

**ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ**  
**NATIONAL TECHNICAL UNIVERSITY OF ATHENS**



**ΤΜΗΜΑ ΠΟΛΙΤΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ**  
**ΤΟΜΕΑΣ ΥΔΑΤΙΚΩΝ ΠΟΡΩΝ ΚΑΙ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΟΣ**

# **Μαθηματική προσομοίωση συστήματος αναερόβιου MBR για την επεξεργασία λυμάτων**

**Σκύβαλος Μιχαήλ**

**Επιβλέπων:**  
**Κωνσταντίνος Νουτσόπουλος, Αναπληρωτής Καθηγητής**

**Αθήνα, Ιούλιος 2022**

## Ευχαριστίες

Η ολοκλήρωση της διπλωματικής μου εργασίας κλείνει τον κύκλο των προπτυχιακών μου σπουδών αποτελώντας ένα πολύ σημαντικό ορόσημο για εμένα προσωπικά.

Πρώτα απ' όλους θα ήθελα να ευχαριστήσω τον επιβλέποντα καθηγητή μου κ. Κωνσταντίνο Νουτσόπουλο για την ανάθεση και επίβλεψη της εργασίας μου. Η δική του καθοδήγηση, εμπειρία και το επιστημονικό του υπόβαθρο υπήρξαν καθοριστικά και άκρως βοηθητικά για την εξέλιξη και ολοκλήρωση αυτής της εργασίας.

Φυσικά ένα πολύ μεγάλο ευχαριστώ στην υποψήφια διδάκτωρ Αργυρώ Πλεύρη η οποία ήταν πάντα διαθέσιμη και υπήρξε παρούσα σε κάθε βήμα σε κάθε δοκιμή και απορία μου. Οι γνώσεις και το υπόβαθρο της υπήρξαν άκρως βοηθητικά και δεν θα μπορούσα να παραλείψω την υπομονή και θετική της διάθεση σε κάθε μας συνάντηση. Της εύχομαι τα καλύτερα στη συνέχεια των προσπαθειών της.

Από το εργαστήριο της σχολής δεν θα μπορούσα να ξεχάσω την μεγάλη βοήθεια που μου προσέφερε ο Χρήστος Ιωαννίδης σε ότι αφορούσε την γλώσσα προγραμματισμού και ότι απορίες προέκυψαν πάνω σε αυτόν τον τομέα.

Ένα πολύ μεγάλο ευχαριστώ οφείλω στην οικογένεια μου. Στους γονείς μου που ήταν πάντα δίπλα μου και πρόσφεραν απλόχερα και ανιδιοτελώς την στήριξη τους με κάθε τρόπο όλα αυτά τα χρόνια, τους είμαι ευγνώμων που πίστευαν σε εμένα ακόμα και σε καιρούς που εγώ δεν είχα την ίδια πίστη στον εαυτό μου. Το ίδιο και ο αδερφός μου Αντώνης που μου έδινε κουράγιο για την ολοκλήρωση των σπουδών μου. Του εύχομαι να αποφύγει τα δικά μου λάθη. Η διπλωματική αυτή είναι αφιερωμένη στον παππού μου Janos Jacsman που με ενέπνευσε να ασχοληθώ με τον τομέα υδραυλικών και περιβάλλοντος.

Ιδιαίτερα ευγνώμων είμαι στον φίλο μου Βαγγέλη για την ψυχολογική υποστήριξη όλα αυτά τα χρόνια, στον φίλο μου Μάνο ο οποίος μου παρείχε τον υπολογιστή του στην αρχή αυτής της διπλωματικής και στον αδερφό του Νίκο που με βοήθησε σε διάφορα θέματα προγραμματισμού.

Κλείνοντας αυτό το σημαντικό κεφάλαιο της ζωής μου θέλω να ευχαριστήσω όλους όσους μέσα στα χρόνια με βοήθησαν και με υποστήριξαν να φτάσω σε αυτό το σημείο.

“We gotta get out of this place  
if its the last thing we ever do...”

Animals

## Περίληψη

Η επεξεργασία αστικών λυμάτων αποτελεί ένα από τα πιο σημαντικά πεδία έρευνας και εφαρμογής σύγχρονων τεχνολογιών για τη διαχείριση τους. Παρόλα αυτά, η υψηλή κατανάλωση ενέργειας οδηγεί στην αναζήτηση εναλλακτικών τεχνολογιών με μικρότερο ενεργειακό αποτύπωμα. Πιο συγκεκριμένα η αναερόβια επεξεργασία λόγω των οικονομικών, περιβαλλοντικών και ενεργειακών της προτερημάτων συνθέτει ένα ολοκληρωμένο μοντέλο διαχείρισης που ενδείκνυται για χρήση στις απαιτήσεις της σύγχρονης εποχής. Τα τελευταία χρόνια, μια από τις τεχνολογίες που κερδίζει έδαφος στον τομέα της έρευνας είναι η τεχνολογία αναερόβιας επεξεργασίας λυμάτων με χρήση μεμβρανών (AnMBR).

Το κύριο χαρακτηριστικό της συγκεκριμένης τεχνολογίας είναι ο πλήρης διαχωρισμός του χρόνου παραμονής στερεών στον αντιδραστήρα (SRT) και του υδραυλικού χρόνου παραμονής μέσω των μεμβρανών. Με αυτόν τον τρόπο δίνεται η δυνατότητα ανάπτυξης των αναερόβιων μικροοργανισμών, που χρειάζονται μεγάλους χρόνους παραμονής, σε αντιδραστήρα με μικρότερο όγκο. Οι διεργασίες πραγματοποιούνται από αναερόβιους μικροοργανισμούς μέσω των οποίων επιτυγχάνεται ο καταβολισμός της οργανικής ύλης με τελικά προϊόντα μεθάνιο, διοξείδιο του άνθρακα και άλλα αέρια σε μικρές ποσότητες. Το μεθάνιο και το διοξείδιο του άνθρακα αποτελούν τα βασικά στοιχεία του βιοαερίου σε αναλογία περίπου 70% και 30% αντίστοιχα. Το βιοαέριο με τη σειρά του συνιστά πηγή ενέργειας γεγονός που μπορεί να χαρακτηρίσει την συγκεκριμένη τεχνολογία ενεργειακά αυτόνομη χρησιμοποιώντας την ενέργεια που έχει παραχθεί στο δίκτυο της (net Energy).

Στην παρούσα διπλωματική ασχοληθήκαμε με την προσαρμογή ενός κώδικα αναερόβιας χώνευσης (BSM2) με τη χρήση των προγραμμάτων MATLAB-SIMULINK σε συνθήκες αναερόβιας επεξεργασίας με την τεχνολογία AnMBR. Για την εργασία αυτή χρησιμοποιήθηκαν πειραματικά δεδομένα τα οποία είχαν διεξαχθεί στα πλαίσια της διδακτορικής διατριβής της Αργυρώς Πλεύρη. Ο αντιδραστήρας των πειραμάτων είχε εγκατασταθεί στην Υπηρεσία Έρευνας και Ανάπτυξης της ΕΥΔΑΠ στην περιοχή της Μεταμόρφωσης. Από τα πειράματα προέκυψαν 3 βασικά σενάρια το καθένα από τα οποία μελετήθηκε για συνθήκες Χειμώνα και καλοκαιριού. Προσπαθήσαμε με τις κατάλληλες αλλαγές στον κώδικα να δημιουργήσουμε μια βάση όπου τα αποτελέσματα του μοντέλου να ανταποκρίνονται όσο το δυνατόν καλύτερα στα πειραματικά αποτελέσματα και με βάση αυτή την προσπάθεια την περαιτέρω ανάπτυξη του κώδικα στο μέλλον.

## Abstract

Wastewater treatment is an important area of research and development of modern technologies for wastewater treatment. Moreover, the high energy consumption leads us to look for alternative technologies with a lower energy demand. In particular, anaerobic wastewater treatment represents a complete model for wastewater management in modern societies due to its financial, environmental and energy advantages. In recent years, one of the technologies that meets these requirements is the anaerobic membrane bioreactor (AnMBR).

The main feature of this technology is the complete separation of the solid retention time (SRT) and the hydraulic retention time (HRT). In this way, we separate the process of growth of the anaerobic microorganisms, which need a lot of time for this, and gain a smaller volume for the bioreactor. These anaerobic microorganisms are responsible for decomposing the organic matter, which in the end leads to the production of methane, carbon dioxide and other gases in smaller quantities. Methane and carbon dioxide are the basic components of biogas in a ratio of 70% and 30% respectively. Biogas is an energy source that has the advantage in this technology that it is energetically independent, as it can produce its own energy.

The aim of this thesis is to adapt an anaerobic digestion model (BSM2) using the programming MATLAB-SIMULINK into a model of the anaerobic wastewater treatment process with AnMBR technology. For this work we used the experimental data from Argiro Plevri's dissertation. The experiments took place at the Research and Development Department of the Athens Water Supply and Sewerage Company (EYDAP), where the bioreactor had been installed. In the experiment, 3 main scenarios occurred, each observed for winter and summer conditions. In summary, the aim of this thesis was to create a basic model whose results should match the experimental results as closely as possible so that it can be used for further and more specific investigations and research in the future.

## Πίνακας Περιεχομένων

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ.....σελ. 7	σελ. 7
1.1 Γενικά.....σελ. 7	σελ. 7
1.2 Σκοπός εργασίας.....σελ. 7	σελ. 7
1.3 Αντικείμενο εργασίας.....σελ. 8	σελ. 8
1.4 Διάρθρωση εργασίας.....σελ. 8	σελ. 8
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2 ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΚΗ ΑΝΑΣΚΟΠΗΣΗ.....σελ. 10	σελ. 10
2.1 Διεργασία Αναερόβιας Επεξεργασίας.....σελ. 10	σελ. 10
2.1.1 Περιγραφή διεργασίας.....σελ. 10	σελ. 10
2.1.2 Μικροβιολογία και βιοχημεία των αναερόβιων διεργασιών.....σελ. 12	σελ. 12
2.1.3 Λειτουργικοί και Περιβαλλοντικοί παράγοντες που επηρεάζουν την αναερόβια επεξεργασία.....σελ. 13	σελ. 13
2.1.4 Οφέλη αναερόβιας επεξεργασίας σε σύγκριση με την αερόβια επεξεργασία.....σελ. 15	σελ. 15
2.1.5 Αντιδραστήρες αναερόβιας επεξεργασίας.....σελ.16	σελ.16
2.2 Αναερόβιοι αντιδραστήρες μεμβρανών (AnMBR).....σελ. 17	σελ. 17
2.2.1 Εισαγωγή.....σελ. 17	σελ. 17
2.2.2 Περιγραφή λειτουργίας.....σελ. 17	σελ. 17
2.2.3 Παράμετροι και συνθήκες λειτουργίας.....σελ. 19	σελ. 19
2.2.4 Είδη αναερόβιων αντιδραστήρων με μεμβράνες.....σελ. 24	σελ. 24
2.2.5 Πλεονεκτήματα και μειονεκτήματα αναερόβιων βιοαντιδραστήρων με μεμβράνες σελ. 28	σελ. 28
2.2.6 Εφαρμογές AnMBR .....σελ. 28	σελ. 28
2.2.7 Εφαρμογές AnMBR για την επεξεργασία αστικών λυμάτων σε συνθήκες Περιβάλλοντος.....σελ. 29	σελ. 29
2.2.8 Προκλήσεις και μελλοντικές εφαρμογές του AnMBR.....σελ. 30	σελ. 30
2.3 Μοντέλα αναερόβιας επεξεργασίας.....σελ.31	σελ.31
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3:Περιγραφή μοντέλου προσομοίωσης της λειτουργίας συστημάτων AnMBR.....σελ. 32	σελ. 32

3.1. Κινητική αναερόβιας χώνευσης .....	σελ.32
3.1.1. Κινητική ανάπτυξης μικροοργανισμών .....	σελ.32
3.1.2. Κινητική αναχαίτισης μικροοργανισμών.....	σελ.34
3.2. Μοντέλο αναερόβιας χώνευσης ADM1 της IWA.....	σελ.36
3.2.1. Εισαγωγή στο ADM1.....	σελ. 36
3.2.2. Εξισώσεις του ADM1 .....	σελ. 39
3.2.2.1. Ρυθμοί βιοχημικών διεργασιών .....	σελ. 39
3.2.2.2. Ρυθμοί οξεογένεσης .....	σελ. 40
3.2.2.3. Ρυθμοί μεταφοράς σε αέριο .....	σελ. 41
3.2.2.4. Συντελεστές αναχαίτισης .....	σελ. 41
3.2.2.5. Διαφορικές εξισώσεις διαλυτού κλάσματος .....	σελ. 42
3.2.2.6. Διαφορικές εξισώσεις σωματιδιακού κλάσματος .....	σελ. 44
3.2.2.7. Διαφορικές εξισώσεις ανιόντων και κατιόντων .....	σελ.45
3.2.2.8. Διαφορικές εξισώσεις διαφόρων ιόντων .....	σελ. 45
3.2.2.9. Υπολογισμός pH .....	σελ.46
3.2.2.10. Διαφορικές εξισώσεις στην αέρια φάση .....	σελ. 47
3.3. Ισοζύγιο μάζας .....	σελ. 49
3.4 Μοντέλο διαχωρισμού συστήματος AnMBR.....	σελ. 52
3.5 Μετατροπή ASM1 σε ADM1 και αντίστροφα.....	σελ.54
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4: Εφαρμογή μαθηματικού μοντέλου .....	σελ. 62
4.1. Προσομοιούμενο σύστημα AnMBR .....	σελ. 62
4.2. Ανάλυση ευαισθησίας μοντέλου.....	σελ. 66
4.3. Ρύθμιση μοντέλου.....	σελ.74
4.4. Επαλήθευση μοντέλου.....	σελ. 79
4.5. Διερεύνηση της επίδρασης λειτουργικών παραμέτρων σε ένα σύστημα AnMBR.....	σελ. 88
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5: ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ .....	σελ. 97
ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ .....	σελ. 100
ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ.....	σελ. 104

## ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1 Εισαγωγή

### 1.1. Γενικά

Ως αναερόβια διεργασία ορίζουμε την βιολογική διεργασία απουσία οξυγόνου ( $O_2$ ) στην οποία πραγματοποιείται η μετατροπή του οργανικού υλικού σε μεθάνιο ( $CH_4$ ) και διοξείδιο του άνθρακα ( $CO_2$ ) και ίχνη άλλων προσμίξεων αερίων που συντελούν στην παραγωγή βιοαερίου όπως ανακάλυψε ο Αλεξαντρο Βόλτα το 1776. Το γεγονός αυτό καθιστά την αναερόβια επεξεργασία ως μια από τις πιο σημαντικές τεχνολογίες ανανεώσιμων πηγών ενέργειας. Ταυτόχρονα πρόκειται για μια από τις παλιότερες ανθρώπινες τεχνολογίες και χρησιμοποιείται για βιομηχανικούς και οικιακούς σκοπούς όπως για παράδειγμα την παραγωγή τροφών, ποτών, καθώς και καυσίμων. Στις μέρες μας παρατηρείται όλο και περισσότερο η έλλειψη διαθέσιμων πηγών νερού γεγονός που καθιστά την αναερόβια επεξεργασία αστικών λυμάτων όλο και πιο απαραίτητη. Η απόδοση της αναερόβιας επεξεργασίας στην απομάκρυνση βλαβερών ουσιών και στην ανάκτηση ενέργειας λόγω της παραγωγής βιοαερίου στο τέλος της διαδικασίας είναι οι κυριότεροι παράγοντες που την καθιστούν τόσο σημαντική. Βέβαια οι μεγάλοι χρόνοι παραμονής που απαιτούνται για την ανάπτυξη των μικροοργανισμών αποτελούν ένα από τα μεγαλύτερα ζητήματα που προκύπτουν όσον αφορά την χρήση της συγκεκριμένης τεχνολογίας. Για το λόγο αυτό πολλοί ερευνητές έχουν στρέψει την προσοχή τους στην τεχνολογία αναερόβιας επεξεργασίας με χρήση μεμβρανών AnMBR όπου με την προσθήκη μεμβρανών μέσα στον αντιδραστήρα έχει επιτευχθεί ο διαχωρισμός του χρόνου παραμονής στερεών SRT και του υδραυλικού χρόνου παραμονής HRT. Άλλο ένα από τα βασικά πλεονεκτήματα της τεχνολογίας αυτής είναι οι κατά πολύ μικρότεροι όγκοι των αντιδραστήρων που τους καθιστά πιο εύχρηστους και χωροταξικά για την χρήση τους σε σύγχρονες και μελλοντικές εφαρμογές.

### 1.2. Σκοπός εργασίας

Σκοπός της εργασίας αυτής είναι η προσαρμογή και η βελτιστοποίηση του μαθηματικού μοντέλου προσομοίωσης που έχει αναπτυχθεί από την I.W.A. (International Wastewater Association) για την προσομοίωση της αναερόβιας χώνευσης. Πιο συγκεκριμένα πραγματοποιήθηκε προσαρμογή του μοντέλου της αναερόβιας χώνευσης (Matlab/Simulink Benchmark Simulation Model No 2 (BSM2)) σε μοντέλο αναερόβιας επεξεργασίας λυμάτων με τεχνολογία AnMBR (Αναερόβιου αντιδραστήρα μεμβρανών). Με τον τρόπο αυτό προκύπτει ένα μοντέλο προσομοίωσης για μεγαλύτερη ανάλυση θεωρητικών σεναρίων για την βελτιστοποίηση ενός τέτοιου συστήματος.

### 1.3. Αντικείμενο εργασίας

Αντικείμενο της εργασίας είναι όπως αναφέρεται και πιο πάνω η προσαρμογή και η βελτιστοποίηση δημιουργία ενός μοντέλου προσομοίωσης ενός συστήματος αναερόβιας επεξεργασίας με χρήση μεμβρανών προσαρμόζοντας το υπάρχων μαθηματικό μοντέλο προσομοίωσης αναερόβιας χώνευσης μέσω προγραμματισμού-κώδικα και πιο συγκεκριμένα με χρήση MATLAB-SIMULINK. Η επαλήθευση του μοντέλου έγινε με τα πειραματικά αποτελέσματα ενός AnMBR που λειτουργεί στα πλαίσια της διδακτορικής διατριβής της Αργυρώς Πλεύρη. Ο αντιδραστήρας έχει εγκατασταθεί στην Υπηρεσία Έρευνας και Ανάπτυξης της ΕΥΔΑΠ στην περιοχή της Μεταμόρφωσης. Έχοντας υπόψη τα πειραματικά δεδομένα εισόδου-εξόδου αλλά και τις λειτουργικές παραμέτρους του αντιδραστήρα για 3 βασικά σενάρια πειραμάτων όπου το καθένα έχει μετρηθεί για συνθήκες χειμώνα και καλοκαιριού ( $\alpha, \beta$ ) προκύπτουν στο σύνολο 6 σενάρια όπου με τη χρήση του μοντέλου προσπαθήσαμε να προσομοιώσουμε ένα αντίστοιχο σύστημα AnMBR όπου τα αποτελέσματα να ανταποκρίνονται σε εκείνα των επι τόπου μετρήσεων των πειραμάτων.

### 1.4. Διάρθρωση εργασίας

Στην παρούσα διπλωματική εργασία προσπαθήσαμε να προσεγγίσουμε το θέμα με μια διάρθρωση που περιγράφει καταρχάς σε ένα γενικότερο πλαίσιο την αναερόβια επεξεργασία, το αρχικό μοντέλο που αναπτύξαμε και με βάση αυτά τα σημεία την εισαγωγή στη νέα τεχνολογία AnMBR τα βασικά χαρακτηριστικά που την αφορούν, τις αλλαγές/προσαρμογές που πραγματοποιήσαμε στον κώδικα και τέλος τα αποτελέσματα όσον αφορά τον συνδυασμό του νέου μοντέλου με τα πειραματικά δεδομένα εισόδου και εξόδου που είχαμε στη διάθεσή μας. Αρχικά στο πρώτο κεφάλαιο γίνεται μια εισαγωγή και μικρή γενική αναφορά για τον σκοπό και το αντικείμενο της εργασίας. Ακολουθεί το δεύτερο κεφάλαιο με μια βιβλιογραφική ανασκόπηση που περιγράφει αναλυτικά τη διεργασία της αναερόβιας χώνευσης, τα διάφορα στάδια της αναερόβιας επεξεργασίας που περιγράφουν τις διαδικασίες που πραγματοποιούνται από τους μικροοργανισμούς και την πορεία των θρεπτικών επίσης στο τέλος του ίδιου κεφαλαίου γίνεται περιγραφή της τεχνολογίας της αναερόβιας επεξεργασίας με χρήση μεμβρανών όπου περιγράφονται τα διάφορα τεχνικά είδη της τεχνολογίας αυτής, πλεονεκτήματα έναντι των κοινών αντιδραστήρων καθώς και οι σύγχρονες και μελλοντικές εφαρμογές. Στη συνέχεια περιγράφονται τα συγκεκριμένα χαρακτηριστικά λειτουργίας του μοντέλου που χρησιμοποιήθηκε όπως αυτά άλλωστε έχουν αναπτυχθεί από την IWA. Στο κεφάλαιο 4 περιλαμβάνονται οι πληροφορίες που αφορούν το μοντέλο που αναπτύξαμε με τις κατάλληλες προσαρμογές και γίνεται η περιγραφή, ανάλυση ευαισθησίας, η επαλήθευση του καθώς και η επίδραση διάφορων λειτουργικών παραμέτρων σε ένα σύστημα AnMBR. Εν κατακλείδι στο πέμπτο και τελευταίο κεφάλαιο γίνεται η αποτύπωση των συμπερασμάτων όπως αυτά προέκυψαν καθόλη τη διάρκεια αυτής της διπλωματικής εργασίας από τη χρήση του νέου



και προσαρμοσμένου κώδικα στα διάφορα πειραματικά σενάρια όπου και έγιναν οι αντίστοιχες προσομοιώσεις.

## ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2 Βιβλιογραφική ανασκόπηση

### 2.1. Διεργασία αναερόβιας επεξεργασίας

Η βασική περιγραφή της αναερόβιας επεξεργασίας αποτυπώνεται ως η μετατροπή του οργανικού υλικού σε βιοαέριο απουσία οξυγόνου μέσω μικροοργανισμών-βακτηρίων που συντελούν τις διεργασίες της ζύμωσης, υδρόλυσης, οξεογένεσης, ακετογένεσης και μεθανογένεσης. Σήμερα η αναερόβια χώνευση χρησιμοποιείται και έχει ως σκοπό την επεξεργασία της βιολογικής λύσης που παράγεται κατά την πρωτοβάθμια και δευτεροβάθμια επεξεργασία των αστικών λυμάτων αφού επιτρέπει την μείωση του ποσοστού των οργανικών στερεών και την αδρανοποίηση της λύσης. Είναι αξιοσημείωτο επίσης να αναφέρουμε ότι η αναερόβια χώνευση χρησιμοποιείται για την επεξεργασία στερεών απορριμμάτων, αστικών λυμάτων και βιομάζας για την παραγωγή ενέργειας (βιοαέριο) (Angelidaki 2003, Gerardi 2003). Πιο συγκεκριμένα κατά την αναερόβια χώνευση ουσιαστικά πραγματοποιείται καταβολισμός του οργανικού φορτίου σε αυστηρά αναερόβιες συνθήκες. Η μείωση αυτή του οργανικού φορτίου ουσιαστικά πραγματοποιείται με την δράση πληθώρας μικροοργανισμών μέσω των οποίων επιτυγχάνεται η βιοαποικοδόμηση και μετατροπή του οργανικού φορτίου σε βιοαέριο το οποίο στην πραγματικότητα αποτελείται από ένα μείγμα αερίων με τα μεγαλύτερα ποσοστά του να αποτελούνται από μεθάνιο ( $\text{CH}_4$ ) και διοξείδιο του άνθρακα ( $\text{CO}_2$ ).

#### 2.1.1. Περιγραφή Διεργασίας

Η διεργασία της αναερόβιας χώνευσης αποτελεί μια διαδικασία πολλαπλών σταδίων με οριζόντιες και παράλληλες αντιδράσεις (Ghaly 1996, Anderson et al 2003, Ponsa et al 2008). Σε πρώτο στάδιο όσον αφορά την αναερόβια χώνευση οι μικροοργανισμοί μετατρέπουν τις πρωτεΐνες, τους υδατάνθρακες και τα λίπη κυρίως σε λιπαρά οξέα και σε δεύτερο στάδιο τα τελικά προϊόντα του μεταβολισμού των μικροοργανισμών του πρώτου σταδίου μέσω των μεθανογόνων βακτηρίων μετατρέπονται σε μεθάνιο και διοξείδιο του άνθρακα (Demirel et al 2005).

Αναλυτικότερα τα κυριότερα στάδια της αναερόβιας χώνευσης είναι τα εξής:

1. Η υδρόλυση των αιωρούμενων οργανικών σε διαλυτές ενώσεις
2. Η οξεογένεση με παραγωγή πτητικών λιπαρών οξέων VFAs και η οξικογένεση με παραγωγή οξικού οξέος ( $\text{CH}_3\text{COOH}$ )
3. Μεθανογένεση με παραγωγή  $\text{CH}_4$ ,  $\text{CO}_2$

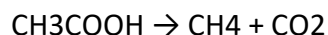
Για το στάδιο της υδρόλυσης τα αδιάλυτα πολυμερή που αποτελούνται από υδρογονάνθρακες (σάκχαρα), λιπαρά οξέα (λιπίδια), και αμινοξέα (πρωτεΐνες) διασπώνται σε μονομερές ενώσεις. Η διάσπαση αυτή των ενώσεων πραγματοποιείται μέσω υδρολυτικών ενζύμων που παράγονται από μεγάλο πλήθος μικροοργανισμών που συμμετέχουν στην αναερόβια χώνευση. Για οργανικές ενώσεις που αποδομούνται δύσκολα, το στάδιο της υδρόλυσης αποτελεί το ρυθμο-ρυθμιστικό βήμα της διαδικασίας. Στα βιομηχανικά απόβλητα που συνήθως είναι διαλυτές οργανικές ενώσεις δεν συμπεριλαμβάνεται το στάδιο της υδρόλυσης.

Στην οξεογένεση επιτελείται η βιαποικοδόμηση των υδρολυμένων απο το προηγούμενο βήμα και άλλων οργανικών ενώσεων υπό μορφή μονομερών με τον σχηματισμό των πτητικών λιπαρών οξέων. Η διαδικασία αυτή επιτυγχάνεται απο μια μεγάλη ποικιλία οξεογενών βακτηρίων. Οι κυριότερες ενώσεις που σχηματίζονται στη φάση της οξεογένεσης είναι το οξικό οξύ, η βουτανόλη, το βουτυρικό οξύ, το καπρονικό οξύ, το μυρμηκικό οξύ, η αιθανόλη, το γαλακτικό οξύ, η μεθανόλη, η προπανόλη, το προπιονικό οξυ και το ηλεκτρικό οξύ, ενώ στο τελευταίο στάδιο παράγεται το διοξείδιο του άνθρακα, του το υδρογόνο. Από το σύνολο των οργανικών οξέων, το οξικό οξύ, το μυρμηκικό οξύ, η μεθανόλη και η μεθλαμίνη είναι ενώσεις που μπορούν να χρησιμοποιηθούν απευθείας από τα μεθανογένη βακτήρια.

Η φάση της οξικογένεσης αποτελεί μια παράλληλη διεργασία καθώς μετατρέπει την αιθανόλη, το βουτυρικό και το προπιονικό οξύ με τη βοήθεια τον οξικογενών βακτηρίων σε οξικό οξύ, καθώς δεν μπορούν να χρησιμοποιηθούν απευθείας. Στην ουσία το οξικό οξύ αποτελεί το πιο σημαντικό πτητικό λιπαρό οξύ καθώς παράγεται σε μεγαλύτερη αναλογία και είναι άμεσα διαθέσιμο για την παραγωγή μεθανίου στο στάδιο της μεθανογένεσης. (Gerardi, 2003. Μαντζιούρας 2010, Παπαδόπουλος 2011):

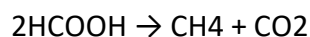
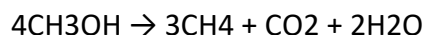
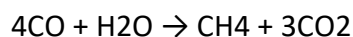
Το στάδιο της μεθανογένεσης αποτελεί το τελευταίο στάδιο της αναερόβιας χώνευσης. Με τη δράση μεθανογόνων βακτηρίων επιτυγχάνεται η παραγωγή μεθανίου και διοξειδίου του άνθρακα. Το μεθάνιο παράγεται κατά κύριο λόγο μέσω του οξικού οξέος, του υδρογόνου και του διοξειδίου του άνθρακα. Οι βασικές αντιδράσεις παραγωγής μεθανίου κατά το στάδιο της μεθανογένεσης είναι οι εξής:

μέσω των οξικοτροφικών μεθανογενών βακτηρίων που χρησιμοποιούν ως υπόστρωμα το οξικό οξύ, σύμφωνα με την παρακάτω εξίσωση:



μέσω των υδρογονοτροφικών μεθανογενών βακτηρίων που χρησιμοποιούν ως υπόστρωμα το υδρογόνο και το διοξείδιο του άνθρακα, σύμφωνα με την παρακάτω εξίσωση:  $\text{CO}_2 + 4\text{H}_2 \rightarrow \text{CH}_4 + 2\text{H}_2\text{O}$

μέσω των μεθανογενών βακτηρίων που χρησιμοποιούν ως υπόστρωμα άλλες ενώσεις, όπως το μονοξείδιο του άνθρακα, το μυρμηκικό οξύ, η μεθανόλη και η μεθλαμίνη, σύμφωνα με τις παρακάτω εξισώσεις:



Εν κατακλείδι για την αποτελεσματική λειτουργία της συνολικής λειτουργίας της αναερόβιας χώνευσης είναι αναγκαίο:

1) Να συμμετέχουν διαφορετικές κατηγορίες βακτηρίων, συναρτώμενες η μια απο την άλλη, καθώς το προϊόν της μια αποτελεί υπόστρωμα για την άλλη.

2) Οι ρυθμοί βιοαποικοδόμησης των τριών σταδίων να ακολουθούν τον ίδιο ρυθμό καθώς εάν το στάδιο της υδόλυσης αναχαιτιστεί, τότε τα ενδιάμεσα προϊόντα της βιοαποδόμησης και η παραγωγή μεθανίου θα περιοριστούν ενώ αν αναχαιτιστεί το στάδιο της μεθανογένεσης τότε θα συσσωρευτούν οξέα στο σύστημα τα οποία δεν θα μετασχηματίζονται πλέον σε μεθάνιο. (Gerardi, 2003, Παπαδόπουλος, 2011).

### 2.1.2. Μικροβιολογία και βιοχημεία των αναερόβιων διεργασιών

Διάφορες ομάδες μικροοργανισμών εμπλέκονται στη μη μεθανογόνα φάση της αναερόβιας χώνευσης όμως η κύρια κατηγορία μικροοργανισμών που περιλαμβάνονται στους αναερόβιους αντιδραστήρες είναι τα βακτήρια, τα οποία διακρίνονται στις εξής κατηγορίες (Anderson 2003):

1. Βακτήρια ζύμωσης
2. Οξικογόνα βακτήρια που παράγουν υδρογόνο
3. Οξικογόνα βακτήρια που καταναλώνουν υδρογόνο
4. Μεθανογόνα βακτήρια που ανάγουν το διοξείδιο του άνθρακα
5. Οξικολυτικά μεθανογόνα βακτήρια

Στη μη μεθανογόνα διεργασία έχουμε την συνύπαρξη των προαιρετικά αναερόβιων βακτηρίων και των αυστηρά αναερόβιων και μάλιστα τα πρώτα προστατεύουν έμμεσα τα δεύτερα καθώς καταλώνουν τις μικροποσότητες οξυγόνου που ενδέχεται να εισέλθουν στο αντιδραστήρα. Τα τελικά προϊόντα της μη μεθανογόνου φάσης είναι τα κορεσμένα λιπαρά οξέα, το υδρογόνο, το διοξείδιο του άνθρακα, και η αμμωνία. Είναι σημαντικό να τονιστεί ο καθοριστικός ρόλος των βακτηρίων που οξειδώνουν λιπαρά οξέα όπως το προπιονικό και βουτυρικό οξύ σε οξικό οξύ αφού τα προϊόντα αυτά δεν μπορούν να μεταβολιστούν από τους μεθανογόνους μικροοργανισμούς. Η ανάπτυξη των μικροοργανισμών αυτών μέσα στην αναερόβια καλλιέργεια, είναι ιδιαίτερα αργή και απαιτεί μεγάλους χρόνους παραμονής, αλλιώς, μπορεί να παρεμποδιστεί η μεθανογένεση, με αποτέλεσμα τη συσσώρευση πτητικών λιπαρών οξέων και κυρίως του προπιονικού οξέος, μέσα στο χωνευτήρα. Στην συνολική διεργασία της αναερόβιας χώνευσης, σημαντικός είναι και ο ρόλος δυο επιπλέον τύπων μικροοργανισμών, τα οποία συνυπάρχουν με τα αναερόβια βακτήρια. Αυτά είναι τα βακτήρια που ανάγουν τα θειικά σε υδρόθειο (sulfate-reducing bacteria), καθώς και τα ομοοξικογόνα βακτήρια που μετατρέπουν το CO<sub>2</sub> και το H<sub>2</sub> σε οξικό (homoacetogenic bacteria) (Anderson, 2003, Gerardi, 2003, Βενετσάνεας, 2012).

Σχετικά με τη μικροβιολογία των μεθανογόνων μικροοργανισμών αφορά αυστηρά αναερόβιους μικροοργανισμούς και στη φύση συναντώνται σε ανοξικά περιβάλλοντα. Το μεθάνιο αποτελεί το κύριο καταβολικό τους προϊόν με τη χρήση περιορισμένου αριθμού απλών οργανικών ενώσεων και επιτυγχάνεται είτε μέσω της αναγωγής του διοξειδίου του άνθρακα σε υδρογόνο είτε μέσω της διάσπασης του οξικού οξέος.

Όλοι οι μεθανογόνοι μικροοργανισμοί χρησιμοποιούν NH<sub>4</sub><sup>+</sup> ως πηγή αζώτου και φώσφορο (HPO<sub>4</sub><sup>-</sup> - P) για την ομαλή λειτουργία τους, ενώ σε όλα τα είδη είναι απολύτως απαραίτητα ιχνοστοιχεία, όπως νικέλιο, σίδηρος και κοβάλτιο (Gerardi, 2003, Βενετσάνεας, 2012).

### 2.1.3. Λειτουργικοί και Περιβαλλοντικοί παράγοντες που επηρεάζουν την αναερόβια επεξεργασία

Η αναερόβια χώνευση όπως έχει άλλωστε και προαναφερθεί αποτελεί μια σύνθετη διεργασία με πολύπλοκες αλληλεπιδράσεις και αντιδράσεις μεταξύ των μικροοργανισμών. Το γεγονός αυτό καθιστά απαραίτητη την απλοποίηση και συστηματοποίηση του φαινομένου για τον καλύτερο έλεγχο της λειτουργίας ενός αναερόβιου χωνευτή καθώς και την διατήρηση των απαιτούμενων συνθηκών για την ικανοποιητική απόδοση του. Οι παράμετροι που εξασφαλίζουν τον έλεγχο και την ομαλή λειτουργία ενός χωνευτή είναι:

#### 1) Περιβαλλοντικοί

- Η θερμοκρασία
- Η οργανική φόρτιση του χωνευτή
- Ο χρόνος σταθεροποίησης του συστήματος
- Ο χρόνος παραμονής στερεών SRT (Solid Retention Time) και ο υδραυλικός χρόνος παραμονής HRT (Hydraulic Retention Time)
- Αλκαλικότητα και pH
- Πρόσθετες χημικές ενώσεις
- Θρεπτικά συστατικά

## 2)Λειτουργικοί παράγοντες

Πίνακας 2.1: Λειτουργικοί παράγοντες αναερόβιας χώνευσης

Λόγος	Σημασία
VSS/TSS	Καταδεικνύει την ποικιλία των βακτηρίων και την βιοαποικοδομησιμότητα.Μία σταθερή τιμή δείχνει σταθερότητα στην παραγόμενη ιλύ.
COD/VSS	Αναπαριστά το ποσοστό εύκολα βιοδιασπάσιμης τροφής
COD/TSS	Αναπαριστά την ύπαρξη εύκολα βιοδιασπάσιμης τροφής. Αύξηση του οδηγεί σε μείωση του απαιτούμενου υδραυλικού χρόνου παραμονής HRT
COD <sub>p</sub> /VSS	Καταδεικνύει το περιεχόμενο σε λιπίδια
TSS/COD	Αύξηση του οδηγεί σε κροκίδωση και σε κακή απόδοση του αντιδραστήρα
COD/N/P	Αναπαριστά την επάρκεια σε θρεπτικά
C/N/P	Αναπαριστά την επάρκεια σε θρεπτικά
COD/N	Αναπαριστά την επάρκεια σε άζωτο
COD/P	Αναπαριστά την επάρκεια σε φώσφορο
COD/SO <sub>4</sub>	Μικρή τιμή του λόγου οδηγεί σε κακή απόδοση του αντιδραστήρα οσμές, διάβρωση και επιδείνωση στην ποσότητα και την ποιότητα του παραγόμενου βιοαερίου
VFAs/Αλκαλικότητα	Καταδεικνύει την σταθερότητα του αντιδραστήρα
Οξεοπαραγωγοί/Μεθανογόνοι	Η αύξηση του λόγου σημαίνει τη συσσώρευση των οξέων στον αντιδραστήρα αλλά παράλληλα βελτίωση της υδρόλυσης
Προπιονικό οξύ/Οξικό οξύ	Η αύξηση του λόγου σημαίνει ότι δεν υπάρχει η επιζητούμενη ισορροπία στον αντιδραστήρα

#### 2.1.4. Οφέλη αναερόβιας επεξεργασίας σε σύγκριση με την αερόβια επεξεργασία

Η αναερόβια χώνευση αποτελεί την πλέον κατάλληλη μέθοδο σταθεροποίησης της ιλύος, με σημαντικά πλεονεκτήματα σε σχέση με την αερόβια επεξεργασία, καθώς εξασφαλίζει:

- Υψηλό βαθμό σταθεροποίησης της ιλύος.
- Ικανοποιητικό ποσοστό καταστροφής παθογόνων μικροοργανισμών όπως παθογόνα βακτήρια και μύκητες, ιοί και πρωτόζωα.
- Βελτίωση των χαρακτηριστικών αφυδατωσιμότητας της ιλύος.
- Δυνατότητα αποδόμησης φυσικών συστατικών που αποδομούνται δύσκολα (π.χ. λιγνίνη).
- Δυνατότητα αποδόμησης ξενοβιοτικών ενώσεων (π.χ. χλωριωμένοι αλιφατικοί υδρογονάνθρακες).
- Παραγωγή μεθανίου.
- Δυνατότητα επεξεργασίας υγρών αποβλήτων με υψηλό οργανικό φορτίο.
- Παραγωγή μικρής ποσότητας σταθεροποιημένης ιλύος.
- Περιορισμένες απαιτήσεις σε θρεπτικά συστατικά (όπως N και P).
- Δυνατότητα διατήρησης των αναερόβιων μικροοργανισμών χωρίς τροφοδοσία για πολύ μεγάλο χρονικό διάστημα, χωρίς σημαντική μείωση της ενεργότητάς τους.

Η αναερόβια χώνευση είναι επίσης ευρύτατα διαδεδομένη ως μια επιλογή ανανεώσιμης πηγής ενέργειας, επειδή σε ελεγχόμενες συνθήκες, οδηγεί σε πολλαπλά οφέλη:

##### Ενεργειακά οφέλη:

- Ελάχιστη κατανάλωση ενέργειας, κυρίως για θέρμανση.
- Παραγωγή βιοαερίου (κυρίως μεθάνιο και διοξείδιο του άνθρακα), το οποίο μπορεί να χρησιμοποιηθεί on site, να τροποποιηθεί σε βιομεθάνιο για να χρησιμοποιηθεί σαν καύσιμο οχημάτων ή όπου υπάρχει ενεργειακή ανάγκη.
- Παραγωγή ανανεώσιμου καυσίμου το οποίο είναι ευέλικτο και μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την παραγωγή θερμότητας και ενέργειας.

##### Περιβαλλοντικά οφέλη:

- Μείωση βιοαερίου, το οποίο υπό άλλες συνθήκες θα διέρρεε στην ατμόσφαιρα.
- Μείωση της εκπομπής οξειδίων του αζώτου, συγκριτικά με την κομποστοποίηση ή την ταφή.
- Παραγωγή εδαφοβελτιωτικού, το οποίο είναι καλύτερης ποιότητας από τα ανεπεξέργαστα απόβλητα αγροτικής παραγωγής.
- Οφέλη στη διαχείριση αποβλήτων: Συστηματική μείωση της ταφής οργανικού υλικού και συμβολή στον κύκλο ζωής με την χρησιμοποίηση ως εδαφοβελτιωτικό.

- Συμβολή στην ανάπτυξη της διαχείρισης των θρεπτικών, καθώς δημιουργείται ένας κλειστός κύκλος θρεπτικών (N,P,K) και καλή απομάκρυνση, σε άμεση εξάρτηση με την θερμοκρασία.
- Τοπική επεξεργασία των αποβλήτων, με βάση την αρχή της εγγύτητας.
- Δυνατότητα ταυτόχρονης επεξεργασίας διαφορετικού είδους αποβλήτων.

#### Οικονομικά οφέλη:

- Μειωμένο λειτουργικό κόστος λόγω της μηδενικής απαίτησης οξυγόνου.
- Μείωση του κόστους διαχείρισης και διάθεσης της ιλύος λόγω της μείωσης του όγκου της παραγόμενης χωνευμένης ιλύος.
- Μηδενισμός του μεταφορικού κόστους καθώς η επεξεργασία γίνεται επί τόπου.
- Δυνατότητα πώλησης των υπολειμμάτων της χώνευσης και των ινών.

#### 2.1.5. Αντιδραστήρες αναερόβιας επεξεργασίας

Ο προσδιορισμός του κατάλληλου αντιδραστήρα για την αναερόβια επεξεργασία προκύπτει από τα ποιοτικά χαρακτηριστικά των λυμάτων. Ένα αποτελεσματικό αναερόβιο σύστημα οφείλει να καλύπτει τις ακόλουθες συνθήκες (Γεωργιοπούλου , 2007):

- ύπαρξη μεγάλου χρόνου παραμονής στερεών
- καλή επαφή βιομάζας και υποστρώματος
- υψηλά ποσοστά αντίδρασης
- ικανότητα εγκλιματισμού της βιομάζας σε διάφορους τύπους αποβλήτων
- επικράτηση ευνοϊκών περιβαλλοντικών συνθηκών για τους μικροοργανισμούς

Σε ό,τι αφορά τον ίδιο τον αντιδραστήρα, οι βασικότεροι αναερόβιοι αντιδραστήρες είναι:

- Αντιδραστήρας πλήρους μίξης (CSTR)
- Μέθοδος αναερόβιας επαφής
- Αναερόβια κλίνη ανοδικής ροής (up-flow anaerobic sludge blanket-UASB)
- Διευρυμένη κλίνη ιλύος (expanded granular sludge bed -EGSB)
- ABR (Anaerobic Baffled Reactor- αντιδραστήρας με ανακλαστήρες)
- Αντιδραστήρες ανοδικής ροής αιωρούμενης βιομάζας
- Αντιδραστήρες ανοδικής ροής προσκολλημένης βιομάζας
- Αναερόβια φίλτρα ανοδικής και καθοδικής ροής
- Συστήματα δύο σταδίων (Two-Stage Systems)
- Αναερόβιοι βιοαντιδραστήρες Μεμβρανών (AnMBR)



## 2.2. Αναερόβιοι Αντιδραστήρες Μεμβρανών (AnMBR)

Όπως έχει ήδη προαναφερθεί στην εισαγωγή της παρούσας διπλωματικής εργασίας η αναερόβια επεξεργασία αστικών λυμάτων και ειδικά η χρήση της μέσω της τεχνολογίας AnMBR αποτελεί ένα καινοτόμο και συνεχώς αυξανόμενο πεδίο έρευνας και πειραμάτων λόγω των προτερημάτων και διευκολύνσεων που προσφέρει σε σύγχρονες και νέες εφαρμογές.

Η χαμηλή οργανική φόρτιση των αστικών λυμάτων σε συνδυασμό με το μικρό ρυθμό ανάπτυξης των αναερόβιων βακτηρίων σε θερμοκρασίες κάτω των 20° C προϋποθέτουν μεγάλους χρόνους παραμονής ώστε να αποφεύγονται τα φαινόμενα wash out των στερεών στους και άρα απαιτούν μεγάλους όγκους αναερόβιων αντιδραστήρων. Ακόμα η υδρόλυση του σωματιδιακού υλικού σε διαλυτά μόρια αποτελεί περιοριστικό μηχανισμό σε αναερόβια συστήματα και οδηγεί σε συσσώρευση στερεών, σε μειωμένη παραγωγή βιοαερίου και σε μειωμένη απόδοση του συστήματος (Lettinga et al., 2001, Martinez-Sosa et al., 2011).

Το γεγονός αυτό αναδεικνύει την ανάγκη ανάπτυξης συστημάτων που να λειτουργούν με πλήρη διαχωρισμό του χρόνου παραμονής στερεών SRT και του υδραυλικού χρόνου παραμονής HRT.

Η λειτουργία των UASB και EGSB είναι περιορισμένη και τα προβλήματα επεξεργασίας των αστικών λυμάτων απαιτούν περισσότερη αναζήτηση και έρευνα για την βελτιστοποίηση της διεργασίας και της εκροής τους.

Βάση αυτών των περιορισμών οι χρήση μεμβρανών μικροδιήθησης ή υπερδιήθησης επιτρέπει την πλήρη συγκράτηση της βιομάζας με την επίτευξη καλής ποιότητας εκροής. Άρα η χρήση μεμβρανών σε συνδυασμό με τη βιολογική επεξεργασία υπό αναερόβιες συνθήκες AnMBR (Anaerobic Membrane BioReactor-Αναερόβιος βιοαντιδραστήρας μεμβρανών) επιλύει τα προβλήματα έκπλυσης στερεών (washout), βελτιώνει σημαντικά την ποιότητα εκροής, και τέλος επιτρέπει την επεξεργασία αστικών λυμάτων χαμηλής οργανικής φόρτισης υπό θερμοκρασίες περιβάλλοντος καθιστώντας με αυτό τον τρόπο την αναερόβια διεργασία φιλική προς το περιβάλλον και επιπλέον οικονομικά και τεχνικά βιώσιμη. (Ozgun H. et al., 2013).

### 2.2.1. Εισαγωγή

Η τεχνολογία των αναερόβιων βιοντιδραστήρων με μεμβράνη χρονολογείται από το 1890 και μέχρι περίπου τα μέσα της δεκαετίας του 2000 χρησιμοποιούνταν κατά κύριο λόγο για την επεξεργασία βιομηχανικών αποβλήτων. Πιο αναλυτικά, ο πρώτος αναερόβιος βιοαντιδραστήρας με μεμβράνη χρησιμοποιήθηκε από τον Grethlein το 1978. Ο Grethlein χρησιμοποίησε εξωτερικές μεμβράνες πλευρικής ροής για να επεξεργαστεί την εκροή από σηπτικές δεξαμενές και πέτυχε την απομάκρυνση 85-95% του οργανικού φορτίου σε όρους BOD.

Έκτοτε από τα μέσα περίπου τις δεκαετίας 2010 ξεκίνησαν εκτεταμένες προσπάθειες άρχισε να αναπτύσσεται η έρευνα σε εργαστηριακό επίπεδο για τη βελτιστοποίηση της λειτουργίας των αναερόβιων βιοντιδραστήρων μεμβρανών με στόχευση και έμφαση στη χρήση τους για την επεξεργασία αστικών λυμάτων. (Lin et al, 2013).

Το γεγονός του όλο και αυξανόμενου ενδιαφέροντος της χρήσης βιοντιδραστήρων με μεμβράνες έγκειται στο γεγονός ότι αποτελούν ένα πολλά υποσχόμενο πεδίο έρευνας καθώς οι AnMBR προσφέρουν πλεονεκτήματα έναντι των αερόβιων βιολογικών αντιδραστήρων, όπως είναι η παραγωγή βιοαερίου, η μειωμένη παραγωγή ιλύος καθώς και το γεγονός ότι δεν χρειάζονται ενέργεια για τον αερισμό τους. (Martinez-Sosa et al., 2011).

### 2.2.2. Περιγραφή Λειτουργίας

Ένα σύστημα αναερόβιων βιοντιδραστήρων μπορεί να περιγραφεί ως μια διαδικασία βιολογικής επεξεργασίας απουσία οξυγόνου με τη χρήση μεμβρανών για τον διαχωρισμό των στερεών από την υγρή φάση.

Οι τύποι των αντιδραστήρων AnMBR είναι στην ουσία όμοιοι με τους αερόβιους αντιδραστήρες. Ειδοποιός διαφορά των δύο αυτών τύπων είναι ότι στην περίπτωση των αναερόβιων δεν μπορεί ο καθαρισμός των μεμβρανών να γίνεται με ροή αέρα. Ο καθαρισμός τους επιτυγχάνεται είτε με ροή υγρού είτε με τη χρήση του βιοαερίου που παράγεται κατά τη διαδικασία.

Οι αναερόβιοι βιοαντιδραστήρες πλευρικής ροής ήταν οι πρώτοι που χρησιμοποιήθηκαν σε εμπορική βάση. Οι εμβαπτισμένοι AnMBR ξεκίνησαν να χρησιμοποιούνται σε ευρύτερη βάση στα τέλη της δεκαετίας του 1990 (Judd ,et al 2011). Συγκρινόμενοι με τους βιοαντιδραστήρες πλευρικής ροής, στους αντιδραστήρες εμβαπτισμένων μεμβρανών οι μεμβράνες τοποθετούνται απευθείας στο υγρό και η εκροή πραγματοποιείται είτε μέσω αντλίας είτε βαρυτικά μέσω του συστήματος των μεμβρανών.

Γενικά, οι αντιδραστήρες πλευρικής ροής (external/side stream) συμβάλλουν σε ένα πιο άμεσο υδροδυναμικό έλεγχο της έμφραξης των μεμβρανών (fouling) και πλεονεκτεί ως προς την ευκολία αντικατάστασης των μεμβρανών και τη διατήρηση υψηλών ροών. Ωστόσο, οι πλευρικής ροής απαιτούν συχνότερο καθάρισμα και καταναλώνουν περισσότερη ενέργεια (της τάξης των 10 kW/m<sup>3</sup> του προϊόντος). Η υψηλή ροή διήθησης μετά από κάποιο σημείο έχει αρνητική επίπτωση στην διατήρηση της βιομάζας στα συστήματα αναερόβιων αντιδραστήρων.

Αντίθετα, οι εμβαπτισμένες μεμβράνες έχουν πολύ μικρότερες ενεργειακές ανάγκες και απαιτούν λιγότερο συχνό καθαρισμό εξαιτίας των μικρών εγκάρσιων ταχυτήτων που εφαρμόζονται. (Lin et al., 2013)

Σύμφωνα με τον Chang (2014), οι σύγχρονοι αναερόβιοι αντιδραστήρες μεμβρανών υψηλής φόρτισης έχουν τη δυνατότητα να επεξεργάζονται ισχυρά λύματα με COD εισόδου που φτάνει τα 60 000 mg/L και μπορούν να επιτύχουν απομάκρυνση σε όρους COD κατά 85-90% σε HRT (υδραυλικούς χρόνους παραμονής) μικρότερους των 5 ημερών.

Σε ό,τι αφορά την παραγωγή βιοαερίου, τα εμπορικά συστήματα AnMBR πλήρους κλίμακας παράγουν περίπου 500 L βιοαερίου/ kg COD, εκ του οποίου τα 250-350 L/ kg COD είναι μεθάνιο. Υπενθυμίζεται ότι σύμφωνα με τη θεωρία, η θεωρητική τιμή στην παραγωγή του βιοαερίου είναι 350 L CH<sub>4</sub>/kg COD, εφόσον:  $CH_3COOH \rightarrow CH_4 + CO_2$

Επομένως: **(1 mol=) 64 g COD (όροι οξικού) παράγουν → (1 mol=) 16 g CH<sub>4</sub> → 22.4 L CH<sub>4</sub> (σε STP)**

Και άρα: **1 g COD·AcH → 0.350 L CH<sub>4</sub>**

Τα πτητικά λιπαρά οξέα (VFAs) έχουν μεγαλύτερη συγκέντρωση στον αντιδραστήρα από αυτή της εκροής, γεγονός που αποδεικνύει την υπόθεση ότι η δημιουργία του στρώματος στερεών στις μεμβράνες (cake layer) προκαλεί την εν μέρει αποσύνθεση των VFAs κατά τη ροή διαμέσου των μεμβρανών.

Επομένως, γίνεται αντιληπτό ότι η ενσωμάτωση των μεμβρανών σε αναερόβιους αντιδραστήρες υψηλής φόρτισης οδηγεί σε πολύ καλή ποιότητα εκροής εξόδου και σε σταθερή λειτουργία της επεξεργασίας.

### 2.2.3. Παράμετροι και συνθήκες λειτουργίας

Οι αρχικές παράμετροι λειτουργίας στους βυθισμένους βιοαντιδραστήρες κατά τις δεκαετίες 1980-1990 ήταν (Judd ,et al 2011):

- Ταχύτητα εγκάρσιας ροής (cross-flow velocity): 1-5 m/s (αν και συστήματα εμβαπτισμένων μεμβρανών λειτουργούν και για 0.3 m/s)
- Διαμεμβρανική πίεση (TMP): 2-7 bar για συστήματα πλευρικής ροής και 0.2-1 bar για βυθισμένα

Παρόλαυτα λόγω της σημασίας της εύρυθμης λειτουργίας των AnMBR ήταν επιτακτική η ανάγκη εύρεσης καλύτερων συνθηκών γεγονός που διεύρυνε τις παραμέτρους που λαμβάνονται υπόψη.

Συνολικά, οι παράμετροι λειτουργίας ενός αναερόβιου αντιδραστήρα με μεμβράνες είναι οι εξής, σύμφωνα με τα έως τώρα δεδομένα:

- ο υδραυλικός χρόνος παραμονής
- ο χρόνος παραμονής στερεών
- η οργανική φόρτιση
- η ροή διήθησης
- η θερμοκρασία του συστήματος
- το pH
- η συγκέντρωση στερεών στον αντιδραστήρα
- τα χαρακτηριστικά της παραγόμενης ιλύος

Σύμφωνα με μελέτες από την περίοδο του 2010 και έπειτα (Lin et al., 2013) οι συνήθεις συνθήκες λειτουργίας για ένα σύστημα AnMBR παρουσιάζονται στον παρακάτω πίνακα:

Πίνακας 2.2: Παράμετροι λειτουργίας AnMBR

Παράμετρος Λειτουργίας	Τυπική τιμή
Υδραυλικός χρόνος παραμονής (HRT)	8-24 h
Χρόνος παραμονής στερεών (SRT)	19-217 d
Οργανική φόρτιση (OLR)	0.8-3 kgCOD/(m <sup>3</sup> /d)
Ροή διήθησης (FLUX)	3.5-11 LMH (L/m <sup>3</sup> -h) για εμβαπτιζόμενες μεμβράνες 7-65 LMH για εξωτερικές μεμβράνες ως κρίσιμη ροή αναφέρονται τα 7 LMH
Θερμοκρασία (T)	10-22 °C για συστήματα που λειτουργούν σε θερμοκρασία περιβάλλοντος; 30-37°C για μεσόφιλα συστήματα
pH	6.5-8.0 (βέλτιστο εύρος 7.0-8.0)
συγκέντρωση MLSS	1-80 g/L (βέλτιστο 14-18 g/L)

### (α) Υδραυλικός χρόνος παραμονής (HRT)

Ο υδραυλικός χρόνος παραμονής είναι μία από τις πιο κρίσιμες λειτουργικές παραμέτρους, εφόσον μικρός HRT συνεπάγεται και μικρό όγκο αντιδραστήρα. Επομένως, η επιλογή του HRT επηρεάζει άμεσα τα κατασκευαστικά κόστη.

Οι αναερόβιοι βιοαντιδραστήρες λειτουργούν κατά βάση με υδραυλικούς χρόνους παραμονής (HRT) μεγαλύτερους των 8 ωρών, μικρότερους από τα τυπικά αναερόβια συστήματα αλλά μεγαλύτερους από τους χρόνους παραμονής των αερόβιων MBR (τυπικοί HRT=4-8h). Το ίδιο ισχύει και για την οργανική φόρτιση, η οποία στους AnMBR δεν ξεπερνά εν γένει τα 3 kg CODm<sup>3</sup>/d στην περίπτωση συνθετικών λυμάτων, μικρότερη από την αντίστοιχη των αερόβιων MBR (Lin et al., 2013).

Η αύξηση του HRT γενικά βελτιώνει την απομάκρυνση του οργανικού φορτίου, μέχρις ότου ένα σημείο. Η μείωση του υδραυλικού χρόνου παραμονής μέχρι το όριο για την αποφυγή έκπλυσης (wash-out) έχει μικρή επίδραση στην μείωση της απόδοσης του συστήματος, όπως αποδεικνύεται από τον Stuckey D.(2012), ο οποίος παρατήρησε μείωση στην απομάκρυνση του COD κατά λιγότερο του 5%, για σταδιακή μείωση του υδραυλικού χρόνου παραμονής από τις 48h στις 3h για την επεξεργασία αραιωμένων λυμάτων. Επιπρόσθετα, είναι σημαντικό να σημειωθεί ότι η μείωση του HRT επηρεάζει τη συγκέντρωση της βιομάζας και την παραγωγή του βιοαερίου. Επομένως, με τη μείωση του υδραυλικού χρόνου παραμονής αυξάνεται η συγκέντρωση στερεών της βιομάζας και κατά συνέπεια αυξάνεται η παραγωγή του βιοαερίου (και μεθανίου).

Είναι σημαντικό να προστεθεί ότι ο υδραυλικός χρόνος παραμονής έχει επίπτωση και στη έμφραξη (fouling) των μεμβρανών. Έτσι, ένας πιο μεγάλος χρόνος παραμονής (HRT=12h), οδηγεί σε έμφραξη των μεμβρανών κατά στάδια (αρχικά η αύξηση του fouling είναι οριζόντια και στη συνέχεια εκθετική), ανάλογα με το SRT και τη συγκέντρωση στερεών MLSS στον αντιδραστήρα. Όμως, για λειτουργία συστημάτων σε χαμηλούς χρόνους HRT (8-10h), ακόμα και για  $SRT = \infty$ , η συγκέντρωση MLSS αυξανόταν και επομένως παρατηρούταν συντομότερη έμφραξη (fouling) των μεμβρανών (Huang et al., 2008). Σε θερμοκρασίες της μεσόφιλης περιοχής, ο χρόνος παραμονής στερεών δεν επηρεάζει την απομάκρυνση του οργανικού φορτίου δεδομένου ότι είναι επαρκής. Σε περιπτώσεις AnMBR που λειτουργούν σε θερμοκρασίες περιβάλλοντος, και ειδικά για θερμοκρασίες μικρότερες των 15°C, ο HRT είναι κρίσιμος παράγοντας για την απόδοση του συστήματος, και η αύξησή του οδηγεί σε αύξηση της απομάκρυνσης του COD (Ozgun H. et al., 2013). Συνάγεται επομένως ότι για κάθε σύστημα υπάρχει ένας βέλτιστος υδραυλικός χρόνος παραμονής για τη λειτουργία του που εξαρτάται από τα υδραυλικά χαρακτηριστικά του συστήματος, τα χαρακτηριστικά των λυμάτων και τις ιδιότητες της ιλύος.

### **(β) Ροή διήθησης**

Η ροή διήθησης στους αναερόβιους βιοαντιδραστήρες εξαρτάται από το αν οι μεμβράνες είναι εξωτερικές του συστήματος ή εμβαπτιζόμενες. Ωστόσο, σαν γενική αρχή η ροή στις περισσότερες μελέτες δεν υπερέβη τα 15 LMH. Στα αερόβια συστήματα, η ροή αυτή είναι σημαντικά μεγαλύτερη, με τις τιμές να κυμαίνονται από 25 έως 140 LMH για εξωτερικά συστήματα και 3.7-85 LMH για εμβαπτισμένα συστήματα αντίστοιχα. Με βάση τη λογική της εύρεσης της κρίσιμης διαμεμβρανικής ροής, ο έλεγχος της ταχύτητας με την οποία γίνεται η διήθηση από τις μεμβράνες φαίνεται να αποτελεί ένα σημαντικό παράγοντα για την ομαλή και σταθερή λειτουργία των συστημάτων AnMBR.

Η κρίσιμη τιμή για τη ροή διήθησης σε AnMBR με εμβαπτισμένες μεμβράνες ήταν σε διαφορετικές μελέτες τα 7 LMH. Σε αυτή την τιμή τα συστήματα είχαν βέλτιστη απομάκρυνση και τη μικρότερη δυνατή επιβάρυνση των μεμβρανών αλλά και τη μικρότερη ζήτηση ενέργειας για τον καθαρισμό τους.

### **(γ) Χρόνος παραμονής στερεών (SRT)**

Ο SRT αποτελεί έναν από τους βασικότερους παράγοντες λειτουργίας των αναερόβιων συστημάτων και καθορίζει τόσο την απόδοση της επεξεργασίας όσο και τη έμφραξη (fouling) των μεμβρανών. Τα περισσότερα συστήματα λειτουργούν για SRT μεγαλύτερο των 20 ημερών. Η επιλογή μεγάλων χρόνων παραμονής στερεών αιτιολογείται από τον αργό ρυθμό των διεργασιών στον αναερόβιο μεταβολισμό, με περιοριστικό παράγοντα το βήμα της υδρόλυσης/διαλυτοποίησης των περισσότερων μεγαλομοριακών ενώσεων. Επομένως απαιτείται αυξημένος χρόνος παραμονής στερεών ( SRT > 10-15d).

Επίσης, σε αντίθεση με τους αναερόβιους αντιδραστήρες τύπου UASB, η χρήση των αναερόβιων αντιδραστήρων μεμβρανών επιτρέπει την πλήρη συγκράτηση της βιομάζας και επιτρέπει το μεγαλύτερο έλεγχο του χρόνου παραμονής στερεών. Σε έρευνες εργαστηριακής κλίμακας η

επιρροή του SRT έχει διφορούμενα αποτελέσματα. Η γενική αποδοχή είναι ότι η αύξηση του SRT οδηγεί σε μεγαλύτερη απομάκρυνση οργανικού φορτίου και καλύτερη συμπεριφορά των μεμβρανών. Ωστόσο, έχει διαπιστωθεί (Ozgun H. et al., 2013) ότι η μείωση του χρόνου παραμονής στερεών από 213d σε 40d δεν είχε κάποια σημαντική επίδραση στη γενική απόδοση του συστήματος. Αυτό καταδεικνύει ότι η σχέση ανάμεσα στο SRT και την απόδοση του συστήματος υπεισέρχονται και οι υπόλοιπες παράμετροι, όπως ο HRT και τα χαρακτηριστικά της εισόδου. Γενικά, συστήματα AnMBR με σχετικά μεγάλους HRT και SRT οδηγούν σε καλύτερη απομάκρυνση οργανικού υλικού, σε αυξημένη ανάκτηση βιοαερίου και σε μειωμένη παραγωγή λύσος. Αυτό συμβαίνει επειδή η αύξηση του SRT διευκολύνει τη διαδικασία της μεθανογένεσης και κατά συνέπεια την αύξηση στην παραγωγή του βιοαερίου.

Σε ό,τι αφορά την κατάσταση των μεμβρανών, παρατηρήθηκε (Huang et al., 2008) ότι η αύξηση του χρόνου παραμονής στερεών προκαλούσε μια ανάλογη αύξηση στην παραγωγή SMP. Η αύξηση των διαλυτών πολυμερών οδήγησε στην επικάλυψη θρεπτικών στις μεμβράνες και στο γέμισμα των πόρων τους. Έτσι, αυξήθηκε το μέγεθος του βιοφίλμ (biocake formation). Επίσης, ένας μεγάλος SRT συνέβαλε στη μείωση των πρωτεϊνών και υδατανθράκων στα εξωκυτταρικά πολυμερή (EPS) με αποτέλεσμα να μειώνεται η δυνατότητα δημιουργίας κροκίδων καθώς και τα σωματίδια να έχουν μικρότερο μέγεθος. Επομένως, υπάρχει συσχέτιση μεταξύ του μεγάλου SRT και του μικρού χρόνου fouling (έμφραξης) των μεμβρανών. Ωστόσο, αυτή η συσχέτιση δεν αποτελεί σχέση αιτίου-αποτελέσματος, καθώς ο χρόνος παραμονής στερεών δεν είναι η μόνη παράμετρος που επηρεάζει την πολύπλοκη δυναμική του fouling των μεμβρανών.

Επομένως, η καλή λειτουργία των αναερόβιων συστημάτων σε θερμοκρασίες περιβάλλοντος είναι βιώσιμη μόνο όταν ο SRT είναι περίπου διπλάσιος από τον αντίστοιχο χρόνο παραμονής των μεσοφιλικών συνθηκών. Σαν γενικός κανόνας, προτείνεται η επιλογή SRT τέτοιο ώστε (Shin et al., 2017):  $SRT_{\text{λειτουργία}} \geq 3 \times \theta_{\text{διπλασιασμού}}$  του πιο αργά αναπτυσσόμενου μικροοργανισμού

#### **(δ) Θερμοκρασία**

Η θερμοκρασία αποτελεί ένα βασικό παράγοντα για τη λειτουργία των αναερόβιων συστημάτων, κυρίως σε ό,τι αφορά τις ενεργειακές δαπάνες και την βέλτιστη οικονομική λειτουργία του συστήματος. Οι αναερόβιοι βιοαντιδραστήρες έχουν καλή απόδοση και σε θερμοκρασίες περιβάλλοντος.

Επίσης, η σημαντική συγκέντρωση σωματιδιακού οργανικού φορτίου στα εισερχόμενα λύματα αυξάνει τη σημασία του σταδίου της υδρόλυσης/ διαλυτοποίησης. Εφόσον ο ρυθμός των παραπάνω διεργασιών σε χαμηλές θερμοκρασίες μειώνεται σημαντικά (Lettinga et al., 2001), η λειτουργία των αναερόβιων βιοαντιδραστήρων σε θερμοκρασίες περιβάλλοντος θα σημαίνει την αύξηση στη συγκέντρωση των στερεών εντός του αντιδραστήρα, που δυνητικά μπορεί να φτάσει σε σημείο συσσώρευσης των στερεών. Αξίζει ωστόσο να αναφερθεί ότι παρά τη συσσώρευση των στερεών, οι Lettinga et al. παρατήρησαν ότι η απομάκρυνση του οργανικού φορτίου ήταν σχεδόν ταυτόσημη (κοντά στο 90%) τόσο για τις μεσόφιλες όσο και για τις ψυχρόφιλες συνθήκες.

Ένα ακόμη στοιχείο που θα πρέπει να λαμβάνεται υπόψη κατά την επιλογή της θερμοκρασίας στην οποία θα λειτουργεί το σύστημα είναι το γεγονός ότι το παραγόμενο μεθάνιο είναι περίπου 1.5 φορές πιο διαλυτό στο νερό στους 15°C συγκρινόμενο με τους 35 °C, για ένα τυπικό ποσοστό μεθανίου στο βιοαέριο (70%). Αυτό σημαίνει ότι το παραγόμενο μεθάνιο δε θα μπορεί να ανακτηθεί σε ένα μεγάλο βαθμό για τα συστήματα που λειτουργούν σε θερμοκρασία περιβάλλοντος (Gouveia J. et al., 2015). Στον αντίποδα, η αύξηση της θερμοκρασίας μπορεί να οδηγήσει στην αποκροκίδωση της ιλύος και στην απελευθέρωση εξωκυτταρικών πολυμερών (EPS), που επηρεάζουν αρνητικά την λειτουργία των μεμβρανών και αναφέρονται αναλυτικά σε επόμενο κεφάλαιο.

#### **(ε) pH**

Σε ότι αφορά το pH, ο στόχος στη λειτουργία των AnMBR είναι η διατήρησή του κοντά στο ουδέτερο με το εύρος λειτουργίας να κυμαίνεται από 6.5-8.0 και τις βέλτιστες αποδόσεις να παρατηρούνται για pH=7.0-8.0. Ωστόσο, είναι σημαντικό να επισημανθεί ότι κατά την υδρόλυση και την οξεογένεση το pH του συστήματος δύναται να μειωθεί και να είναι αναγκαία η ρύθμισή του με τη χρήση των κατάλληλων χημικών.

#### **(στ) Οργανική φόρτιση**

Η οργανική φόρτιση έχει σημαντική επίδραση στη λειτουργία του συστήματος και στην απόδοσή του. Μία οργανική φόρτιση της τάξης του  $1\text{ kg COD}/\text{m}^3/\text{d}$  οδηγεί σε παραγωγή βιοαερίου κοντά στα 0.4 L/d. Η αύξηση της οργανικής φόρτισης οδηγεί σε αύξηση του παραγόμενου βιοαερίου με γραμμική σχέση εφόσον ο υδραυλικός χρόνος παραμονής διατηρείται στα επιθυμητά όρια.

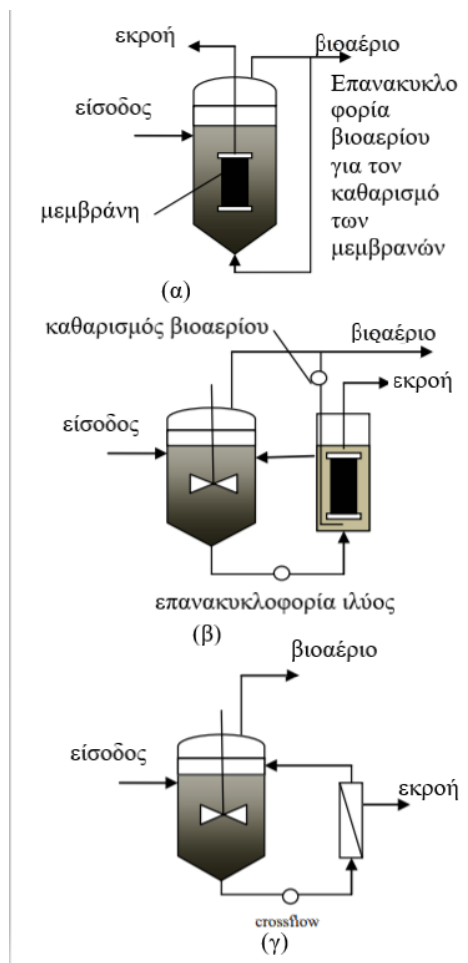
#### **(ζ) Χαρακτηριστικά ανάμικτου υγρού**

Τα χαρακτηριστικά της βιομάζας στον αντιδραστήρα (όπως είναι το ποσοστό των αργά αναπτυσσόμενων βακτηρίων και οι απαιτήσεις σε θρεπτικά) είναι άμεσα συνδεδεμένα με τις συνθήκες λειτουργίας στον αντιδραστήρα (Ozgun H. et al., 2013). Η λειτουργία των AnMBR συνδέεται σε πολλές περιπτώσεις με την απώλεια βιομάζας, ειδικά των διασπαστών προπιονικού. Η μείωση αυτή μπορεί να οφείλεται στην καταστροφή των κυττάρων υπό υψηλές διατμητικές δυνάμεις ή στην αυξημένη απόσταση ανάμεσα στα υδρογονοπαραγωγικά και στα υδρογονοτροφικά βακτήρια. Ωστόσο, η διατήρηση των συνθηκών του αναερόβιου μεταβολισμού σε αμετάβλητο επίπεδο είναι εφικτή. (Jeison et al., 2009). Το εύρος λειτουργίας για έναν AnMBR σε ό,τι αφορά τη συγκέντρωση των MLSS εξαρτάται από το είδος και τη μέθοδο επεξεργασίας, ωστόσο έχει βρεθεί ότι η συγκέντρωση των MLSS μπορεί να φτάσει και τα 17 g/L χωρίς να επηρεάσει την απόδοση του αντιδραστήρα (Martinez-Sosa et al., 2011).

## 2.2.4. Είδη αναερόβιων αντιδραστήρων με Μembrάνες

Πιο συγκεκριμένα τα είδη των αντιδραστήρων AnMBR συνοψίζονται στα ακόλουθα:

- αντιδραστήρες με εμβαπτισμένες μεμβράνες ( που ονομάζονται sAnMBR)
- αντιδραστήρες με εξωτερικές μεμβράνες (ή μεμβράνες παράπλευρης ροής) (cross-flow)
- αντιδραστήρες με εξωτερικές μεμβράνες που είναι εμβαπτισμένες



Εικόνα 2.1: Είδη αναερόβιων αντιδραστήρων με μεμβράνες: (α) εμβαπτισμένες μεμβράνες, (β) εξωτερικές εμβαπτιζόμενες μεμβράνες, (γ) εξωτερικές μεμβράνες διασταυρούμενης ροής (Chang , 2014)

### (α) Εμβαπτιζόμενες μεμβράνες

Από μελέτες που έχουν πραγματοποιηθεί για εμβαπτιζόμενες μεμβράνες με διαφορετικές λειτουργικές συνθήκες (εναλλαγές σε HRT και SRT) έχει αποδειχθεί ότι σε όλες τις περιπτώσεις η απομάκρυνση του COD και η παραγωγή βιοαερίου ήταν βέλτιστη, όταν η είσοδος των αντιδραστήρων ήταν συνθετικά λύματα χαμηλής οργανικής φόρτισης (Huang et al., 2008).



Αύξηση στον χρόνο παραμονής στερεών οδήγησε και σε βελτίωση της απόδοσης των συστημάτων.

Στην εφαρμογή των sAnMBR σε πλήρη κλίμακα δεν προτείνεται η διατήρηση υπερβολικά μικρών HRT καθώς και υπερβολικά μεγάλων SRT, εξαιτίας της αύξησης στη συγκέντρωση της βιομάζας, της αύξησης των SMP και στη μείωση των EPS, γεγονότα που οδηγούν στη έμφραξη των μεμβρανών. Είναι επομένως απολύτως αναγκαία η εύρεση των βέλτιστων συνθηκών λειτουργίας για κάθε σύστημα και ανά περίπτωση για να αποφεύγεται η μείωση στην απόδοση των συστημάτων.

Οι αντιδραστήρες με εμβαπτιζόμενες μεμβράνες έχουν ωστόσο και ορισμένα προβλήματα. Ένα από αυτά είναι η δημιουργία αφρισμού και η ανάπτυξη νηματοειδών μικροοργανισμών κατά την περίοδο εκκίνησης των αντιδραστήρων. Αυτό το φαινόμενο μπορεί να αποδοθεί στη μεγάλη διατμητική δύναμη κατά τον καθαρισμό των μεμβρανών με αέρα.

### **(β) Συστήματα διασταυρούμενης/ εγκάρσιας ροής (cross-flow)**

Συνήθως οι εξωτερικές μεμβράνες είναι της μορφής plate and frame (επίπεδη διαμόρφωση μεμβρανών) ή σε κυλινδρικό δοχείο με μεμβράνες κοίλων ινών. Σε ένα τέτοιο σύστημα η εγκάρσια ροή του υγρού χρησιμοποιείται για την δημιουργία διατμητικής δύναμης στην επιφάνεια ώστε να περιορίζεται η έμφραξη (fouling) των μεμβρανών. Η ροή της εξόδου πραγματοποιείται είτε λόγω της μεγάλης ταχύτητας της ροής (τυρβώδης ροή) είτε μέσω αντλίας

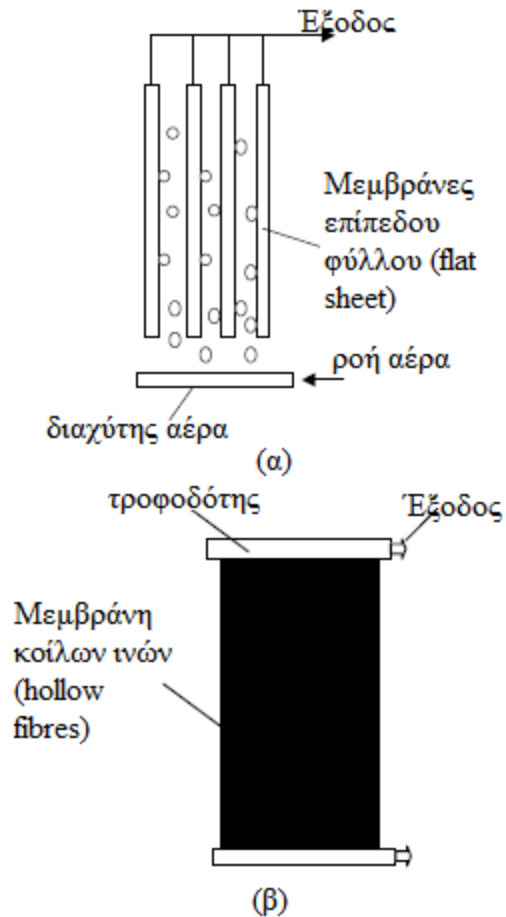
Στα συστήματα αυτά αναπτύσσεται τυρβώδης ροή και η ταχύτητα κυκλοφορίας είναι  $v > 1 \text{ m/s}$

### **(γ) Συστήματα με εξωτερικές εμβαπτιζόμενες μεμβράνες**

Το σύστημα εμβαπτισμένων μεμβρανών εξωτερικά του αντιδραστήρα προσομοιάζει τα συστήματα εμβαπτιζόμενων μεμβρανών εντός του αντιδραστήρα, μπορεί όμως να λειτουργεί με μεγαλύτερες ταχύτητες διήθησης και έχει διαφορετική διαμόρφωση. Όπως και στην περίπτωση (β), έτσι και εδώ οι εξωτερικές μεμβράνες είναι σε πλάκα ή σε κυλινδρικό δοχείο με μεμβράνες κοίλων ινών. Οι εμβαπτισμένες εσωτερικά και εξωτερικά μεμβράνες είναι οι πιο ευρέως διαδεδομένες σε ό,τι αφορά την αναερόβια επεξεργασία λυμάτων. Οι εμβαπτιζόμενες μεμβράνες έχουν διαμορφώσεις όπως της εικόνας 2.6. Σημειώνεται ότι τα πάνελ μεμβρανών επίπεδου φύλλου έχουν απόσταση μεταξύ τους από 8 έως 12 mm ώστε να επιτρέπεται η είσοδος αερίου για την αντιμετώπιση της έμφραξης και την μείωση του στρώματος στερεών (cake layer).

Σε εφαρμογές πλήρους κλίμακας, μέχρι και 100 πάνελ μπορούν να είναι συνδεδεμένα σε έναν αντιδραστήρα ώστε να αποτελούν ένα ενιαίο σύστημα φίλτρανσης.

Επιπλέον, η διαμόρφωση για τις μεμβράνες κοίλων ινών γίνεται σε δέσμη ινών που έχει τροφοδότη. Οι μεμβράνες κοίλων ινών μπορούν να διαμορφωθούν κυλινδρικά ή σε μορφή κουρτίνας.



Εικόνα 2.2: Διαμόρφωση των εμβαπτισμένων μεμβρανών (α) μεμβράνες επιπέδων φύλλων, (β) μεμβράνες κοίλων ινών (Chang ,2014, τροποποιημένο)

Τα είδη των μεμβρανών που μπορούν να χρησιμοποιηθούν είναι:

- πολλαπλές (multi tube)
- μεμβράνες επίπεδων φύλλων (flat sheet)
- μεμβράνες κοίλων ινών (hollow fiber)

Σε ό,τι αφορά το είδος των μεμβρανών που χρησιμοποιούνται, οι κοίλες μεμβράνες (τύπου hollow fiber) μπορούν να λειτουργήσουν σε δυνατότητες όγκου που φτάνουν τα 160 m<sup>3</sup>/m<sup>2</sup> αντιδραστήρα. Οι νεότεροι τύποι λειτουργούν με ροή σχεδιασμού τα 22 L/m<sup>2</sup>/d και μπορούν να επεξεργαστούν 800m<sup>3</sup>/d (Chang, 2014).

Ως προς τη λειτουργία των μεμβρανών στους αναερόβιους βιοαντιδραστήρες, μπορούν να συναχθούν τα ακόλουθα:

- Οι μεμβράνες είναι καλό να έχουν διακοπτόμενη λειτουργία (κύκλοι λειτουργίας-χαλάρωσης) ώστε να διασφαλίζεται η εύρυθμη μακροπρόθεσμα λειτουργία του συστήματος. Προτείνεται (Chang , 2014) ο κάθε κύκλος λειτουργίας να διαρκεί 10-15 λεπτά και η χαλάρωση των μεμβρανών να διαρκεί 10-60 δευτερόλεπτα. Επίσης, δεν έχει

παρατηρηθεί κάποιο προφανές πλεονέκτημα της αναστροφής ροής (backwash) σε σχέση με τον προτεινόμενο κύκλο λειτουργίας/χαλάρωσης.

- Οι μεμβράνες στα συστήματα AnMBR μπορούν να συγκρατήσουν πολύ υψηλότερες συγκεντρώσεις αιωρούμενων στερεών συγκρινόμενα με τα αερόβια MBR, όπου η υψηλή συγκέντρωση MLSS μπορεί να προκαλέσει τη μείωση στην αποδοτικότητα της μεταφοράς του οξυγόνου και κατά συνέπεια να επηρεάζει στη διήθηση του ανάμικτου υγρού

Σε ό,τι αφορά τον ίδιο τον αντιδραστήρα, οι βασικότεροι αναερόβιοι αντιδραστήρες μπορεί να είναι:

- Αντιδραστήρας πλήρους μίξης (CSTR)
- Αναερόβια κλίνη ανοδικής ροής (up-flow anaerobic sludge blanket-UASB)
- Διευρυμένη κλίνη υλός (expanded granular sludge bed- EGSB)

Τα είδη των αντιδραστήρων που μπορούν να χρησιμοποιηθούν για τους AnMBR, δηλαδή οι αντιδραστήρες που χρησιμοποιούνται στην αναερόβια επεξεργασία μπορούν να χρησιμοποιηθούν με την προσθήκη μεμβρανών.

Η λειτουργία αντιδραστήρων πλήρους μίξης με μεμβράνη ανεξαρτητοποιεί το χρόνο παραμονής στερεών από τον υδραυλικό ( $SRT \neq HRT$ ) και επομένως μπορεί να οδηγήσει σε αποτελεσματική λειτουργία με μικρούς και οικονομικά βιώσιμους αντιδραστήρες.

Οι πλέον διαδεδομένοι βιοαντιδραστήρες μεμβρανών είναι αντιδραστήρες πλήρους μίξης (CSTR), καθώς η προσθήκη μεμβρανών επιτρέπει τον πλήρη διαχωρισμό SRT και HRT, και άρα μειώνει τους απαιτούμενους όγκους. Η χρήση μεμβρανών σε CSTR επιτρέπει επίσης την αύξηση της συγκέντρωσης στερεών και συνεκδοχικά επιλύει τον περιοριστικό παράγοντα της υδρόλυσης των σωματιδίων και της παραγωγής βιοαερίου. Ωστόσο, η χρήση μεμβρανών σε αντιδραστήρα πλήρους μίξης οδηγεί σε συσσώρευση της βιομάζας και σε αύξηση της έμφραξης των μεμβρανών.

Σε ό,τι αφορά τους αντιδραστήρες ανοδικής ροής (UASB και EGSB) η προσθήκη μεμβρανών αυξάνει την ποιότητα της εκροής. Η τοποθέτηση μεμβρανών σε αυτή την περίπτωση γίνεται στο άνω στρώμα του αντιδραστήρα ώστε να περιορίζεται η απομάκρυνση στερεών. Σε τέτοιες περιπτώσεις η απομάκρυνση του COD είναι πολύ υψηλή (μεγαλύτερη του 97%) και η τελική συγκέντρωση στην έξοδο για το COD φτάνει τα 20 mg/L. Η χρήση μεμβρανών σε αυτά τα συστήματα δεν περιορίζει την οργανική φόρτιση που μπορεί να εφαρμοστεί. Επίσης, οι μεμβράνες συμβάλλουν στην ολική απομάκρυνση παθογόνων και 27στην υψηλή ποιότητα εκροής.

### 2.2.5. Πλεονεκτήματα και μειονεκτήματα αναερόβιων βιοαντιδραστήρων με μεμβράνες

Συνοπτικά, τα πλεονεκτήματα της χρήσης ενός αναερόβιου βιοαντιδραστήρα συνοψίζονται στα ακόλουθα (Lin et al, 2013, Ozgun H.et al, 2013):

- Υψηλή απομάκρυνση οργανικού φορτίου
- Υψηλή ποιότητα εκροής
- Δυνατότητα λειτουργίας σε υψηλή οργανική φόρτιση
- Χαμηλή παραγωγή ιλύος
- Απόλυτη συγκράτηση βιομάζας
- Ικανότητα λειτουργίας σε μεγάλο εύρος οργανικών φορτίσεων
- Χαμηλή απαίτηση ενέργειας (έως την λειτουργία με μηδενικό ισοζύγιο ενέργειας)
- Μειωμένο περιβαλλοντικό αποτύπωμα
- Μηδενική απαίτηση αερισμού
- Μικρή περίοδος προσαρμογής κατά την έναρξη (start-up μικρότερο από 2 εβδομάδες)
- Επανάκτηση ενέργειας μέσω της παραγωγής βιοαερίου
- Χαμηλή απαίτηση σε θρεπτικά
- Δυνατότητα χρήσης συστημάτων για την επεξεργασία ισχυρών λυμάτων ή/και λυμάτων με υψηλή περιεκτικότητα σε λίπη.
- Πολύ μικρότερος όγκος του αντιδραστήρα σε σχέση με το παραδοσιακό σύστημα ενεργού ιλύος και άρα εξοικονόμηση χώρου εγκαταστάσεων.

Μπορούμε λοιπόν να συμπεράνουμε ότι οι αναερόβιοι βιοαντιδραστήρες μεμβρανών συγκεντρώνουν τα πλεονεκτήματα των αναερόβιων συστημάτων και της τεχνολογίας των μεμβρανών, καθώς ένα από τα κύρια θέματα των αναερόβιων συστημάτων είναι η απαίτηση πολύ μεγάλων χρόνων παραμονής. Η προσθήκη μεμβρανών λύνει το πρόβλημα αυτό καθώς διαχωρίζει το χρόνο παραμονής στερεών SRT με τον υδραυλικό χρόνο παραμονής HRT καθιστώντας αυτή τη λύση οικονομικά και τεχνικά βιώσιμη (Lin et al, 2013).

Επιπλέον, η λειτουργία του AnMBR οδηγεί σε μηδενική κατανάλωση ενέργειας (εφόσον δεν υπάρχει ανάγκη για αερισμό και μπορεί να επανακυκλοφορείται το παραχθέν βιοαέριο, αλλά και εφόσον το βιοαέριο που παράγεται μπορεί να αντισταθμίσει την ζήτηση σε ενέργεια του συστήματος).

Με βάση τις μελέτες σε εργαστηριακή κλίμακα, οι αναερόβιοι βιοαντιδραστήρες φαίνεται να είναι κατάλληλοι για την επεξεργασία όλων των ειδών λυμάτων εκτός από λύματα που χαρακτηρίζονται από υψηλό οργανικό φορτίο σε συνδυασμό με μικρή συγκέντρωση βιομάζας (Lin et al., 2013).

### 2.2.6. Εφαρμογές AnMBR

Οι εφαρμογές της τεχνολογίας AnMBR στις απαιτήσεις των σύγχρονων κοινωνιών την καθιστούν από τις πιο σημαντικές και εξελίξιμες τεχνολογίες με χωροταξικά, ενεργειακά και οικονομικά οφέλη. Είναι λογικό και επόμενο η χρήση της να έχει άμεση εφαρμογή πολλούς κλάδους όπου η επεξεργασία αστικών λυμάτων αποτελεί ένα από τα πιο σημαντικά θέματα προς διαχείριση.

Η χρήση των AnMBR είναι πολλά υποσχόμενη για την επεξεργασία λυμάτων ισχυρών ακόμα και με υψηλή περιεκτικότητα σε λίπη (Ramos et al., 2014) και μπορεί να οδηγήσει σε ικανοποιητική απομάκρυνση του COD σε ποσοστό άνω του 95%, καθώς και σε αξιόλογη παραγωγή βιοαερίου με λειτουργία σε υψηλή οργανική φόρτιση (άνω των 3 kg COD/m<sup>3</sup>-d). Σε αυτή τη χρονική περίοδο οι αναερόβιοι αντιδραστήρες μεμβρανών δεν είναι ακόμα ευρέως διαδεδομένοι. Όλο και περισσότερες έρευνες διεξάγονται για την βελτιστοποίηση της συγκεκριμένης τεχνολογίας και την επιβεβαίωση των οικονομικοτεχνικών προτερημάτων της και την εφαρμογή της. Λόγω των προτερημάτων και ιδίως του μικρού όγκου του αντιδραστήρα ενδείκνυται η χρήση του σε τουριστικές-ξενοδοχειακές μονάδες.

### 2.2.7 Εφαρμογές AnMBR για την επεξεργασία αστικών λυμάτων σε συνθήκες περιβάλλοντος

Η μεγάλη ζήτηση πηγών νερού καθώς και η ταυτόχρονη μείωση των πόρων λόγω της ολοένα και αυξανόμενης διασποράς της μόλυνσης των πηγών αυτών καθιστά την έρευνα γύρω από την επεξεργασία των αστικών λυμάτων για την επαναχρησιμοποίηση του νερού όλο και πιο επιτακτική. Προκύπτει λοιπόν από τις ανάγκες της εποχής η εύρεση τεχνολογιών που θα αποτελούν οικονομικά και ενεργειακά βιώσιμα μοντέλα με ρεαλιστική εφαρμογή στις σύγχρονες κοινωνίες. Η τεχνολογία AnMBR ανταποκρίνεται στις ανάγκες αυτές και για το λόγο αυτό όλο και περισσότερες έρευνες σχετίζονται με την εν λόγω τεχνολογία. Ο αναερόβιος αντιδραστήρας με χρήση μεμβρανών έχει το ενεργειακό πλεονέκτημα έναντι του αντίστοιχου αερόβιου καθώς σε αναερόβιες συνθήκες παράγεται βιοαέριο ενώ ταυτόχρονα το αερόβιο σύστημα προϋποθέτει μεγάλες ποσότητες αερισμού λόγω της έμφραξης των μεμβρανών γεγονός που την καθιστά και πιο κοστοβόρα μέθοδο. Σύμφωνα με τις τελευταίες έρευνες οι αντιδραστήρες AnMBR δοκιμάστηκαν και στην απόδοση απομάκρυνσης οργανικών μικρομολυντών (OMPs) με πολύ καλή αντίδραση απομάκρυνσης των στοιχείων αυτών μέχρι και της τάξης του 70% (Harb et al. 2016, Carneiro et al. 2020, Wijekoon et al. 2015). Άλλη μια καινοτόμα δοκιμή στους AnMBR αφορούσε την απόδοση σε φαρμακευτικά απόβλητα όπου τα αποτελέσματα ήταν ενθαρρυντικά για μεγάλους χρόνους παραμονής στερεών (SRT) και με τη χρήση ενεργού άνθρακα για την υποβοήθηση του συστήματος (Xiao et al. 2017).

### 2.2.8 Προκλήσεις και μελλοντικές εφαρμογές του AnMBR

Πέρα από τις σύγχρονες εφαρμογές όπως είναι κατανοητό η τεχνολογία AnMBR αποτελεί ένα ευρύ πεδίο έρευνας που ακόμα είναι υπό μελέτη. Το γεγονός αυτό δημιουργεί πολλά περιθώρια βελτίωσης και βελτιστοποίησης της εν λόγω τεχνολογίας για μελλοντικές εφαρμογές.

Η χρήση των αντιδραστήρων με μεμβράνες επεκτείνεται και στην επεξεργασία στερεών αποβλήτων από την επεξεργασία στερεών απορριμμάτων (Abuabdou et al., 2020), ακόμα και αποβλήτων bamboo (Wang et al., 2013).

Άλλο ένα καινοτόμο πεδίο έρευνας αποτελεί μια πιο εξειδικευμένη λειτουργία των AnMBR ώστε ως τελικό προϊόν της επεξεργασίας λυμάτων να παράγεται υδρογόνο. Σκοπός και προτέρημα της εν λόγω έρευνας είναι η χρήση του υδρογόνου ως καθαρού καυσίμου καθώς δεν αφήνει κατάλοιπα και συγχρόνως η μείωση της παραγωγής μεθανίου για τον περιορισμό των εκπομπών.

Σε ό,τι αφορά τη βελτιστοποίηση της λειτουργίας των συστημάτων AnMBR, οι Robles A. et al., (2013) πρότειναν τις εξής στατιστικές μεθόδους ώστε να βελτιστοποιείται η ποιότητα της εκροής:

- Ανάλυση ευαισθησίας για την εύρεση και αξιολόγηση των σημαντικότερων παραμέτρων λειτουργίας
- Εφαρμογή μεθόδου Monte Carlo για την εύρεση της βέλτιστης διαμεμβρανικής πίεσης και των αρχικών τιμών του συστήματος
- Χρήση ενός πολύπλοκου αλγόριθμου βελτιστοποίησης για την επιτάχυνση του αυτόματου ελέγχου και την ελαχιστοποίηση του κόστους.

Η λειτουργία του AnMBR με αυτό τον τρόπο οδήγησε σε μείωση των απαιτήσεων ενέργειας κατά 25% με σταθερή ποιότητα εκροής σύμφωνα με τη νομοθεσία.

Επιπλέον, η λειτουργία των AnMBR αλλάζει με τη χρήση νέων τεχνολογιών. Για παράδειγμα, σε εργαστηριακό επίπεδο είναι δυνατή η λειτουργία ενός βιοαντιδραστήρα με δυναμική μεμβράνη (dynamic membrane-DM). Στο σύστημα τοποθετείται διαχωριστικό μεγάλου μεγέθους πόρων (200 μm) ώστε να αποτρέπεται η γρήγορη έμφραξη της μεμβράνης, να υποβοηθάται η διήθηση και να μειώνεται η κατανάλωση ενέργειας. Το σύστημα αυτό πέτυχε 80% απομάκρυνση COD (Alibardi et al., 2016). Η δυναμική μεμβράνη αποτελείται από ένα σύστημα βιοφίλμ που παίζει σημαντικό ρόλο στην ικανότητα απομάκρυνσης οργανικού φορτίου. Η μεγάλη διάμετρος πόρων του διαχωριστικού επιτρέπει τη χρήση μεγάλων ροών διήθησης (15-20 LMH) και τη λειτουργία σε μικρές διαμεμβρανικές πιέσεις (TMP < 50-100 mbar κατά κύριο λόγο). Η λειτουργία του

συστήματος σε χαμηλούς HRT παρουσίασε πρόβλημα ως προς την απομάκρυνση του COD και την παραγωγή βιοαερίου.

### 2.3. Μοντέλα αναερόβιας επεξεργασίας

Όπως έχει ήδη αναφερθεί στην παρούσα διπλωματική εργασία ένα από τα μεγαλύτερα πλεονεκτήματα της αναερόβιας χώνευσης είναι η παραγωγή ενέργειας και το γεγονός αυτό αποτελεί ίσως τον κυριότερο παράγοντα που κινεί την έρευνα γύρω από τη συγκεκριμένη διεργασία. Για την καλύτερη εκτίμηση και πρόβλεψη της έχουν δημιουργηθεί διάφορα μοντέλα αναερόβιας επεξεργασίας με πιο σημαντικό και διαδεδομένο το μοντέλο ADM1 της IWA καθώς επίσης αποτελεί και μοντέλο αναφοράς το οποίο θα αναλυθεί εκτενέστερα στο κεφάλαιο 3.2 . Άλλο ένα απλούστερο μοντέλο αναερόβιας επεξεργασίας αποτελεί το AMOCO.

## ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3 Περιγραφή του μοντέλου προσομοίωσης της λειτουργίας συστημάτων AnMBR

### 3.1. Κινητική αναερόβιας χώνευσης

#### 3.1.1. Κινητική ανάπτυξης μικροοργανισμών

Ο ρυθμός ανάπτυξης των μικροοργανισμών βασίζεται στις παρακάτω θεμελιώδεις σχέσεις:

1. Στο ρυθμό ανάπτυξης των μικροοργανισμών  $rx$ , ο οποίος σχετίζεται με τη συγκέντρωσή τους, με εξισώσεις της μορφής:

$$rx = dx/dt = \mu(S, x) * x \quad (3.1)$$

Όπου:  $\mu$  [=]  $T^{-1}$  είναι ο ειδικός ρυθμός ανάπτυξης των μικροοργανισμών που είναι συνάρτηση της συγκέντρωσης του περιοριστικού θρεπτικού συστατικού (υπόστρωμα  $S$  [=]  $ML^{-3}$ ) και της συγκέντρωσης των μικροοργανισμών  $x$  [=]  $ML^{-3}$

$t$  [=]  $T$  είναι ο χρόνος.

Η επίδραση των διεργασιών που οδηγούν σε μείωση της κυτταρικής μάζας, όπως η φθορά των βακτηρίων και η κυτταρική λύση τους (ενδογενής αναπνοή) στον καθαρό ρυθμό ανάπτυξης, συχνά χρησιμοποιείται ως τροποποίηση στο ρυθμό μικροβιακής ανάπτυξης (Lawrence & McCarty, 1970, Lawrence, 1971) ως εξής:

$$rx = dx/dt = (\mu - b) * x \quad (3.2)$$

Όπου:  $b$  ο ειδικός ρυθμός φθοράς των μικροοργανισμών [=]  $T^{-1}$

2. Στο ρυθμό κατανάλωσης υποστρώματος (Lawrence & McCarty, 1970), ο οποίος δίνεται από τη σχέση:

$$dS/dt = (dx/dt) Y \quad (3.3)$$

Όπου:  $Y$  ο συντελεστής απόδοσης της βιομάζας [=]  $MM^{-1}$

( $\Delta x / \Delta S$ ) (παραγόμενη βιομάζα / καταναλισκόμενο υπόστρωμα)

Από τις εξισώσεις 1 και 3 προκύπτει:

$$-1x * dS/dt = \mu Y = km = Um \quad (3.4)$$

Όπου:  $km$  ή  $Um$  ο ειδικός ρυθμός χρήσης υποστρώματος [=]  $MM^{-1}T^{-1}$

Διάφορα μαθηματικά μοντέλα έχουν χρησιμοποιηθεί για τη περιγραφή της επίδρασης της συγκέντρωσης του περιοριστικού υποστρώματος στον ειδικό ρυθμό μικροβιακής ανάπτυξης (Monod, 1949, Contois, 1959, Grau et al., 1975, Chen & Hashimoto, 1978). Το πιο απλό και



ευρύτερα χρησιμοποιούμενο μοντέλο είναι το μοντέλο Monod, που περιγράφει τον ειδικό ρυθμό ανάπτυξης των μικροοργανισμών ως εξής:

$$\mu = \mu_{max} \frac{KS}{K_S + S} \quad (3.5)$$

Όπου:  $\mu_{max}$  [=] T<sup>-1</sup> ο μέγιστος ειδικός ρυθμός ανάπτυξης

$K_S$  [=] ML<sup>-3</sup> σταθερά κορεσμού (είναι ίση με την συγκέντρωση υποστρώματος στην οποία ο ειδικός ρυθμός ισούται με το μισό του μέγιστου ρυθμού ανάπτυξης  $\mu = \mu_{max} / 2$ )

Η εξίσωση Monod αν και εμπειρική, χρησιμοποιείται ευρύτατα για μικροβιακά συστήματα, καθώς περιγράφει μαθηματικά την μεταβολή από μια πρώτης τάξεως κινητική (ως προς S) σε χαμηλή συγκέντρωση S, σε μια μηδενικής τάξεως κινητική (ως προς S) σε υψηλή συγκέντρωση (Βενετσανέας, 2012).

Η εξάρτηση του ειδικού ρυθμού ανάπτυξης από την συγκέντρωση του περιοριστικού υποστρώματος παρουσιάζεται στον παρακάτω πίνακα:

Πίνακας 3.1 Εκφράσεις του ειδικού ρυθμού ανάπτυξης, ως συνάρτηση της συγκέντρωσης του υποστρώματος ( Pavlostathis & Giraldo-Gomez, 1991, Gavala et al., 2003).

Μοντέλο	Ειδικός ρυθμός ανάπτυξης, $\mu$	Ρυθμός χρήσης υποστρώματος
		$(-\frac{dS}{dt} =)$
Πρώτης τάξεως	$\mu = \frac{kS}{S_0 - S} - b$	$kS$
Grau et al.	$\mu = \frac{\mu_{max} S}{S_0} - b$	$\frac{\mu_{max} S}{Y S_0} x$
Monod	$\mu = \frac{\mu_{max} S}{K_S + S} - b$	$\frac{\mu_{max} S}{Y(K_S + S)} x$
Moser	$\mu = \frac{\mu_{max} S^n}{K_S + S^n} - b$	$\frac{\mu_{max} S^n}{Y(K_S + S^n)} x$
Contois	$\mu = \frac{U_m S}{BX + S} - b$	$\frac{U_m S}{Y(BX + S)} x$

### 3.1.2 Κινητική αναχαίτισης μικροοργανισμών

Η διεργασία της αναερόβιας χώνευσης παρουσιάζει ιδιαίτερη ευαισθησία στα εξής:

- Στην παρεμπόδιση, το οποίο εξαρτάται από τη φύση και τη συγκέντρωση του παρεμποδιστή καθώς και από την τυχόν προηγούμενη έκθεση του βιολογικού συστήματος σε τοξική ουσία
- Στην τοξικότητα που προκαλούν διάφορες ουσίες όπως το οξυγόνο, η αμμωνία, τα κατιόντα, τα λιπαρά οξέα, τα βαρέα μέταλλα, τα θειούχα και θειϊκά ιόντα και διάφορες ξενοβιοτικές ενώσεις ( McCarthy, 1964, Parkin, 1986).

Για αυτό ακριβώς το λόγο έχουν ενσωματωθεί στην εξίσωση Monod διάφορες διορθωτικές σταθερές παρεμπόδισης για να περιγράψουν και να αποτυπωθούν οι αναχαιτιστικοί αυτοί παράγοντες της ανάπτυξης των μικροοργανισμών. Όταν η παρεμπόδιση είναι αντιστρέψιμη προτείνονται τρεις τύποι μοντέλων: τα ανταγωνιστικά, τα μη ανταγωνιστικά και τα ανανταγωνιστικά (Lehninger, 1975). Ο ειδικός ρυθμός κατανάλωσης υποστρώματος ( $I$ ), δίνεται από τις εξισώσεις:

➤ Μη ανταγωνιστικά:  $I = \frac{1}{1 + S_i/K_i}$  (3.6)

➤ Ανανταγωνιστικά:  $I = \frac{K_m \cdot S}{K_s + S(1 + K_i/S_i)}$  (3.7)

➤ Ανταγωνιστικά:  $I = \frac{K_m \cdot S}{K_s \cdot (1 + S_i/K_i) + S}$  (3.8)

Όπου:  $K_i$ =Παράμετρος αναχαίτισης

$S_i$ =Συγκέντρωση “αναχαιτιστή”

$K_m$ =Μέγιστος ειδικός ρυθμός κατανάλωσης υποστρώματος

$S$ =συγκέντρωση υποστρώματος

$K_s$ =Σταθερά κορεσμού

Από τις παραπάνω σχέσεις διαπιστώνεται ότι:

- Η ανταγωνιστική παρεμπόδιση επιδρά στη σταθερά κορεσμού
- Η μη ανταγωνιστική παρεμπόδιση επιδρά στο μέγιστο ειδικό ρυθμό κατανάλωσης υποστρώματος

- Η ανανταγωνιστική παρεμπόδιση επιδρά και στις 2 προαναφερόμενες κινητικές.

Τα προαναφερόμενα μοντέλα για την περιγραφή της παρεμπόδισης που προκαλείται είτε από τα αδιάσπαστα πτητικά λιπαρά οξέα, είτε από τα ολικά πτητικά λιπαρά οξέα, έχουν χρησιμοποιηθεί από αρκετούς ερευνητές (π.χ. Andrews & Graef, 1971, Hill & Barth, 1977). Το ανανταγωνιστικό μοντέλο παρεμπόδισης έχει χρησιμοποιηθεί επίσης για να περιγραφεί η παρεμπόδιση από τα πτητικά λιπαρά οξέα, ή από άλλες τοξικές, για την αναερόβια χώνευση, ουσίες π.χ. την αμμωνία (π.χ. Andrews, 1969, Andrews & Graef 1971, Βενετσανέας 2012).

## 3.2. Μοντέλο αναερόβιας χώνευσης ADM1 της IWA

### 3.2.1. Εισαγωγή στο ADM1

Το μοντέλο ADM1 της IWA αποτελεί προϊόν εντατικής ενασχόλησης και αμιγούς συνεργασίας μεταξύ ειδικών επιστημόνων στους τομείς της διεργασίας-ανάλυσης αναερόβιας χώνευσης, μοντελοποίησης και φυσικά της προσομοίωσης. Η ιδέα της ανάπτυξης του συγκεκριμένου μοντέλου προϋπήρχε όμως δημοσιεύθηκε πρώτη φορά στο πλαίσιο του 8<sup>ου</sup> συνεδρίου αναερόβιας χώνευσης στην πόλη Sendai της Ιαπωνίας το 1997. Σκοπός του μοντέλου είναι, μέσω προσομοίωσης της αναερόβιας χώνευσης, η πρόβλεψη και εν τέλει βελτιστοποίηση της λειτουργίας των συστημάτων που αναπτύσσονται. Ένα εργαλείο που βελτιώνει τις συνθήκες έρευνας καθώς αναπτύχθηκε λαμβάνοντας υπόψη τα δεδομένα των τελευταίων 20 χρόνων (Appels et al., 2008).

Πρόκειται για ένα δομημένο μοντέλο που περιλαμβάνει τα βήματα της αποσύνθεσης, της υδρόλυσης, της οξεογένεσης, της ακετογένεσης καθώς και της μεθανογένεσης. Η δομή του μοντέλου συμπυκνώνεται στους πίνακες 3.2.1.1 και 3.2.1.2

Πίνακας 3.2 Διεργασίας αναερόβιας χώνευσης για τα διαλυτά στερεά(IWA 2002)

Συστατικό i → Διεργασία j ↓	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	Ρυθμός β <sub>i</sub> (kg COD m <sup>-3</sup> d <sup>-1</sup> )
1. Διάσπαση													$f_{st,xc} k_{dis} X_c$
2. Υδρόλυση Υδρογονανθράκων	1												$k_{hyd,ch} X_{ch}$
3. Υδρόλυση πρωτεϊνών			1										$k_{hyd,pr} X_{pro}$
4. Υδρόλυση λιπιδίων	$1-f_{fa,li}$		$f_{fa,li}$										$k_{hyd,li} X_{li}$
5. Κατανάλωση σακχάρων	-1				$(1-Y_{su})f_{bu,su}$	$(1-Y_{su})f_{pro,su}$	$(1-Y_{su})f_{ac,su}$	$(1-Y_{su})f_{h2,su}$		$-\sum_{i=1-9,11-24} C_i v_{i,5}$	$-Y_{su} N_{bac}$		$k_{m,su} \frac{S_{su}}{K_S + S_{su}} X_{su} I_{pH} I_{N,lim}$
6. Κατανάλωση πρωτεϊνών		-1		$(1-Y_{aa})f_{va,aa}$	$(1-Y_{aa})f_{bu,aa}$	$(1-Y_{aa})f_{pro,aa}$	$(1-Y_{aa})f_{ac,aa}$	$(1-Y_{aa})f_{h2,aa}$		$-\sum_{i=1-9,11-24} C_i v_{i,6}$	$N_{aa}-Y_{aa} N_{bac}$		$k_{m,aa} \frac{S_{aa}}{K_S + S_{aa}} X_{aa} I_{pH} I_{N,lim}$
7. Κατανάλωση LCFA			-1				$(1-Y_{fa})0.7$	$(1-Y_{fa})0.3$				$-Y_{fa} N_{bac}$	$k_{m,fa} \frac{S_{fa}}{K_S + S_{fa}} X_{fa} I_{pH} I_{N,lim} I_{h2}$
8. Κατανάλωση πενταναϊκού οξέους				-1		$(1-Y_{c4})0.54$	$(1-Y_{c4})0.31$	$(1-Y_{c4})0.15$				$-Y_{c4} N_{bac}$	$k_{m,c4} \frac{S_{va}}{K_S + S_{va}} X_{c4} \frac{1}{1 + S_{bu}/S_{va}} I_{pH} I_{N,lim} I_{h2}$
9. Κατανάλωση βουτυρικού οξέους					-1		$(1-Y_{c4})0.8$	$(1-Y_{c4})0.2$				$-Y_{c4} N_{bac}$	$k_{m,c4} \frac{S_{bu}}{K_S + S_{bu}} X_{c4} \frac{1}{1 + S_{va}/S_{bu}} I_{pH} I_{N,lim} I_{h2}$
10. Κατανάλωση προπιονικού οξέους						-1	$(1-Y_{pro})0.57$	$(1-Y_{pro})0.43$		$-\sum_{i=1-9,11-24} C_i v_{i,10}$	$-Y_{pro} N_{bac}$		$k_{m,pr} \frac{S_{pro}}{K_S + S_{pro}} X_{pro} I_{pH} I_{N,lim} I_{h2}$
11. Κατανάλωση οξικού οξέους							-1		$(1-Y_{ac})$	$-\sum_{i=1-9,11-24} C_i v_{i,11}$	$-Y_{ac} N_{bac}$		$k_{m,ac} \frac{S_{ac}}{K_S + S_{ac}} X_{ac} I_{pH} I_{N,lim} I_{NH3} X_{ac}$
12. Κατανάλωση υδρογόνου								-1	$(1-Y_{h2})$	$-\sum_{i=1-9,11-24} C_i v_{i,12}$	$-Y_{h2} N_{bac}$		$k_{m,h2} \frac{S_{h2}}{K_S + S_{h2}} X_{h2} I_{pH} I_{N,lim}$
13. Φθορά βιομάζας X <sub>su</sub>													$k_{dec,Xsu} X_{su}$
14. Φθορά βιομάζας X <sub>aa</sub>													$k_{dec,Xaa} X_{aa}$
15. Φθορά βιομάζας X <sub>fa</sub>													$k_{dec,Xfa} X_{fa}$
16. Φθορά βιομάζας X <sub>C4</sub>													$k_{dec,Xc4} X_{c4}$
17. Φθορά βιομάζας X <sub>pro</sub>													$k_{dec,Xpro} X_{pro}$
18. Φθορά οξικροφικής βιομάζας X <sub>ac</sub>													$k_{dec,Xac} X_{ac}$
19. Φθορά υδρογονοτροφικής βιομάζας X <sub>h2</sub>													$k_{dec,Xh2} X_{h2}$

Πίνακας 3.3 Διεργασίες αναερόβιας χώνευσης για τα σωματιδιακά στερεά( IWA 2002)

Συστατικό i → Διεργασία j ↓	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	Ρυθμός $\rho_i$ (kg COD m <sup>-3</sup> d <sup>-1</sup> )
	$X_c$	$X_{ch}$	$X_{pr}$	$X_{fi}$	$X_{su}$	$X_{aa}$	$X_{fa}$	$X_{c4}$	$X_{pro}$	$X_{ac}$	$X_{h2}$	$X_i$	
1. Διάσπαση	-1	$f_{chXc}$	$f_{prXc}$	$f_{fiXc}$								$f_{Xl,Xc}$	$k_{dis}X_c$
2. Υδρόλυση Υδρογονανθράκων		-1											$k_{hyd,ch}X_{ch}$
3. Υδρόλυση πρωτεϊνών			-1										$k_{hyd,pr}X_{pro}$
4. Υδρόλυση λιπιδίων				-1									$k_{hyd,li}X_{fi}$
5. Κατανάλωση σακχάρων					$Y_{su}$								$k_{m,su} \frac{S_{su}}{K_S + S_{su}} X_{su} I_{pH} I_{N,lim}$
6. Κατανάλωση πρωτεϊνών						$Y_{aa}$							$k_{m,aa} \frac{S_{aa}}{K_S + S_{aa}} X_{aa} I_{pH} I_{N,lim}$
7. Κατανάλωση LCFA							$Y_{fa}$						$k_{m,fa} \frac{S_{fa}}{K_S + S_{fa}} X_{fa} I_{pH} I_{N,lim} I_{h2}$
8. Κατανάλωση πεντανοϊκού οξέους								$Y_{c4}$					$k_{m,c4} \frac{S_{c4}}{K_S + S_{c4}} X_{c4} \frac{1}{1 + S_{bu}/S_{c4}} I_{pH} I_{N,lim} I_{h2}$
9. Κατανάλωση βουτυρικού οξέους									$Y_{c4}$				$k_{m,c4} \frac{S_{c4}}{K_S + S_{c4}} X_{c4} \frac{1}{1 + S_{bu}/S_{c4}} I_{pH} I_{N,lim} I_{h2}$
10. Κατανάλωση προπιονικού οξέους									$Y_{pro}$				$k_{m,pr} \frac{S_{pro}}{K_S + S_{pro}} X_{pro} I_{pH} I_{N,lim} I_{h2}$
11. Κατανάλωση οξικού οξέους										$Y_{ac}$			$k_{m,ac} \frac{S_{ac}}{K_S + S_{ac}} X_{ac} I_{pH} I_{N,lim} I_{NH3} X_{ac}$
12. Κατανάλωση υδρογόνου											$Y_{h2}$		$k_{m,h2} \frac{S_{h2}}{K_S + S_{h2}} X_{h2} I_{pH} I_{N,lim}$
13. Φθορά βιομάζας $X_{su}$					-1								$k_{dec,Xsu} X_{su}$
14. Φθορά βιομάζας $X_{aa}$						-1							$k_{dec,Xaa} X_{aa}$
15. Φθορά βιομάζας $X_{fa}$							-1						$k_{dec,Xfa} X_{fa}$
16. Φθορά βιομάζας $X_{C4}$								-1					$k_{dec,Xc4} X_{c4}$
17. Φθορά βιομάζας $X_{pro}$									-1				$k_{dec,Xpro} X_{pro}$
18. Φθορά οξικοτροφικής βιομάζας $X_{ac}$										-1			$k_{dec,Xac} X_{ac}$
19. Φθορά υδρογονοτροφικής βιομάζας $X_{h2}$											-1		$k_{dec,Xh2} X_{h2}$

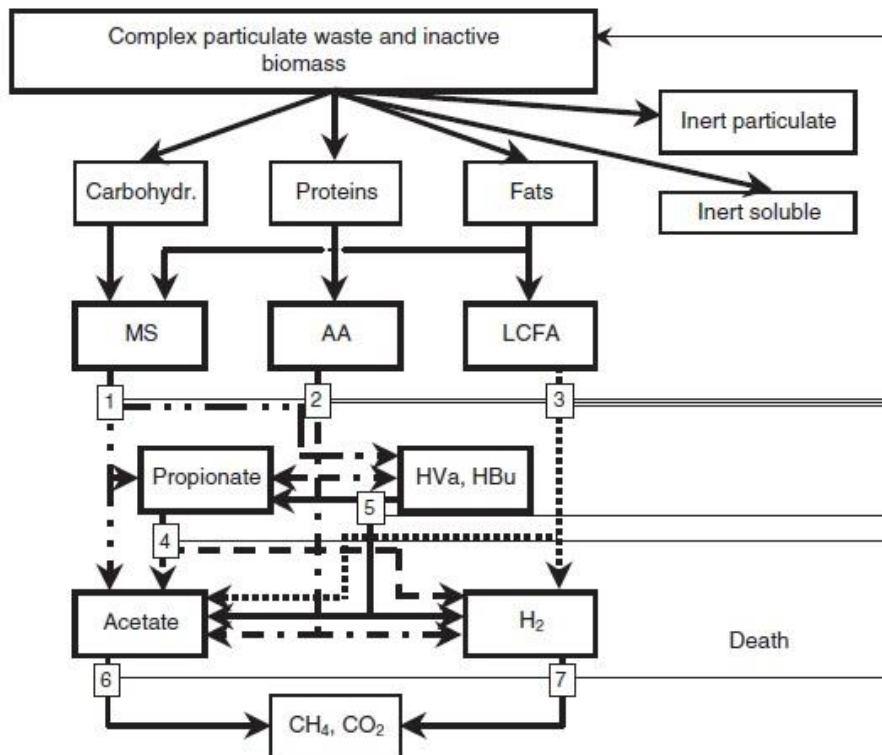
Οι αντιδράσεις που λαμβάνουν χώρα σε έναν αναερόβιο αντιδραστήρα διακρίνονται σε βιολογικές και φυσικοχημικές.

**Βιοχημικές αντιδράσεις:** Περιλαμβάνονται οι εξωκυτταρικές αντιδράσεις της υδρόλυσης και οι τρεις βασικές κατηγορίες αντιδράσεων που πραγματοποιούνται στα κύτταρα των αναερόβιων μικροοργανισμών, η οξεογένεση, η οξικογένεση και η μεθανογένεση. Ως υπόστρωμα θεωρείται το βιοδιασπάσιμο κλάσμα του COD, καθώς το μη βιοδιασπάσιμο κλάσμα δεν είναι διαθέσιμο για τις βιοχημικές διεργασίες. Το μοντέλο περιλαμβάνει και τα ενδιάμεσα προϊόντα της αναερόβιας χώνευσης, με στόχο τη μεγιστοποίηση της εφαρμοσιμότητας του μοντέλου, διατηρώντας παράλληλα μια απλοποιημένη μορφή.

**Φυσικοχημικές αντιδράσεις:** Περιλαμβάνονται οι αντιδράσεις στην υγρή φάση, όπως οι αντιδράσεις σχηματισμού ιόντων, οι αντιδράσεις μεταξύ υγρής και αέριας φάσης, όπως η διαφυγή των αέριων προϊόντων, καθώς και οι αντιδράσεις μεταξύ υγρής και στερεής φάσης, όπως η πρόσληψη των ιόντων από τα κύτταρα. Μέσω των φυσικοχημικών αντιδράσεων μπορούν να μελετηθούν τόσο παράγοντες απόδοσης όπως το βιοαέριο και η αλκαλικότητα, όσο και αναχαιτιστικοί παράγοντες, όπως τα ελεύθερα οξέα και βάσεις (Batstone et al.,2002, Ματζιούρας, 2010).

Σημειώνεται ότι όλα τα μεγέθη που χρησιμοποιούνται στο μοντέλο εκφράζονται σε μονάδες Χημικά Απαιτούμενου Οξυγόνου (COD) και συγκεκριμένα σε kgCOD m<sup>-3</sup> ≡ gCOD L<sup>-1</sup>, εξαιτίας της

χρήσης της συγκεκριμένης μονάδας στο χαρακτηρισμό των αποβλήτων. Τα συστατικά που δεν μπορούν να εκφραστούν σε μονάδες COD, όπως είναι ο ανόργανος άνθρακας (με τις μορφές CO<sub>2</sub> και HCO<sub>3</sub><sup>-</sup>) και το ανόργανο άζωτο (με τις μορφές NH<sub>4</sub><sup>+</sup> και NH<sub>3</sub>), εκφράζονται σε μονάδες μοριακής συγκέντρωσης και συγκεκριμένα σε kmole m<sup>-3</sup> = M (IWA, 2002).



Διάγραμμα 3.1: Σχηματική αναπαράσταση βιοχημικών διεργασιών (IWA 2002)

1. οξεογένεση από σάκχαρα,
2. οξεογένεση από αμινοξέα,
3. οξεογένεση από ελεύθερα λιπαρά οξέα,
4. οξεογένεση από προπιονικό οξύ,
5. οξεογένεση από βουτυρικό και βαλερικό οξύ,
6. οξεοτροφική μεθανογένεση
7. υδρογονοτροφική μεθανογένεση]

Στόχος της αναερόβιας χώνευσης είναι η αποδόμηση μεγαλομοριακών ενώσεων και η διαλυτοποίησή τους σε αξιοποιήσιμα προϊόντα. Η διεργασία αυτή περιγράφεται και από τον σχήμα 3.1. Η οργανική ύλη στην είσοδο αποτελείται από πολύπλοκες οργανικές ενώσεις οι οποίες αρχικά διασπώνται σε Υδατάνθρακες, Πρωτεΐνες, Λίπη καθώς και ένα μέρος αποτελεί αδρανή βιομάζα. Στη συνέχεια τα στοιχεία αυτά υδρολύονται αντίστοιχα το καθένα σε Μονοσακχαρίτες, σε Αμινοξέα και Λιπαρά οξέα μακράς αλυσίδας. Οι Μονοσακχαρίτες μέσω της οξεογένεσης μετατρέπονται σε πτητικά λιπαρά οξέα (VFAs :βουτυρικό κ.α.) και σε οξικό οξύ. Τα

Αμινοξέα μέσω οξεογένεσης μετατρέπονται σε, VFAs (προπιονικό, βουτυρικό), σε οξικό οξύ καθώς και διαλυμένο υδρογόνο. Τέλος τα Λιπαρά οξέα μακράς αλυσίδας (LCFA) μέσω ακετογένεσης μετατρέπονται σε διαλυμένο υδρογόνο και οξικό οξύ. Το οξικό οξύ ανήκει κι εκείνο στην κατηγορία των VFAs γίνεται όμως ιδιαίτερη αναφορά καθώς αποτελεί το στοιχείο σε μεγαλύτερη αναλογία των VFAs. Τέλος τα VFAs και το οξικό μέσω της οξεοτροφικής μεθανογένεσης αλλά και το διαλυμένο υδρογόνο μέσω υδρογονοτροφικής μεθανογένεσης μετατρέπονται σε διοξείδιο του άνθρακα και μεθάνιο στοιχεία που ορίζουν το βιοαέριο.

### 3.2.2. Εξισώσεις του ADM1

#### 3.2.2.1. Ρυθμοί βιοχημικών διεργασιών

Οι ρυθμοί βιοχημικών διεργασιών του μοντέλου

Κλασματοποίηση:

$$\rho_1 = K_{dis} * X_c \quad (3.2.1)$$

Υδρόλυση υδατανθράκων:

$$\rho_2 = K_{hyd,ch} * X_{ch} \quad (3.2.2)$$

Υδρόλυση πρωτεϊνών

$$\rho_3 = K_{hyd,pr} * X_{pr} \quad (3.2.3)$$

Υδρόλυση λιπιδίων

$$\rho_4 = K_{hyd,li} * X_{li} \quad (3.2.4)$$

Κατανάλωση σακχάρων

$$\rho_5 = K_{m,su} * (S_{su} / (K_{s,su} + S_{su})) * X_{su} * I_5 \quad (3.2.5)$$

Κατανάλωση αμινοξέων

$$\rho_6 = K_{m,aa} * (S_{aa} / (K_{s,aa} + S_{aa})) * X_{aa} * I_6 \quad (3.2.6)$$

Κατανάλωση πτητικών λιπαρών οξέων

$$\rho_7 = K_{m,fa} * (S_{fa} / (K_{s,fa} + S_{fa})) * X_{fa} * I_7 \quad (3.2.7)$$

Κατανάλωση βαλερικού οξέος

$$\rho_8 = K_{m,c4} * (S_{va} / (K_{s,c4} + S_{va})) * X_{c4} * (S_{va} / (S_{bu} + S_{va} + 1 * e^{-6})) * I_8 \quad (3.2.8)$$

Κατανάλωση βουτυρικού οξέος

$$\rho_9 = K_{m,c4} * (S_{bu} / (K_{s,c4} + S_{bu})) * X_{c4} * (S_{bu} / (S_{va} + S_{bu} + 1 * e^{-6})) * I_9 \quad (3.2.8)$$

Κατανάλωση προπιονικού

$$\rho_{10} = K_{m,pr} * (S_{pro} / (K_{s,pro} + S_{pro})) * X_{pro} * I_{10} \quad (3.2.9)$$

Κατανάλωση οξικού οξέος

$$\rho_{11} = K_{m,ac} * (S_{ac} / (K_{s,ac} + S_{ac})) * X_{ac} * I_{11} \quad (3.2.10)$$

Κατανάλωση υδρογόνου

$$\rho_{12} = K_{m,h2} * (S_{h2} / (K_{s,h2} + S_{h2})) * X_{h2} * I_{12} \quad (3.2.11)$$

Αποσύνθεση καταναλωτών σακχάρων:

$$\rho_{13} = K_{dec,xsu} * X_{su} \quad (3.2.12)$$

Αποσύνθεση καταναλωτών αμινοξέων:

$$\rho_{14} = K_{dec,xaa} * X_{aa} \quad (3.2.13)$$

Αποσύνθεση καταναλωτών πτητικών λιπαρών οξέων:

$$\rho_{15} = K_{dec,xfa} * X_{fa} \quad (3.2.14)$$

Αποσύνθεση καταναλωτών βαλυρικού και βουτυρικού:

$$\rho_{16} = K_{dec,xc4} * X_{c4} \quad (3.2.15)$$

Αποσύνθεση καταναλωτών προπιονικού:

$$\rho_{17} = K_{dec,xpro} * X_{pro} \quad (3.2.16)$$

Αποσύνθεση καταναλωτών οξικού:

$$\rho_{18} = K_{dec,xac} * X_{ac} \quad (3.2.17)$$

Αποσύνθεση καταναλωτών υδρογόνου

$$\rho_{19} = K_{dec,xh2} * X_{h2} \quad (3.2.18)$$

Σημείωση: Στις εκφράσεις  $\rho_8, \rho_9$  προστέθηκε στον παρονομαστή μια μικρή ποσότητα της τάξης του  $1e-6$  για να αποφευχθεί η διαίρεση με το μηδέν σε περίπτωση που έχουμε έλλειψη βουτυρικού και βαλυρικού οξέος.

### 3.2.2.2. Ρυθμοί οξεογένεσης

$$\rho_{A,4} = K_{A,Bva} * (S_{va} * (K_{a,va} + S_{H+}) - K_{a,va} * S_{va}) \quad (3.2.19)$$

$$\rho_{A,5} = K_{A,Bbu} * (S_{bu} * (K_{a,bu} + S_{H+}) - K_{a,bu} * S_{bu}) \quad (3.2.20)$$

$$\rho_{A,6} = K_{A,Bpro} * (S_{pro} * (K_{a,pro} + S_{H+}) - K_{a,pro} * S_{pro}) \quad (3.2.21)$$

$$\rho_{A,7} = K_{A,Bac} * (S_{ac} * (K_{a,ac} + S_{H+}) - K_{a,ac} * S_{ac}) \quad (3.2.22)$$

$$\rho_{A,10} = K_{A,Bco2} * (S_{hco3} * (K_{a,co2} + S_{H+}) - K_{a,co2} * S_{ic}) \quad (3.2.23)$$



$$\rho_{A,11}=K_{A,Bin}*(S_{nh3}-*(K_{a,in}+S_{H+})-K_{a,in}*S_{in}) \quad (3.2.24)$$

### 3.2.2.3. Ρυθμοί μεταφοράς σε αέριο

$$\rho_{\tau,8}=k_{La}*(S_{h2}-16*K_{H,h2}*p_{gas,h2}) \quad (3.2.25)$$

$$\rho_{\tau,9}=k_{La}*(S_{ch4}-64*K_{H,ch4}*p_{gas,ch4}) \quad (3.2.26)$$

$$\rho_{\tau,10}=k_{La}*(S_{co2}-K_{H,co2}*p_{gas,co2}) \quad (3.2.27)$$

### 3.2.2.4. Συντελεστές αναχαίτισης

Συντελεστής αναχαίτισης του pH και του ανόργανου αζώτου για την κατανάλωση των σακχάρων και των αμινοξέων:

$$I_{5,6}=I_{pH,aa}*I_{in,lim} \quad (3.2.28)$$

Συντελεστής αναχαίτισης του pH και του ανόργανου αζώτου για την κατανάλωση των πτητικών λιπαρών οξέων (fatty acids):

$$I_7=I_{pH,aa}*I_{in,lim}*I_{h2,fa} \quad (3.2.29)$$

Συντελεστής αναχαίτισης του pH και του ανόργανου αζώτου για την κατανάλωση του βουτυρικού και του βαλερικού οξέος:

$$I_{8,9}=I_{pH,aa}*I_{in,lim}*I_{h2,c4} \quad (3.2.30)$$

Συντελεστής αναχαίτισης του pH και του ανόργανου αζώτου για την κατανάλωση του προπιονικού:

$$I_{10}=I_{pH,aa}*I_{in,lim}*I_{h2,pro} \quad (3.2.31)$$

Συντελεστής αναχαίτισης του pH, του ανόργανου αζώτου και της ελεύθερης αμμωνίας για την κατανάλωση του οξικού οξέος:

$$I_{11}=I_{pH,ac}*I_{in,lim}*I_{nh3} \quad (3.2.32)$$

Συντελεστής αναχαίτισης του pH και του ανόργανου αζώτου για την κατανάλωση του υδρογόνου:

$$I_{12}=I_{pH,h2}*I_{in,lim} \quad (3.2.33)$$

Συντελεστές αναχαίτισης για την κατανάλωση των αμινοξέων, του acetate και του υδρογόνου:

$$I_{pH,aa}=\frac{K_{pH}^{n_{aa}}}{S_{H^+}^{n_{aa}}+K_{pH}^{n_{aa}}} \text{ με } K_{pH} = 10^{-\frac{pH_{LL,aa}+pH_{UL,aa}}{2}} \text{ και } n_{aa} = \frac{3}{pH_{UL,aa}-pH_{LL,aa}} \quad (3.2.34)$$

$$I_{pH,ac}=\frac{K_{pH}^{n_{ac}}}{S_{H^+}^{n_{ac}}+K_{pH}^{n_{ac}}} \text{ με } K_{pH} = 10^{-\frac{pH_{LL,ac}+pH_{UL,ac}}{2}} \text{ και } n_{ac} = \frac{3}{pH_{UL,ac}-pH_{LL,ac}} \quad (3.2.35)$$

$$I_{pH,h2} = \frac{K_{pH}^{n_{h2}}}{S_{H^+}^{n_{h2}} + K_{pH}^{n_{h2}}} \text{ με } K_{pH} = 10^{-\frac{pH_{LL,h2} + pH_{UL,h2}}{2}} \text{ και } n_{ac} = \frac{3}{pH_{UL,h2} - pH_{LL,h2}} \quad (3.2.36)$$

Συντελεστής αναχαίτισης του ανόργανου αζώτου:

$$I_{iN,lim} = 1/(1+(K_{s,iN}/S_{iN})) \quad (3.2.37)$$

Συντελεστής αναχαίτισης του υδρογόνου για την κατανάλωση των πτητικών λιπαρών οξέων (fatty acids):

$$I_{h2,fa} = 1/(1+(S_{h2}/K_{i,h2,fa})) \quad (3.2.38)$$

Συντελεστής αναχαίτισης του υδρογόνου για την κατανάλωση του βαλερικού και του προπιονικού οξέος:

$$I_{h2,c4} = 1/(1+(S_{h2}/K_{i,h2,c4})) \quad (3.2.39)$$

Συντελεστής αναχαίτισης του υδρογόνου για την κατανάλωση του προπιονικού:

$$I_{h2,pro} = 1/(1+(S_{h2}/K_{i,h2,pro})) \quad (3.2.40)$$

Συντελεστής αναχαίτισης της ελεύθερης αμμωνίας:

$$I_{nh3} = 1/(1+(S_{nh3}/K_{i,nh3})) \quad (3.2.41)$$

Υπολογισμός του pH:

$$pH = -\log(S_{h^+}) \quad (3.2.42)$$

### 3.2.2.5. Διαφορικές εξισώσεις διαλυτού κλάσματος

Η γενική διαφορική εξίσωση έχει ως εξής:

$$\frac{dV S_{liq,i}}{dt} = q_{in} \cdot S_{in,i} - q_{out} \cdot S_{liq,i} + V \cdot \sum_{j=1-19} \rho_j \cdot v_{i,j} \quad (3.2.42)$$

Όμως στην προκειμένη περίπτωση  $q_{in}=q_{out}=q$  άρα τελικά η παραπάνω εξίσωση (3.2.42) καταλήγει:

$$\frac{dS_{liq,i}}{dt} = \frac{q \cdot S_{in,i}}{V_{liq}} - \frac{q \cdot S_{liq,i}}{V_{liq}} + \sum_{j=1-19} \rho_j \cdot v_{i,j} \quad (3.2.43)$$

Μεταβολή σακχάρων:

$$dS_{su}/dt = q_{in}/V_{liq} * (S_{su,in} - S_{su}) + \rho_2 + (1 - f_{fa,li}) * \rho_4 - \rho_5 \quad (3.2.2.1)$$

Μεταβολή αμινοξέων:

$$dS_{aa}/dt = q_{in}/V_{liq} * (S_{aa,in} - S_{aa}) + \rho_3 - \rho_6 \quad (3.2.2.2)$$

Μεταβολή λιπαρών οξέων:

$$dS_{fa}/dt = q_{in}/V_{liq} * (S_{fa,in} - S_{fa}) + f_{fa,li} * \rho_4 - \rho_7 \quad (3.2.2.3)$$

Μεταβολή βαλερικού οξέος:

$$dS_{va}/dt = q_{in}/V_{liq} * (S_{va,in} - S_{va}) + (1 - Y_{aa}) * f_{va,aa} * \rho_6 - \rho_8 \quad (3.2.2.3)$$

Μεταβολή βουτυρικού οξέος:

$$dS_{bu}/dt = q_{in}/V_{liq} * (S_{bu,in} - S_{bu}) + (1 - Y_{su}) * f_{bu,su} * \rho_5 + (1 - Y_{aa}) * f_{bu,aa} * \rho_6 - \rho_9 \quad (3.2.2.4)$$

Μεταβολή προπιονικού οξέος:

$$dS_{pro}/dt = q_{in}/V_{liq} * (S_{pro,in} - S_{pro}) + (1 - Y_{su}) * f_{pro,su} * \rho_5 + (1 - Y_{aa}) * f_{pro,aa} * \rho_6 + (1 - Y_{c4}) * 0.54 * \rho_8 - \rho_{10} \quad (3.2.2.5)$$

Μεταβολή οξικού οξέος:

$$dS_{ac}/dt = q_{in}/V_{liq} * (S_{ac,in} - S_{ac}) + (1 - Y_{su}) * f_{ac,su} * \rho_5 + (1 - Y_{aa}) * f_{ac,aa} * \rho_6 + (1 - Y_{fa}) * 0.7 * \rho_7 + (1 - Y_{c4}) * 0.31 * \rho_8 + (1 - Y_{c4}) * 0.8 * \rho_9 + (1 - Y_{pro}) * 0.57 * \rho_{10} - \rho_{11} \quad (3.2.2.6)$$

Μεταβολή διαλυτού υδρογόνου:

$$dS_{h2}/dt = q_{in}/V_{liq} * (S_{h2,in} - S_{h2}) + (1 - Y_{su}) * f_{h2,su} * \rho_5 + (1 - Y_{aa}) * f_{h2,aa} * \rho_6 + (1 - Y_{fa}) * 0.3 * \rho_7 + (1 - Y_{c4}) * 0.15 * \rho_8 + (1 - Y_{c4}) * 0.2 * \rho_9 + (1 - Y_{pro}) * 0.43 * \rho_{10} - \rho_{12} - \rho_{\tau,8} \quad (3.2.2.7)$$

Μεταβολή διαλυτού μεθανίου:

$$dS_{ch4}/dt = q_{in}/V_{liq} * (S_{ch4,in} - S_{ch4}) + (1 - Y_{ac}) * \rho_{11} + (1 - Y_{h2}) * \rho_{12} - \rho_{\tau,9} \quad (3.2.2.8)$$

Μεταβολή ανόργανου άνθρακα:

$$dS_{ic}/dt = q_{in}/V_{liq} * (S_{ic,in} - S_{ic}) + \sum_{j=1}^{19} (\sum_{i=1-9,11-24}^C i \cdot V_{i,j} \cdot \rho_j) - \rho_{\tau,10} \quad (3.2.2.9)$$

Μεταβολή ανόργανου αζώτου:

$$dS_{iN}/dt = q_{in}/V_{liq} * (S_{iN,in} - S_{iN}) + Y_{su} * N_{bac} * \rho_5 + (N_{aa} - Y_{aa} * N_{bac}) * \rho_6 - Y_{fa} * N_{bac} * \rho_7 - Y_{c4} * N_{bac} * \rho_8 - Y_{c4} * N_{bac} * \rho_9 - Y_{pro} * N_{bac} * \rho_{10} - Y_{ac} * N_{bac} * \rho_{11} - Y_{h2} * N_{bac} * \rho_{12} + (N_{bac} - N_{xc}) * \sum_{i=13}^{19} \rho_i + (N_{xc} - f_{si,xc} * N_i - f_{pr,xc} * N_i - f_{pr,xc} * N_{aa}) * \rho_1 \quad (3.2.2.10)$$

Μεταβολή διαλυτών αδρανών:

$$dS_i/dt = q_{in}/V_{liq} * (S_{i,in} - S_i) + f_{si,xc} * \rho_1 \quad (3.2.2.11)$$

Όπου ο υπολογισμός του ανόργανου άνθρακα σε κάθε μεταβλητή γίνεται ως εξής:

$$\sum_{j=1}^{19} (\sum_{i=1-19,11-24}^C C_i \cdot V_{i,j} \cdot \rho_j) = \sum_{k=1}^{12} S_k \cdot \rho_k + s_{13} (\rho_{13} + \rho_{14} + \rho_{15} + \rho_{16} + \rho_{17} + \rho_{18} + \rho_{19}) \quad (3.2.2.12)$$

$$s_1 = -C_{xc} + f_{si,xc} * C_{si} + f_{ch,xc} * C_{pr} + f_{li,xc} * C_{li} + f_{xi,xc} * C_{xi} \quad (3.2.2.13)$$

$$s_2 = -C_{ch} + C_{su} \quad (3.2.2.14)$$

$$s_3 = -C_{pr} + C_{aa} \quad (3.2.2.15)$$

$$S_4 = -C_{li} + (1 - f_{fa,li}) * C_{su} + f_{fa,li} * C_{fa} \quad (3.2.2.16)$$

$$S_5 = -C_{su} + (1 - Y_{su}) * (f_{bu,su} * C_{bu} + f_{pro,su} * C_{pro} + f_{ac,su} * C_{ac}) + Y_{su} * C_{bac} \quad (3.2.2.17)$$

$$S_6 = -C_{aa} + (1 - Y_{aa}) * (f_{va,aa} * C_{va} + f_{bu,aa} * C_{bu} + f_{pro,aa} * C_{pro} + f_{ac,aa} * C_{ac}) + Y_{aa} * C_{bac} \quad (3.2.2.18)$$

$$S_7 = -C_{fa} + (1 - Y_{fa}) * 0.7 * C_{ac} + Y_{fa} * C_{bac} \quad (3.2.2.19)$$

$$S_8 = -C_{va} + (1 - Y_{c4}) * 0.54 * C_{pro} + (1 - Y_{c4}) * 0.31 * C_{ac} + Y_{c4} * C_{bac} \quad (3.2.2.20)$$

$$S_9 = -C_{bu} + (1 - Y_{c4}) * 0.8 * C_{ac} + Y_{c4} * C_{bac} \quad (3.2.2.21)$$

$$S_{10} = -C_{pro} + (1 - Y_{pro}) * 0.57 * C_{ac} + Y_{pro} * C_{bac} \quad (3.2.2.22)$$

$$S_{11} = -C_{ac} + (1 - Y_{ac}) * C_{ch4} + Y_{ac} * C_{bac} \quad (3.2.2.23)$$

$$S_{12} = (1 - Y_{h2}) * C_{ch4} + Y_{h2} * C_{bac} \quad (3.2.2.24)$$

$$S_{13} = -C_{bac} + C_{xc} \quad (3.2.2.25)$$

### 3.2.2.6. Διαφορικές εξισώσεις σωματιδιακού κλάσματος

Μεταβολή σωματιδιακών κλασμάτων:

$$\frac{dX_c}{dt} = q_{in}/V_{liq} * (X_{c,in} - X_c) - \rho_1 + \sum_{i=13}^{19} \rho_i \quad (3.2.2.26)$$

Μεταβολή υδρογονανθράκων:

$$\frac{dX_{ch}}{dt} = q_{in}/V_{liq} * (X_{ch,in} - X_{ch}) - f_{ch,xc} * \rho_1 - \rho_2 \quad (3.2.2.27)$$

Μεταβολή πρωτεϊνών:

$$\frac{dX_{pr}}{dt} = q_{in}/V_{liq} * (X_{pr,in} - X_{pr}) - f_{pr,xc} * \rho_1 - \rho_3 \quad (3.2.2.28)$$

Μεταβολή λιπιδίων:

$$\frac{dX_{li}}{dt} = q_{in}/V_{liq} * (X_{li,in} - X_{li}) - f_{li,xc} * \rho_1 - \rho_4 \quad (3.2.2.29)$$

Μεταβολή καταναλωτών σακχάρων:

$$\frac{dX_{su}}{dt} = q_{in}/V_{liq} * (X_{su,in} - X_{su}) + Y_{su} * \rho_5 - \rho_{13} \quad (3.2.2.30)$$

Μεταβολή καταναλωτών αμινοξέων:

$$\frac{dX_{aa}}{dt} = q_{in}/V_{liq} * (X_{aa,in} - X_{aa}) + Y_{aa} * \rho_6 - \rho_{14} \quad (3.2.2.31)$$

Μεταβολή καταναλωτών λιπαρών οξέων:

$$\frac{dX_{fa}}{dt} = q_{in}/V_{liq} * (X_{fa,in} - X_{fa}) + Y_{fa} * \rho_7 - \rho_{15} \quad (3.2.2.32)$$

Μεταβολή καταναλωτών μεθανίου:

$$\frac{dX_{c4}}{dt} = q_{in}/V_{liq} * (X_{c4,in} - X_{c4}) + Y_{c4} * \rho_8 + Y_{c4} * \rho_9 - \rho_{16} \quad (3.2.2.33)$$

Μεταβολή καταναλωτών προπιονικού οξέος:

$$dX_{pro}/dt = q_{in}/V_{liq} * (X_{pro,in} - X_{pro}) + Y_{pro} * \rho_{10} - \rho_{17} \quad (3.2.2.34)$$

Μεταβολή καταναλωτών οξικού οξέος:

$$dX_{ac}/dt = q_{in}/V_{liq} * (X_{ac,in} - X_{ac}) + Y_{ac} * \rho_{11} - \rho_{18} \quad (3.2.2.35)$$

Μεταβολή καταναλωτών διαλυτού υδρογόνου:

$$dX_{h2}/dt = q_{in}/V_{liq} * (X_{h2,in} - X_{h2}) + Y_{h2} * \rho_{12} - \rho_{19} \quad (3.2.2.36)$$

Μεταβολή σωματιδιακού αδρανούς:

$$dX_i/dt = q_{in}/V_{liq} * (X_{i,in} - X_i) + f_{xi,xc} * \rho_1 \quad (3.2.2.37)$$

### 3.2.2.7. Διαφορικές εξισώσεις ανιόντων και κατιόντων

Μεταβολή κατιόντων:

$$dS_{cat+}/dt = q_{in}/V_{liq} * (S_{cat+,in} - S_{cat+}) \quad (3.2.2.38)$$

Μεταβολή ανιόντων:

$$dS_{an-}/dt = q_{in}/V_{liq} * (S_{an-,in} - S_{an-}) \quad (3.2.2.39)$$

### 3.2.2.8. Διαφορικές εξισώσεις διαφόρων ιόντων

Μεταβολή ανιόντων βαλρικού οξέος:

$$dS_{va-}/dt = -\rho_{A,4} \quad (3.2.2.40)$$

Μεταβολή ανιόντων βουτυρικού οξέος:

$$dS_{bu-}/dt = -\rho_{A,5} \quad (3.2.2.41)$$

Μεταβολή ανιόντων προπιονικού οξέος:

$$dS_{pro-}/dt = -\rho_{A,6} \quad (3.2.2.42)$$

Μεταβολή ανιόντων οξικού οξέος:

$$dS_{ac-}/dt = -\rho_{A,7} \quad (3.2.2.43)$$

Μεταβολή ανιόντων ανθρακικού οξέος:

$$dS_{hco3-}/dt = -\rho_{A,10} \quad (3.2.2.44)$$

Μεταβολή ανιόντων αμμωνίας:

$$dS_{nh3-}/dt = -\rho_{A,11} \quad (3.2.2.45)$$

### 3.2.2.9. Υπολογισμός pH

Αλγεβρική μέθοδος για των υπολογισμό του pH:

Ισοζύγιο ιόντων:

$$\sum S_{c+} - \sum S_{a-} = 0 \quad (3.2.2.46)$$

$$S_{cat+} + S_{nh4+} + S_{h+} - S_{hco3-} - (S_{ac-}/64) - (S_{pro-}/112) - (S_{bu-}/160) - (S_{va-}/208) - S_{an-} - S_{oh-} = 0 \quad (3.2.2.47)$$

Συγκέντρωση ιόντος υδρογόνου:

$$S_{h+} = -\frac{\Theta}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{\Theta^2 + 4 \cdot KW} \quad (3.2.2.48)$$

$$\Theta = S_{cat+} + S_{nh4+} - S_{hco3-} - (S_{ac-}/64) - (S_{pro-}/112) - (S_{bu-}/160) - (S_{va-}/208) - S_{an-} \quad (3.2.2.49)$$

Συγκέντρωση αμμωνιακού αζώτου:

$$S_{nh4+} = S_{in} - S_{nh3} \quad (3.2.2.50)$$

Συγκέντρωση διαλυτού διοξειδίου του άνθρακα:

$$S_{co2} = S_{ic} - S_{hco3-} \quad (3.2.2.51)$$

Ο υπολογισμός του pH μπορεί να γίνει με διάφορες μεθόδους, όπως αυτή που προτάθηκε προηγουμένως από το εγχειρίδιο του ADM1. Για να αποφευχθεί την ύπαρξη πολλών διεπιφανειών αλγεβρικών και διαφορικών εξισώσεων προτείνεται και η παρακάτω μέθοδος υπολογισμού κατιόντος υδρογόνου:

$$\frac{dS_{h+}}{dt} = \frac{A}{B} \quad (3.2.2.52)$$

$$A = \frac{dS_{an-}}{dt} + \frac{K_{a,in}}{K_{a,in} + S_{h+}} + \frac{K_{a,co2}}{K_{a,co2} + S_{h+}} \cdot \frac{dS_{ic}}{dt} + \frac{1}{64} \cdot \frac{K_{a,ac}}{K_{a,ac} + S_{h+}} \cdot \frac{dS_{ac}}{dt} + \frac{1}{112} \cdot \frac{K_{a,pro}}{K_{a,pro} + S_{h+}} \cdot \frac{dS_{pro}}{dt} + \frac{1}{160} \cdot \frac{K_{a,bu}}{K_{a,bu} + S_{h+}} \cdot \frac{dS_{bu}}{dt} + \frac{1}{208} \cdot \frac{K_{a,va}}{K_{a,va} + S_{h+}} \cdot \frac{dS_{va}}{dt} - \frac{dS_{in}}{dt} - \frac{dS_{cat+}}{dt} \quad (3.2.2.53)$$

$$B = 1 + \frac{K_{a,in} \cdot S_{in}}{(K_{a,in} + S_{h+})^2} + \frac{K_{a,co2} \cdot S_{ic}}{(K_{a,co2} + S_{h+})^2} + \left(\frac{1}{64}\right) \cdot \frac{K_{a,ac} \cdot S_{ac}}{(K_{a,ac} + S_{h+})^2} + \left(\frac{1}{112}\right) \cdot \frac{K_{a,pro} \cdot S_{pro}}{(K_{a,pro} + S_{h+})^2} + \left(\frac{1}{160}\right) \cdot \frac{K_{a,bu} \cdot S_{bu}}{(K_{a,bu} + S_{h+})^2} + \left(\frac{1}{208}\right) \cdot \frac{K_{a,va} \cdot S_{va}}{(K_{a,va} + S_{h+})^2} + \frac{KW}{(S_{h+})^2} \quad (3.2.2.54)$$

### 3.2.2.10. Διαφορικές εξισώσεις στην αέρια φάση

Για την περιγραφή της αέριας φάσης εφαρμόζεται επίσης το ισοζύγιο μάζας για το υδρογόνο, το μεθάνιο και το CO<sub>2</sub>, κατά αντιστοιχία με την υγρή φάση, όπως δίνεται ακολούθως:

$$\frac{dS_{gas,i}}{dt} = -\frac{S_{gas,i} \cdot q_{gas}}{V_{gas}} + \rho_{\tau,i} \cdot \frac{V_{liq}}{V_{gas}} \quad (3.2.2.55)$$

Διαφορικές εξισώσεις:

Μεταβολή αέριου υδρογόνου:

$$dS_{gas,h2}/dt = -(S_{gas,h2} \cdot q_{gas}/V_{gas}) + \rho_{\tau,8} \cdot V_{liq}/V_{gas} \quad (3.2.2.56)$$

Μεταβολή αέριου μεθανίου:

$$dS_{gas,ch4}/dt = -(S_{gas,ch4} \cdot q_{gas}/V_{gas}) + \rho_{\tau,9} \cdot V_{liq}/V_{gas} \quad (3.2.2.57)$$

Μεταβολή αέριου διοξειδίου του άνθρακα:

$$dS_{gas,co2}/dt = -(S_{gas,co2} \cdot q_{gas}/V_{gas}) + \rho_{\tau,10} \cdot V_{liq}/V_{gas} \quad (3.2.2.58)$$

Αλγεβρικές εξισώσεις:

$$P_{gas,h2o} = 0.0313 \cdot \exp(5290 \cdot (1/298 - 1/T)) \quad (3.2.2.59)$$

$$P_{gas,h2} = S_{gas,h2} \cdot R \cdot T_{op}/16 \quad (3.2.2.60)$$

$$P_{gas,ch4} = S_{gas,ch4} \cdot R \cdot T_{op}/64 \quad (3.2.2.61)$$

$$P_{gas,co2} = S_{gas,co2} \cdot R \cdot T_{op} \quad (3.2.2.62)$$

$$q_{gas} = (R \cdot T_{op} / (P_{atm} - P_{gas,h2o})) \cdot V_{liq} \cdot ((\rho_{\tau,8}/16) + (\rho_{\tau,9}/64) + \rho_{\tau,10}) \quad (3.2.2.63)$$

Έχει αναφερθεί ότι ο παραπάνω τρόπος εύρεσης του  $q_{gas}$  έχει παρουσιάσει διάφορα αριθμητικά προβλήματα. Πολλοί χρήστες ανέφεραν ειδικά σε συνθήκες steady state να παρουσιάζονται αρκετές αριθμητικές ανωμαλίες για το λόγο αυτό δίνεται κι ένας εναλλακτικός τρόπος υπολογισμού του  $q_{gas}$  από τον Bastone et al. 2002 ( Alex in Benchmark Simulation Model 2 BSM2)

$$q_{gas} = k_p \cdot (P_{gas} - P_{atm}) \quad (3.2.2.64)$$

$$\text{Όπου: } P_{gas} = P_{gas,h2} + P_{gas,ch4} + P_{gas,co2} + P_{gas,h2o} \quad (3.2.2.65)$$

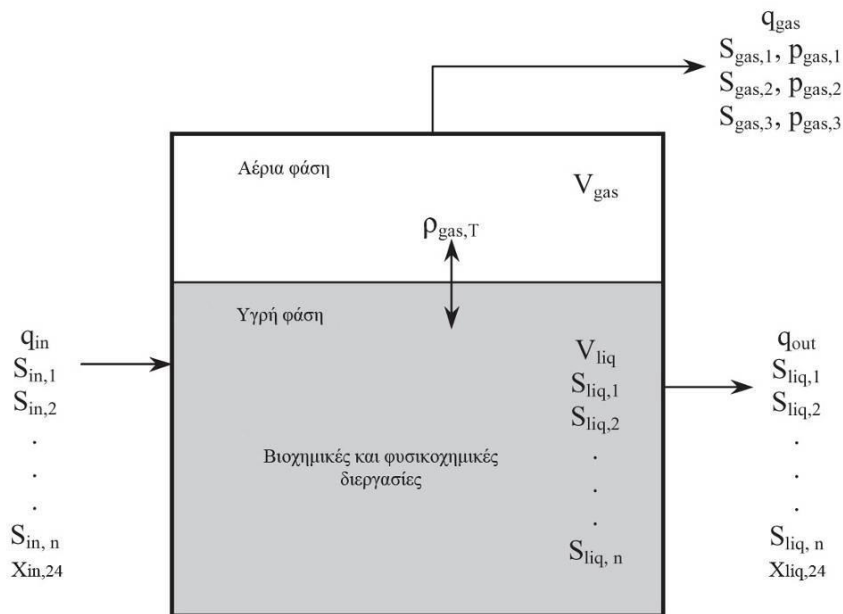
Ο υπολογισμός της παροχής με τον παραπάνω τύπο μπορεί πολλές φορές να προκαλέσει αριθμητικά προβλήματα στην προσομοίωση. Για τον λόγο αυτό χρησιμοποιείται πολλές φορές και ο παρακάτω τύπος για τον καθορισμό της ροής στην ατμοσφαιρική πίεση:

$$q_{gas} = k_p \cdot (P_{gas} - P_{atm}) \cdot P_{gas}/P_{atm} \quad (3.2.2.66)$$

Αν και αυτός ο παράγοντας αντιστάθμισης περιλαμβάνεται, οι δύο εκφράσεις δεν θα αποδώσουν τα ίδια αποτελέσματα. Ανάλογα με τη λειτουργική υπερπίεση, η οποία είναι συνάρτηση της τιμής της παραμέτρου  $k_r$  (που σχετίζεται με την τριβή στην έξοδο αερίου), τα αποτελέσματα διαφοροποιούνται σε ένα ελαφρώς μικρότερο ρυθμό ροής. Αυτό οφείλεται στην διαφορά των ρυθμών μεταφοράς υγρού-αερίου. Μία σύγκριση των δύο εκφράσεων όταν εφαρμόζεται η ίδια υπερπίεση δείχνει πολύ παρόμοια αποτελέσματα (Το σχετικό σφάλμα στην περιοχή είναι  $1e-5$ ).



### 3.3. Ισοζύγιο μάζας



Εικόνα 3.1: Παρουσίαση ισοζυγίων στον χωνευτή (Batstone 2002)

Η διατήρηση των ισοζυγίων μάζας σε όλα τα συστατικά του μοντέλου (COD, N, κ.λπ.) αποτελεί θεμελιώδη στόχο του κάθε μοντέλου. Το ASM1 εξασφαλίζει μόνο ισοζύγια μάζας με βάση το COD (καθώς δεν περιλαμβάνονται όλα τα συστατικά του αζώτου), το ASM2 διατηρεί τα ισοζύγια των COD, N, P και του φορτίου, ενώ το ASM3 προσθέτει το θεωρητικώς απαιτούμενο οξυγόνο, ως συντηρητική μεταβλητή. Το ADM1 περιλαμβάνει μια διαδικασία που αναφέρεται ως αποσύνθεση, όταν ένα σύνθετο υλικό (XC) μετασχηματίζεται σε διάφορες ενώσεις (SI, X<sub>ch</sub>, X<sub>pr</sub>, X<sub>li</sub> και XI). Στην περίπτωση κατά την οποία μία μονάδα μάζας COD των XC έχει εντελώς αποσυντεθεί, παράγει:

$$f_{sl,xc} \cdot S_I + f_{xl,xc} \cdot X_I + f_{ch,xc} \cdot X_{ch} + f_{pr,xc} \cdot X_{pr} + f_{li,xc} \cdot X_{li} = 0,1 \cdot S_I + 0,25 \cdot X_I + 0,2 \cdot X_{ch} + 0,2 \cdot X_{pr} + 0,25 \cdot X_{li} \quad (3.3.1)$$

Ισορροπία COD υπάρχει όσο το άθροισμα όλων των  $f_{i,xc}=1$ , ωστόσο, η προτεινόμενη περιεκτικότητα σε άζωτο XC ( $N_{xc}$ ) είναι 0.002 kmole N / kg COD. Αν αντ' αυτού υπολογιστεί η περιεκτικότητα σε άζωτο των προϊόντων αποσύνθεσης (kmole N), με τη χρήση τιμών παραμέτρων που έχουν δοθεί από τους Batstone et al. (Batstone et al., 2002), προκύπτει:

$$N_I \cdot 0,1 \cdot S_I + N_I \cdot 0,25 \cdot X_I + N_{ch} \cdot 0,2 \cdot X_{ch} + N_{aa} \cdot 0,2 \cdot X_{pr} + N_{li} \cdot 0,25 \cdot X_{li} = 0,0002 + 0,0005 + 0,0014 = 0,0021 \quad (3.3.2)$$

Θα πρέπει να σημειωθεί ότι οι υδατάνθρακες και τα λιπίδια δεν περιέχουν άζωτο. Αυτό σημαίνει ότι ανά kg COD που αποσυντίθεται, δημιουργείται 0.1 mole N (5% περισσότερο από το αρχικό).

Καθώς τα περιεχόμενα αζώτου και τα ποσοστά των σύνθετων υλικών είναι εξαιρετικά ευμετάβλητα, απαιτείται προσαρμογή ανά περίπτωση, ωστόσο οι τυπικές τιμές των παραμέτρων θα οδηγούν πάντοτε σε κλείσιμο των ισοζυγίων μάζας. Στην εργασία αυτή προτείνονται τιμές για  $f_{si,xc}=0.05$ ,  $f_{xi,xc}=0.05$ ,  $f_{ch,xc}=0.3$ ,  $f_{pr,xc}=0.3$ ,  $f_{li,xc}=0.3$ . Το ADM1 περιέχει τις μεταβλητές ανόργανου άνθρακα και ανόργανου αζώτου. Αν και αυτές οι μεταβλητές μπορούν να οδηγήσουν σε κλείσιμο των ισοζυγίων μάζας, το παρεχόμενο στοιχειομετρικό μητρώο δεν έχει οριστεί να τις λαμβάνει υπόψη. Για παράδειγμα η αποσύνθεση της βιομάζας παράγει μια ίση ποσότητα σύνθετων υλικών με βάση το COD, αν και η περιεκτικότητα σε άνθρακα στη βιομάζα μπορεί να διαφέρει από την αντίστοιχη στα περιεχόμενα της αποσύνθεσης. Επιπλέον στο περίσσειμα του αζώτου μέσα στη βιομάζα η περιεκτικότητα των βακτηρίων σε άζωτο ( $N_{bac}$ ) είναι 0,00625 kmole N / kg COD (Batstone et al., 2002), επομένως τρεις φορές υψηλότερη από την προτεινόμενη τιμή για  $N_{xc}$ . Σε μια τέτοια περίπτωση μπορεί να προστεθεί ένας στοιχειομετρικός όρος ( $N_{bac}$ ,  $N_{xc}$ ) στο μητρώο που θα αφορά στο περίσσειμα του αζώτου, ενώ η ίδια αρχή ισχύει και για τον άνθρακα κατά την αποσύνθεση της βιομάζας, δηλαδή ( $C_{bac}$ ,  $C_{xc}$ ). Μια παρόμοια τροποποίηση του στοιχειομετρικού μητρώου μπορεί να εφαρμοσθεί και για τον ανόργανο άνθρακα, τόσο για τις διεργασίες της κατανάλωσης LCFA, βαλτρικού και βουτυρικού οξέος, όσο και για τις διεργασίες αποσάθρωσης και υδρόλυσης του άνθρακα και του αζώτου.

Γενικότερα προτείνεται να προστεθούν στοιχειομετρικές σχέσεις για όλες τις διεργασίες (19 συνολικά) που αφορούν στον ανόργανο άνθρακα και το ανόργανο άζωτο (βλ. Batstone et al. 2002). Αν και σε πολλές περιπτώσεις τα αποτελέσματα θα είναι μηδενικά, ωστόσο θα υπάρξει εγγύηση ότι τα ισοζύγια μάζας κλείνουν και θα τηρούνται οι προϋποθέσεις αναφορικά με το COD, τον άνθρακα και το άζωτο. Επιπλέον, μια τέτοια προσέγγιση διευκολύνει ιδιαίτερα την εφαρμογή του μοντέλου επαλήθευσης (εύρεση σφαλμάτων κωδικοποίησης σε εφαρμογή).

Χρησιμοποιώντας τις προτεινόμενες τιμές περιεκτικότητας σε άνθρακα στην αρχική εφαρμογή ADM1 προκύπτει ότι η περιεκτικότητα σε άνθρακα του XC είναι ίση με 0,03 kmole C/kg COD. Ωστόσο, αν εξετάσουμε τα περιεχόμενα άνθρακα των προϊόντων που προκύπτουν από την αποσύνθεση του σύνθετου υλικού (με βάση τις νέες παραμέτρους κλασμάτωσης που ορίζονται παραπάνω) προκύπτουν τα εξής:

$$0,03* 0,1* S_I + 0,03* 0,2* X_I + 0,0313* 0,2* X_{CH} + 0,03* 0,2* X_{PR} + 0,022* 0,3* X_{LI} = 0,02786 \text{ kmoleC/kgCOD} \quad (3.3.4)$$

Αν χρησιμοποιείται η αρχική κλασματοποίηση του σύνθετου υλικού (π.χ.  $f_{xl,xc} = 0,25$  και  $f_{li,xc} = 0,25$ ) η περιεκτικότητα σε άνθρακα των διασπασμένων προϊόντων υπολογίζεται σε 0,02826 kmole C/kg COD. Και στις δύο περιπτώσεις είναι προφανές ότι ένα σημαντικό ποσοστό του άνθρακα (6-7%) "εξαφανίζεται", ως αποτέλεσμα της αποσύνθεσης. Εάν το μοντέλο ενημερώνεται με την προσθήκη των στοιχειομετρικών σχέσεων που εξασφαλίζουν εγγυημένα ισοζύγια μάζας του άνθρακα και του αζώτου, αυτός ο «εξαφανισμένος» άνθρακας θα καταλήξει ως ανόργανος και ενδεχομένως θα οδηγήσει στην παραγωγή διοξειδίου του άνθρακα στη φάση αερίου. Αντίθετα, αν το μοντέλο δεν ενημερωθεί, όπως αναφέρθηκε παραπάνω, τότε το 6-7% της περιεκτικότητας σε άνθρακα του σύνθετου υλικού απλώς θα αφαιρεθεί και το ισοζύγιο

μάζας του άνθρακα δεν θα διατηρηθεί. Καθώς αυτός ο επιπλέον άνθρακας τελικά καταλήγει ως διοξείδιο του άνθρακα στη φάση αερίου, το αρχικό μοντέλο ADM1 έχει την τάση να παράγει σχετικά υψηλό ποσοστό CO<sub>2</sub> (32-35%) και σχετικά χαμηλό ποσοστό CH<sub>4</sub> (55-58%) στο παραγόμενο αέριο, χρησιμοποιώντας μια λογική εισροή ιλύος. Ωστόσο η μάζα του παραγόμενου CH<sub>4</sub> εξακολουθεί να είναι η αναμενόμενη, καθώς αυτή η ανισορροπία άνθρακα οδηγεί σε υψηλότερο ρυθμό ροής αερίου. Για να αποφευχθεί αυτό το πρόβλημα προτείνεται να χρησιμοποιηθεί μια τιμή 0,02786 kmole C/kg COD για να περιγράψει την περιεκτικότητα σε άνθρακα του σύνθετου υλικού στην εφαρμογή του benchmark. Για τις λογικές εισροές ιλύος, αυτή η τροποποίηση κανονικά θα οδηγήσει σε παραγωγή μεθανίου 60-65% στην αέρια φάση (Rosén & Jeppsson, 2006).

### 3.4. Μοντέλο διαχωρισμού συστήματος AnMBR

Όπως έχει ήδη προαναφερθεί ειδοποιός διαφορά ενός συστήματος AnMBR σε σχέση με άλλα μοντέλα αναερόβιας χώνευσης είναι ο διαχωρισμός του υδραυλικού χρόνου παραμονής HRT με τον χρόνο παραμονής στερεών. Η έξοδος του αντιδραστήρα είναι απαλλαγμένη από αιωρούμενα στερεά αφού κατακρατούνται από τις μεμβράνες.

Ως HRT ορίζεται ο λόγος του όγκου του αντιδραστήρα με την παροχή εισόδου-εξόδου:

$$HRT = \frac{V_{liq}}{Q_{in}} \quad (3.4.1)$$

Στο μοντέλο AnMBR πρέπει επίσης να προσδιοριστεί η μάζα της λάσπης η οποία αφαιρείται. Ως μάζα λάσπης θεωρούμε ότι είναι :  $V \cdot X$

Επίσης στη δική μας περίπτωση έχουμε  $SRT=50d$  πράγμα που σημαίνει ότι κάθε μέρα πρέπει να αφαιρούμε στο μοντέλο το  $1/50$  της λάσπης διότι δηλώνουμε ότι αφαιρούμε το  $1/SRT$  της λάσπης.

Στο συγκεκριμένο μοντέλο και προκειμένου να φτάσουμε σε τιμές σύγκλισης (Steady state) δεν τρέχουμε των κώδικα με σταθερό βήμα και προκειμένου να μην επέμβουμε σε πολλές μεταβλητές του κώδικα ορίσαμε τη λάσπη που αφαιρείται ως εξής.

$$-V \cdot \frac{X}{SRT} = -Q' \cdot X = -q \cdot 0.04 \cdot X \quad (3.4.2)$$

$$\text{Η τιμή } 0.04 \text{ προκύπτει ως εξής: } Q' = V/SRT = 0.04/50 = 0.08 \quad (3.4.3)$$

$$\text{Όμως } q = 0.02 \text{ άρα : } -Q' \cdot X = -0.08 \cdot X = -q \cdot 0.04 \cdot X / q = -q \cdot 0.04 \cdot X \quad (3.4.4)$$

Τελικά οι εξισώσεις που αφορούν την ολοκλήρωση των σωματιδιακών στοιχείων (3.2.2.26 έως 3.2.2.27) καταλήγουν στην εξής μορφή:

Μεταβολή σωματιδιακών κλασμάτων:

$$\frac{dX_c}{dt} = q_{in}/V_{liq} * (X_{c,in} - 0.04 * X_c) - \rho_1 + \sum_{i=13}^{19} \rho_i \quad (3.2.2.67)$$

Μεταβολή υδρογονανθράκων:

$$\frac{dX_{ch}}{dt} = q_{in}/V_{liq} * (X_{ch,in} - 0.04 * X_{ch}) - f_{ch,xc} * \rho_1 - \rho_2 \quad (3.2.2.68)$$

Μεταβολή πρωτεϊνών:

$$\frac{dX_{pr}}{dt} = q_{in}/V_{liq} * (X_{pr,in} - 0.04 * X_{pr}) - f_{pr,xc} * \rho_1 - \rho_3 \quad (3.2.2.69)$$

Μεταβολή λιπιδίων:

$$\frac{dX_{li}}{dt} = q_{in}/V_{liq} * (X_{li,in} - 0.04 * X_{li}) - f_{li,xc} * \rho_1 - \rho_4 \quad (3.2.2.70)$$

Μεταβολή καταναλωτών σακχάρων:

$$dX_{su}/dt = q_{in}/V_{liq} * (X_{su,in} - 0.04 * X_{su}) + Y_{su} * \rho_5 - \rho_{13} \quad (3.2.2.71)$$

Μεταβολή καταναλωτών αμινοξέων:

$$dX_{aa}/dt = q_{in}/V_{liq} * (X_{aa,in} - 0.04 * X_{aa}) + Y_{aa} * \rho_6 - \rho_{14} \quad (3.2.2.72)$$

Μεταβολή καταναλωτών λιπαρών οξέων:

$$dX_{fa}/dt = q_{in}/V_{liq} * (X_{fa,in} - 0.04 * X_{fa}) + Y_{fa} * \rho_7 - \rho_{15} \quad (3.2.2.73)$$

Μεταβολή καταναλωτών μεθανίου:

$$dX_{c4}/dt = q_{in}/V_{liq} * (X_{c4,in} - 0.04 * X_{c4}) + Y_{c4} * \rho_8 + Y_{c4} * \rho_9 - \rho_{16} \quad (3.2.2.74)$$

Μεταβολή καταναλωτών προπιονικού οξέος:

$$dX_{pro}/dt = q_{in}/V_{liq} * (X_{pro,in} - 0.04 * X_{pro}) + Y_{pro} * \rho_{10} - \rho_{17} \quad (3.2.2.75)$$

Μεταβολή καταναλωτών οξικού οξέος:

$$dX_{ac}/dt = q_{in}/V_{liq} * (X_{ac,in} - 0.04 * X_{ac}) + Y_{ac} * \rho_{11} - \rho_{18} \quad (3.2.2.76)$$

Μεταβολή καταναλωτών διαλυτού υδρογόνου:

$$dX_{h2}/dt = q_{in}/V_{liq} * (X_{h2,in} - 0.04 * X_{h2}) + Y_{h2} * \rho_{12} - \rho_{19} \quad (3.2.2.77)$$

Μεταβολή σωματιδιακού αδρανούς:

$$dX_i/dt = q_{in}/V_{liq} * (X_{i,in} - 0.04 * X_i) + f_{xi,xc} * \rho_1 \quad (3.2.2.78)$$

Η τιμή 0.04 προκύπτει από την σχέση  $V/Q/SRT = HRT/SRT$

Όστε να συνεχίζονται οι διεργασίες με την ίδια παροχή  $q$  και να μην απορυθμίζεται το μοντέλο.

Στην έξοδο του AnMBR, τα σωματιδιακά στοιχεία είναι μηδενικά αφού αυτά κατακρατώνται από τις μεμβράνες και συσσωρεύονται. Για αυτό το λόγο, εφαρμόστηκε μια τεχνική λύση όπου ορίζουμε τον μηδενισμό των σωματιδιακών στον κώδικα του interface ADM/ASM.

### 3.5. Μετατροπή ASM1 σε ADM1 και αντίστροφα

Ο βασικός και αναγκαίος λόγος χρήσης των interface αποτελεί το γεγονός ότι τα μοντέλα ASM και ADM χρησιμοποιούν διαφορετικές μεταβλητές. Οι μεταβλητές του ASM χρησιμοποιούνται περισσότερο στην διεθνή βιβλιογραφία όμως ο κώδικας χρησιμοποιεί τις μεταβλητές σε όρους ADM

Γίνεται λοιπόν κατανοητό ότι τα interface έχουν σκοπό την μετατροπή των μεταβλητών της οργανικής ύλης, οι οποίες αρχικά αποτυπώνονται σε όρους του ASM1, σε όρους ADM1 υπό τους οποίους λειτουργεί ο προσομοιούμενος αναερόβιος αντιδραστήρας του κώδικα που χρησιμοποιήσαμε. Η αντίστροφη διαδικασία πραγματοποιείται ADM/ASM χρησιμοποιώντας interface για τις μεταβλητές εξόδου.

Παρουσιάζουμε παρακάτω 2 πίνακες των μεταβλητών σε όρους ASM, ADM :

Πίνακας 3.1 Παράμετροι σε όρους ASM1

ΠΑΡΑΜΕΤΡΟΙ ΚΑΙ ΜΟΝΑΔΕΣ ΣΤΟ ASM	
Si	Διαλυτό αδρανές (gCODm <sup>-3</sup> )
Ss	Διαλυτό εύκολα βιοδιασπάσιμο (gCOD m <sup>-3</sup> )
Xi	Σωματιδιακό αδρανές (gCODm <sup>-3</sup> )
Xs	Σωματιδιακό αργά βιοδιασπάσιμο (gCODm <sup>-3</sup> )
Xbh	Ενεργή ετεροτροφική βιομάζα (gCODm <sup>-3</sup> )
Xba	Ενεργή αυτοτροφική βιομάζα (gCODm <sup>-3</sup> )
Xp	Σωματιδιακά προϊόντα από φθορά βιομάζας (gCODm <sup>-3</sup> )
So	Οξυγόνο (gCODm <sup>-3</sup> )
Sno	Νιτρώδη και νιτρικά (gNm <sup>-3</sup> )
Snh	Αμμωνιακό άζωτο (gNm <sup>-3</sup> )
Snd	Διαλυτό Βιοδιασπάσιμο οργανικό άζωτο (gNm <sup>-3</sup> )
Xnd	Σωματιδιακό βιοδιασπάσιμο οργανικό άζωτο (gNm <sup>-3</sup> )
Salk	Αλκαλικότητα (mol L <sup>-1</sup> )

Πίνακας 3.2 Παράμετροι σε όρους ADM1

ΠΑΡΑΜΕΤΡΟΙ ΚΑΙ ΜΟΝΑΔΕΣ ΣΤΟ ADM	
Si	Διαλυτά αδρανή (kgCODm <sup>-3</sup> )
Ssu	Μονοσακχαρίτες (kgCODm <sup>-3</sup> )
Saa	Αμινοξέα (kgCODm <sup>-3</sup> )
Sfa	Λιπαρά οξέα μακράς αλυσίδας (LCFA) (kgCODm <sup>-3</sup> )
Sva	Βαλερικό οξύ (kgCODm <sup>-3</sup> )
Sbu	Βουτυρικό οξύ (kgCODm <sup>-3</sup> )
Spro	Προπιονικό οξύ (kgCODm <sup>-3</sup> )
Sac	Οξικό οξύ (kgCODm <sup>-3</sup> )
Sh2	Αέριο υδρογόνο (kgCODm <sup>-3</sup> )
Sch4	Αέριο μεθάνιο
Xi	Σωματιδιακά αδρανή (kgCODm <sup>-3</sup> )
Xc	Σύνθετα υλικά (kgCODm <sup>-3</sup> )
Xch	Υδατάνθρακες (kgCODm <sup>-3</sup> )
Xpr	Πρωτεΐνες (kgCODm <sup>-3</sup> )
Xli	Λιπίδια (kgCODm <sup>-3</sup> )
Xsu	Αποικοδομητές σακχάρων (kgCODm <sup>-3</sup> )
Xaa	Αποικοδομητές αμινοξέων (kgCODm <sup>-3</sup> )
Xfa	Αποικοδομητές LCFA (kgCODm <sup>-3</sup> )
Xc4	Αποικοδομητές Βαλιρικού και βουτυρικού οξέος (kgCODm <sup>-3</sup> )
Xpro	Αποικοδομητές προπιονικού οξέος (kgCODm <sup>-3</sup> )
Xac	Αποικοδομητές οξικού οξέος (kgCODm <sup>-3</sup> )
Xh2	Αποικοδομητές υδρογόνου (kgCODm <sup>-3</sup> )
Sn	Ανόργανο άζωτο (KmolNm <sup>-3</sup> )
Sic	Ανόργανος άνθρακας (KmolCm <sup>-3</sup> )
San	Ανιόντα (Kmolm <sup>-3</sup> )
Scat	Κατιόντα (Kmolm <sup>-3</sup> )

ASM:

$$\text{CODs} = \text{Si} + \text{Ss} \quad (3.5.1)$$

$$\text{CODp} = \text{Xi} + \text{Xs} + \text{Xbh} + \text{Xba} + \text{Xp} \quad (3.5.2)$$

$$\text{CODt} = \text{CODs} + \text{CODp} \quad (3.5.3)$$

$$\text{TKN} = \text{Snh} + \text{Snd} + \text{Xnd} + \text{ixb} * (\text{Xbh} + \text{Xba}) + \text{ixe} * (\text{Xi} + \text{Xp}) \quad (3.5.4)$$

Όπου:

CODs = Διαλυτό COD

CODp = Σωματιδιακό COD

CODt = Ολικό COD

TKN = Ολικό Kjeldahl άζωτο

ADM:

$$\text{CODs} = \text{Si} + \text{Ssu} + \text{Saa} + \text{Sfa} + \text{Sva} + \text{Sbu} + \text{Spro} + \text{Sac} + \text{Sh2} + \text{Sch4} \quad (3.5.5)$$

$$\text{CODp} = \text{Xi} + \text{Xsu} + \text{Xaa} + \text{Xfa} + \text{Xc4} + \text{Xpro} + \text{Xac} + \text{Xh2} + \text{Xc} + \text{Xch} + \text{Xpr} + \text{Xli} \quad (3.5.6)$$

$$\text{CODt} = \text{CODs} + \text{CODp} \quad (3.5.7)$$

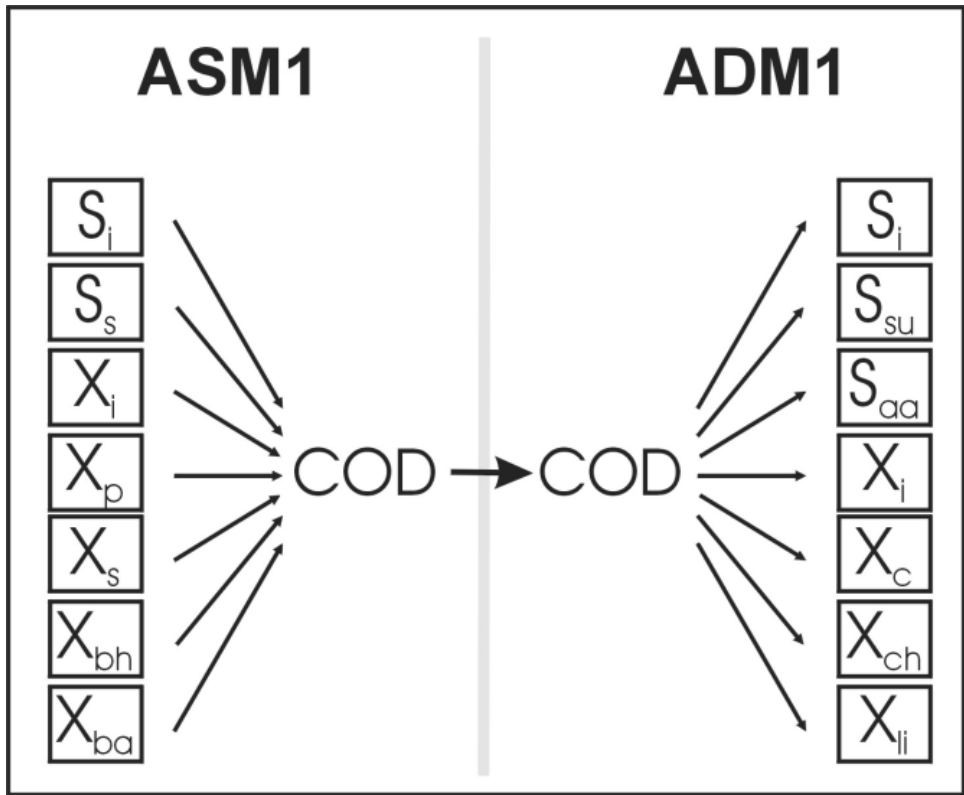
$$\text{TKNt} = \text{Sin} + \text{Nxc} * \text{Xc} + \text{Ni} * (\text{Si} + \text{Xi}) + \text{Naa} * (\text{Xpr} + \text{Saa}) + \text{Nbac} * (\text{Xsu} + \text{Xaa} + \text{Xfa} + \text{Xc4} + \text{Xpro} + \text{Xac} + \text{Xh2}) \quad (3.5.8)$$

Όπως είναι φανερό οι συγκεντρώσεις των παραμέτρων σε κάθε μοντέλο είναι διαφορετικές. Πρέπει επίσης να αναφερθεί ότι στις περιπτώσεις που ο υπολογισμός του COD είναι απλώς το άθροισμα από διάφορες μεταβλητές, το TKN υπολογίζεται από το άθροισμα των μεταβλητών που αφορούν στο άζωτο και την περιεκτικότητα αζώτου κάποιων οργανικών μεταβλητών. Για παράδειγμα στο ADM1 θεωρείται ότι η μεταβλητή Xc περιέχει οργανικό άζωτο. Η περιεκτικότητα του αζώτου προσδιορίζεται από τη σταθερά Nxc, δηλαδή η περιεκτικότητα του αζώτου υπολογίζεται από τον πολλαπλασιασμό της σταθεράς με την συγκέντρωση του Xc.

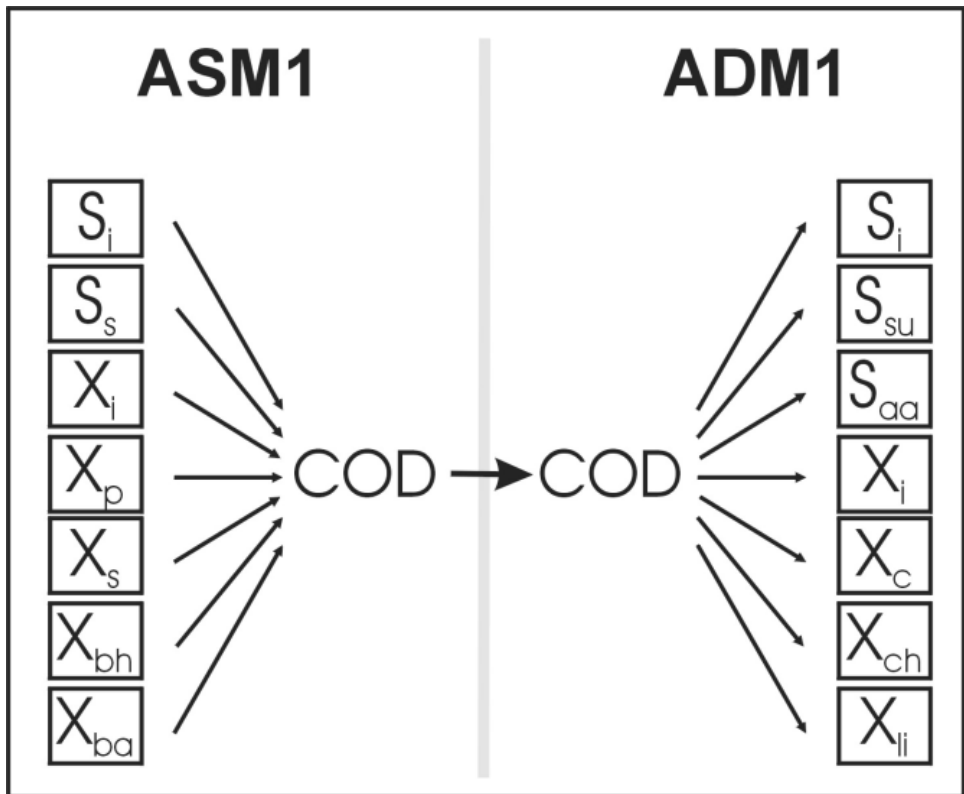
Ανάλογοι υπολογισμοί γίνονται και για άλλες μεταβλητές που περιέχουν οργανικό άζωτο. Η ανάγκη να μετρηθεί το άζωτο προκύπτει καθώς πρέπει να υπολογιστεί το TKN. Το TKN πρέπει να είναι ίδιο στις μεταβλητές του ASM1 και του ADM1, έτσι ώστε να διατηρείται το ισοζύγιο μάζας.

Παραθέτουμε 2 εικόνες με σχηματική απεικόνιση της εν λόγω διπλής μετατροπής μέσω των interfaces.

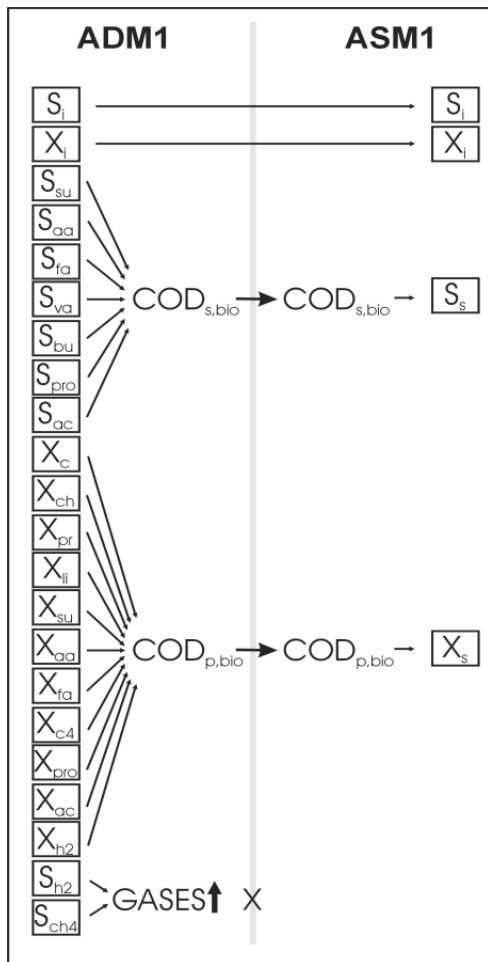




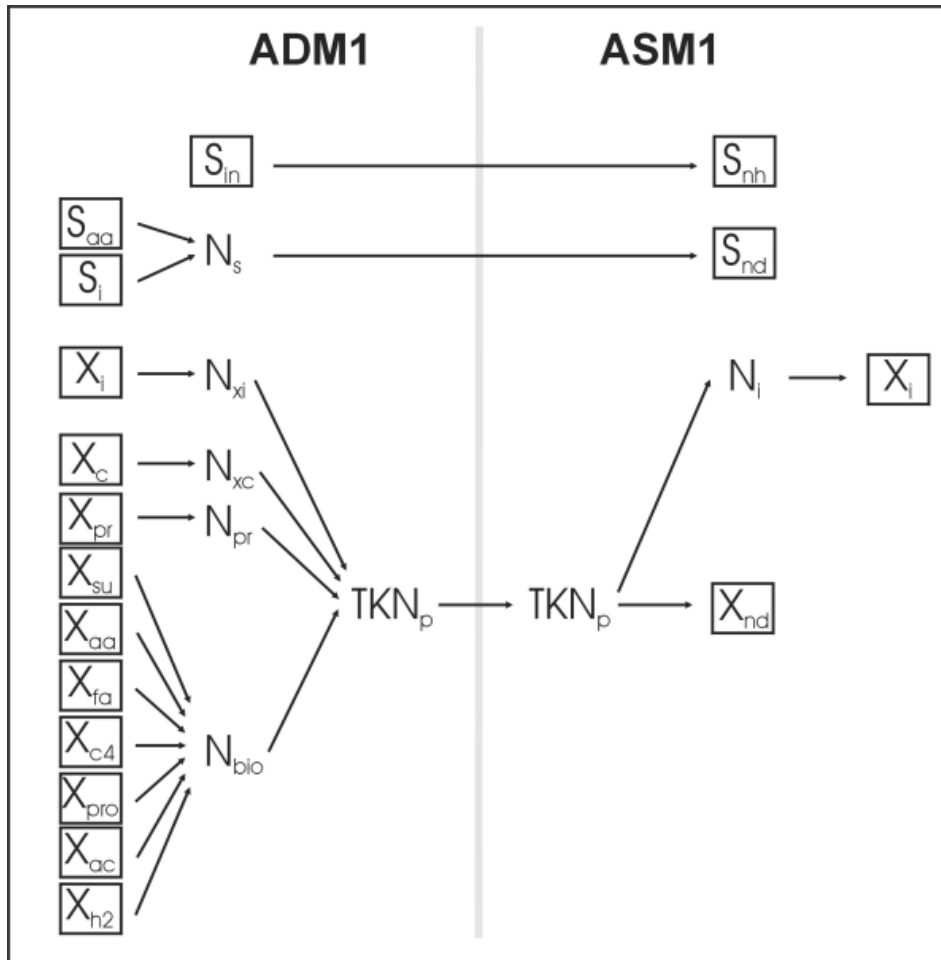
Εικόνα 3.2 : Μετατροπή ASM/ADM αντιστοίχιση μεταβλητών για COD (Corr et al., 2003)



Εικόνα 3.3: Μετατροπή ASM/ADM αντιστοίχιση μεταβλητών για TKN (Corr et al., 2003)



Εικόνα 3.4: Από ADM1 σε ASM1 αντιστοίχιση μεταβλητών για COD (Corp et al., 2003).



Εικόνα 3.5: Από ADM1 σε ASM1 αντιστοίχιση μεταβλητών για TKN (Corp et al., 2003).

Στον κώδικα που χρησιμοποιήσαμε (BSM2) τα 2 interfaces ορίζονται από έναν αριθμό κανόνων (Norpens et al., 2009). Σκοπός είναι η εξοικείωσή του χρήστη/προγραμματιστή. Οι παρακάτω εξισώσεις εξασφαλίζουν την ισορροπία του φορτίου καθώς επίσης το script των interfaces στη MATLAB παρατίθεται στο παράρτημα στο τέλος:

$$\alpha^{ch}_{ac} = \alpha^{ch}_{pro} = \alpha^{ch}_{bu} = \alpha^{ch}_{va} = \frac{-1/C_i}{(1+10^{pKa-pH_{ad}})} \quad (3.5.9)$$

$pKa=4.76, 4.88, 4.82, 4.86$  (Για  $T=25^\circ C$ ) και  $C_i=64, 112, 160, 208$  αντίστοιχα για της ως άνω τιμές.

$$\alpha^{ch}_{IN} = \frac{10^{pKa-pH_a}}{(1+10^{pKa-pH_{ad}})} \quad (3.5.10)$$

Με  $pKa=9.25 - \log_{10}(\exp[(51965/(100 \cdot R)) \cdot ((1/T_{base}) - (1/T_{ad}))])$

$$\alpha^{ch}_{IC} = \frac{-1}{(1+10^{pKa-pH_{ad}})} \quad (3.5.11)$$

Με  $pKa=6.35 - \log_{10}(\exp[(7646/(100 \cdot R)) \cdot ((1/T_{base}) - (1/T_{ad}))])$

$$\alpha^{ch}_{NH} = 1/14000 \text{ (μετατροπή από μονάδες AS g N.m}^{-3} \text{ σε AD kmole N.m}^{-3}\text{)}$$

$$\alpha^{ch}_{NO} = 1/14000 \text{ (μετατροπή από μονάδες AS g N.m}^{-3} \text{ σε AD kmole N.m}^{-3}\text{)}$$

$\alpha^{ch}_{ALK} = -1/1000$  (μετατροπή από μονάδες AS moleHCO<sub>3</sub>.m<sup>-3</sup> σε AD kmole HCO<sub>3</sub>.m<sup>-3</sup>)

Σημειώνεται πως  $R=0.083145 \text{ bar}\cdot\text{m}^3\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{kmol}^{-1}$

**Για το interface ASM/ADM:**

$$S_{IC} = \frac{[S_{ALK} \cdot \alpha_{ALK}^{ch} + S_{NH} \cdot \alpha_{NH}^{ch} + S_{NO} \cdot \alpha_{NO}^{ch}]_{as} - [S_{ac} \cdot \alpha_{ac}^{ch} + S_{pro} \cdot c + S_{bu} \cdot \alpha_{bu}^{ch} + S_{va} \cdot \alpha_{va}^{ch} + S_{IN} \cdot \alpha_{IN}^{ch}]_{ad}}{\alpha_{ALK}^{ch}} \quad (3.5.12)$$

Να σημειωθεί ότι εξορισμού του μοντέλου BSM TG ASM/ADM interface οι μεταβλητές  $S_{ac}$ ,  $S_{pro}$ ,  $S_{bu}$ , και  $S_{va}$  θα είναι πάντα μηδενικές τις συμπεριλαμβάνουμε όμως στην εξίσωση για γενική περιγραφή.

Για το interface ADM/ASM:

$$S_{ALK} = \frac{[S_{ac} \cdot \alpha_{ac}^{ch} + S_{pro} \cdot \alpha_{pro}^{ch} + S_{bu} \cdot \alpha_{bu}^{ch} + S_{va} \cdot \alpha_{va}^{ch} + S_{IN} \cdot \alpha_{IN}^{ch} + S_{IC} \cdot \alpha_{IC}^{ch}]_{ad} - [S_{NH} \cdot \alpha_{NH}^{ch} + S_{NO} \cdot \alpha_{NO}^{ch}]_{as}}{\alpha_{ALK}^{ch}} \quad (3.5.13)$$

Σημειώνεται πάλι ότι εξορισμού του BSM TG ADM/ASM interface η μεταβλητή  $S_{NO}$  θα είναι πάντα μηδέν περιλαμβάνεται όμως για τη γενική περιγραφή της εξίσωσης.

Το μοντέλο του ADM1 ολοκληρώνει το ισοζύγιο μάζας μέσω των  $S_{an}$  και  $S_{cat}$  σε αντίθεση με το μοντέλο ASM1 που δεν περιλαμβάνει τον υπολογισμό όλων των ιόντων.

Για τον υπολογισμό των  $S_{an}$  και  $C$  στην είσοδο του ADM1 θα πρέπει να συμπεριληφθούν και τα ιόντα  $OH^-$  και  $H^+$ :

$$0 = [S_{ac} \cdot \alpha_{ac}^{ch} + S_{pro} \cdot \alpha_{pro}^{ch} + S_{bu} \cdot \alpha_{bu}^{ch} + S_{va} \cdot \alpha_{va}^{ch} + S_{IN} \cdot \alpha_{IN}^{ch} + S_{IC} \cdot \alpha_{IC}^{ch} + OH^- - H^+ + S_{an-} - S_{cat+}]_{ad} \quad (3.5.14)$$

με  $H^+ = 10^{-pH_{ad}}$  και  $OH^- = 10^{-(pK_w + pH_{ad})}$  καταλήγουμε ότι

$$S_{cat+} - S_{an-} = S_{ac} \cdot \alpha_{ac}^{ch} + S_{pro} \cdot \alpha_{pro}^{ch} + S_{bu} \cdot \alpha_{bu}^{ch} + S_{va} \cdot \alpha_{va}^{ch} + S_{IN} \cdot \alpha_{IN}^{ch} + S_{IC} \cdot \alpha_{IC}^{ch} + OH^- - H^+ \quad (3.5.15)$$

Αν το αποτέλεσμα  $S_{cat+} - S_{an-}$  είναι μεγαλύτερο του μηδενός τότε γίνεται η εξής υπόθεση:

$$S_{cat+} = S_{ac} \cdot \alpha_{ac}^{ch} + S_{pro} \cdot \alpha_{pro}^{ch} + S_{bu} \cdot \alpha_{bu}^{ch} + S_{va} \cdot \alpha_{va}^{ch} + S_{IN} \cdot \alpha_{IN}^{ch} + S_{IC} \cdot \alpha_{IC}^{ch} + OH^- - H^+ \quad (3.5.16)$$

και

$$S_{an-} = 0$$

Ενώ εάν το αποτέλεσμα  $S_{cat+} - S_{an-}$  είναι μικρότερο του μηδενός τότε:

$$S_{cat+}=0$$

και

$$S_{an-} = -(S_{ac} * \alpha_{ac}^{ch} + S_{pro} * \alpha_{pro}^{ch} + S_{bu} * \alpha_{bu}^{ch} + S_{va} * \alpha_{va}^{ch} + S_{IN} * \alpha_{IN}^{ch} + S_{IC} * \alpha_{IC}^{ch} + OH^- - H^+) \quad (3.5.17)$$

Να σημειώσουμε ότι οι παραπάνω εξισώσεις είναι σημαντικές μόνο για το interface ASM/ADM

## ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4 Εφαρμογή Μαθηματικού Μοντέλου

### 4.1. Προσομοιούμενο σύστημα AnMBR

Στο πλαίσιο αυτής της διπλωματικής προσομοιώθηκαν 3 βασικά πειραματικά σενάρια το καθένα από τα οποία χωρίζεται σε 2 υποσενάρια α και β όπου α: περίοδος χειμώνα, β: περίοδος καλοκαιριού. Τα πειράματα διενεργήθηκαν από την Αργυρώ Πλεύρη στο πλαίσιο της διδακτορικής της διατριβής.. Πιο συγκεκριμένα, τα πειράματα πραγματοποιήθηκαν , στις εγκαταστάσεις της ΕΥΔΑΠ με έναν αναερόβιο αντιδραστήρα εργαστηριακής κλίμακας 40L με PVDF μεμβράνη υπερδιήθησης, επίπεδων φύλλων, συνολικής επιφάνειας 0.5 m<sup>2</sup> στο εσωτερικό του και ένα αεριοφυλάκιο 20L για την συλλογή και καταμέτρηση του παραγόμενου βιοαερίου. Ο καθαρισμός των μεμβρανών γινόταν με επανακυκλοφορία του παραγόμενου βιοαερίου εντός του αντιδραστήρα για την απομάκρυνση των αιωρούμενων στερών που επανατίθενται πάνω στην επιφάνεια της μεμβράνης.

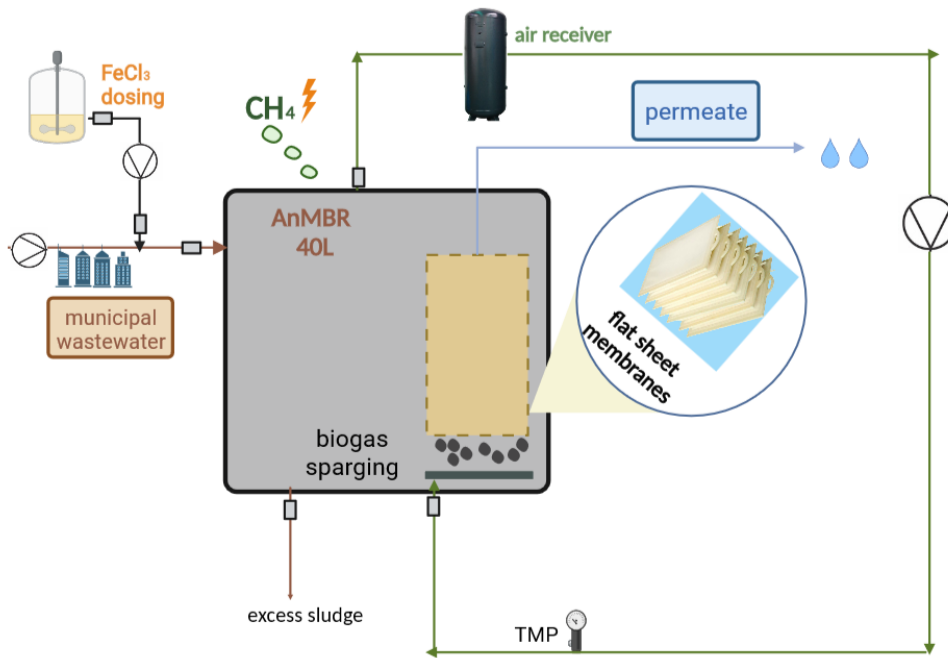
Οι παρακάτω εικόνες 4.1, 4.2 δείχνουν τον αντιδραστήρα του πειράματος μαζί με τον ηλεκτρομηχανολογικό εξοπλισμό καθώς επίσης παρατίθεται και μια σχηματική απεικόνιση της διαδικασίας του εν λόγω αναερόβιου βιοαντιδραστήρα μεμβρανών 4.3



Εικόνα 4.1: Αντιδραστήρας πειράματος



Εικόνα 4.2: Αντιδραστήρας με λύματα



Εικόνα 4.3: Σχηματική απεικόνιση AnMBR

Ακολουθεί πίνακας με τα κατασκευαστικά χαρακτηριστικά των μεμβρανών που χρησιμοποιήθηκαν στο πείραμα

Πίνακας 4.1: Σχηματική απεικόνιση AnMBR

Χαρακτηριστικά μεμβράνης	
Κατασκευαστής	SINAP
Τύπος Μεμβράνης	Επίπεδων φύλλων
Μοντέλο Μεμβράνης	SINAP 10(5*0.1m <sup>2</sup> )
Μέγεθος πόρων	<0.1μm
Επιφάνεια Μεμβράνης	0.1m <sup>2</sup>
Υλικό	PVDF
Ειδικές απαιτήσεις αερισμού ανάλογα με την επιφάνεια της Μεμβράνης	0.36 m <sup>3</sup> αέρα/m <sup>2</sup> επιφάνειας μεμβράνης/h

Το σύστημα λειτούργησε μεταξύ θερμοκρασιών 14οC και 26οC με μέσο όρο θερμοκρασιών 18οC για χειμώνα και 24°C για καλοκαίρι. Για την ρύθμιση των θερμοκρασιών σε τιμές κοντά στα ελληνικά WWTPs τοποθετήθηκε μια εξωτερική λεκάνη με θερμαινόμενο νερό. Επιπροσθέτως για τη θερμοκρασία, REDOX και τη διαμεμβρανική πίεση (TMP) είχαν εγκατασταθεί αισθητήρες στην μονάδα για τον έλεγχο των αναερόβιων διεργασιών. Ακόμα χρησιμοποιήθηκαν 2 περισταλτικές αντλίες . Μια για την τροφοδοσία λυμάτων εντός του αντιδραστήρα και μία για την έξοδο του διηθημένου νερού.. (A. Plevri, et al.2021)

Για κάθε σενάριο και το υποσενάριο του παρουσιάζονται οι συνθήκες ενδιαφέροντος :

Πίνακας 4.2 Πειραματικά δεδομένα λειτουργίας του συστήματος

Παράμετροι	Σενάριο 1 α/β	Σενάριο 2 α/β	Σενάριο 3 α/β
Θερμοκρασία (T)(οC)	18/23	19/24	19/24
Παροχή (Q) (L/d)	20	40	80
HRT (d)	2	1	0.5
SRT (d)	50	50	50

Σημείωση: Στις τιμές των παραμέτρων έχουν ληφθεί υπόψιν οι μέσοι όροι των μετρήσεων.



Παρουσιάζουμε στον επόμενο πίνακα και τα αποτελέσματα του εν λόγω πειράματος

Πίνακας 4.3 Πειραματικά δεδομένα εξόδου

	Σενάριο 1α Μέση τιμή ± τυπική απόκλιση	Σενάριο 1β Μέση τιμή ± τυπική απόκλιση	Σενάριο 2α Μέση τιμή ± τυπική απόκλιση	Σενάριο 2β Μέση τιμή ± τυπική απόκλιση	Σενάριο 3α Μέση τιμή ± τυπική απόκλιση	Σενάριο 3β Μέση τιμή ± τυπική απόκλιση
COD <sub>in</sub> (mg/l)	477 (±62)	470( ±48)	456( ±46)	428( ±48)	455( ±44)	442( ±51)
COD <sub>out</sub> (mg/l)	105 ( ±21)	51 ( ±8)	95 ( ±9)	67 ( ±10)	123 ( ±18)	91 ( ±5)
Q <sub>gas</sub> (l/d)	1.45 (±0.014)	2.06( ±0.07)	3.79 ( ±0.3)	4.94 ( ±0.5)	6.13 ( ±0.7)	7.18( ±0.75)

## 4.2. Ανάλυση ευαισθησίας μοντέλου

Η ανάλυση ευαισθησίας αποτελεί ισχυρό εργαλείο στα μαθηματικά μοντέλα προσομοίωσης διότι μας επιτρέπει να προσδιορίσουμε και να εκτιμήσουμε την επίδραση μιας διαταραχής στις παραμέτρους εισόδου, ως προς τα αποτελέσματα που μας ενδιαφέρουν στη έξοδο (Camprolongo,2000). Μέχρι στιγμής στα μοντέλα, όπως άλλωστε και στο δικό μας, χρησιμοποιείται η μέθοδος “μια τη φορά”( once-at-a-time) η οποία βέβαια δεν επιτρέπει την ανάλυση και ποσοτικοποίηση των αλληλεπιδράσεων μεταξύ των μεταβλητών στα εξαγόμενα αποτελέσματα του μοντέλου. Στην δική μας περίπτωση, έγινε επιλογή των πιο σημαντικών παραμέτρων εισόδου όσον αφορά τα αποτελέσματα που μας ενδιέφεραν τα οποία και πιο συγκεκριμένα είναι COD εξόδου, qgas(παροχή Βιοαερίου), VSS, SNH. Αναλυτικότερα οι παράμετροι και οι έξοδοι ενδιαφέροντος παρουσιάζονται στην εικόνα 4.4 παρακάτω:

Πίνακας 4.4: Παράμετροι Εισόδου και Εξόδου ελέγχου ανάλυσης ευαισθησίας

Παράμετροι εισόδου		Παράμετροι εξόδου	
Y_aa	0.08	CODout	
Y_fa	0.06	qgas	
Y_c4	0.06	VSS	
Y_pro	0.04	SNH	
Y_ac	0.05		
Y_h2	0.06		
k_dis	0.5		
k_hyd_ch	10		
k_hyd_pr	10		
k_hyd_li	10		
K_S_IN	1.00E-04		
k_m_su	30		
K_S_su	0.5		
k_m_aa	50		
K_S_aa	0.3		
k_m_fa	6		
K_S_fa	0.4		
k_m_c4	20		
K_S_c4	0.2		
k_m_pro	13		
K_S_pro	0.1		
k_m_ac	8		
K_S_ac	0.15		
k_m_h2	35		
K_S_h2	7.00E-06		

Στην περίπτωση μας όπως προαναφερθήκαμε επιλέχτηκε η μέθοδος once at a time. Η συγκεκριμένη μέθοδος έχει σχετικά απλή και γρήγορη εφαρμογή και δείχνει ποιοτικά την

βαρύτητα της κάθε παραμέτρου στις εξόδους ενδιαφέροντος. Συγκεκριμένα για κάθε προσομοίωση μεταβάλλεται κάθε μία από τις παραμέτρους, με μια διαταραχή της τάξης +30% και -30% ενώ όλες οι υπόλοιπες διατηρούν την αρχική τους τιμή δηλαδή την τιμή που ορίζουμε ως κατάσταση αναφοράς. Στη συνέχεια προκύπτει ένας δείκτης που στην ουσία ποσοτικοποιεί τη μεταβολή της κάθε τιμής μεταβλητής εξόδου σε σχέση με την αντίστοιχη μεταβολή της παραμέτρου όπως εκείνη μεταβλήθηκε για την εκάστοτε προσομοίωση. Ο δείκτης μεταβολής προκύπτει από την εξίσωση :

$$S_{pyji} = \frac{\frac{\Delta y_i}{y_{i,0}}}{\frac{\Delta p_j}{p_{j,0}}} \quad (4.2.1)$$

Όπου

- $\Delta y_i$ = Η διαφορά μεταξύ της τιμής της μεταβλητής εξόδου στην κατάσταση αναφοράς και της αντίστοιχης λόγω της διαταραχής της παραμέτρου εισόδου  $p_j$
- $\Delta p_j$ = Η διαφορά μεταξύ της τιμής της παραμέτρου εισόδου στην κατάσταση αναφοράς και της αντίστοιχης μετά τη διαταραχή της
- $y_{i,0}$ = Η τιμή αναφοράς της μεταβλητής εξόδου
- $p_{j,0}$ = Η τιμή αναφοράς της παραμέτρου εισόδου

Κατά αυτόν τον τρόπο υπολογίσαμε τον δείκτη ευαισθησίας-βαρύτητας για κάθε μεταβολή των μεταβλητών εξόδου για κάθε μια από τις διαταραχές των παραμέτρων εισόδου (  $\pm 30\%$ ). Επόμενο βήμα της διαδικασίας ήταν να λάβουμε την μέγιστη απόλυτη τιμή των 2 διαταραχών της κάθε παραμέτρου εισόδου και η τιμή που προέκυψε είναι εκείνη που τελικά περιγράφει την ευαισθησία της κάθε μεταβλητής στην εκάστοτε παράμετρο εισόδου. Λόγω του συγκεκριμένου τρόπου ανάλυσης ευαισθησίας γίνεται αντιληπτό ότι δεν είναι δυνατόν να περιγραφεί και να αποτυπωθεί τυχόν αλληλεπίδραση των παραμέτρων στα αποτελέσματα των μεταβλητών εξόδου.

Μένει τέλος να προσδιοριστεί η σημαντικότητα των παραμέτρων ανάλογα με τον δείκτη ευαισθησίας-βαρύτητας που προκύπτει. Από τη βιβλιογραφία (Cosenza et al., 2013) επιλέξαμε ως όριο για την σημαντικότητα των παραμέτρων την τιμή 0.1 Με αυτόν τον τρόπο παρουσιάζονται παρακάτω τα αποτελέσματα σε πίνακες των σημαντικότερων μεταβλητών που προέκυψαν ανά περίπτωση μεταβλητής εξόδου.

Για τον βαθμό ευαισθησίας του μοντέλου προσαρτάται ο επόμενος πίνακας που μας δείχνει σε ποιες μεταβλητές και κατά πόσο ευαίσθητο είναι το σύστημα μας.

	Mesofilic high-rate(nom 35 C)	Mesofilic solids(nom 35 C)	Thermofilic solids(nom 55 C)	S	Var	
Kdis	0,4	0,5	1	3	3	d-1
Khyd_ch	0,25	10	10	3	2	d-1
Khyd_pr	0,2	10	10	3	2	d-1
Khyd_li	0,1	10	10	2	3	d-1
tres_x	40	0	0	3	2	d
Kdec_all	0,02	0,02	0,04	2	2	d-1
Ks_nh3_all	0,00001	0,00001	0,00001	1	1	M
pHul_acet_acid	5,5	5,5	5,5	1	2	-
pHll_acet_acid	4	4	4	1	2	-
Km_su	30	30	70	1	2	CODCOD-1d-1
Ks_su	0,5	0,5	1	1	2	kgCODm-3
Ysu	0,1	0,1	0,1	1	1	CODCOD-1
Km_aa	50	50	70	1	2	CODCOD-1d-1
Ks_aa	0,3	0,3	0,3	1	1	kgCODm-3
Yaa	0,08	0,08	0,08	1	1	CODCOD-1
Km_fa	6	6	10	1	3	CODCOD-1d-1
Ks_fa	0,4	0,4	0,4	1	3	kgCODm-3
Yfa	0,06	0,06	0,06	1	1	CODCOD-1
Klh2_fa	0,000005	0,000005	n/a	1	1	kgCODm-3
Km_c4	20	20	30	1	2	CODCOD-1d-1
Ks_c4	0,3	0,2	0,4	1	3	kgCODm-3
Yc4	0,06	0,06	0,06	1	1	CODCOD-1
Klh2_c4	0,00001	0,00001	0,00003	1	1	kgCODm-3
Km_pro	13	13	20	2	2	CODCOD-1d-1
Ks_pro	0,3	0,1	0,3	2	2	kgCODm-3
Ypro	0,04	0,04	0,05	1	1	CODCOD-1
Klh2_pro	0,0000035	0,0000035	0,000001	2	1	kgCODm-3
Km_ac	8	8	16	3	2	CODCOD-1d-1
Ks_ac	0,15	0,15	0,3	3	2	kgCODm-3
Yac	0,05	0,05	0,05	1	1	CODCOD-1
pHul_ac	7	7	7	3	1	-
pHll_ac	6	6	6	2	1	-
Klnh3	0,0018	0,0018	0,011	2	1	M
Km_h2	35	35	35	1	2	CODCOD-1d-1
Ks_h2	0,0000025	0,000007	0,000005	2	2	kgCODm-3
Yh2	0,06	0,06	0,06	1	1	CODCOD-1
pHul_h2	6	6	6	2	2	-
pHll_h2	5	5	5	1	1	-
Ks_in		0,0001				M

Ο παραπάνω πίνακας του ADM1 περιγράφει τα χαρακτηριστικά για κάθε σταθερά. Αναλυτικά:

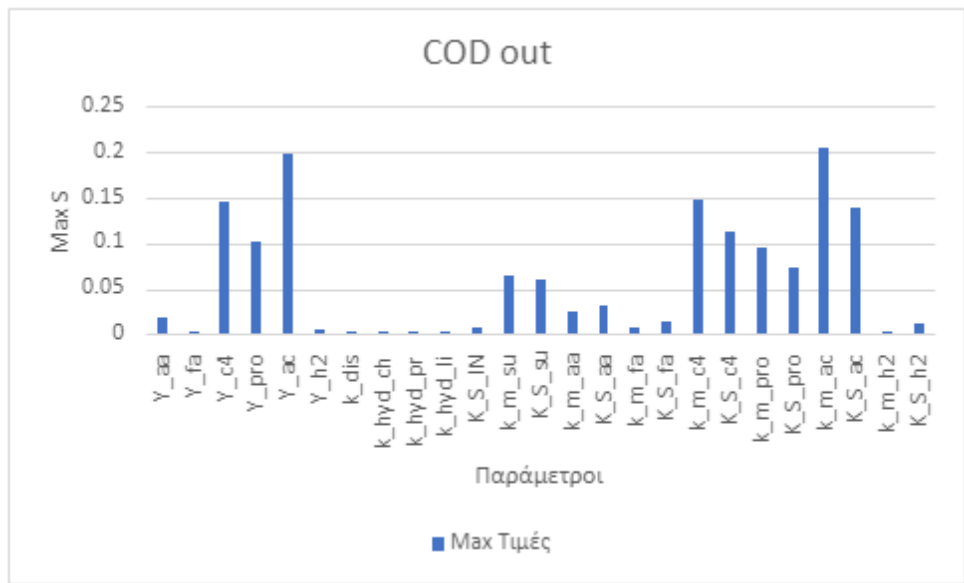
- Ο δείκτης S δείχνει την ευαισθησία των εξαγόμενων του μοντέλου σε μεταβολές της σταθεράς. Για S=1 η μεταβολή είναι μικρή ή ανεπαίσθητη, για S=2 υπάρχει μεταβολή σε κάποιες παραμέτρους, ενώ για S=3 η μεταβολή των παραμέτρων είναι αξιοσημείωτη σε steady state συνθήκες και σημαντική σε δυναμικές συνθήκες.
- Ο δείκτης Var παρουσιάζει τη μεταβλητότητα της κάθε σταθεράς, συγκεκριμένα για Var=1 μπορεί να μεταβληθεί κατά 30%, για Var=2 κατά 100% και για Var=3 κατά 300%.

Με βάση τα δεδομένα αυτά έγιναν ενδεικτικές αλλαγές σε σταθερές του προγράμματος και αξιολογήθηκε η εκάστοτε μεταβολή που προκλήθηκε, ενώ παράλληλα έγινε κατανοητός ο ρόλος κάθε σταθεράς. Για τις ανάγκες των δοκιμών αυτών χρησιμοποιήθηκαν τα παρακάτω δεδομένα ως δεδομένα εισόδου.

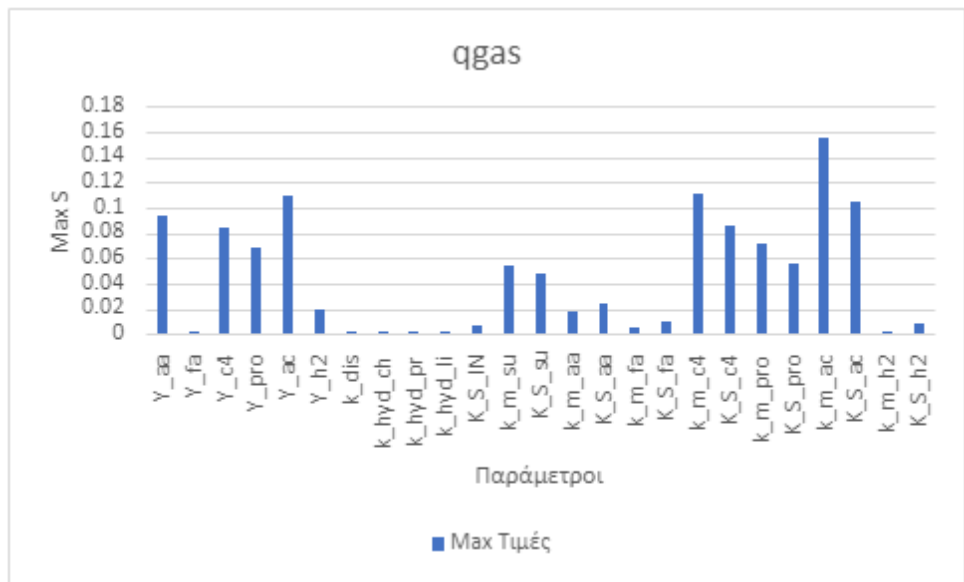
Μετά τις παραπάνω διαδικασίες που ακολουθήσαμε στο πρόγραμμα excel καταλήξαμε στα παρακάτω αποτελέσματα μέγιστων τιμών με τα αντίστοιχα γραφήματα με τα αποτελέσματα για κάθε έξοδο ενδιαφέροντος:

Πίνακας 4.6 : Μέγιστες τιμές ευαισθησίας S παραμέτρων εισόδου-τελικών μεταβλητών ενδιαφέροντος

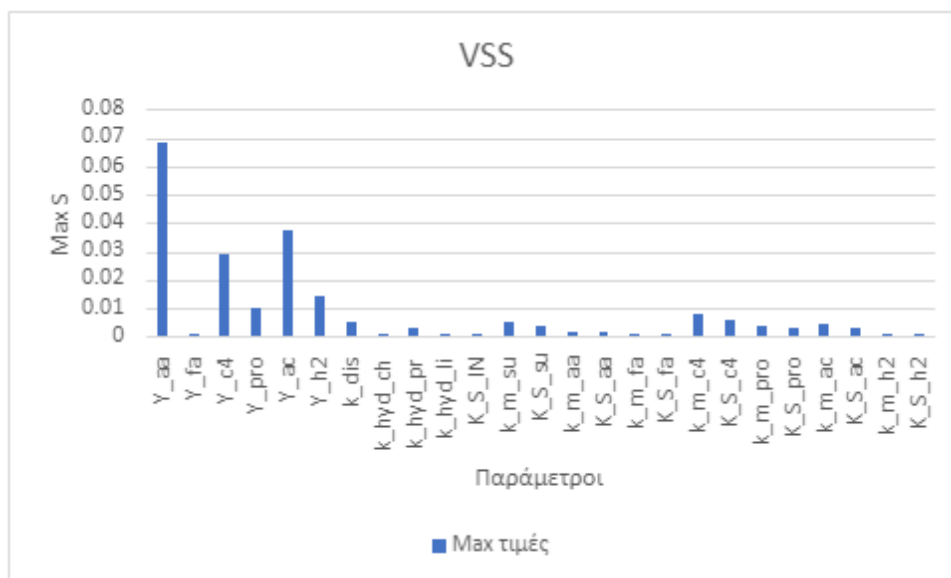
S		CODout	qgas	VSS	SNH
0	MAX	0.205829	0.155081	0.06861	0.105412
1	Y_aa	0.019114	0.093698	0.06861	0.105412
2	Y_fa	0.002332	0.001806	0.000259	0.000293
3	Y_c4	0.146096	0.084441	0.029307	0.043377
4	Y_pro	0.100848	0.06912	0.009917	0.014681
5	Y_ac	0.1979	0.110056	0.037651	0.0557
6	Y_h2	0.004909	0.020221	0.014118	0.020881
7	k_dis	0.003634	0.002915	0.005279	0.000653
8	k_hyd_ch	7.45E-06	0.000165	0.000142	2.12E-05
9	k_hyd_pr	0.000147	0.002991	0.002817	0.000866
10	k_hyd_li	0.000371	1.66E-05	0.000295	2.26E-06
11	K_S_IN	0.008426	0.006431	0.000359	0.000585
12	k_m_su	0.065582	0.055034	0.004964	0.007296
13	K_S_su	0.059241	0.048767	0.00402	0.006008
14	k_m_aa	0.024595	0.018734	0.001955	0.006704
15	K_S_aa	0.031245	0.023828	0.001956	0.005625
16	k_m_fa	0.00801	0.006104	0.000284	0.000528
17	K_S_fa	0.01357	0.010437	0.00077	0.001093
18	k_m_c4	0.148257	0.111053	0.00772	0.011377
19	K_S_c4	0.113637	0.085365	0.005785	0.008621
20	k_m_pro	0.094814	0.071334	0.003752	0.005502
21	K_S_pro	0.073713	0.055617	0.002956	0.004435
22	k_m_ac	0.205829	0.155081	0.004224	0.006203
23	K_S_ac	0.139593	0.105312	0.003164	0.004741
24	k_m_h2	0.00332	0.002609	0.000131	0.000251
25	K_S_h2	0.011904	0.009035	0.000512	0.000813



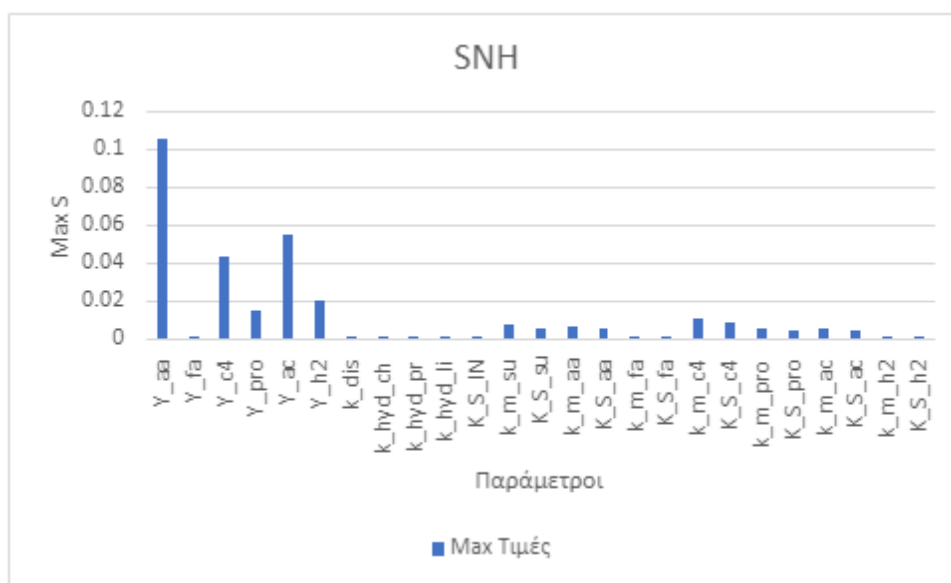
Διάγραμμα 4.1: Μέγιστες τιμές ευαισθησίας παραμέτρων για CODout



Διάγραμμα 4.2: Μέγιστες τιμές ευαισθησίας παραμέτρων για qgas

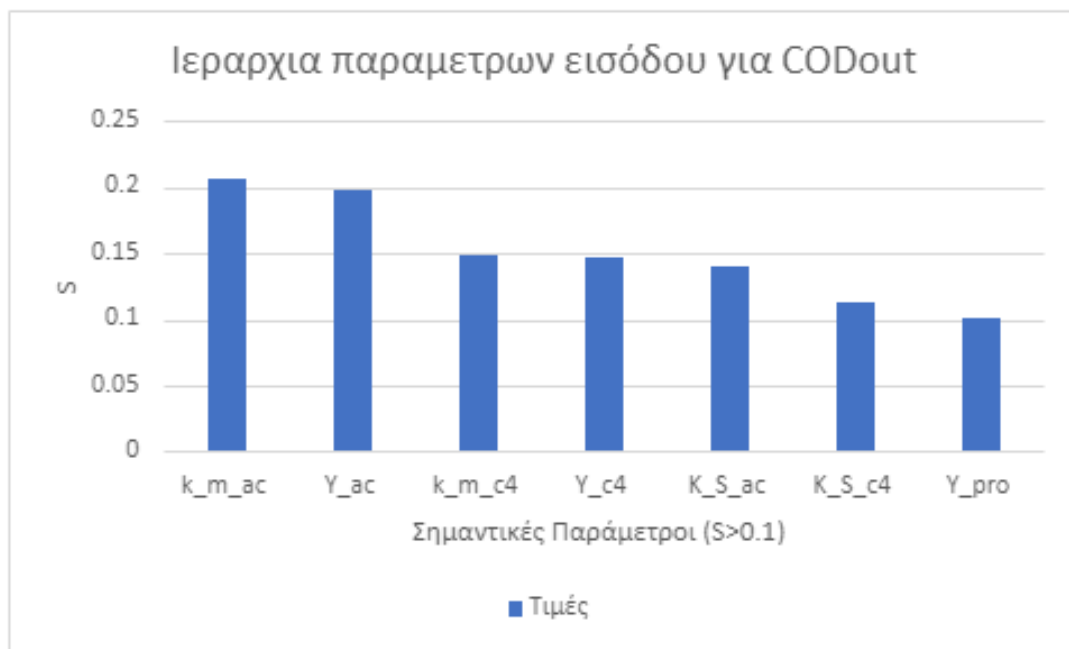


Διάγραμμα 4.3: Μέγιστες τιμές ευαισθησίας παραμέτρων για VSS



Διάγραμμα 4.4: Μέγιστες τιμές ευαισθησίας παραμέτρων για SNH

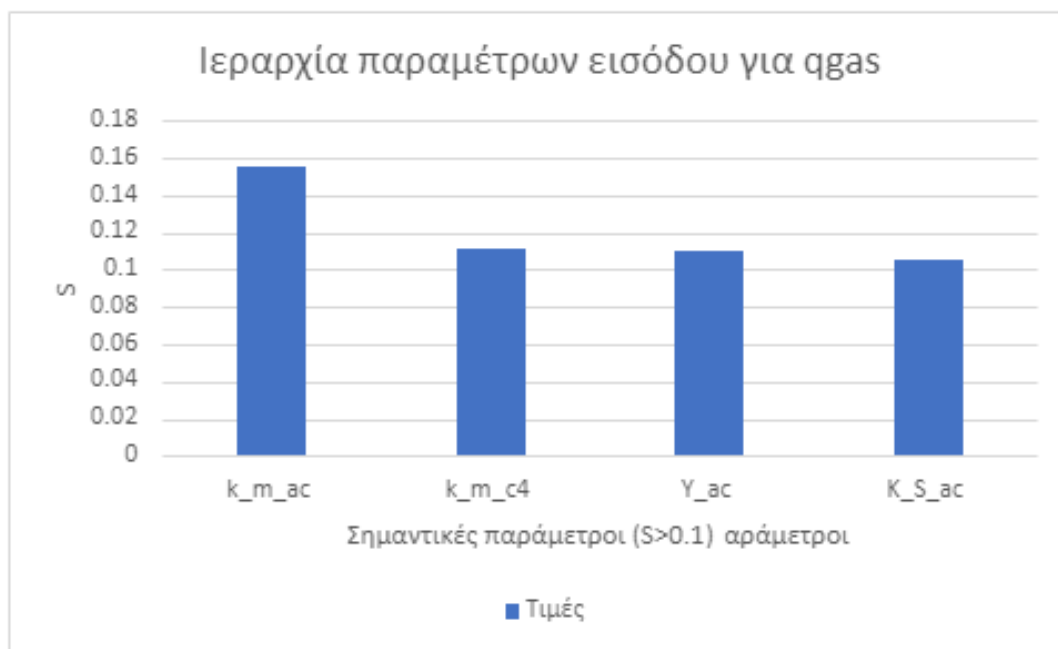
Έπειτα από αυτά τα αποτελέσματα ξεχωρίσαμε τις παραμέτρους ως σημαντικές και μη σημαντικές με το όριο της τιμής 0.1 όπως προαναφέρθηκε. Καταλήξαμε έτσι στα παρακάτω διαγράμματα που αποτυπώνονται και σε ιεράρχηση οι πιο σημαντικές παράμετροι για κάθε μεταβλητή εξόδου που μας ενδιέφερε να εξετάσουμε:



Διάγραμμα 4.5: Ιεράρχηση των πιο σημαντικών παραμέτρων για CODout

Το μοντέλο μας είναι μερικώς ευαίσθητο στις παραμέτρους εισόδου όσον αφορά την ευαισθησία του για το CODout. Όπως παρατηρούμε και από το παραπάνω διάγραμμα οι παράμετροι που έχουν τη μεγαλύτερη επιρροή είναι καταρχάς εκείνες που αφορούν το οξικό οξύ συμπέρασμα που είναι λογικό καθώς το οξικό οξύ καταλαμβάνει την μεγαλύτερη αναλογία των VFAs και άρα συναντάται σε μεγαλύτερες ποσότητες, σε συνέχεια γίνεται αντιληπτό ακολουθούν οι παράμετροι που αφορούν του βουτυρικό και το βαλερικό οξύ που περιγράφονται ως c4. Η παράμετρος k\_m\_ac εκφράζει τον ειδικό ρυθμό κατανάλωσης του οξικού οξέος και φαίνεται ότι είναι η παράμετρος με τη μεγαλύτερη ευαισθησία λόγω της μεγάλης συγκέντρωσης οξικού όπως προαναφέραμε. Το Y αφορά το ποσοστό του COD που διατίθεται στη βιομάζα ενώ το υπόλοιπο καταλήγει για οξείδωση επομένως η μεταβολή του όπως άλλωστε επιβεβαιώνει και το διάγραμμα επηρεάζει το CODout ειδικά όσο αφορά το οξικό καθώς αλλαγή του ποσοστού διάθεσης του για βιομάζα και οξείδωση επηρεάζουν άμεσα το COD εξόδου. Είναι άξιο αναφοράς ότι στην τεχνική αναφορά της IWA του αρχικού μοντέλου είναι προσανατολισμένο στη λάσπη επομένως έχουν μεγαλύτερη επιρροή και έχουν μεγαλύτερη επιρροή οι παράμετροι υδρόλυσης k<sub>hyd</sub> και k<sub>dis</sub> κάτι που στην δική μας περίπτωση δεν ισχύει αφού έχουν οριακή (μη σημαντική επίδραση)





Διάγραμμα 4.6: Ιεράρχηση των πιο σημαντικών παραμέτρων για qgas

Αναφορικά με το qgas και τα αποτελέσματα της ανάλυσης ευαισθησίας διαπιστώνουμε και σε αυτή την περίπτωση ότι το σύστημα είναι μερικώς ευαίσθητο στις σημαντικές παραμέτρους που προέκυψαν. Οι παράμετροι ακολουθούν περίπου την ιεραρχία που προέκυψε και για το CODout καθώς και οι 4 σημαντικές παράμετροι για το qgas περιλαμβάνονται στο COD. Και σε αυτή την περίπτωση γίνεται αντιληπτό πόσο σημαντικές είναι οι παράμετροι που αφορούν το οξικό οξύ λόγω της μεγάλης του συγκέντρωσης καθώς όλες οι σχετιζόμενες παράμετροι περιλαμβάνονται στο διάγραμμα ως σημαντικές και άρα επηρεάζουν τα αποτελέσματα του qgas. Ενδιάμεσα στα αποτελέσματα των παραμέτρων του οξικού παρατηρούμε ότι περιλαμβάνεται και η παράμετρος του ειδικού ρυθμού κατανάλωσης βουτυρικού-βαλερικού οξέος.

Όσον αφορά τα αποτελέσματα των άλλων 2 τελικών μεταβλητών ενδιαφέροντος (VSS, SNH) παρατηρήσαμε ότι από την ανάλυση ευαισθησίας δεν προκύπτει κάποια από τις παραμέτρους ως σημαντική και ότι ουσιαστικά οι μεταβολές που εφαρμόσαμε είχαν ανεπαίσθητη επίδραση στις τελευταίες 2 μεταβλητές εξόδου.

### 4.3. Ρύθμιση μοντέλου

Για τη ρύθμιση του μοντέλου χρησιμοποιήθηκε το σενάριο 1α όπου αφορά το πρώτο σενάριο σε χειμερινές θερμοκρασιακές συνθήκες (18°C).

Προκειμένου να ρυθμίσουμε το μοντέλο με βάση το συγκεκριμένο σενάριο έγιναν πολλές δοκιμές που βασίστηκαν κατά κύριο λόγο στην ανάλυση ευαισθησίας του μοντέλου μας και στην βιβλιογραφία. Οι αλλαγές αφορούσαν την απόκριση του μοντέλου στις διαφορετικές θερμοκρασίες (Χειμώνα-Καλοκαίρι) με σκοπό την όσο το δυνατόν καλύτερη λειτουργία του.

Για την ρύθμιση των παραμέτρων παρουσιάζουμε στον παρακάτω πίνακα τις τιμές όλων των παραμέτρων όπως αυτές δίνονται αρχικά από το μοντέλο και δίπλα τις δικές μας αλλαγές για χειμώνα και καλοκαίρι. Έχουμε υπογραμμίσει και τονίσει τις παραμέτρους που αλλάξαμε.

Πίνακας 4.7 : Ρύθμιση παραμέτρων μοντέλου

Παράμετροι	Αρχικές τιμές μοντέλου	Τελικές τιμές Χειμώνα	Τελικές τιμές Καλοκαίρι
<i>f_sl_xc</i>	<u>0.1</u>	<u>0.05</u>	<u>0.05</u>
<i>f_xl_xc</i>	<u>0.2</u>	<u>0.05</u>	<u>0.05</u>
<i>f_ch_xc</i>	<u>0.2</u>	<u>0.3</u>	<u>0.3</u>
<i>f_pr_xc</i>	<u>0.2</u>	<u>0.3</u>	<u>0.3</u>
<i>f_li_xc</i>	0.3	0.3	0.3
N_xc	0.0376/14.0	0.0376/14.0	0.0376/14.0
N_l	0.06/14.0	0.06/14.0	0.06/14.0
N_aa	0.007	0.007	0.007
C_xc	0.02786	0.02786	0.02786
C_sl	0.03	0.03	0.03
C_ch	0.0313	0.0313	0.0313
C_pr	0.03	0.03	0.03
C_li	0.022	0.022	0.022
C_xl	0.03	0.03	0.03
C_su	0.0313	0.0313	0.0313
C_aa	0.03	0.03	0.03
<i>f_fa_li</i>	0.95	0.95	0.95
C_fa	0.0217	0.0217	0.0217
<i>f_h2_su</i>	0.19	0.19	0.19
<i>f_bu_su</i>	0.13	0.13	0.13
<i>f_pro_su</i>	0.27	0.27	0.27
<i>f_ac_su</i>	0.41	0.41	0.41
N_bac	0.08/14.0	0.08/14.0	0.08/14.0
C_bu	0.025	0.025	0.025

C_pro	0.0268	0.0268	0.0268
C_ac	0.0313	0.0313	0.0313
C_bac	0.0313	0.0313	0.0313
Y_su	0.1	0.1	0.1
f_h2_aa	0.06	0.06	0.06
f_va_aa	0.23	0.23	0.23
f_bu_aa	0.26	0.26	0.26
f_pro_aa	0.05	0.05	0.05
f_ac_aa	0.4	0.4	0.4
C_va	0.024	0.024	0.024
Y_aa	0.08	0.08	0.08
Y_fa	0.06	0.06	0.06
Y_c4	0.06	0.06	0.06
Y_pro	0.04	0.04	0.04
C_ch4	0.0156	0.0156	0.0156
Y_ac	0.05	0.05	0.05
Y_h2	0.06	0.06	0.06
<b><u>k_dis</u></b>	<b><u>0.5</u></b>	<b><u>2</u></b>	<b><u>2</u></b>
k_hyd_ch	10	10	10
k_hyd_pr	10	10	10
k_hyd_li	10	10	10
K_S_IN	1.00E-04	1.00E-04	1.00E-04
<b><u>k m su</u></b>	<b><u>30</u></b>	<b><u>56</u></b>	<b><u>100.8</u></b>
<b><u>K S su</u></b>	<b><u>0.5</u></b>	<b><u>0.2</u></b>	<b><u>0.2</u></b>
pH_UL_aa	5.5	5.5	5.5
pH_LL_aa	4	4	4
<b><u>k m aa</u></b>	<b><u>50</u></b>	<b><u>56</u></b>	<b><u>100.8</u></b>
<b><u>K S aa</u></b>	<b><u>0.3</u></b>	<b><u>0.1</u></b>	<b><u>0.1</u></b>
<b><u>k m fa</u></b>	<b><u>6</u></b>	<b><u>8</u></b>	<b><u>14.4</u></b>
<b><u>K S fa</u></b>	<b><u>0.4</u></b>	<b><u>0.1</u></b>	<b><u>0.1</u></b>
K_lh2_fa	5.00E-06	5.00E-06	5.00E-06
<b><u>k m c4</u></b>	<b><u>20</u></b>	<b><u>24</u></b>	<b><u>43.2</u></b>
K_S_c4	0.2	0.2	0.2
K_lh2_c4	1.00E-05	1.00E-05	1.00E-05
<b><u>k m pro</u></b>	<b><u>13</u></b>	<b><u>15.392</u></b>	<b><u>27.7056</u></b>
K_S_pro	0.1	0.1	0.1
K_lh2_pro	3.50E-06	3.50E-06	3.50E-06
<b><u>k m ac</u></b>	<b><u>8</u></b>	<b><u>12.8</u></b>	<b><u>23.04</u></b>
K_S_ac	0.15	0.15	0.15
K_I_nh3	0.0018	0.0018	0.0018
pH_UL_ac	7	7	7

pH_LL_ac	6	6	6
<b><i>k_m_h2</i></b>	<b><i>35</i></b>	<b><i>36.12</i></b>	<b><i>65.016</i></b>
K_S_h2	7.00E-06	7.00E-06	7.00E-06
pH_UL_h2	6	6	6
pH_LL_h2	5	5	5
k_dec_Xsu	0.02	0.02	0.02
k_dec_Xaa	0.02	0.02	0.02
k_dec_Xfa	0.02	0.02	0.02
k_dec_Xc4	0.02	0.02	0.02
k_dec_Xpro	0.02	0.02	0.02
k_dec_Xac	0.02	0.02	0.02
k_dec_Xh2	0.02	0.02	0.02
R	0.083145	0.083145	0.083145
pK_w_base	14	14	14
pK_a_va_base	4.86	4.86	4.86
pK_a_bu_base	4.82	4.82	4.82
pK_a_pro_base	4.88	4.88	4.88
pK_a_ac_base	4.76	4.76	4.76
pK_a_co2_base	6.35	6.35	6.35
pK_a_IN_base	9.25	9.25	9.25
k_A_Bva	1.00E+10	1.00E+10	1.00E+10
k_A_Bbu	1.00E+10	1.00E+10	1.00E+10
k_A_Bpro	1.00E+10	1.00E+10	1.00E+10
k_A_Bac	1.00E+10	1.00E+10	1.00E+10
k_A_Bco2	1.00E+10	1.00E+10	1.00E+10
k_A_BIN	1.00E+10	1.00E+10	1.00E+10
P_atm	1.013	1.013	1.013
kLa	200	200	200
K_H_h2o_base	0.0313	0.0313	0.0313
K_H_co2_base	0.035	0.035	0.035
K_H_ch4_base	0.0014	0.0014	0.0014
K_H_h2_base	7.80E-04	7.80E-04	7.80E-04
k_P	5.00E+04	5.00E+04	5.00E+04

Πρώτος στόχος ήταν το μοντέλο σε συνθήκες steady states να έχει ικανοποιητικές τιμές σύγκλισης στις μεταβλητές του οι οποίες θα μας έδιναν και τα κατάλληλα αποτελέσματα.

Με βάση τις προσαρμογές των παραμέτρων προέκυψαν τα ακόλουθα αποτελέσματα όσον αφορά τις τιμές που μας ενδιαφέρουν τα οποία παραθέτουμε στον πίνακα όπου με κόκκινο χρώμα παρουσιάζονται οι τιμές του πειράματος και με μαύρο οι τιμές που προέκυψαν από το μοντέλο:

Πίνακας 4.8 : Αποτελέσματα σεναρίου 1α

ΣΕΝΑΡΙΟ	ΠΕΡΙΠΤΩΣΗ	COD IN (mg/l)	T-op (c)	HRT (DAYS)	Q (L/D)	COD OUT (mg/L)	QGAS (L/D)	VSS (mg/l)	SNH	PH
1A-Winter	EXPERIMENTAL RESULTS	477	18	2	20	105	1.45	4000		
	MODEL RESULTS	477	18	2	20	79.22639297	1.2446692	3895.5765	97.73186	6.909964

Για το σενάριο ρύθμισης 1α έχουμε καλή απόκριση του μοντέλου ανάμεσα στα πειραματικά αποτελέσματα και της προσομοίωσης στο CODout με του μοντέλο να είναι λίγο χαμηλότερα και ταυτόχρονα ίδια περίπου συμπεριφορά στο qgas. Τα VSS είναι πάρα πολύ κοντά στις τιμές του πειράματος.

Για την απόκριση του συστήματος έγινε κι ένα ισοζύγιο μάζας για την μελέτη τυχόν απωλειών. Αναλυτικότερα:

Είσοδος:

$$\text{COD}_{in} = Q * \text{COD}_{IN} / 1000 = 9.54 \text{ mg/d}$$

Έξοδος:

$$\text{COD}_{out} = Q * \text{COD}_{OUT} / 1000 = 1.58 \text{ mg/d}$$

$$\text{COD}_{biomass} = 0.027 * Q * \text{VSS} / 1000 * 1.33 = 2.80 \text{ mg/d}$$

$$\text{COD}_{biogass} = q_{gas} * 0.7 / 0.37 = 2.35 \text{ mg/d}$$

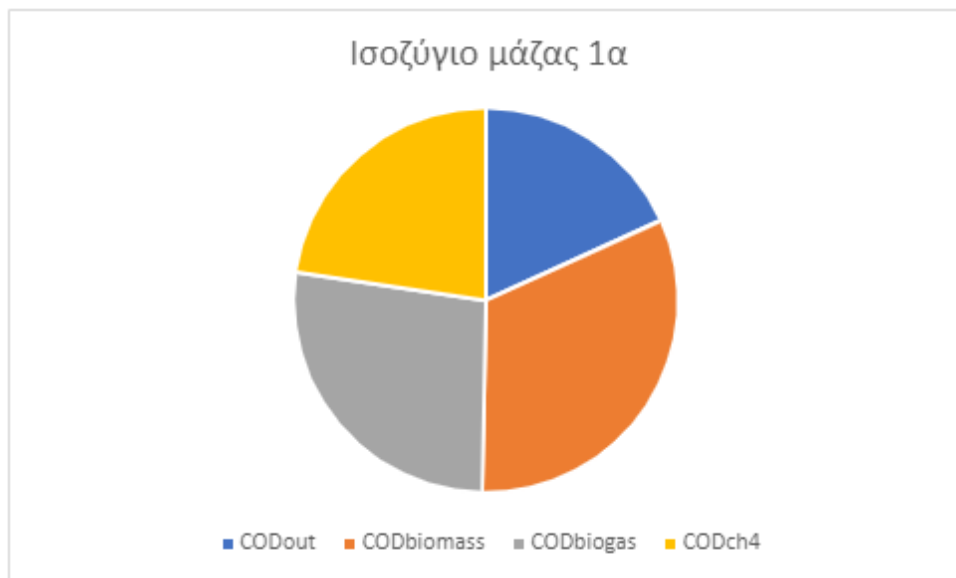
$$\text{COD}_{ch4} = Q * \text{Sch4} / 1000 = 1.97 \text{ mg/d}$$

$$\text{Totalout} = \text{COD}_{out} + \text{COD}_{biomass} + \text{COD}_{biogass} + \text{COD}_{ch4} = 8.71 \text{ mg/d}$$

$$\text{Ποσοστό απωλειών} = \text{Totalout} / \text{COD}_{in} = 0.92$$

Διαπιστώνουμε ότι το σύστημα μας έχει μικρές απώλειες COD ανάμεσα σε είσοδο και έξοδο.

Για την καλύτερη κατανόηση των ισοζυγίων παρουσιάζουμε το παρακάτω διάγραμμα



Διάγραμμα 4.7 : Ισοζύγιο μάζας για σενάριο 1α

#### 4.4. Επαλήθευση μοντέλου

Με βάση τη ρύθμιση του μοντέλου που έγινε στο προηγούμενο κεφάλαιο προχωρήσαμε στην επαλήθευση του χρησιμοποιώντας τις αντίστοιχες αλλαγές στα υπόλοιπα 5 σενάρια όπου πάλι με κόκκινο χρώμα παρουσιάζονται οι τιμές του πειράματος και με μαύρο οι τιμές που προέκυψαν από το μοντέλο:

Πίνακας 4.9 : Αποτελέσματα επαλήθευσης μοντέλου στα υπόλοιπα σενάρια έρευνας

ΣΕΝΑΡΙΟ	ΠΕΡΙΠΤΩΣΗ	COD IN (mg/l)	T-op (c)	HRT (DAYS)	Q (L/D)	COD OUT (mg/L)	QGAS (L/D)	VSS (mg/l)	SNH	PH
1A-Winter	EXPERIMENTAL RESULTS	477	18	2	20	105	1.45	4000		
	MODEL RESULTS	477	18	2	20	79.226	1.245	3895.576	97.732	6.91
ΣΕΝΑΡΙΟ	ΠΕΡΙΠΤΩΣΗ	COD IN (mg/l)	T-op(c)	HRT (DAYS)	Q (L/D)	COD OUT (mg/L)	QGAS (L/D)	VSS (mg/l)	SNH	PH
1B-Summer	EXPERIMENTAL RESULTS	470	23	2	20	51	2.06	4000		
	MODEL RESULTS	470	23	2	20	62.618	1.453	3859.567	98.279	6.91
ΣΕΝΑΡΙΟ	ΠΕΡΙΠΤΩΣΗ	COD IN (mg/l)	T-op (c)	HRT (DAYS)	Q (L/D)	COD OUT (mg/L)	QGAS (L/D)	VSS (mg/l)	SNH	PH
2A-Winter	EXPERIMENTAL RESULTS	456	19	1	40	95	3.79	4000		
	MODEL RESULTS	456	19	1	40	92.250	1.870	3869.423	104.108	6.81
ΣΕΝΑΡΙΟ	ΠΕΡΙΠΤΩΣΗ	COD IN (mg/l)	T-op (c)	HRT (DAYS)	Q (L/D)	COD OUT (mg/L)	QGAS (L/D)	VSS (mg/l)	SNH	PH
2B-Summer	EXPERIMENTAL RESULTS	428	24	1	40	67	4.94	4000		
	MODEL RESULTS	428	24	1	40	65.420	2.157	3699.268	105.106	6.94
ΣΕΝΑΡΙΟ	ΠΕΡΙΠΤΩΣΗ	COD IN (mg/l)	T-op (c)	HRT (DAYS)	Q (L/D)	COD OUT (mg/L)	QGAS (L/D)	VSS (mg/l)	SNH	PH
3A-Winter	EXPERIMENTAL RESULTS	455	19	0.5	80	123	6.13	4000		
	MODEL RESULTS	455	19	0.5	80	114.769	3.037	4046.749	111.244	6.87
ΣΕΝΑΡΙΟ	ΠΕΡΙΠΤΩΣΗ	COD IN (mg/l)	T-op (c)	HRT (DAYS)	Q (L/D)	COD OUT (mg/L)	QGAS (L/D)	VSS (mg/l)	SNH	PH
3B-Summer	EXPERIMENTAL RESULTS	442	24	0.5	80	91	7.18	4000		
	MODEL RESULTS	442	24	0.5	80	78.909	3.990	3982.338	113.482	6.92

Παρατηρούμε βάση τον παραπάνω πίνακα 4.7 ότι κατά την επαλήθευση του μοντέλου η προσομοίωση έχει πάρα πολύ καλά αποτελέσματα όσον αφορά το CODout και τα VSS σε σχέση με τα πειραματικά αποτελέσματα. Για το qgas είναι ευδιάκριτο ότι υπάρχει αρκετή απόκλιση σε σχέση με αυτά, ειδικά στα σενάρια 2 και 3.

Για την απόκριση του συστήματος έγινε κι ένα ισοζύγιο μάζας και για τα υπόλοιπα σενάρια για την μελέτη τυχόν απωλειών. Αναλυτικότερα:

- Σενάριο 1β:

Είσοδος:

$$\text{COD}_{in} = Q * \text{COD}_{IN} / 1000 = 9,4 \text{ mg/d}$$

Έξοδος:

$$\text{COD}_{out} = Q * \text{COD}_{OUT} / 1000 = 1.2523 \text{ mg/d}$$

$$\text{COD}_{\text{biomass}} = 0.027 * Q * \text{VSS} / 1000 * 1.33 = 2.77 \text{ mg/d}$$

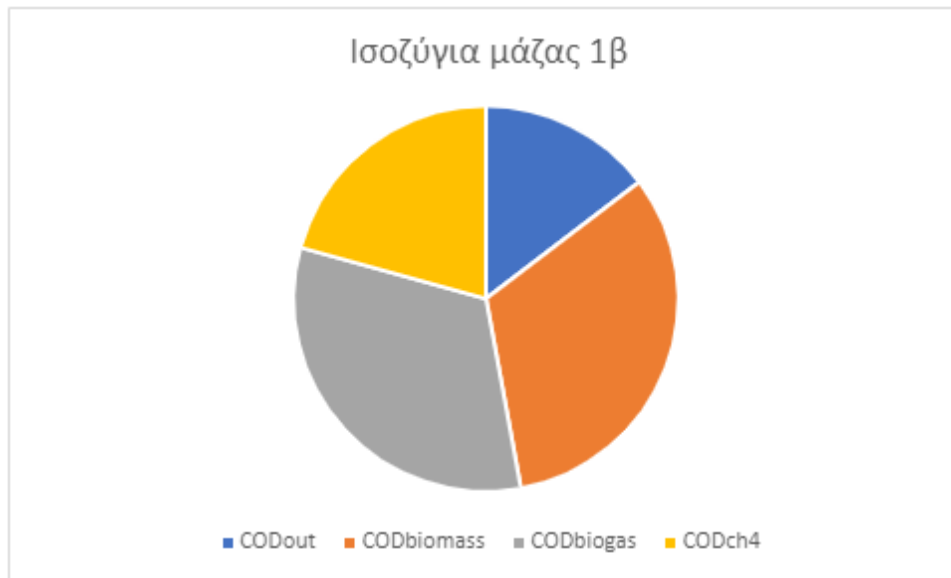
$$\text{COD}_{\text{biogas}} = q_{\text{gas}} * 0.7 / 0.37 = 2,75 \text{ mg/d}$$

$$\text{COD}_{\text{ch4}} = Q * \text{Sch4} / 1000 = 1,77 \text{ mg/d}$$

$$\text{Totalout} = \text{COD}_{\text{out}} + \text{COD}_{\text{biomass}} + \text{COD}_{\text{biogas}} + \text{COD}_{\text{ch4}} = 8,54 \text{ mg/d}$$

$$\text{Ποσοστό απωλειών} = \text{Totalout} / \text{COD}_{\text{in}} = 0,93$$

Για το σενάριο 1β παρατηρούμε απώλειες της τάξης του 7%



Διάγραμμα 4.8 : Ισοζύγιο μάζας για σενάριο 1β



- Σενάριο 2α

Είσοδος:

$$\text{CODin} = Q * \text{CODIN} / 1000 = 18,24 \text{ mg/d}$$

Έξοδος:

$$\text{CODout} = Q * \text{CODOUT} / 1000 = 3,69 \text{ mg/d}$$

$$\text{CODbiomass} = 0.027 * Q * \text{VSS} / 1000 * 1.33 = 5,56 \text{ mg/d}$$

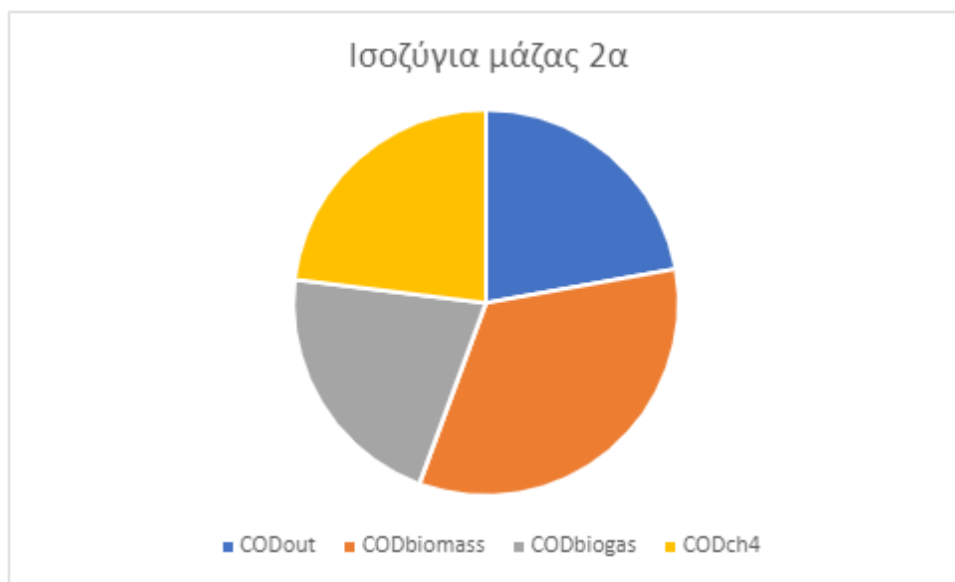
$$\text{CODbiogass} = q_{\text{gas}} * 0.7 / 0.37 = 3,54 \text{ mg/d}$$

$$\text{CODch4} = Q * \text{Sch4} / 1000 = 3,84 \text{ mg/d}$$

$$\text{Totalout} = \text{CODout} + \text{CODbiomass} + \text{CODbiogass} + \text{CODch4} = 16,63 \text{ mg/d}$$

$$\text{Ποσοστό απωλειών} = \text{Totalout} / \text{CODin} = 0,91$$

Για το σενάριο 2α παρατηρούμε απώλειες της τάξης του 9%



Διάγραμμα 4.9 : Ισοζύγιο μάζας για σενάριο 2α

- Σενάριο 2β

Είσοδος:

$$\text{CODin} = Q * \text{CODIN} / 1000 = 17.12 \text{ mg/d}$$

Έξοδος:

$$\text{CODout} = Q * \text{CODOUT} / 1000 = 2.62 \text{ mg/d}$$

$$\text{CODbiomass} = 0.027 * Q * \text{VSS} / 1000 * 1.33 = 5.31 \text{ mg/d}$$

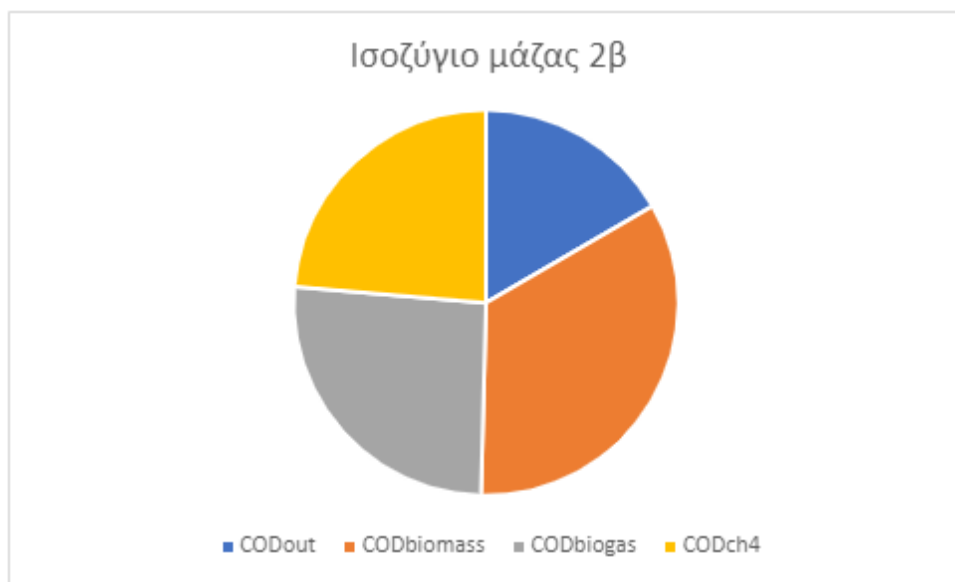
$$\text{CODbiogass} = q_{\text{gas}} * 0.7 / 0.37 = 4.08 \text{ mg/d}$$

$$\text{CODch4} = Q * \text{Sch4} / 1000 = 3.72 \text{ mg/d}$$

$$\text{Totalout} = \text{CODout} + \text{CODbiomass} + \text{CODbiogass} + \text{CODch4} = 15.73 \text{ mg/d}$$

$$\text{Ποσοστό απωλειών} = \text{Totalout} / \text{CODin} = 0,92$$

Για το σενάριο 2β παρατηρούμε απώλειες της τάξης του 8%



Διάγραμμα 4.10 : Ισοζύγιο μάζας για σενάριο 2β

- Σενάριο 3α

Είσοδος:

$$\text{CODin} = Q * \text{CODIN} / 1000 = 36.4 \text{ mg/d}$$

Έξοδος:

$$\text{CODout} = Q * \text{CODOUT} / 1000 = 9.18 \text{ mg/d}$$

$$\text{CODbiomass} = 0.027 * Q * \text{VSS} / 1000 * 1.33 = 11.63 \text{ mg/d}$$

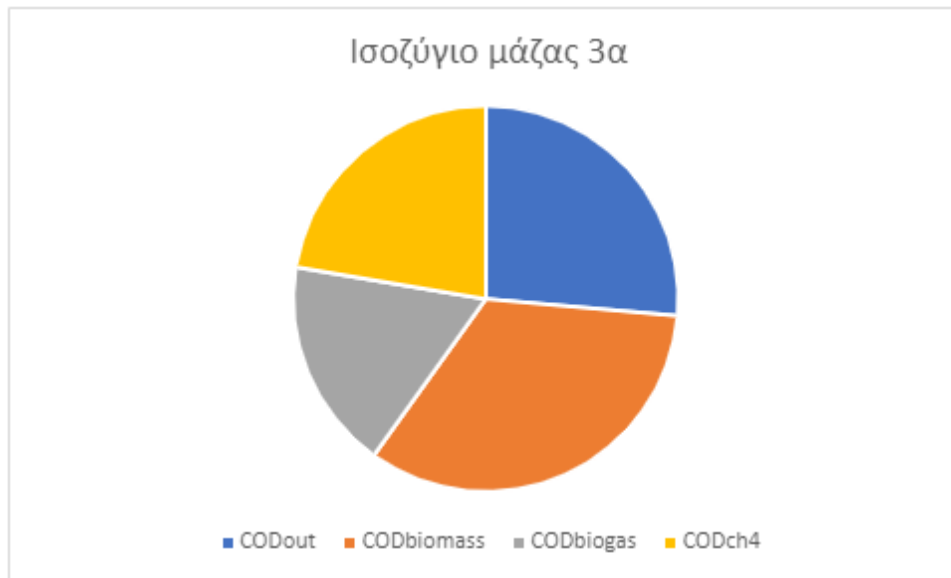
$$\text{CODbiogass} = q_{\text{gas}} * 0.7 / 0.37 = 6.16 \text{ mg/d}$$

$$\text{CODch4} = Q * \text{Sch4} / 1000 = 7.77 \text{ mg/d}$$

$$\text{Totalout} = \text{CODout} + \text{CODbiomass} + \text{CODbiogass} + \text{CODch4} = 34.73 \text{ mg/d}$$

$$\text{Ποσοστό απωλειών} = \text{Totalout} / \text{CODin} = 0,95$$

Για το σενάριο 3α παρατηρούμε απώλειες της τάξης του 5%



Διάγραμμα 4.11 : Ισοζύγιο μάζας για σενάριο 3α

- Σενάριο 3β

Είσοδος:

$$\text{CODin} = Q * \text{CODIN} / 1000 = 35.36 \text{ mg/d}$$

Έξοδος:

$$\text{CODout} = Q * \text{CODOUT} / 1000 = 6.31 \text{ mg/d}$$

$$\text{CODbiomass} = 0.027 * Q * \text{VSS} / 1000 * 1.33 = 11.63 \text{ mg/d}$$

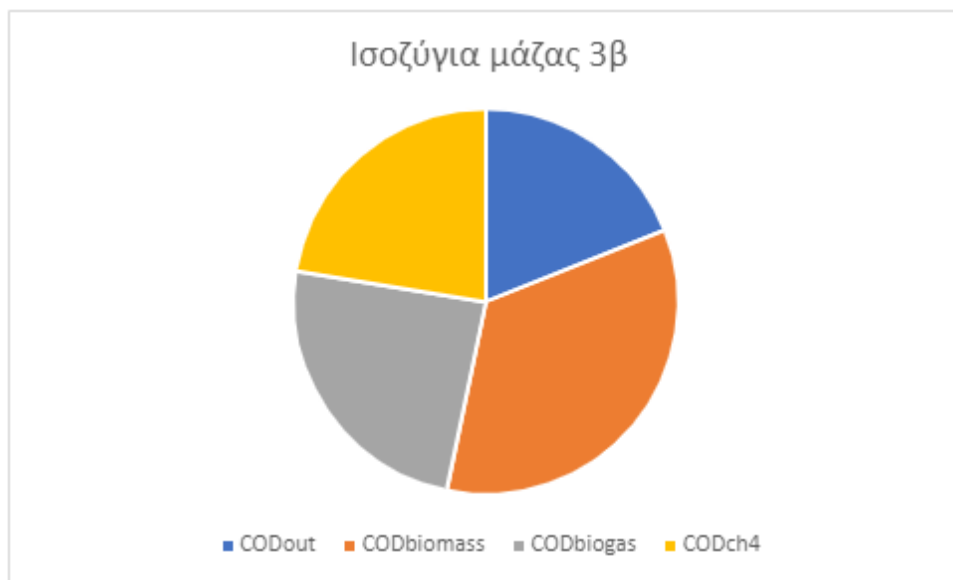
$$\text{CODbiogass} = q_{\text{gas}} * 0.7 / 0.37 = 11.44 \text{ mg/d}$$

$$\text{CODch4} = Q * \text{Sch4} / 1000 = 8.09 \text{ mg/d}$$

$$\text{Totalout} = \text{CODout} + \text{CODbiomass} + \text{CODbiogass} + \text{CODch4} = 33.32 \text{ mg/d}$$

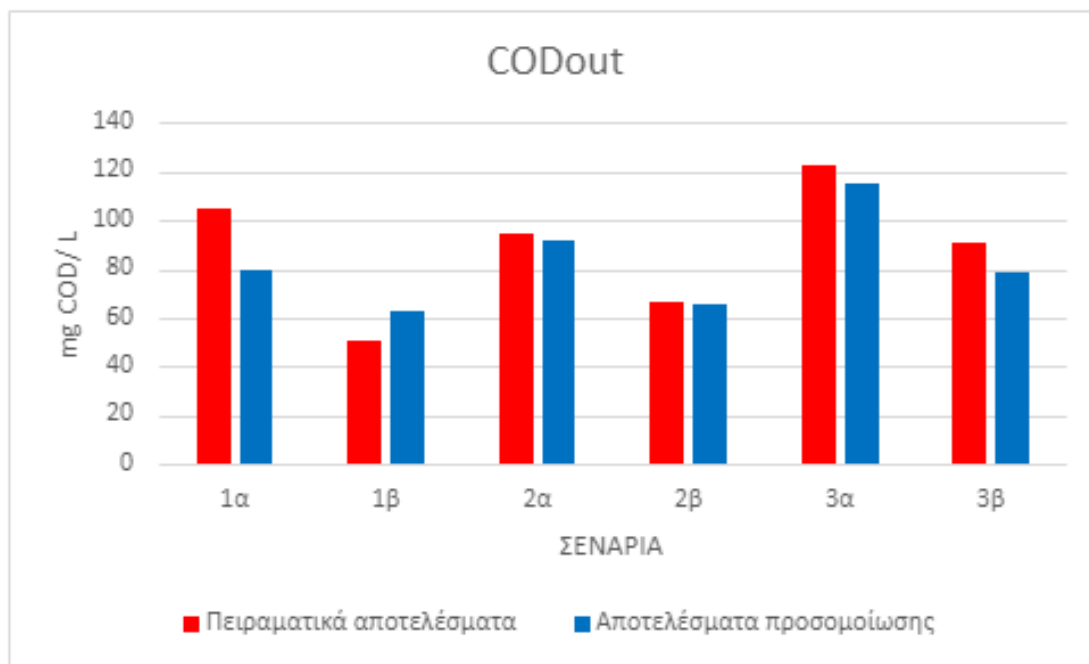
$$\text{Ποσοστό απωλειών} = \text{Totalout} / \text{CODin} = 0,94$$

Για το σενάριο 3β παρατηρούμε απώλειες της τάξης του 6%



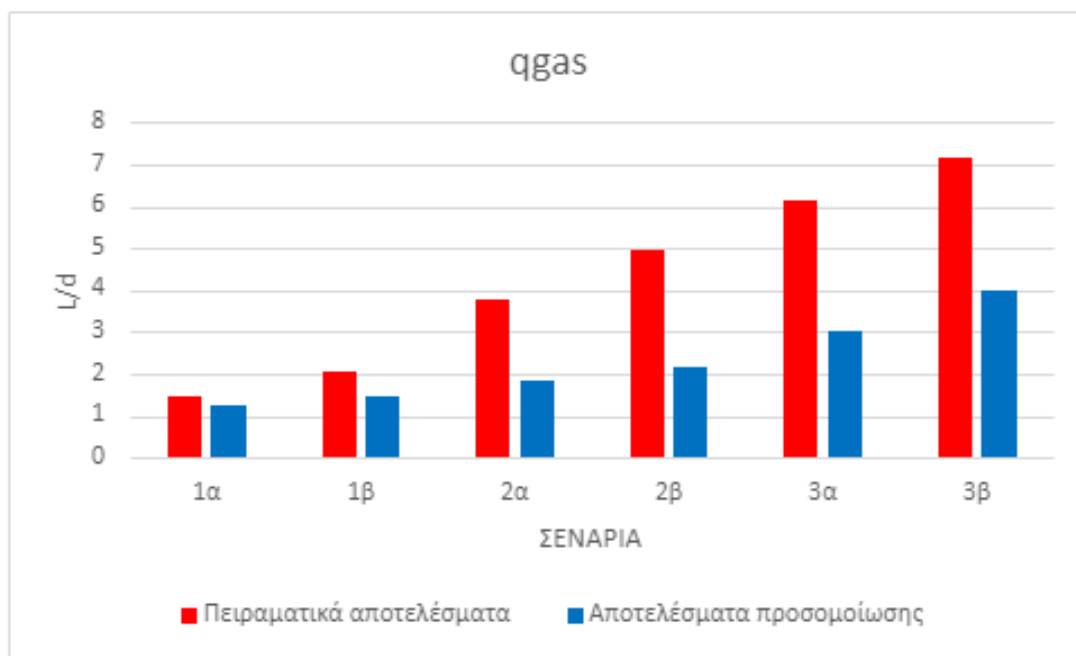
Διάγραμμα 4.12 : Ισοζύγιο μάζας για σενάριο 3β

Παραθέτουμε και μια σχηματική απεικόνιση της σχέσης πειραματικών αποτελεσμάτων και αποτελεσμάτων προσομοίωσης για όλα τα σενάρια



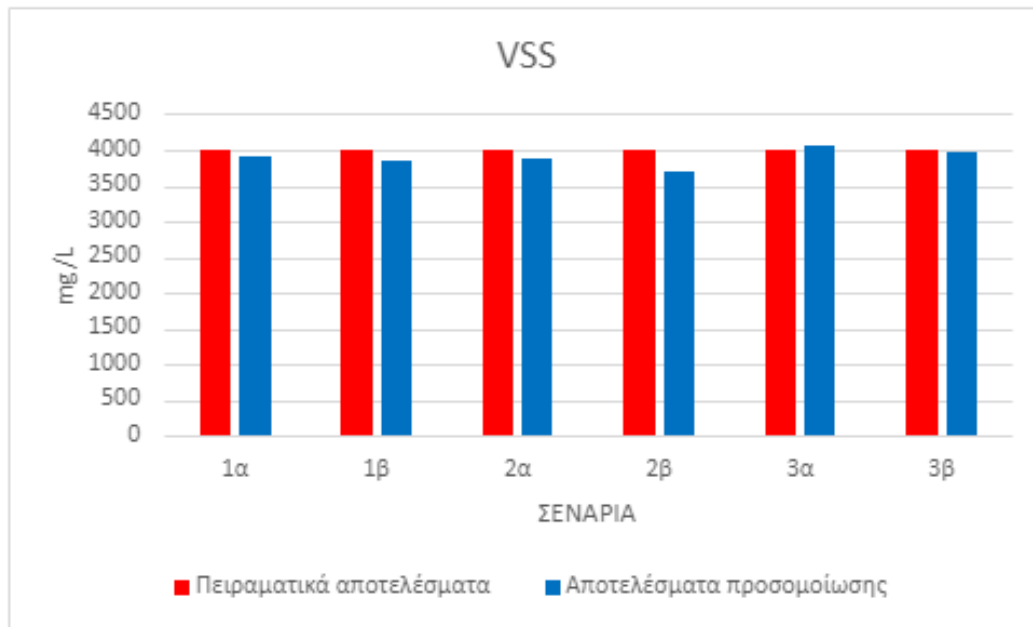
Διάγραμμα 4.13 : Σύγκριση πειραματικών αποτελεσμάτων και αποτελεσμάτων προσομοίωσης ως προς το CODout για όλα τα σενάρια

Για το CODout παρατηρούμε μια αρκετά καλή απόδοση του μοντέλου ως προς το πείραμα καθώς οι τιμές παρουσιάζουν πολύ μικρές αποκλίσεις κάτι που είναι αναμενόμενο γενικότερα όμως στα περισσότερα σενάρια οι τιμές είναι πάρα πολύ κοντά. Ο υπολογισμός του COD out στο μοντέλο υπολογίστηκε με το άθροισμα των τιμών SI , SS σε όρους ASM1.



Διάγραμμα 4.14 : Σύγκριση πειραματικών αποτελεσμάτων και αποτελεσμάτων προσομοίωσης ως προς το qgas για όλα τα σενάρια

Όσον αφορά το qgas συμπεραίνεται ότι τα αποτελέσματα της προσομοίωσης ακολουθούν το μοτίβο των πειραματικών αποτελεσμάτων καθώς η πτώση του HRT (2d, 1d, 0.5d) ακολουθείται από αύξηση της τιμής του βιοαερίου όπως και για τις θερμοκρασιακές μεταβολές το βιοαέριο ακολουθεί αυξητική τάση αποτελέσματα της καλοκαιρινής περιόδου σε σχέση με της χειμερινής του κάθε σεναρίου. Βέβαια η αύξηση του βιοαερίου στα αποτελέσματα της προσομοίωσης δεν ακολουθεί τα πειραματικές μετρήσεις έχουν σχετικά μεγάλη απόκλιση γεγονός που κατά πάσα πιθανότητα οφείλεται στην φύση του αρχικού μοντέλου BSM2 που δημιουργήθηκε για την επεξεργασία λάσπης και άρα για μεγαλύτερα HRT. Ταυτόχρονα παρατηρούμε μεγαλύτερη αφαίρεση βιομάζας στον κώδικα του μοντέλου γεγονός που επηρεάζει την τιμή του qgas όπως φαίνεται και στο διάγραμμα. Για το qgas είναι απαραίτητη η περαιτέρω διερεύνηση του μοντέλου.



Διάγραμμα 4.15 : Σύγκριση πειραματικών αποτελεσμάτων και αποτελεσμάτων προσομοίωσης ως προς τα VSS για όλα τα σενάρια

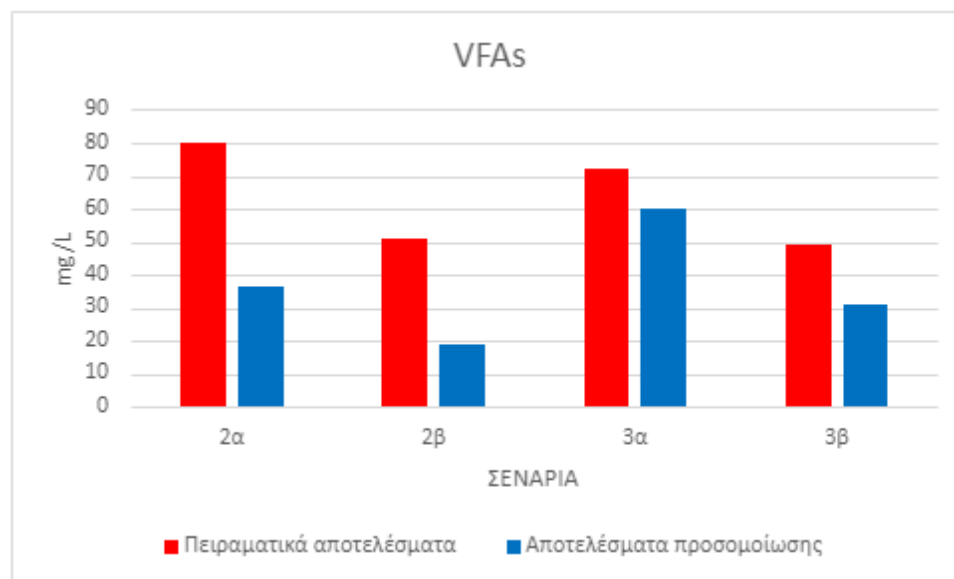
Και στα 6 σενάρια είναι φανερό υπάρχει πολύ καλή συσχέτιση αποτελεσμάτων μεταξύ πειράματος και προσομοίωσης για τις τιμές των VSS

Πίνακας 4.10 : Τιμές VFAs πειραμάτων προσομοίωσης

VFAs		
Σενάρια	Πείραμα	Προσομοίωση
2α	80±10	36.6
2β	51±6	19.1
3α	72±13	59.9
3β	49±8	31.0

Για την μελέτη των τιμών των VFAs εξαιρέσαμε το πρώτο σενάριο καθώς οι μετρήσεις του πειράματος έγιναν υπό συνθήκες Startup για το σύστημα και τα αποτελέσματα δεν ενδείκνυνται για σύγκριση.

Πίνακας 4.9 : Πίνακας δεδομένων και αποτελεσμάτων για την επίδραση του HRT



Διάγραμμα 4.16: Σχέση πειραματικών αποτελεσμάτων και αποτελεσμάτων προσομοίωσης

Υπάρχει αρκετά μεγάλη απόκλιση των τιμών σύγκλισης για τα VFA στην προσομοίωση σε σχέση με το πείραμα ειδικά στο σενάριο 2 και λίγο λιγότερο στο σενάριο 3 γεγονός πού συνδέεται και με την μικρότερη παραγωγή βιοαερίου στα αντίστοιχα σενάρια καθώς μέσω της οξικτροφικής μεθανογένεσης τα VFAs μετατρέπονται στα συστατικά του βιοαερίου.

## 4.5. Διερεύνηση της επίδρασης λειτουργικών παραμέτρων σε ένα σύστημα AnMBR

### ➤ Επίδραση HRT

Για την διερεύνηση της επίδρασης του HRT στο συγκεκριμένο μοντέλο που δημιουργήσαμε επιλέξαμε να δούμε την απόκριση του σε 5 διαφορετικές περιπτώσεις. Καταλήξαμε σε δοκιμές 5 διαφορετικών σεναρίων για HRT από 1 έως 5 με  $COD_{in}=477 \text{ mg/l}$  και θερμοκρασία  $T_{op}=20^{\circ}\text{C}$

Πίνακας 4.11 : Πίνακας δεδομένων και αποτελεσμάτων για την επίδραση του HRT

HRT (d)	SRT (d)	COD IN (mg/l)	T-op (c)	Vliq (L)	Q (L/D)	ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΛΑΣΠΗΣ (αδιαστατο)	COD OUT (mg/L)	QGAS (L/D)	VSS (mg/l)	SNH (mg/l)	PH
1	50	477	20	40	40	0.02	86.216	2.397	5396	115.08	6.92
2	50	477	20	40	20	0.04	86.215	1.201	2698	92.104	6.92
3	50	477	20	40	13.3	0.06	86.214	0.802	1799	84.445	6.92
4	50	477	20	40	10	0.08	86.214	0.601	1349	80.615	6.92
5	50	477	20	40	8	0.1	86.214	0.481	1079	78.318	6.92

Η σχέση που συνδέει τον χρόνο παραμονής των στερεών SRT, τον υδραυλικό χρόνο παραμονής HRT, την παροχή Q τον όγκο V και το ποσοστό αφαίρεσης λάσπης είναι η εξής:

Σύμφωνα με τις εξισώσεις 3.4.2 έως 3.4.4 καταλήγουμε:

Αφαίρεση λάσπης=HRT/SRT

$HRT=V/Q$

Ο υπολογισμός του COD out στο μοντέλο υπολογίστηκε με το άθροισμα των τιμών SI , SS σε όρους ASM1.

Το  $q_{gas}$  υπολογίζεται από τον κώδικα με βάση την εξίσωση :  $q_{gas} = k_P \cdot (P_{gas} - P_{atm})$

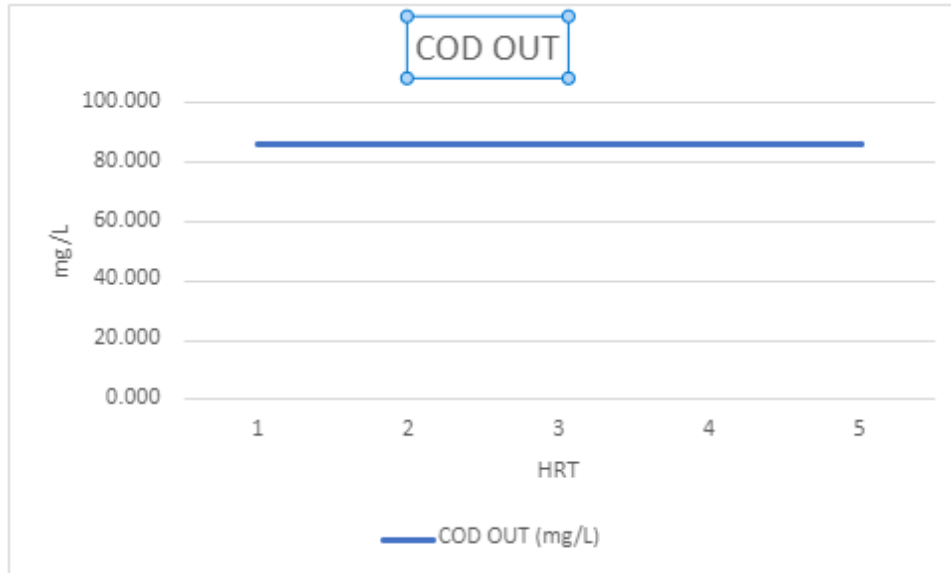
Το μοντέλο υπολογίζει VSS ως εξής :  $VSS = 0.75 \cdot (XI + XS + XBH + XBA + XP)$ ;

Στο παραπάνω υποθετικό σενάριο σύμφωνα με τον πίνακα αποτελεσμάτων, με την αύξηση του HRT παρατηρείται μια σταθερότητα στις τιμές του pH και του CODout. Όσον αφορά το CODout είναι λογική η ανεπαίσθητη η διακύμανση των αποτελεσμάτων καθώς οι αναερόβιες διεργασίες επηρεάζονται περισσότερο από το SRT που στην προκειμένη περίπτωση είναι σταθερό. Μεγάλες γραμμικές αλλαγές παρατηρούνται στα αποτελέσματα των  $q_{gas}$  και VSS καθώς εμφανίζουν μια αντιστρόφως ανάλογη πορεία σε σχέση με το HRT. Με την αύξηση του HRT προκαλείται μείωση των τιμών του βιοαερίου και των VSS καθώς πτωτική πορεία εμφανίζει και

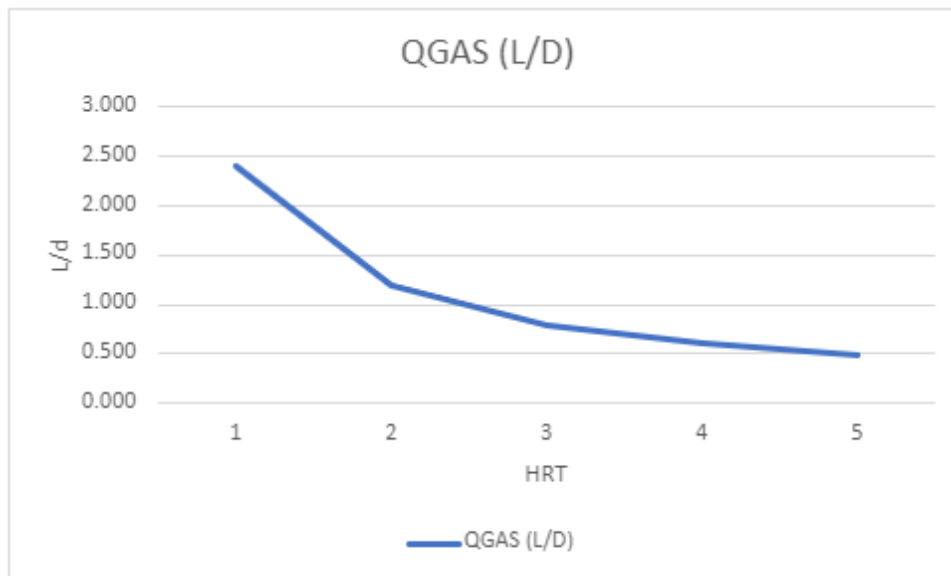


το αμμωνιακό άζωτο. Τα αποτελέσματα αυτά για το βιοαέριο επιβεβαιώνονται και στα σενάρια προσομοίωσης.

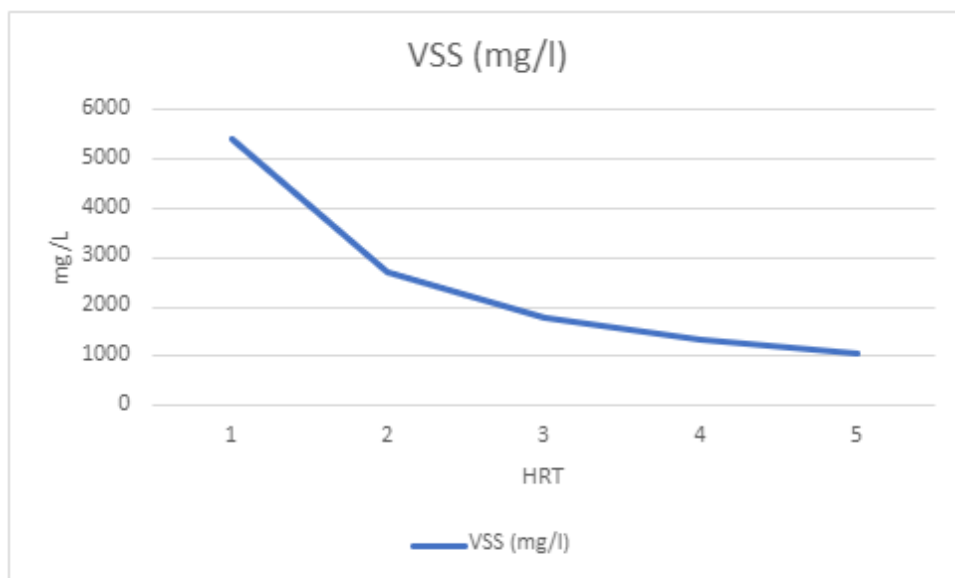
Ακολουθεί διαγραμματική απεικόνιση της επίδρασης του HRT:



Διάγραμμα 4.17: Επίδραση HRT στο CODout



Διάγραμμα 4.18: Επίδραση HRT στο qgas



Διάγραμμα 4.19: Επίδραση HRT στα VSS

### ➤ Επίδραση SRT

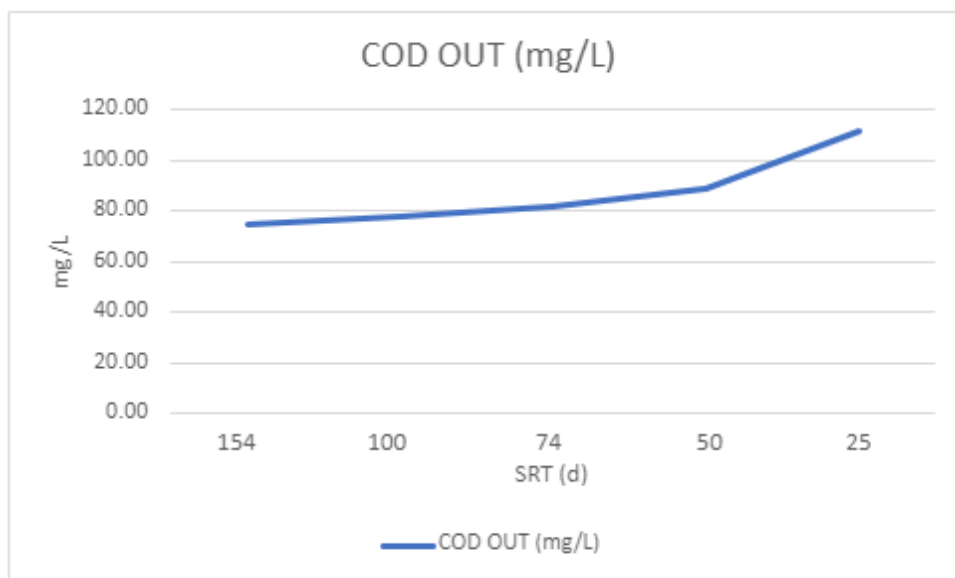
Προκειμένου να μελετήσουμε την επίδραση του SRT επιλέξαμε ένα υποθετικό σενάριο όπου το SRT κυμαίνεται μεταξύ 25d και 150d με  $COD_{in}=500$  θερμοκρασία  $T_{op}=20^{\circ}C$  και  $HRT=2d$

Πίνακας 4.12 : Πίνακας δεδομένων και αποτελεσμάτων για την επίδραση του SRT

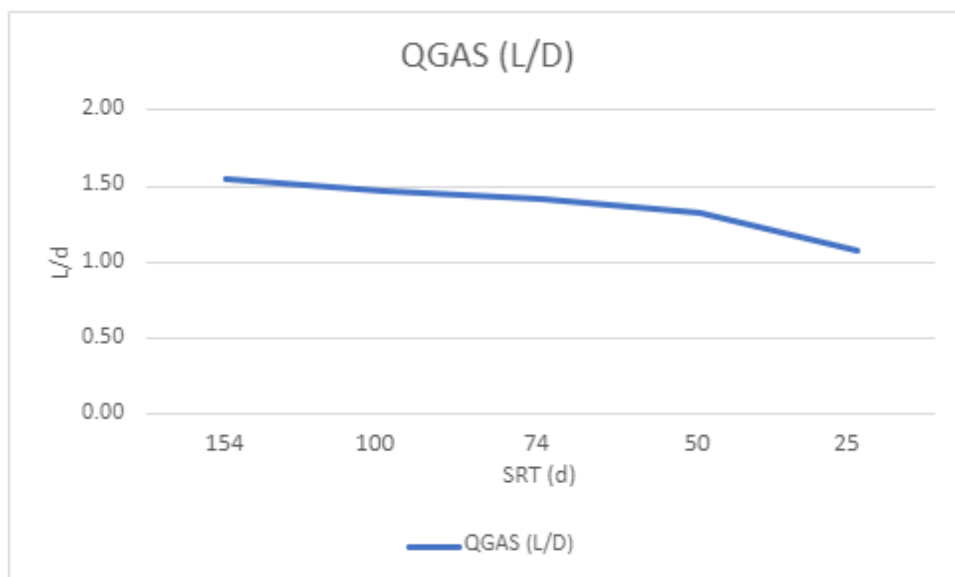
HRT (d)	SRT (d)	COD IN (mg/l)	T-op (c)	Vliq (L)	Q (L/D)	ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΛΑΣΠΗΣ (αδιαστατο)	COD OUT (mg/L)	QGAS (L/D)	VSS (mg/l)	SNH (mg/l)	PH
2	154	500	20	40	20	0.013	74.538	1.542	8240	108.837	6.82
2	100	500	20	40	20	0.02	78.050	1.476	5427	103.257	6.83
2	74	500	20	40	20	0.027	81.679	1.418	4080	98.944	6.84
2	50	500	20	40	20	0.04	88.674	1.323	2827	93.080	6.85
2	25	500	20	40	20	0.08	111.88	1.080	1471	83.383	6.88

Ερμηνεύοντας τον πιο πάνω πίνακα για την επίδραση του SRT φαίνεται μια σταθερότητα στο pH και εν τέλει αλλαγές στα υπόλοιπα αποτελέσματα. Πιο συγκεκριμένα με την μείωση του SRT έχουμε αυξητική τάση στα  $COD_{out}$  και πτωτική τάση στο βιοαέριο τα VSS και το αμμωνιακό άζωτο. Μεγάλοι χρόνοι SRT ευνοούν τις αναερόβιες διεργασίες και είναι λογικό και αναμενόμενο ,σε μεγαλύτερους SRT να έχουμε περισσότερη παραγωγή βιοαερίου και άρα πτώση των τιμών  $COD_{out}$ .

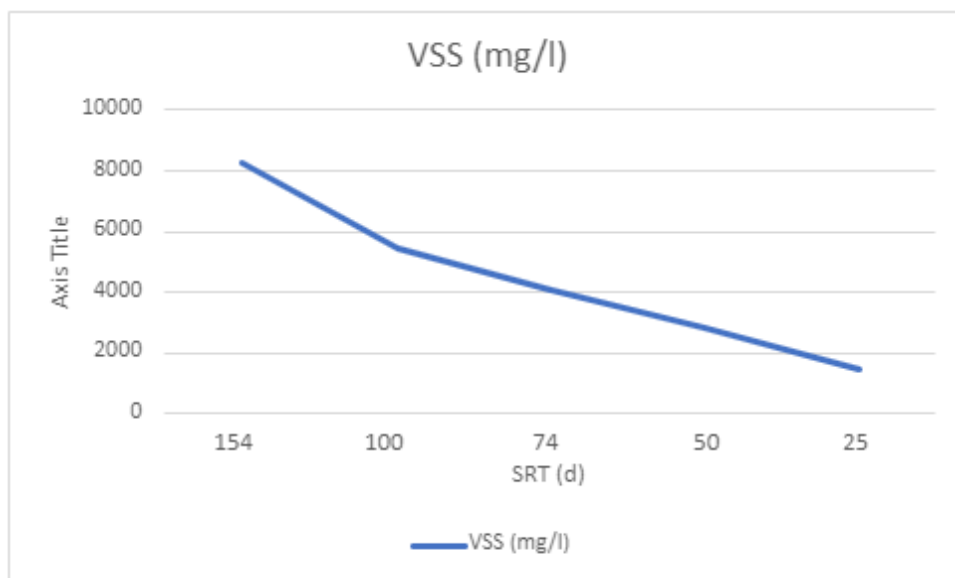
Ακολουθεί διαγραμματική απεικόνιση της επίδρασης του SRT:



Διάγραμμα 4.20: Επίδραση SRT στο CODout



Διάγραμμα 4.21: Επίδραση SRT στο qgas



Διάγραμμα 4.22: Επίδραση SRT στα VSS

### ➤ Επίδραση CODin

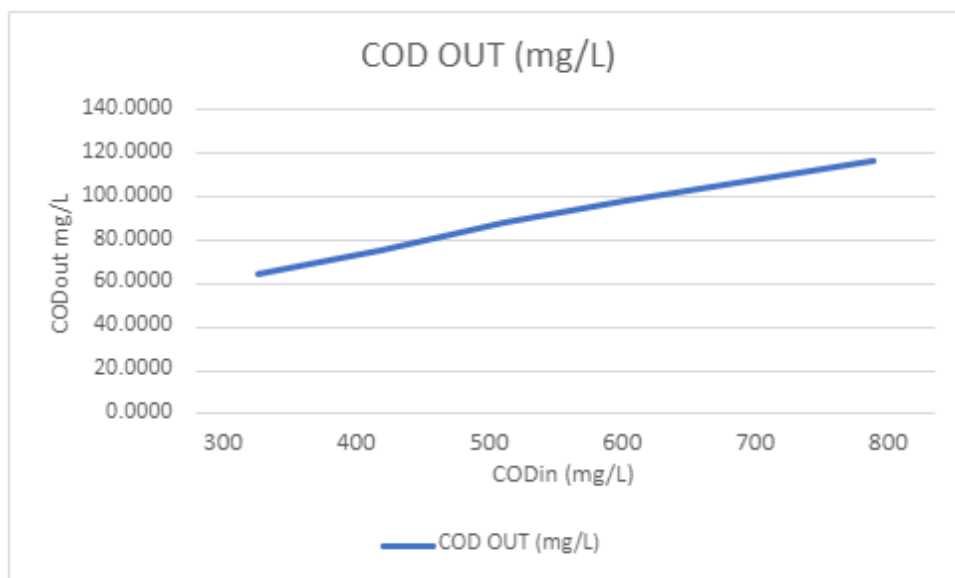
Για να μελετήσουμε το μοντέλο σε σχέση με την οργανική ύλη που εισέρχεται στο σύστημα επιλέξαμε ένα εύρος τιμών για το CODin μεταξύ 300-800 mg/l με SRT=50d και HRT=2d

Πίνακας 4.13 : Πίνακας δεδομένων και αποτελεσμάτων για την επίδραση του CODin

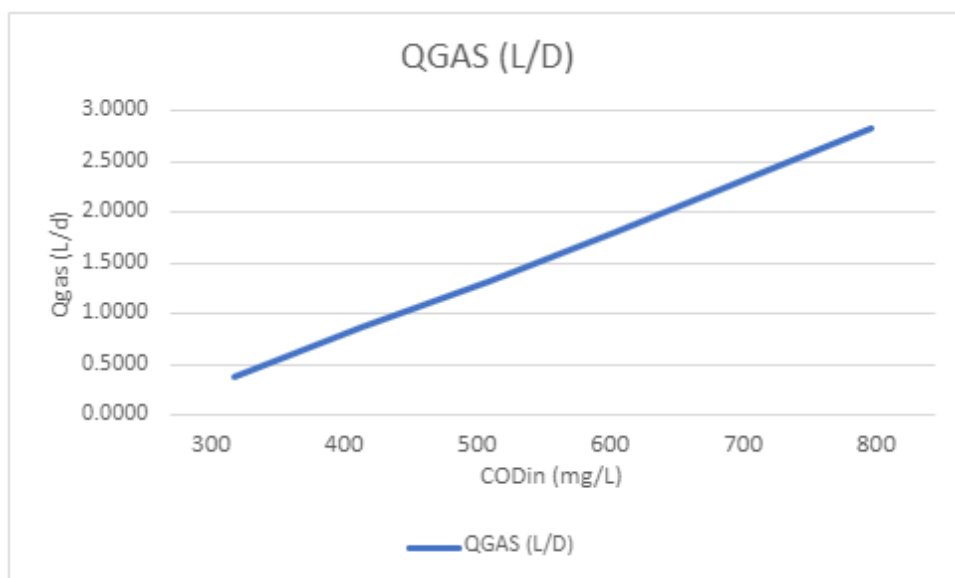
HRT (d)	SRT (d)	COD IN (mg/l)	T-op (c)	Vliq (L)	Q (L/D)	ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΛΑΣΠΗΣ (αδιαστατο)	COD OUT (mg/L)	QGAS (L/D)	VSS (mg/l)	SNH (mg/l)	PH
2	50	300	20	40	20	0.04	64.354	0.389	1690	83.825	6.95
2	50	400	20	40	20	0.04	75.687	0.865	2265	88.728	6.85
2	50	500	20	40	20	0.04	88.674	1.323	2827	93.080	6.85
2	50	600	20	40	20	0.04	98.098	1.821	3387	97.356	6.83
2	50	700	20	40	20	0.04	107.482	2.321	3947	101.63	6.81
2	50	800	20	40	20	0.04	116.831	2.823	4507	105.91	6.79

Με την σταδιακή αύξηση της οργανικής ύλης εισόδου παρατηρείται σταδιακή αύξηση σε όλα τα αποτελέσματα του μοντέλου εκτός του pH. Η εξέλιξη αυτή είναι αναμενόμενη καθώς διατίθενται κάθε φορά αυξανόμενοι πόροι για τις αναερόβιες διεργασίες με τις υπόλοιπες συνθήκες να είναι σταθερές. Επομένως θα υπάρξει μεγαλύτερη απόδοση των τιμών των αποτελεσμάτων που περιγράφονται σε όρους COD.

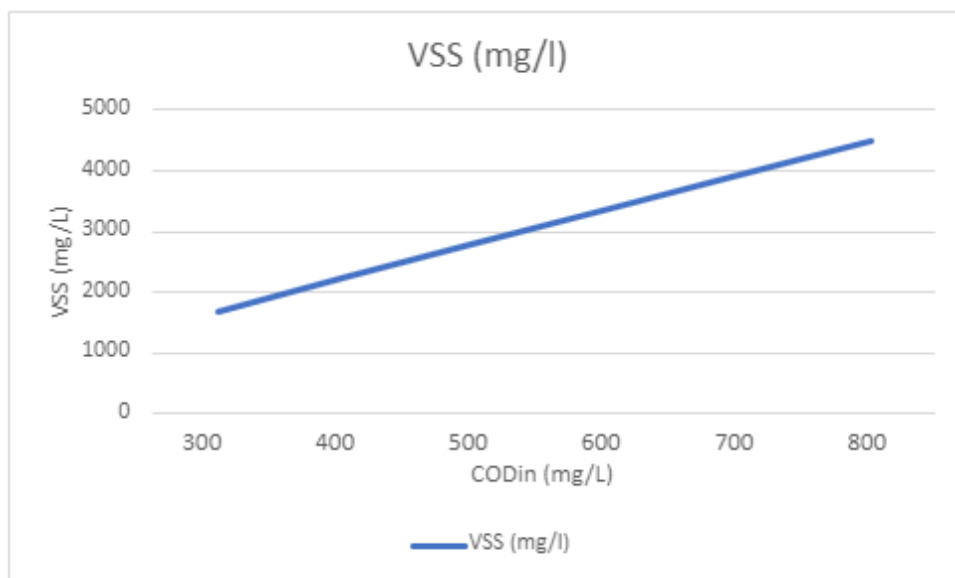
Ακολουθεί διαγραμματική απεικόνιση της επίδρασης του CODin:



Διάγραμμα 4.23: Επίδραση COD<sub>in</sub> στο COD<sub>out</sub>



Διάγραμμα 4.24: Επίδραση COD<sub>in</sub> στο qgas



Διάγραμμα 4.25: Επίδραση CODin στα VSS

#### ➤ Επίδραση σύστασης CODin

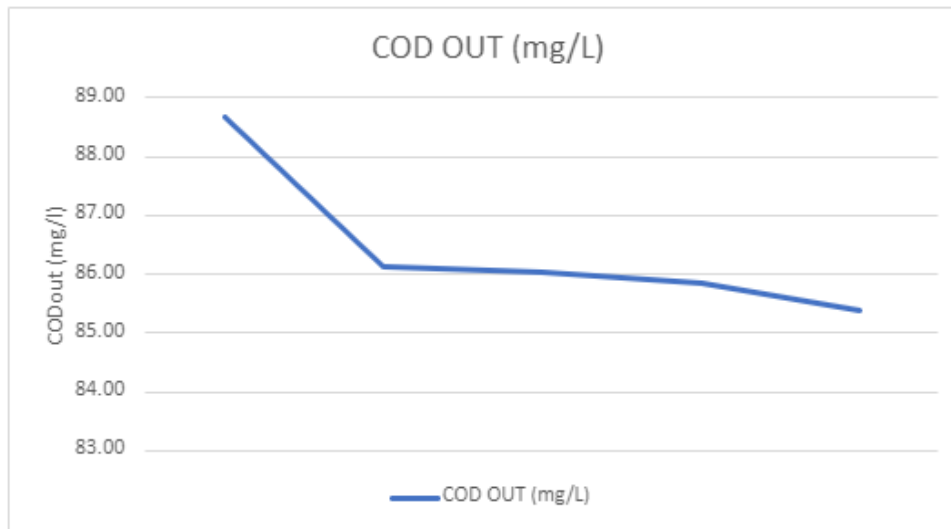
Τέλος για την αναλυτικότερη διερεύνηση του CODin ελέγξαμε ένα υποθετικό σενάριο όπου για σταθερή τιμή εισόδου CODin=500 mg/l μετατρέπαμε τα ποσοστά της αρχικής κλασματοποίησης της οργανικής ύλης σε όρους ASM. Πιο συγκεκριμένα, στην αρχική κλασματοποίηση που πραγματοποιούσαμε και στα πειραματικά σενάρια υποθέσαμε SS=15% του CODin και XS=50% του CODin. Σε αυτό σενάριο διερεύνησης αλλάξαμε αυτά τα ποσοστά κατά 10% κάθε φορά υπέρ των SS και εις βάρος των XS για 5 διαφορετικές προσομοιώσεις

Πίνακας 4.14: Πίνακας δεδομένων και αποτελεσμάτων για την επίδραση της σύστασης του CODin

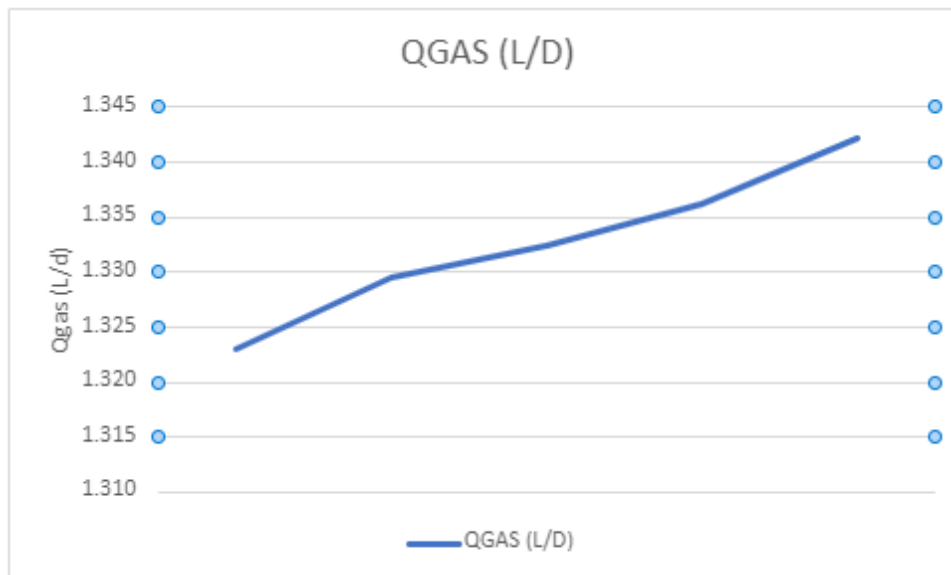
HRT (d)	SRT (d)	COD IN (mg/l)	T-op (c)	Vliq (L)	Q (L/D)	ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΛΑΣΠΗΣ (αδιαστατο)	COD OUT (mg/L)	QGAS (L/D)	VSS (mg/l)	SNH (mg/l)	PH	SS %	XS %
2	50	500	20	40	20	0.04	88.674	1.323	2827	93.1	6.85	15	50
2	50	500	20	40	20	0.04	86.126	1.329	2841	93.8	6.91	25	40
2	50	500	20	40	20	0.04	86.050	1.332	2842	93.9	6.91	35	30
2	50	500	20	40	20	0.04	85.862	1.336	2843	94.0	6.91	45	20
2	50	500	20	40	20	0.04	85.383	1.342	2844	94.1	6.92	55	10

Σε αυτή την περίπτωση δεν παρατηρούνται μεγάλες διακυμάνσεις των αποτελεσμάτων. Μια μικρή μείωση του COD σε συνδυασμό με μια μικρή αύξηση των τιμών του βιοαερίου των VSS και των νιτρικών. Θα μπορούσαμε πάντως να πούμε ότι οι αλλαγές στην σύσταση του CODin δεν έχουν ιδιαίτερο αντίκτυπο στα αποτελέσματα του μοντέλου.

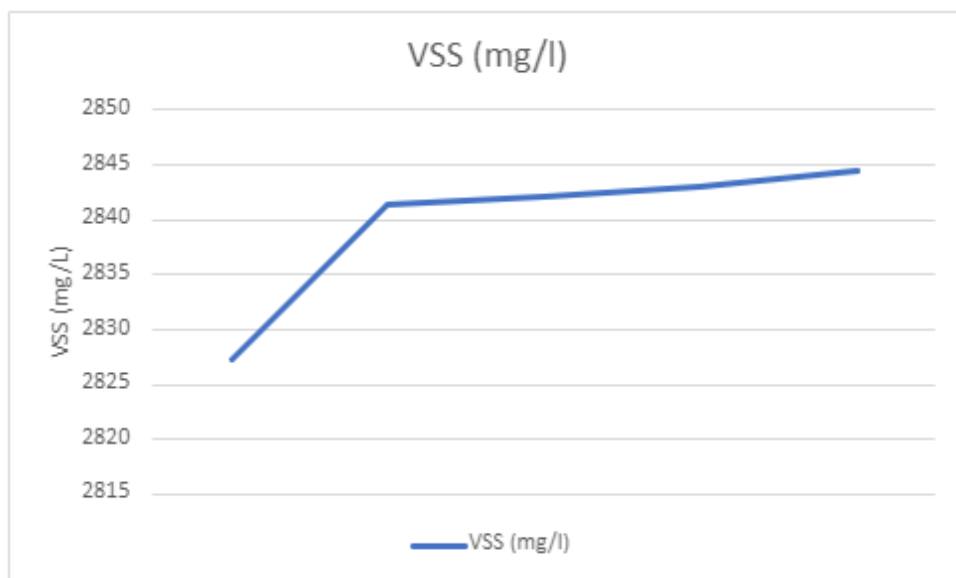
Ακολουθεί διαγραμματική απεικόνιση της επίδρασης της σύστασης του CODin:



Διάγραμμα 4.26: Επίδραση της σύστασης CODin στο CODout



Διάγραμμα 4.27: Επίδραση της σύστασης CODin στο qgas



Διάγραμμα 4.28: Επίδραση της σύστασης CODin στα VSS



## ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5 Συμπεράσματα

Στόχος της παρούσας διπλωματικής εργασίας ήταν η προσαρμογή ενός κώδικα αναερόβιας χώνευσης σε σύστημα αναερόβιας επεξεργασίας λυμάτων με χρήση ενός αναερόβιου αντιδραστήρα μεμβρανών (AnMBR). Η κύρια επιδίωξη είναι η δημιουργία μιας βάσης για την περαιτέρω ανάπτυξη και διερεύνησή στο μέλλον. Η προσπάθεια αυτή στηρίχτηκε στα πειραματικά αποτελέσματα προηγούμενων εργασιών που έχουν πραγματοποιηθεί στο Εργαστήριο Υγειονομικής Τεχνολογίας στο πλαίσιο της διδακτορικής διατριβής της κ. Αργυρώ Πλεύρη. Με τον τρόπο αυτό έγινε η αρχική προσαρμογή του μοντέλου στα κατάλληλα δεδομένα και με τις αντίστοιχες αλλαγές σε κάποιες διεργασίες. Για τον προσδιορισμό των κατάλληλων παραμέτρων για τις οποίες το μοντέλο είναι ευαίσθητο όσον αφορά τα τελικά αποτελέσματα που παρακολουθούσαμε κρίθηκε απαραίτητο και χρήσιμο ο έλεγχος τους μέσω της διαδικασίας της ανάλυσης ευαισθησίας του μοντέλου με την μέθοδο “Once at a time” . Στη συνέχεια και με βάση το πειραματικό σενάριο 1α έγινε η βασική ρύθμιση του μοντέλου με την προσαρμογή των τιμών κάποιων παραμέτρων σε συνθήκες χειμερινών και καλοκαιρινών θερμοκρασιών για την κατά το δυνατόν αποδοτικότερη λειτουργία της προσομοίωσης. Έχοντας επιτύχει μια καλή ρύθμιση στο αρχικό σενάριο το επόμενο βήμα ήταν ο έλεγχος και η επαλήθευση του μοντέλου στα υπόλοιπα 5 σενάρια με τη χρήση δηλαδή των ίδιων παραμέτρων για τις αντίστοιχες θερμοκρασίες ελέγξαμε την λειτουργία του συστήματος και την απόκριση του στα υπόλοιπα δεδομένα και αποτελέσματα. Τέλος και με την ολοκλήρωση της επαλήθευσης του μοντέλου διερευνήθηκε η επίδραση τεσσάρων λειτουργικών παραμέτρων (HRT, SRT, COD<sub>in</sub>, σύσταση COD<sub>in</sub>) με τη χρήση υποθετικών σεναρίων σε κάθε μια από τις επιμέρους περιπτώσεις διερεύνησης.

Από την ανωτέρω διερεύνηση προέκυψαν μία σειρά από συμπεράσματα τα οποία συνοψίζονται στα ακόλουθα:

- Προκειμένου να επιτευχθεί ικανοποιητική σύγκλιση μεταξύ πειραματικών και υπολογιστικών αποτελεσμάτων επιλέχθηκαν τιμές κινητικών παραμέτρων αρκετά υψηλότερες από τις προτεινόμενες για συστήματα αναερόβιας χώνευσης ιλύος.
- Γενικότερα το μοντέλο μας αποδείχθηκε μερικώς ευαίσθητο σύμφωνα με τις παραμέτρους που προέκυψαν ως σημαντικές και σύμφωνα με την διακύμανση ως προς αυτές στα τελικά αποτελέσματα.
- Για το COD<sub>out</sub> οι παράμετροι που προέκυψαν ως σημαντικές για την ευαισθησία των αποτελεσμάτων ήταν, με σειρά προτεραιότητας, οι  $k_m$ ,  $Y_{ac}$ ,  $k_{c4}$ ,  $Y_{c4}$ ,  $Ks_{ac}$ ,  $Ks_{c4}$ ,  $Y_{pro}$ . Σύμφωνα με τα στοιχεία που προέκυψαν παρατηρούμε τον βασικό ρόλο των VFAs ως προς την ευαισθησία του συστήματος, με σημαντικότερο τον ρόλο του οξικού οξέος που αποτελεί το μεγαλύτερο σε ποσοστό στοιχείο των VFAs. Η κομβική σημασία του οξικού οξέος αναδεικνύεται από το γεγονός ότι και οι 3 παράμετροι που το

αφορούν χαρακτηρίζονται ως σημαντικές για την ευαισθησία του συστήματος. Η παράμετρος  $k_m_{ac}$  εκφράζει τον ειδικό ρυθμό κατανάλωσης του οξικού οξέος και φαίνεται ότι είναι η παράμετρος με τη μεγαλύτερη ευαισθησία λόγω της μεγάλης συγκέντρωσης οξικού όπως προαναφέραμε. Το  $Y$  αφορά στο ποσοστό του COD που χρησιμοποιείται για σύνθεση και επομένως η μεταβολή του επηρεάζει το COD<sub>out</sub> ειδικά όσο αφορά στη δίαιτα του οξικού οξέος. Ως ευαίσθητες επίσης χαρακτηρίστηκαν οι μεταβλητές που αφορούν στο βουτυρικό και βαλερικό οξύ ( $c_4$ ) τα οποία επίσης αποτελούν στοιχεία των VFAs.

- Για το  $q_{gas}$  από την ανάλυση ευαισθησίας ως σημαντικές παράμετροι προέκυψαν οι  $k_m_{ac}$ ,  $k_m_{c_4}$ ,  $Y_{ac}$ ,  $k_s_{ac}$ . Οι παράμετροι αυτές περιέχονται και στα αποτελέσματα του COD<sub>out</sub> και επιβεβαιώνεται διπλά η μεγάλη σημασία του οξικού οξέος και ειδικά όσον αφορά το βιοαέριο καθώς μέσω των οξικοτροφικών μικροοργανισμών έχουμε παραγωγή μεθανίου  $CH_4$  και διοξειδίου του άνθρακα  $CO_2$  τα οποία συνθέτουν το βιοαέριο σε αναλογία 70-30% αντίστοιχα. Σημαντική μεταβλητή αποτελεί και ο ειδικός ρυθμός κατανάλωσης βουτυρικού-βαλερικού οξέος από τα οποία επίσης προκύπτει οξικοτροφική παράγωγη αερίων σε μικρότερο βέβαια ποσοστό από το οξικό. Στο σημείο αυτό έγινε και μια διερεύνηση σχετικά με τα VFAs που μετρήθηκαν στο πείραμα και στα αποτελέσματα του μοντέλου και παρατηρήθηκε αρκετά μεγάλη απόκλιση στις τιμές τους. Οι τιμές του μοντέλου είναι μικρότερες του πειράματος γεγονός που συνδέεται με την αντίστοιχη μικρότερη απόδοση του βιοαερίου στο μοντέλο σε σχέση με το πείραμα.
- Για τα συνολικά έξι σενάρια που είχαμε στη διάθεσή μας, όσον αφορά το COD<sub>out</sub> τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων έδωσαν πολύ καλά αποτελέσματα πολύ κοντά στα αποτελέσματα των πειραματικών δεδομένων ειδικά στο σενάριο 2 έχουμε ελάχιστες αποκλίσεις μεταξύ τους.
- Τα αποτελέσματα του  $q_{gas}$  στις προσομοιώσεις ακολουθούν το μοτίβο των πειραμάτων καθώς με την μείωση του HRT παρατηρείται αύξηση του  $q_{gas}$  σε κάθε σενάριο. Βέβαια θα πρέπει να σημειωθεί ότι ενώ στον σενάριο 1 έχουμε μικρές αποκλίσεις των προσομοιώσεων, στο σενάριο 2 και ακόμα περισσότερο στο σενάριο 3 οι αποκλίσεις μεταξύ πειραματικών και υπολογιστικών τιμών είναι σημαντικές. Αυτή η απόκλιση πολύ πιθανό να οφείλεται αφενός στο γεγονός ότι ο αρχικός κώδικα BSM2 δημιουργήθηκε για την επεξεργασία ιλύος και άρα για μεγαλύτερους υδραυλικούς χρόνους και αφετέρου στην διαφορά των τιμών του χρόνου παραμονής στερεών μεταξύ πειραμάτων και μαθηματικής προσομοίωσης.
- Τα VSS σε όλα τα σενάρια είναι πολύ κοντά στα πειραματικά αποτελέσματα και φαίνεται ικανοποιητική η λειτουργία της προσομοίωσης σε αυτό το κομμάτι.
- Αξίζει επίσης να σημειωθεί ότι ελέγχοντας τα ισοζύγια μάζας για κάθε προσομοιούμενο σενάριο καταγράφηκαν απώλειες της τάξης του 5-9% που είναι μια ένδειξη καλής απόκρισης των προσομοιώσεων και λειτουργίας του μοντέλου.

- Η επίδραση του HRT είναι ορατή στα αποτελέσματα του βιοαερίου και των VSS και των νιτρικών. Με την αύξηση του υδραυλικού χρόνου παραμονής προκαλείται η μείωση των 2 αυτών τιμών. Μικροδιακυμάνσεις παρατηρούνται στο pH και στο CODout χωρίς να είναι άξιες αναφοράς.
- Η μείωση του SRT οδηγεί σε η αύξηση του CODout και μείωση του παραγόμενου βιοαερίου με το pH να διατηρείται σε σταθερά επίπεδα. Οι συσχετίσεις αυτές είναι αναμενόμενες καθώς για μεγάλα SRT έχουμε μεγαλύτερη παραγωγή βιοαερίου, συσσώρευση των VSS και άρα χρήση μεγαλύτερου ποσοστού COD για τις αναερόβιες διεργασίες.
- Η επίδραση του CODin έχει αναμενόμενα αποτελέσματα με την επακόλουθη αύξηση των τιμών όλων των αποτελεσμάτων καθώς έχοντας σταθερές τις λειτουργικές παραμέτρους του συστήματος εκτός από την οργανική ύλη εισόδου (CODin) η οποία σε κάθε δοκιμή αυξανόταν είναι λογικό και τα αποτελέσματα που εκφράζονται σε όρους COD να αυξάνονται σε κάθε δοκιμή.
- Τα αποτελέσματα των δοκιμών με αλλαγές στη σύσταση του CODin ως προς τον καταμερισμό των SS και XS (σταδιακή αύξηση ποσοστού SS με αντίστοιχη μείωση XS) συνοδεύτηκε με μια μικρή μείωση του CODout και μικρή αύξηση του qgas.

## Βιβλιογραφία

- Abuabdou Salahaldin M.A., Ahmad Waseem, Ng Choon Aun, Bashir Mohammed J.K., (2020), *A review of anaerobic membrane bioreactors (AnMBR) for the treatment of highly contaminated landfill leachate and biogas production: Effectiveness, limitations and future perspectives*, *Journal of Cleaner Production* 255: 120215
- Alex J., L. Benedetti, J. Copp, K.V. Gernaey, U. Jeppsson, I. Nopens, M.N. Pons, C. Rosen, J.P. Steyer and P. Vanrolleghem *Benchmark Simulation Model no. 2 (BSM2)*
- Alibardi Luca , Bernava Nicoletta , Cossu Raffaello, Spagni Alessandro, (2016), *Anaerobic dynamic membrane bioreactor for wastewater treatment at ambient temperature*, *Chemical Engineering Journal* 284: 130–138
- Anderson, K., Sallis, P. & Uyanik, S. (2003). *Anaerobic treatment processes*. In "Handbook of Water and Wastewater Microbiology" (D.M.N. Horan, ed.). Academic Press, Elsevier.
- Andrews, J.F. (1969). *Dynamic model of the anaerobic digestion process*. *J. Sanit. Engng. Div. Am. Soc. Civ. Engrs., SA 1: 95-116*.
- Andrews, J.F. & Graef, S.P. (1971). "Dynamic modelling and simulation of the anaerobic digestion process", *Advances in Chemistry Series (Am Chem Soc)*, 126–162.
- Angelidaki, I., Ellegaard, L., & Ahring, B. K. (2003). *Applications of the Anaerobic Digestion Process*. In "Advances in Biochemical Engineering/Biotechnology" (T. Scheper, ed.). Springer-Verlag Berlin Heidelberg.
- Appels L., Dewil R., Baeyens J., Degrève J. (2008). *Ultrasonically enhanced anaerobic digestion of waste activated sludge*. *International Journal of Sustainable Engineering*, 1 (2), 94-104.
- Batstone, D.J., Keller, J., Angelidaki, I., Kalyuzhnyi, S., Pavlostathis, S.G., Rozzi, A., Sanders, W., Siegrist, H. & Vavilin, V. (2002) (*IWA Task Group on Modeling of Anaerobic Digestion Processes*) . *Anaerobic Digestion Model No. 1 (ADM1)*. IWA Publishing, London.
- Carneiro, R.B., Gonzalez-Gil, L., Londoño, Y.A., Zaiat, M., Carballa, M., Lema, J.M., (2020). *Acidogenesis is a key step in the anaerobic biotransformation of organic micropollutants*. *J. Hazard. Mater.* 389, 121888.
- Chang Sheng, (2014), *Anaerobic Membrane Bioreactors (AnMBR) for Wastewater Treatment*, *Advances in Chemical Engineering and Science* 4: 56-61.
- Chen, Y.R. & Hashimoto A.G. (1978). *Kinetics of methane fermentation*. *Biotechnology and Bioengineering Symp* 8, 269-282.
- Contois, D.E. (1959). *Kinetics of bacterial growth. Relationship between population density and specific growth rate of continuous cultures*. *J. Gen. Microbiol.* 21, 40-50.
- Copp, J. B., Jeppsson, U. & Rosen, C., (2003). *ASM1 to ADM1 transformation (Towards an ASM1 - ADM1 State Variable Interface for Plant-Wide Wastewater Treatment Modeling*. *Proc. Water Environment Federation Conference WEFTEC, Los Angeles, California, USA, 11-15 Oct. 2003*.
- Demirel, B. & Yenigunm O., (2002). *Two-phase anaerobic digestion processes: A review*, *Journal of Chemical Technology and Biotechnology*

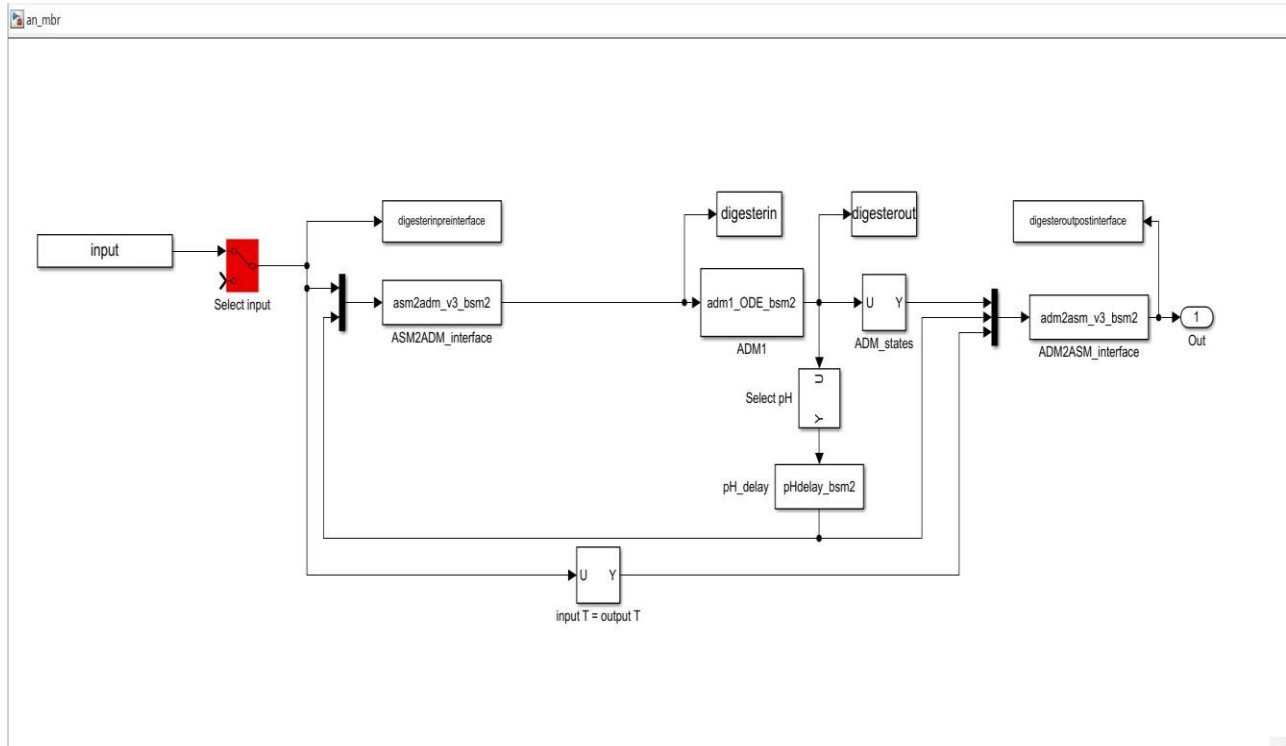
- Gerardi M., (2003). *The microbiology of anaerobic digesters*, Wastewater Microbiology Series.
- Ghaly, A. E. (1996). *A comparative study of anaerobic digestion of acid cheese whey and dairy manure in a two-stage reactor*. *Bioresource Technology* 58, 61-72.
- Gouveia J., Plaza F., Garralon G., Fdz- Polanco F., Peña M.,(2015), *Long-term operation of a pilot scale anaerobic membrane bioreactor (AnMBR) for the treatment of municipal wastewater under psychrophilic conditions*, *Bioresour. Technol.*185: 225–233.
- Grau, P., Dohanyos, M., & Chudoba, J., (1975). *Kinetics of multicomponent substrate removal by activated sludge*. *Wat. Res.* 9: 637-642.
- Harb, M., Wei, C.-H., Wang, N., Amy, G., Hong, P.-Y., (2016). *Organic micropollutants in aerobic and anaerobic membrane bioreactors: changes in microbial communities and gene expression*. *Bioresour. Technol.* 218, 882–891.
- Huang Z., Ong S.L., Ng H.Y., (2008), *The effect of HRT and SRT on performance of submerged anaerobic membrane bioreactor (SAMBR) for low-strength wastewater treatment*, *Proceedings of the IWA North American Membrane Research Conference, Amherst, USA*
- IWA, (2002). *Anaerobic Digestion Model No 1 (ADM1)*. International Water Association Scientific and Technical Report No. 13, IWA Publishing, London UK.
- Jeison D., Plugge C.M., Pereira A., van Lier J.B., (2009), *Effects of acidogenic biomass on the performance of an anaerobic membrane bioreactor for wastewater treatment*, *Bioresour. Technol.* 100: 1951–1956.
- Jeppsson Dr Ulf, (January 2007) *Investigation of anaerobic digestion alternatives for Henriksdal's WWTP 2 IEA*, Lund University
- Lawrence, A.W. & McCarty, P.L., (1970). *A unified basis for biological treatment design and operation*. *J. Sanit. Eng. Div. ASCE.* 96, 757-778.
- Lawrence, A.W., (1971). *Application of process kinetics to design of anaerobic processes*, στο *Anaerobic Biological Treatment processes*, F.G. Pohland (eds.)
- Lehninger, A.L., (1975). *Biochemistry. The Molecular Basis of Cell Structure and Function (2nd Edition)*. 1104 S., zahlr. Abb., zahlr. Tab. New York. Worth Publ. Inc.
- Lettinga G., Rebac S., Zeeman G., (2001), *Challenge of psychrophilic anaerobic wastewater treatment*, *Trends Biotechnol.* 19(9): 363–370
- Lier, J.B.v., Rebac, S. & Lettinga, G., (1997). *High-rate anaerobic wastewater treatment under psychrophilic and thermophilic conditions*. *Water science and Technology*, 35, 199-206.
- Lin H., Peng W., Zhang M., Chen J., Huachang H., Zhang Y., (2013), *A review on anaerobic membrane bioreactors: applications, membrane fouling and future perspectives*, *Desalination* 314:169–188.
- Martin I., Pidou M., Soares A., Judd S., Jefferson B., (2011), *Modelling the energy demands of aerobic and anaerobic membrane bioreactors for wastewater treatment*, *Environ. Technol.* 32:921–932

- Martinez-Sosa D., Helmreich, B., Netter, T., Paris, S., Bischof, F., Horn, H., 2011. *Pilot scale anaerobic submerged membrane bioreactor (AnSMBR) treating municipal wastewater: the fouling phenomenon and long-term operation*. *Water Sci. Technol.* 64, 1804.
- McCarthy, P., (1964), *Anaerobic waste treatment fundamentals, Chemistry And Microbiology, Sanitary Engineering Stanford University*.
- Monod, J., (1949). *The growth of bacterial cultures*. *Ann. Rev. Microbiol.* 3, 371-376.
- Nopens I., Alex J., Batstone D., Copp J., Dudley J., Pons M.-N., Vanrolleghem P.A, Volcke E.I.P. and Jeppsson U. (2009). *ASM/ADM/ASM interfaces for BSM2*. In: *Technical report no. of the Scientific and Technical Report, IWA Publishing, London*.
- Ozgun H., R. K. Dereli, M. E. Ersahin, C. Kinaci, H. Spanjers, J. B. van Lier, 2013, *A review of anaerobic membrane bioreactors for municipal wastewater treatment : integration options, limitations and expectations*, *Sep. Purif. Technol.* 118: 89–104.
- Peng W. H., Zhang M., Chen J., Huachang H., Zhang Y., (2013), *A review on anaerobic membrane bioreactors: applications, membrane fouling and future perspectives*, *Desalination* 314:169–188.
- Plevri\* A., D. Mamais, C. Noutsopoulos (2021 )*Anaerobic MBR technology for treating municipal wastewater at ambient temperatures*(*chemosphere* 275)
- Ramos C., García A., Díez V., (2014), *Performance of an AnMBR pilot plant treating high strength lipid wastewater: Biological and filtration processes*, *Water research* 67: 203-215
- Robles A., Ruano M. V., Ribes J., Ferrer J., (2013), *Performance of industrial scale hollow-fibre membranes in a submerged anaerobic MBR (HF-SAnMBR) system at mesophilic and psychrophilic conditions*, *Sep.Purif.Technol.*104: 290–296.
- Shin C., Bae J., (2017). *Current status of the pilot-scale anaerobic membrane bioreactor treatments of domestic wastewaters: a critical review*. *Bioresour. Technol.*
- Stuckey D., (2012), *Recent developments in anaerobic membrane reactors*, *Bioresour. Technol.* 122: 137–148.
- Wang Z., X. Mei, M. Jinxing, A. Grasmick, W. Zhichao, (2013), *Potential foulants and fouling indicators in MBRs: A critical review*, *Separation Science and Technology*, 48(1), p. 22-50
- Yaohari Y., H., De Araujo, C., Sze, C.C., Stuckey, D.C., (2017). *Removal of selected pharmaceuticals in an anaerobic membrane bioreactor (AnMBR) with/without powdered activated carbon (PAC)*. *Chem. Eng. J.* 321, 335–345.
- Βενετσάνεας, Ν.Ε. (2012). *Ανάπτυξη Διβαθμίου Συστήματος Βιοτεχνολογικής Παραγωγής Υδρογόνου και Μεθανίου από Απόβλητα Τυροκομείου. Διδακτορική Διατριβή. Πανεπιστήμιο Πατρών.*

- Γεωργιοπούλου Μάρθα, 2007, *Ανάπτυξη μεθόδων για την επιλογή της καλύτερης διαθέσιμης τεχνολογίας για την επεξεργασία υγρών βιομηχανικών αποβλήτων*, Πανεπιστήμιο Πατρών
- Μαντζιούρας, Δ.Η., (2010). *Βελτιστοποίηση διβάθμιων συστημάτων αναερόβιας χώνευσης ιλύος με προσθήκη μετάλλων*, Μεταπτυχιακή εργασία στο Διεπιστημονικό-Διατμηματικό Πρόγραμμα Μεταπτυχιακών Σπουδών «Επιστήμη & Τεχνολογία Υδατικών Πόρων» ΕΜΠ, Αθήνα.
- Παπαδόπουλος, Ν., (2011). *Ανάπτυξη μαθηματικής προσομοίωσης Συστημάτων αναερόβιας χώνευσης ιλύος*, Μεταπτυχιακή εργασία στο Διεπιστημονικό- Διατμηματικό Πρόγραμμα Μεταπτυχιακών Σπουδών «Επιστήμη & Τεχνολογία Υδατικών Πόρων» ΕΜΠ, Αθήνα.

## Παράρτημα

Το μοντέλο όπως χρησιμοποιήθηκε στην SIMULINK



### Το Βασικό SCRIPT που χρησιμοποιήθηκε στο MATLAB (Michalis.m)

```
clear;clc;
```

```
CODt=477; %mg/l
```

```
SI=(9/100)*CODt; %mg/l
```

```
SS=(15/100)*CODt; %mg/l
```

```
XI=(23/100)*CODt; %mg/l
```

```
XS=(50/100)*CODt; %mg/l
```

```
XBH=(1/100)*CODt; %mg/l
```

```
XBA=(1/100)*CODt;%mg/l
```

```
XP=(1/100)*CODt;%mg/l
```

```
SO=0;
```



```

TN=71.42857143 ; %mg/l
SNO=(1/100)*TN; %mg/l
SNH=(67/100)*TN; %mg/l
SND=(2/100)*TN; %mg/l
XND=(30/100)*TN; %mg/l
SALK=2.6; %mole HCO3-/m3
TSS=100; %mg/l
Qin = 20 ;%m3/d
T = 18 ;%degC
T1=0;
T2=1000;
input=[T1,SI,SS,XI,XS,XBH,XBA,XP,SO,SNO,SNH,SND,XND,SALK,TSS,Qin,T,0,0,0,0,0
T2,SI,SS,XI,XS,XBH,XBA,XP,SO,SNO,SNH,SND,XND,SALK,TSS,Qin,T,0,0,0,0,0];
mex adm1_ODE_bsm2.c
mex adm2asm_v3_bsm2.c
mex asm2adm_v3_bsm2.c
mex pHdelay_bsm2.c
init_bsm2
%adm1init_bsm2;
sim('an_mbr',500) %simulate model for 1000 days
print_results
CODout=digesteroutpostinterface(end,1)+digesteroutpostinterface(end,2);
TKNout=digesteroutpostinterface(end,9)+digesteroutpostinterface(end,10)+digesteroutpostinterface(end,11);
%sensitivity analysis
asensan(1,1)=CODout;
asensan(1,2)=digesterout(end,51);
asensan(1,3)=digesteroutpostinterface(end,14);
asensan(1,4)=digesteroutpostinterface(end,10);
asensan(1,5)=digesterout(end,34);

```

## To SCRIPT με τους συντελεστές και τις αρχικές τιμές αντιδραστήρα για Χειμώνα (adm1init bsm2.m)

```
% This file initiates parameter values and sets initial conditions for any of the three
% model implementations adm1_ODE, adm1_DAE1 and adm1_DAE2. Note that some of the
% parameter values deviate from the values given in the ADM1-STR (Batstone et al., 2002).
%
% Copyright 2006:
% Dr Christian Rosen, Dr Darko Vrecko and Dr Ulf Jeppsson
% Dept. Industrial Electrical Engineering and Automation
% Lund University, Sweden
% http://www.iea.lth.se
%
% The state values are based on BSM2 openloop results using the constant
% input file.
%
% Copyright: Ulf Jeppsson, IEA, Lund University, Lund, Sweden
S_su = 0.0124;
S_aa = 0.0055;
S_fa = 0.1074;
S_va = 0.0123;
S_bu = 0.0140;
S_pro = 0.0176;
S_ac = 0.0893;
S_h2 = 2.5055e-7;
S_ch4 = 0.0555;
S_IC = 0.0951;
S_IN = 0.0945;
S_I = 0.1309;
X_xc = 0.1079;
X_ch = 0.0205;
X_pr = 0.0842;
```

```

X_li = 0.0436;
X_su = 0.3122;
X_aa = 0.9317;
X_fa = 0.3384;
X_c4 = 0.3258;
X_pro = 0.1011;
X_ac = 0.6772;
X_h2 = 0.2848;
X_I = 17.2162;
S_cat = 3.5659e-43;
S_an = 0.0052;
S_hva = 0.0123; % is actually Sva-
S_hbu = 0.0140; % is actually Sbu-
S_hpro = 0.0175; % is actually Spro-
S_hac = 0.0890; % is actually Sac-
S_hco3 = 0.0857;
S_nh3 = 0.0019;
S_gas_h2 = 1.1032e-5;
S_gas_ch4 = 1.6535;
S_gas_co2 = 0.0135;
Q_D = 20;
T_D = 18;
S_D1_D = 0;
S_D2_D = 0;
S_D3_D = 0;
X_D4_D = 0;
X_D5_D = 0;
S_H_ion = 5.4562e-8;
% used by all three ADM implementations, adm1_ODE, adm1_DAE1 and adm1_DAE2.
DIGESTERINIT = [ S_su S_aa S_fa S_va S_bu S_pro S_ac S_h2 S_ch4 S_IC S_IN S_I X_xc X_ch X_pr X_li X_su X_aa X_fa
X_c4 X_pro X_ac X_h2 ...

```

```
X_I S_cat S_an S_hva S_hbu S_hpro S_hac S_hco3 S_nh3 S_gas_h2 S_gas_ch4 S_gas_co2 Q_D T_D S_D1_D S_D2_D S_D3_D X_D4_D X_D5_D ];
```

```
% used by both DAE ADM implementations, adm1_DAE1 and adm1_DAE2.
```

```
PHSOLVINIT = [ S_H_ion S_hva S_hbu S_hpro S_hac S_hco3 S_nh3 ];
```

```
% used by one DAE ADM implementation, adm1_DAE2.
```

```
SH2SOLVINIT = [ S_h2 ];
```

```
f_sl_xc = 0.05;
```

```
f_xl_xc = 0.05;
```

```
f_ch_xc = 0.3;
```

```
f_pr_xc = 0.3;
```

```
f_li_xc = 0.3;
```

```
N_xc = 0.0376/14.0;
```

```
N_l = 0.06/14.0;
```

```
N_aa = 0.007;
```

```
C_xc = 0.02786;
```

```
C_sl = 0.03;
```

```
C_ch = 0.0313;
```

```
C_pr = 0.03;
```

```
C_li = 0.022;
```

```
C_xl = 0.03;
```

```
C_su = 0.0313;
```

```
C_aa = 0.03;
```

```
f_fa_li = 0.95;
```

```
C_fa = 0.0217;
```

```
f_h2_su = 0.19;
```

```
f_bu_su = 0.13;
```

```
f_pro_su = 0.27;
```

```
f_ac_su = 0.41;
```

```
N_bac = 0.08/14.0;
```

```
C_bu = 0.025;
```

```
C_pro = 0.0268;
```

```
C_ac = 0.0313;
C_bac = 0.0313;
Y_su = 0.1;
f_h2_aa = 0.06;
f_va_aa = 0.23;
f_bu_aa = 0.26;
f_pro_aa = 0.05;
f_ac_aa = 0.40;
C_va = 0.024;
Y_aa = 0.08;
Y_fa = 0.06;
Y_c4 = 0.06;
Y_pro = 0.04;
C_ch4 = 0.0156;
Y_ac = 0.05;
Y_h2 = 0.06;
k_dis = 2;
k_hyd_ch = 10.0;
k_hyd_pr = 10.0;
k_hyd_li = 10.0;
K_S_IN = 1.0e-4;
k_m_su = 70*0.8; %par ws
K_S_su = 0.2; %par
pH_UL_aa = 5.5;
pH_LL_aa = 4.0;
k_m_aa = 70*0.8; %par ws
K_S_aa = 0.1; %par
k_m_fa = 10*0.8; %par ws
K_S_fa = 0.1; %par
K_lh2_fa = 5.0e-6;
k_m_c4 = 20.0*1.5*0.8; %par ws
```

```
K_S_c4 = 0.2;
K_Ih2_c4 = 1.0e-5;
k_m_pro = 13.0*1.48*0.8; %par ws
K_S_pro = 0.1;
K_Ih2_pro = 3.5e-6;
k_m_ac = 8.0*2*0.8; %par ws
K_S_ac = 0.15;
K_I_nh3 = 0.0018;
pH_UL_ac = 7.0;
pH_LL_ac = 6.0;
k_m_h2 = 35.0*1.29*0.8; % par ws
K_S_h2 = 7.0e-6;
pH_UL_h2 = 6.0;
pH_LL_h2 = 5.0;
k_dec_Xsu = 0.02;
k_dec_Xaa = 0.02;
k_dec_Xfa = 0.02;
k_dec_Xc4 = 0.02;
k_dec_Xpro = 0.02;
k_dec_Xac = 0.02;
k_dec_Xh2 = 0.02;
R = 0.083145; % universal gas constant dm3*bar/(mol*K) = 8.3145 J/(mol*K)
T_base = 298.15; % 25 degC = 298.15 K
T_op = 291.15; % operational temperature of AD and interfaces, 18 degC, should really be an input
pK_w_base = 14.0;
pK_a_va_base = 4.86;
pK_a_bu_base = 4.82;
pK_a_pro_base = 4.88;
pK_a_ac_base = 4.76;
pK_a_co2_base = 6.35;
pK_a_IN_base = 9.25;
```

```

k_A_Bva = 1.0e10; % 1e8; according to STR
k_A_Bbu = 1.0e10; % 1e8; according to STR
k_A_Bpro = 1.0e10; % 1e8; according to STR
k_A_Bac = 1.0e10; % 1e8; according to STR
k_A_Bco2 = 1.0e10; % 1e8; according to STR
k_A_BIN = 1.0e10; % 1e8; according to STR
P_atm = 1.013; % bar
kLa = 200.0;
K_H_h2o_base = 0.0313;
K_H_co2_base = 0.035;
K_H_ch4_base = 0.0014;
K_H_h2_base = 7.8e-4;
k_P = 5.0e4;
DIGESTERPAR = [ f_sl_xc f_xl_xc f_ch_xc f_pr_xc f_li_xc N_xc N_I N_aa C_xc C_sl C_ch C_pr C_li C_xl C_su C_aa f_fa_li
C_fa ...
f_h2_su f_bu_su f_pro_su f_ac_su N_bac C_bu C_pro C_ac C_bac Y_su f_h2_aa f_va_aa f_bu_aa f_pro_aa f_ac_aa
C_va Y_aa Y_fa ...
Y_c4 Y_pro C_ch4 Y_ac Y_h2 k_dis k_hyd_ch k_hyd_pr k_hyd_li K_S_IN k_m_su K_S_su pH_UL_aa pH_LL_aa k_m_aa
K_S_aa k_m_fa ...
K_S_fa K_lh2_fa k_m_c4 K_S_c4 K_lh2_c4 k_m_pro K_S_pro K_lh2_pro k_m_ac K_S_ac K_l_nh3 pH_UL_ac pH_LL_ac
k_m_h2 K_S_h2 ...
pH_UL_h2 pH_LL_h2 k_dec_Xsu k_dec_Xaa k_dec_Xfa k_dec_Xc4 k_dec_Xpro k_dec_Xac k_dec_Xh2 R T_base T_op
pK_w_base pK_a_va_base pK_a_bu_base ...
pK_a_pro_base pK_a_ac_base pK_a_co2_base pK_a_IN_base k_A_Bva k_A_Bbu k_A_Bpro k_A_Bac k_A_Bco2
k_A_BIN P_atm kLa ...
K_H_h2o_base K_H_co2_base K_H_ch4_base K_H_h2_base k_P ];
V_liq = 40; %m3, size of BSM2 AD
V_gas = 20; %m3, size of BSM2 AD
DIM_D = [ V_liq V_gas ];
% parameters for ASM2ADM and ADM2ASM interfaces
% could be put it their own initialisation file
CODequiv = 40.0/14.0;
fnaa = N_aa*14.0; % fraction of N in amino acids and Xpr as in ADM1 report

```

```

fnxc = N_xc*14.0; % N content of composite material based on BSM2
fnbac = N_bac*14.0; % N content of biomass based on BSM1, same in AS and AD
fxni = N_I*14.0; % N content of inerts XI and XP, same in AS and AD
fsni = 0.0; % N content of SI, assumed zero in ASM1 and BSM1
fsni_adm = N_I*14.0; % N content of SI in the AD system

% fnbac, fxni and fsni are adjusted to fit the benchmark values of iXB=0.08 and
% iXP=0.06 in the AS.

frlixs = 0.7; % lipid fraction of non-nitrogenous XS in BSM2
frlibac = 0.4; % lipid fraction of non-nitrogenous biomass in BSM2
frxs_adm = 0.68; % anaerobically degradable fraction of AS biomass in BSM2
fdegrade_adm = 0; % amount of AS XI and XP degradable in AD, zero in BSM2
frxs_as = 0.79; % aerobically degradable fraction of AD biomass in BSM2
fdegrade_as = 0; % amount of AD XI and XP degradable in AS, zero in BSM2
pH_adm_init = 7.0; % initial value of pH in ADM to be used by interfaces for the first sample

INTERFACEPAR = [ CODEquiv fnaa fnxc fnbac fxni fsni fsni_adm frlixs frlibac frxs_adm fdegrade_adm frxs_as
fdegrade_as ...

R T_base T_op pK_w_base pK_a_va_base pK_a_bu_base pK_a_pro_base pK_a_ac_base pK_a_co2_base
pK_a_IN_base ];

% parameters for the pHdelay function

PHINIT = pH_adm_init;
PHTIMECONST = 0.01;

```

### To SCRIPT με τους συντελεστές και τις αρχικές τιμές αντιδραστήρα για Καλοκαιρι (adm1init bsm2.m)

```

% This file initiates parameter values and sets initial conditions for any of the three
% model implementations adm1_ODE, adm1_DAE1 and adm1_DAE2. Note that some of the
% parameter values deviate from the values given in the ADM1-STR (Batstone et al., 2002).
%
% Copyright 2006:
% Dr Christian Rosen, Dr Darko Vrecko and Dr Ulf Jeppsson
% Dept. Industrial Electrical Engineering and Automation
% Lund University, Sweden

```



```
% http://www.iea.lth.se
%
% The state values are based on BSM2 openloop results using the constant
% input file.
%
% Copyright: Ulf Jeppsson, IEA, Lund University, Lund, Sweden
S_su = 0.0124;
S_aa = 0.0055;
S_fa = 0.1074;
S_va = 0.0123;
S_bu = 0.0140;
S_pro = 0.0176;
S_ac = 0.0893;
S_h2 = 2.5055e-7;
S_ch4 = 0.0555;
S_IC = 0.0951;
S_IN = 0.0945;
S_I = 0.1309;
X_xc = 0.1079;
X_ch = 0.0205;
X_pr = 0.0842;
X_li = 0.0436;
X_su = 0.3122;
X_aa = 0.9317;
X_fa = 0.3384;
X_c4 = 0.3258;
X_pro = 0.1011;
X_ac = 0.6772;
X_h2 = 0.2848;
X_I = 17.2162;
S_cat = 3.5659e-43;
```

```

S_an = 0.0052;
S_hva = 0.0123; % is actually Sva-
S_hbu = 0.0140; % is actually Sbu-
S_hpro = 0.0175; % is actually Spro-
S_hac = 0.0890; % is actually Sac-
S_hco3 = 0.0857;
S_nh3 = 0.0019;
S_gas_h2 = 1.1032e-5;
S_gas_ch4 = 1.6535;
S_gas_co2 = 0.0135;
Q_D = 20;
T_D = 23;
S_D1_D = 0;
S_D2_D = 0;
S_D3_D = 0;
X_D4_D = 0;
X_D5_D = 0;
S_H_ion = 5.4562e-8;
% used by all three ADM implementations, adm1_ODE, adm1_DAE1 and adm1_DAE2.
DIGESTERINIT = [ S_su S_aa S_fa S_va S_bu S_pro S_ac S_h2 S_ch4 S_IC S_IN S_I X_xc X_ch X_pr X_li X_su X_aa X_fa
X_c4 X_pro X_ac X_h2 ...
X_I S_cat S_an S_hva S_hbu S_hpro S_hac S_hco3 S_nh3 S_gas_h2 S_gas_ch4 S_gas_co2 Q_D T_D S_D1_D S_D2_D
S_D3_D X_D4_D X_D5_D ];
% used by both DAE ADM implementations, adm1_DAE1 and adm1_DAE2.
PHSOLVINIT = [ S_H_ion S_hva S_hbu S_hpro S_hac S_hco3 S_nh3 ];
% used by one DAE ADM implementation, adm1_DAE2.
SH2SOLVINIT = [ S_h2 ];
f_sl_xc = 0.05;
f_xl_xc = 0.05;
f_ch_xc = 0.3;
f_pr_xc = 0.3;

```

f\_li\_xc = 0.3;  
N\_xc = 0.0376/14.0;  
N\_l = 0.06/14.0;  
N\_aa = 0.007;  
C\_xc = 0.02786;  
C\_sl = 0.03;  
C\_ch = 0.0313;  
C\_pr = 0.03;  
C\_li = 0.022;  
C\_xl = 0.03;  
C\_su = 0.0313;  
C\_aa = 0.03;  
f\_fa\_li = 0.95;  
C\_fa = 0.0217;  
f\_h2\_su = 0.19;  
f\_bu\_su = 0.13;  
f\_pro\_su = 0.27;  
f\_ac\_su = 0.41;  
N\_bac = 0.08/14.0;  
C\_bu = 0.025;  
C\_pro = 0.0268;  
C\_ac = 0.0313;  
C\_bac = 0.0313;  
Y\_su = 0.1;  
f\_h2\_aa = 0.06;  
f\_va\_aa = 0.23;  
f\_bu\_aa = 0.26;  
f\_pro\_aa = 0.05;  
f\_ac\_aa = 0.40;  
C\_va = 0.024;  
Y\_aa = 0.08;

Y\_fa = 0.06;  
Y\_c4 = 0.06;  
Y\_pro = 0.04;  
C\_ch4 = 0.0156;  
Y\_ac = 0.05;  
Y\_h2 = 0.06;  
k\_dis = 2;  
k\_hyd\_ch = 10.0;  
k\_hyd\_pr = 10.0;  
k\_hyd\_li = 10.0;  
K\_S\_IN = 1.0e-4;  
k\_m\_su = 70\*0.8\*1.8; %par ws  
K\_S\_su = 0.2; %par  
pH\_UL\_aa = 5.5;  
pH\_LL\_aa = 4.0;  
k\_m\_aa = 70\*0.8\*1.8; %par ws  
K\_S\_aa = 0.1; %par  
k\_m\_fa = 10\*0.8\*1.8; %par ws  
K\_S\_fa = 0.1; %par  
K\_Ih2\_fa = 5.0e-6;  
k\_m\_c4 = 20.0\*1.5\*0.8\*1.8; %par ws  
K\_S\_c4 = 0.2;  
K\_Ih2\_c4 = 1.0e-5;  
k\_m\_pro = 13.0\*1.48\*0.8\*1.8; %par ws  
K\_S\_pro = 0.1;  
K\_Ih2\_pro = 3.5e-6;  
k\_m\_ac = 8.0\*2\*0.8\*1.8; %par ws  
K\_S\_ac = 0.15;  
K\_I\_nh3 = 0.0018;  
pH\_UL\_ac = 7.0;  
pH\_LL\_ac = 6.0;

```

k_m_h2 = 35.0*1.29*0.8*1.8; % par ws
K_S_h2 = 7.0e-6;
pH_UL_h2 = 6.0;
pH_LL_h2 = 5.0;
k_dec_Xsu = 0.02;
k_dec_Xaa = 0.02;
k_dec_Xfa = 0.02;
k_dec_Xc4 = 0.02;
k_dec_Xpro = 0.02;
k_dec_Xac = 0.02;
k_dec_Xh2 = 0.02;
R = 0.083145; % universal gas constant dm3*bar/(mol*K) = 8.3145 J/(mol*K)
T_base = 298.15; % 25 degC = 298.15 K
T_op = 296.15; % operational temperature of AD and interfaces, 23 degC, should really be an input
pK_w_base = 14.0;
pK_a_va_base = 4.86;
pK_a_bu_base = 4.82;
pK_a_pro_base = 4.88;
pK_a_ac_base = 4.76;
pK_a_co2_base = 6.35;
pK_a_IN_base = 9.25;
k_A_Bva = 1.0e10; % 1e8; according to STR
k_A_Bbu = 1.0e10; % 1e8; according to STR
k_A_Bpro = 1.0e10; % 1e8; according to STR
k_A_Bac = 1.0e10; % 1e8; according to STR
k_A_Bco2 = 1.0e10; % 1e8; according to STR
k_A_BIN = 1.0e10; % 1e8; according to STR
P_atm = 1.013; % bar
kLa = 200.0;
K_H_h2o_base = 0.0313;
K_H_co2_base = 0.035;

```

```

K_H_ch4_base = 0.0014;

K_H_h2_base = 7.8e-4;

k_P = 5.0e4;

DIGESTERPAR = [ f_sl_xc f_xl_xc f_ch_xc f_pr_xc f_li_xc N_xc N_I N_aa C_xc C_sl C_ch C_pr C_li C_xl C_su C_aa f_fa_li
C_fa ...

f_h2_su f_bu_su f_pro_su f_ac_su N_bac C_bu C_pro C_ac C_bac Y_su f_h2_aa f_va_aa f_bu_aa f_pro_aa f_ac_aa
C_va Y_aa Y_fa ...

Y_c4 Y_pro C_ch4 Y_ac Y_h2 k_dis k_hyd_ch k_hyd_pr k_hyd_li K_S_IN k_m_su K_S_su pH_UL_aa pH_LL_aa k_m_aa
K_S_aa k_m_fa ...

K_S_fa K_lh2_fa k_m_c4 K_S_c4 K_lh2_c4 k_m_pro K_S_pro K_lh2_pro k_m_ac K_S_ac K_I_nh3 pH_UL_ac pH_LL_ac
k_m_h2 K_S_h2 ...

pH_UL_h2 pH_LL_h2 k_dec_Xsu k_dec_Xaa k_dec_Xfa k_dec_Xc4 k_dec_Xpro k_dec_Xac k_dec_Xh2 R T_base T_op
pK_w_base pK_a_va_base pK_a_bu_base ...

pK_a_pro_base pK_a_ac_base pK_a_co2_base pK_a_IN_base k_A_Bva k_A_Bbu k_A_Bpro k_A_Bac k_A_Bco2
k_A_BIN P_atm kLa ...

K_H_h2o_base K_H_co2_base K_H_ch4_base K_H_h2_base k_P ];

V_liq = 40; %m3, size of BSM2 AD
V_gas = 20; %m3, size of BSM2 AD

DIM_D = [ V_liq V_gas ];

% parameters for ASM2ADM and ADM2ASM interfaces
% could be put it their own initialisation file

CODequiv = 40.0/14.0;

fnaa = N_aa*14.0; % fraction of N in amino acids and Xpr as in ADM1 report
fnxc = N_xc*14.0; % N content of composite material based on BSM2
fnbac = N_bac*14.0; % N content of biomass based on BSM1, same in AS and AD
fxni = N_I*14.0; % N content of inerts XI and XP, same in AS and AD
fsni = 0.0; % N content of SI, assumed zero in ASM1 and BSM1
fsni_adm = N_I*14.0; % N content of SI in the AD system

% fnbac, fxni and fsni are adjusted to fit the benchmark values of iXB=0.08 and
% iXP=0.06 in the AS.

frlixs = 0.7; % lipid fraction of non-nitrogenous XS in BSM2
frlibac = 0.4; % lipid fraction of non-nitrogenous biomass in BSM2
frxs_adm = 0.68; % anaerobically degradable fraction of AS biomass in BSM2

```

```

fdegrade_adm = 0;          % amount of AS XI and XP degradable in AD, zero in BSM2
frxs_as = 0.79; % aerobically degradable fraction of AD biomass in BSM2
fdegrade_as = 0; % amount of AD XI and XP degradable in AS, zero in BSM2
pH_adm_init = 7.0; % initial value of pH in ADM to be used by interfaces for the first sample
INTERFACEPAR = [ CODEquiv fnaa fnxc fnbac fxni fsni fsni_adm frlixs frlibac frxs_adm fdegrade_adm frxs_as
fdegrade_as ...
R T_base T_op pK_w_base pK_a_va_base pK_a_bu_base pK_a_pro_base pK_a_ac_base pK_a_co2_base
pK_a_IN_base ];
% parameters for the pHdelay function
PHINIT = pH_adm_init;
PHTIMECONST = 0.01;

```

### To interface ASM/ADM (asm2adm v3 bsm2)

```

/*
* New version (no 3) of the ASM1 to ADM1 interface based on discussions
* within the IWA TG BSM community during 2002-2006. Now also including charge
* balancing and temperature dependency for applicable parameters.
* Model parameters are defined in adm1init_bsm2.m
* u is the input in ASM1 terminology + extra dummy states, 21 variables
* plus one extra input = dynamic pH from the ADM1 system (needed for
* accurate charge balancing - also used the ADM1 to ASM1 interface).
* If temperature control of AD is used then the operational temperature
* of the ADM1 should also be an input rather than a defined parameter.
* Temperature in the ADM1 and the ASM1 to ADM1 and the ADM1 to ASM1
* interfaces should be identical at every time instant.
* Input vector:
* u[0] : Si = soluble inert organic material (g COD/m3)
* u[1] : Ss = readily biodegradable substrate (g COD/m3)
* u[2] : Xi = particulate inert organic material (g COD/m3)
* u[3] : Xs = slowly biodegradable substrate (g COD/m3)
* u[4] : Xbh = active heterotrophic biomass (g COD/m3)
* u[5] : Xba = active autotrophic biomass (g COD/m3)

```

- \*  $u[6]$  :  $X_p$  = particulate product arising from biomass decay (g COD/m<sup>3</sup>)
- \*  $u[7]$  :  $S_o$  = oxygen (g -COD/m<sup>3</sup>)
- \*  $u[8]$  :  $S_{no}$  = nitrate and nitrite nitrogen (g N/m<sup>3</sup>)
- \*  $u[9]$  :  $S_{nh}$  = ammonia and ammonium nitrogen (g N/m<sup>3</sup>)
- \*  $u[10]$  :  $S_{nd}$  = soluble biogradable organic nitrogen (g N/m<sup>3</sup>)
- \*  $u[11]$  :  $X_{nd}$  = particulate biogradable organic nitrogen (g N/m<sup>3</sup>)
- \*  $u[12]$  :  $S_{alk}$  = alkalinity (mole HCO<sub>3</sub><sup>-</sup>/m<sup>3</sup>)
- \*  $u[13]$  : TSS = total suspended solids (internal use) (mg SS/l)
- \*  $u[14]$  : flow rate (m<sup>3</sup>/d)
- \*  $u[15]$  : temperature (deg C)
- \*  $u[16:20]$  : dummy states for future use
- \*  $u[21]$  : pH in the anaerobic digester
- \*
- \*  $y$  is the output in ADM1 terminology + extra dummy states, 33 variables
- \*  $y[0]$  :  $S_{su}$  = monosacharides (kg COD/m<sup>3</sup>)
- \*  $y[1]$  :  $S_{aa}$  = amino acids (kg COD/m<sup>3</sup>)
- \*  $y[2]$  :  $S_{fa}$  = long chain fatty acids (LCFA) (kg COD/m<sup>3</sup>)
- \*  $y[3]$  :  $S_{va}$  = total valerate (kg COD/m<sup>3</sup>)
- \*  $y[4]$  :  $S_{bu}$  = total butyrate (kg COD/m<sup>3</sup>)
- \*  $y[5]$  :  $S_{pro}$  = total propionate (kg COD/m<sup>3</sup>)
- \*  $y[6]$  :  $S_{ac}$  = total acetate (kg COD/m<sup>3</sup>)
- \*  $y[7]$  :  $S_{h2}$  = hydrogen gas (kg COD/m<sup>3</sup>)
- \*  $y[8]$  :  $S_{ch4}$  = methane gas (kg COD/m<sup>3</sup>)
- \*  $y[9]$  :  $S_{ic}$  = inorganic carbon (kmole C/m<sup>3</sup>)
- \*  $y[10]$  :  $S_{in}$  = inorganic nitrogen (kmole N/m<sup>3</sup>)
- \*  $y[11]$  :  $S_i$  = soluble inerts (kg COD/m<sup>3</sup>)
- \*  $y[12]$  :  $X_c$  = composites (kg COD/m<sup>3</sup>)
- \*  $y[13]$  :  $X_{ch}$  = carbohydrates (kg COD/m<sup>3</sup>)
- \*  $y[14]$  :  $X_{pr}$  = proteins (kg COD/m<sup>3</sup>)
- \*  $y[15]$  :  $X_{li}$  = lipids (kg COD/m<sup>3</sup>)
- \*  $y[16]$  :  $X_{su}$  = sugar degraders (kg COD/m<sup>3</sup>)



```

* y[17] : Xaa = amino acid degraders (kg COD/m3)
* y[18] : Xfa = LCFA degraders (kg COD/m3)
* y[19] : Xc4 = valerate and butyrate degraders (kg COD/m3)
* y[20] : Xpro = propionate degraders (kg COD/m3)
* y[21] : Xac = acetate degraders (kg COD/m3)
* y[22] : Xh2 = hydrogen degraders (kg COD/m3)
* y[23] : Xi = particulate inerts (kg COD/m3)
* y[24] : scat+ = cations (metallic ions, strong base) (kmole/m3)
* y[25] : san- = anions (metallic ions, strong acid) (kmole/m3)
* y[26] : flow rate (m3/d)
* y[27] : temperature (deg C)
* y[28:32] : dummy states for future use
*
* ASM1 --> ADM1 conversion, version 3 for BSM2
* Copyright: John Copp, Primodal Inc., Canada; Ulf Jeppsson, Lund
* University, Sweden; Damien Batstone, Univ of Queensland,
* Australia, Ingmar Nopens, Univ of Ghent, Belgium,
* Marie-Noelle Pons, Nancy, France, Peter Vanrolleghem,
* Univ. Laval, Canada, Jens Alex, IFAK, Germany and
* Eveline Volcke, Univ of Ghent, Belgium.
*/
#define S_FUNCTION_NAME asm2adm_v3_bsm2
#include "simstruc.h"
#include <math.h>
#define PAR    ssGetArg(S,0)
/*
* mdlInitializeSizes - initialize the sizes array
*/
static void mdlInitializeSizes(SimStruct *S)
{
ssSetNumContStates( S, 0); /* number of continuous states */

```

```

ssSetNumDiscStates( S, 0); /* number of discrete states */
ssSetNumInputs( S, 22); /* number of inputs */
ssSetNumOutputs( S, 33); /* number of outputs */
ssSetDirectFeedThrough(S, 1); /* direct feedthrough flag */
ssSetNumSampleTimes( S, 1); /* number of sample times */
ssSetNumSFcnParams( S, 1); /* number of input arguments */
ssSetNumRWork( S, 0); /* number of real work vector elements */
ssSetNumIWork( S, 0); /* number of integer work vector elements*/
ssSetNumPWork( S, 0); /* number of pointer work vector elements*/
}
/*
 * mdlInitializeSampleTimes - initialize the sample times array
 */
static void mdlInitializeSampleTimes(SimStruct *S)
{
ssSetSampleTime(S, 0, CONTINUOUS_SAMPLE_TIME);
ssSetOffsetTime(S, 0, 0.0);
}
/*
 * mdlInitializeConditions - initialize the states
 */
static void mdlInitializeConditions(double *x0, SimStruct *S)
{
}
/*
 * mdlOutputs - compute the outputs
 */
static void mdlOutputs(double *y, double *x, double *u, SimStruct *S, int tid)
{
double CODEquiv, fnaa, fnxc, fnbac, fxni, fsni, fsni_adm, frlixs, frlibac, frxs_adm, fdegrade_adm, frxs_as,
fdegrade_as;

```

```

double R, T_base, T_op, pK_w_base, pK_a_va_base, pK_a_bu_base, pK_a_pro_base, pK_a_ac_base,
pK_a_co2_base, pK_a_IN_base;

double pH_adm, pK_w, pK_a_co2, pK_a_IN, alfa_va, alfa_bu, alfa_pro, alfa_ac, alfa_co2, alfa_IN, alfa_NH, alfa_alk,
alfa_NO, factor;

double CODdemand, remaina, remainb, remainc, remaind, ScatminusSan;

double sorgn, xorgn, xprtemp, xprtemp2, xlitemp, xlitemp2, xlitemp3, xchtemp, xchtemp2, xchtemp3;

double biomass, biomass_nobio, biomass_bioN, remainCOD, inertX, xc, noninertX, inertS, utemp[22], utemp2[22];

int i;

/* parameters defined in adm1init_bsm2.m, INTERFACEPAR */
CODEquiv = mxGetPr(PAR)[0];
fnaa = mxGetPr(PAR)[1];
fnxc = mxGetPr(PAR)[2];
fnbac = mxGetPr(PAR)[3];
fxni = mxGetPr(PAR)[4];
fsni = mxGetPr(PAR)[5];
fsni_adm = mxGetPr(PAR)[6];
frlixs = mxGetPr(PAR)[7];
frlibac = mxGetPr(PAR)[8];
frxs_adm = mxGetPr(PAR)[9];
fdgrade_adm = mxGetPr(PAR)[10];
frxs_as = mxGetPr(PAR)[11]; /* not used in ASM2ADM */
fdgrade_as = mxGetPr(PAR)[12]; /* not used in ASM2ADM */
R = mxGetPr(PAR)[13];
T_base = mxGetPr(PAR)[14];
T_op = mxGetPr(PAR)[15]; /* should be an input variable if dynamic temperature control is used */
pK_w_base = mxGetPr(PAR)[16];
pK_a_va_base = mxGetPr(PAR)[17];
pK_a_bu_base = mxGetPr(PAR)[18];
pK_a_pro_base = mxGetPr(PAR)[19];
pK_a_ac_base = mxGetPr(PAR)[20];
pK_a_co2_base = mxGetPr(PAR)[21];

```

```

pK_a_IN_base = mxGetPr(PAR)[22];
pH_adm = u[21];
factor = (1.0/T_base - 1.0/T_op)/(100.0*R);
pK_w = pK_w_base - log10(exp(55900.0*factor));
pK_a_co2 = pK_a_co2_base - log10(exp(7646.0*factor));
pK_a_IN = pK_a_IN_base - log10(exp(51965.0*factor));
alfa_va = 1.0/208.0*(-1.0/(1.0 + pow(10, pK_a_va_base - pH_adm)));
alfa_bu = 1.0/160.0*(-1.0/(1.0 + pow(10, pK_a_bu_base - pH_adm)));
alfa_pro = 1.0/112.0*(-1.0/(1.0 + pow(10, pK_a_pro_base - pH_adm)));
alfa_ac = 1.0/64.0*(-1.0/(1.0 + pow(10, pK_a_ac_base - pH_adm)));
alfa_co2 = -1.0/(1.0 + pow(10, pK_a_co2 - pH_adm));
alfa_IN = (pow(10, pK_a_IN - pH_adm))/(1.0 + pow(10, pK_a_IN - pH_adm));
alfa_NH = 1.0/14000.0; /* convert mgN/l into kmoleN/m3 */
alfa_alk = -0.001; /* convert moleHCO3/m3 into kmoleHCO3/m3 */
alfa_NO = -1.0/14000.0; /* convert mgN/l into kmoleN/m3 */
for (i = 0; i < 22; i++) {
utemp[i] = u[i];
utemp2[i] = u[i];
}

for (i = 0; i < 32; i++)
y[i] = 0.0;
/*=====
====*/
/* Let CODdemand be the COD demand of available electron
* acceptors prior to the anaerobic digester, i.e. oxygen and nitrate */
CODdemand = u[7] + CODEquiv*u[8];
utemp[7] = 0;
utemp[8] = 0;
/* if extreme detail was used then some extra NH4 would be transformed
* into N bound in biomass and some biomass would be formed when

```

\* removing the CODdemand (based on the yield). But on a total COD balance  
 \* approach the below is correct (neglecting the N need for biomass growth)  
 \* The COD is reduced in a hierarchical approach in the order:  
 \* 1) SS; 2) XS; 3) XBH; 4) XBA. It is no real improvement to remove SS and add  
 \* biomass. The net result is the same.\*/

```

if (CODdemand > u[1]) { /* check if COD demand can be fulfilled by SS*/
remaina = CODdemand - u[1];
utemp[1] = 0.0;
if (remaina > u[3]) { /* check if COD demand can be fulfilled by XS*/
remainb = remaina - u[3];
utemp[3] = 0.0;
if (remainb > u[4]) { /* check if COD demand can be fulfilled by XBH */
remainc = remainb - u[4];
utemp[9] = utemp[9] + u[4]*fnbac;
utemp[4] = 0.0;
if (remainc > u[5]) { /* check if COD demand can be fulfilled by XBA */
remaind = remainc - u[5];
utemp[9] = utemp[9] + u[5]*fnbac;
utemp[5] = 0.0;
utemp[7] = remaind;
/* if here we are in trouble, carbon shortage: an error printout should be given */
/* and execution stopped */
}
else { /* reduced all COD demand by use of SS, XS, XBH and XBA */
utemp[5] = u[5] - remainc;
utemp[9] = utemp[9] + remainc*fnbac;
}
}
else { /* reduced all COD demand by use of SS, XS and XBH */

```

```

utemp[4] = u[4] - remainb;
utemp[9] = utemp[9] + remainb*fnbac;
}
}
else {          /* reduced all COD demand by use of SS and XS */
utemp[3] = u[3] - remaina;
}
}
else {          /* reduced all COD demand by use of SS */
utemp[1] = u[1] - CODdemand;
}

/*=====
====*/

/* SS becomes part of amino acids when transformed into ADM
* and any remaining SS is mapped to monosacharides (no N contents)
* Enough SND must be available for mapping to amino acids */
sorgn = u[10]/fnaa; /* Saa COD equivalent to SND */
if (sorgn >= utemp[1]) { /* not all SND-N in terms of COD fits into amino acids */
y[1] = utemp[1]; /* map all SS COD into Saa */
utemp[10] = utemp[10] - utemp[1]*fnaa; /* excess SND */
utemp[1] = 0.0;          /* all SS used */
}
else { /* all SND-N fits into amino acids */
    y[1] = sorgn; /* map all SND related COD into Saa */
utemp[1] = utemp[1] - sorgn;          /* excess SS, which will become sugar in ADM1 i.e. no nitrogen
association */
utemp[10] = 0.0;          /* all SND used */
}

/*=====
====*/

/* XS becomes part of Xpr (proteins) when transformed into ADM
* and any remaining XS is mapped to Xch and Xli (no N contents)

```

```

* Enough XND must be available for mapping to Xpr */
xorgn = u[11]/fnaa; /* Xpr COD equivalent to XND */
if (xorgn >= utemp[3]) { /* not all XND-N in terms of COD fits into Xpr */
xprtemp = utemp[3]; /* map all XS COD into Spr */
utemp[11] = utemp[11] - utemp[3]*fnaa; /* excess XND */
utemp[3] = 0.0; /* all XS used */
xlitemp = 0.0;
xchtemp = 0.0;
}
else { /* all XND-N fits into Xpr */
xprtemp = xorgn; /* map all XND related COD into Xpr */
xlitemp = frlixs*(utemp[3] - xorgn); /* part of XS COD not associated with N */
xchtemp = (1.0 - frlixs)*(utemp[3] - xorgn); /* part of XS COD not associated with N */
utemp[3] = 0.0; /* all XS used */
utemp[11] = 0.0; /* all XND used */
}
/*=====
====*/
/* Biomass becomes part of Xpr and XI when transformed into ADM
* and any remaining XBH and XBA is mapped to Xch and Xli (no N contents)
* Remaining XND-N can be used as nitrogen source to form Xpr */
biomass = utemp[4] + utemp[5];
biomass_nobio = biomass*(1.0 - frxs_adm); /* part which is mapped to XI */
biomass_bioN = (biomass*fnbac - biomass_nobio*fxni);
if (biomass_bioN < 0.0) {
/* Problems: if here we should print 'ERROR: not enough biomass N to map the requested inert part' */
/* and execution stopped */
}
if ((biomass_bioN/fnaa) <= (biomass - biomass_nobio)) {
xprtemp2 = biomass_bioN/fnaa; /* all biomass N used */
remainCOD = biomass - biomass_nobio - xprtemp2;
}

```

```

if ((utemp[11]/fnaa) > remainCOD) { /* use part of remaining XND-N to form proteins */
xprtemp2 = xprtemp2 + remainCOD;
utemp[11] = utemp[11] - remainCOD*fnaa;
remainCOD = 0.0;
utemp[4] = 0.0;
utemp[5] = 0.0;
}
else { /* use all remaining XND-N to form proteins */
xprtemp2 = xprtemp2 + utemp[11]/fnaa;
remainCOD = remainCOD - utemp[11]/fnaa;
utemp[11] = 0.0;
}
xlitemp2 = frlibac*remainCOD; /* part of the COD not associated with N */
xchtemp2 = (1.0 - frlibac)*remainCOD; /* part of the COD not associated with N */
}
else {
xprtemp2 = biomass - biomass_nobio; /* all biomass COD used */
utemp[11] = utemp[11] + biomass*fnbac - biomass_nobio*fxni - xprtemp2*fnaa; /* any remaining N in XND */
}
utemp[4] = 0.0;
utemp[5] = 0.0;
/*=====
====*/
/* direct mapping of XI and XP to ADM1 XI (if fdegrade_ad = 0)
* assumption: same N content in both ASM1 and ADM1 particulate inerts */
inertX = (1-fdegrade_adm)*(utemp[2] + utemp[6]);
/* special case: IF part of XI and XP in the ASM can be degraded in the AD
* we have no knowledge about the contents so we put it in as composites (Xc)
* we need to keep track of the associated nitrogen
* N content which may be different, take first from XI&XP-N, then XND-N, then SND-N,
* then SNH. A similar principle could be used for other states. */

```



```

xc = 0.0;

xlitemp3 = 0.0;

xchtemp3 = 0.0;

if (fdegrade_adm > 0) {
noninertX = fdegrade_adm*(utemp[2] + utemp[6]);
if (fxni < fnxc) { /* N in XI&XP(ASM) not enough */
xc = noninertX*fxni/fnxc;
noninertX = noninertX - noninertX*fxni/fnxc;
if (utemp[11] < (noninertX*fnxc)) { /* N in XND not enough */
xc = xc + utemp[11]/fnxc;
noninertX = noninertX - utemp[11]/fnxc;
utemp[11] = 0.0;
if (utemp[10] < (noninertX*fnxc)) { /* N in SND not enough */
xc = xc + utemp[10]/fnxc;
noninertX = noninertX - utemp[10]/fnxc;
utemp[10] = 0.0;
if (utemp[9] < (noninertX*fnxc)) { /* N in SNH not enough */
xc = xc + utemp[9]/fnxc;
noninertX = noninertX - utemp[9]/fnxc;
utemp[9] = 0.0;
/* Should be a WARNING printout: Nitrogen shortage when converting biodegradable XI&XP
* Putting remaining XI&XP as lipids (50%) and carbohydrates (50%) */
xlitemp3 = 0.5*noninertX;
xchtemp3 = 0.5*noninertX;
noninertX = 0.0;
}
else { /* N in SNH enough for mapping */
xc = xc + noninertX;
utemp[9] = utemp[9] - noninertX*fnxc;
noninertX = 0.0;
}
}
}

```

```

}
else { /* N in SND enough for mapping */
xc = xc + noninertX;
utemp[10] = utemp[10] - noninertX*fnxc;
noninertX = 0.0;
}
}
else { /* N in XND enough for mapping */
xc = xc + noninertX;
utemp[11] = utemp[11] - noninertX*fnxc;
noninertX = 0.0;
}
}
else { /* N in XI&XP(ASM) enough for mapping */
xc = xc + noninertX;
utemp[11] = utemp[11] + noninertX*(fxni-fnxc); /* put remaining N as XND */
noninertX = 0;
}
}

/*=====
====*/

/* Mapping of ASM SI to ADM1 SI
* N content may be different, take first from SI-N, then SND-N, then XND-N,
* then SNH. Similar principle could be used for other states. */
inertS = 0.0;
if (fsni < fsni_adm) { /* N in SI(ASM) not enough */
inertS = utemp[0]*fsni/fsni_adm;
utemp[0] = utemp[0] - utemp[0]*fsni/fsni_adm;
if (utemp[10] < (utemp[0]*fsni_adm)) { /* N in SND not enough */
inertS = inertS + utemp[10]/fsni_adm;
utemp[0] = utemp[0] - utemp[10]/fsni_adm;

```

```

utemp[10] = 0.0;
if (utemp[11] < (utemp[0]*fsni_adm)) { /* N in XND not enough */
inertS = inertS + utemp[11]/fsni_adm;
utemp[0] = utemp[0] - utemp[11]/fsni_adm;
utemp[11] = 0.0;
if (utemp[9] < (utemp[0]*fsni_adm)) { /* N in SNH not enough */
inertS = inertS + utemp[9]/fsni_adm;
utemp[0] = utemp[0] - utemp[9]/fsni_adm;
utemp[9] = 0.0;
/* Here there shpuld be a warning printout: Nitrogen shortage when converting SI
* Putting remaining SI as monosacharides */
utemp[1] = utemp[1] + utemp[0];
utemp[0] = 0.0;
}
else { /* N in SNH enough for mapping */
inertS = inertS + utemp[0];
utemp[9] = utemp[9] - utemp[0]*fsni_adm;
utemp[0] = 0.0;
}
}
else { /* N in XND enough for mapping */
inertS = inertS + utemp[0];
utemp[11] = utemp[11] - utemp[0]*fsni_adm;
utemp[0] = 0.0;
}
}
else { /* N in SND enough for mapping */
inertS = inertS + utemp[0];
utemp[10] = utemp[10] - utemp[0]*fsni_adm;
utemp[0] = 0.0;
}
}

```

```

}

else { /* N in SI(ASM) enough for mapping */
inertS = inertS + utemp[0];
utemp[10] = utemp[10] + utemp[0]*(fsni-fsni_adm); /* put remaining N as SND */
utemp[0] = 0.0;
}

/*=====
====*/

/* Define the outputs including charge balance */
y[0] = utemp[1]/1000.0;
y[1] = y[1]/1000.0;
y[10] = (utemp[9] + utemp[10] + utemp[11])/14000.0;
y[11] = inertS/1000.0;
y[12] = xc/1000.0;
y[13] = (xchtemp + xchtemp2 + xchtemp3)/1000.0;
y[14] = (xprtemp + xprtemp2)/1000.0;
y[15] = (xlitemp + xlitemp2 + xlitemp3)/1000.0;
y[23] = (biomass_nobio + inertX)/1000.0;
y[26] = u[14]; /* flow rate */
y[27] = T_op - 273.15; /* temperature, degC */
y[28] = u[16]; /* dummy state */
y[29] = u[17]; /* dummy state */
y[30] = u[18]; /* dummy state */
y[31] = u[19]; /* dummy state */
y[32] = u[20]; /* dummy state */

/* charge balance, output S_IC */
y[9] = ((utemp2[8]*alfa_NO + utemp2[9]*alfa_NH + utemp2[12]*alfa_alk) - (y[3]*alfa_va + y[4]*alfa_bu +
y[5]*alfa_pro + y[6]*alfa_ac + y[10]*alfa_IN))/alfa_co2;

/* calculate anions and cations based on full charge balance including H+ and OH- */
ScatminusSan = y[3]*alfa_va + y[4]*alfa_bu + y[5]*alfa_pro + y[6]*alfa_ac + y[10]*alfa_IN + y[9]*alfa_co2 + pow(10,
(-pK_w + pH_adm)) - pow(10, -pH_adm);

if (ScatminusSan > 0) {

```

```

y[24] = ScatminusSan;

y[25] = 0.0;
}

else {
y[24] = 0.0;
y[25] = -1.0*ScatminusSan;
}

/* Finally there should be a input-output mass balance check here of COD and N */
}

/*
* mdlUpdate - perform action at major integration time step
*/
static void mdlUpdate(double *x, double *u, SimStruct *S, int tid)
{
}

/*
* mdlDerivatives - compute the derivatives
*/
static void mdlDerivatives(double *dx, double *x, double *u, SimStruct *S, int tid)
{
}

/*
* mdlTerminate - called when the simulation is terminated.
*/
static void mdlTerminate(SimStruct *S)
{
}

#ifdef MATLAB_MEX_FILE /* Is this file being compiled as a MEX-file? */
#include "simulink.c" /* MEX-file interface mechanism */
#else
#include "cg_sfun.h" /* Code generation registration function */

```

#endif

## To interface ADM/ASM (adm2asm v3 bsm2)

/\*

- \* New version (no 3) of the ADM1 to ASM1 interface based on discussions
- \* within the IWA TG BSM community during 2002-2006. Now also including charge
- \* balancing and temperature dependency for applicable parameters.
- \* Model parameters are defined in adm1init\_bsm2.m
- \* u is the input in ADM1 terminology + extra dummy states, 33 variables
- \* plus two extra inputs: 1) dynamic pH from the ADM1 system (needed for
- \* accurate charge balancing - also used the ASM1 to ADM1 interface) and
- \* 2) wastewater temperature into the ASM2ADM interface, which is used as
- \* the output temperature from the ADM2ASM interface (assume heat exchangers etc).
- \* If temperature control of AD is used then the operational temperature
- \* of the ADM1 should also be an input rather than a defined parameter.
- \* Temperature in the ADM1 and the ASM1 to ADM1 and the ADM1 to ASM1
- \* interfaces should be identical at every time instant.
- \* The interface assumes identical N-content of particulate inerts in both
- \* AD and AS. The same holds for biomass. The N-content of soluble inerts may vary.
- \*
- \* u is the input in ADM1 terminology + extra dummy states, 33 variables
- \* u[0] : Ssu = monosacharides (kg COD/m3)
- \* u[1] : Saa = amino acids (kg COD/m3)
- \* u[2] : Sfa = long chain fatty acids (LCFA) (kg COD/m3)
- \* u[3] : Sva = total valerate (kg COD/m3)
- \* u[4] : Sbu = total butyrate (kg COD/m3)
- \* u[5] : Spro = total propionate (kg COD/m3)
- \* u[6] : Sac = total acetate (kg COD/m3)
- \* u[7] : Sh2 = hydrogen gas (kg COD/m3)
- \* u[8] : Sch4 = methane gas (kg COD/m3)
- \* u[9] : Sic = inorganic carbon (kmole C/m3)

- \* u[10] :  $S_{in}$  = inorganic nitrogen (kmole N/m<sup>3</sup>)
- \* u[11] :  $S_i$  = soluble inerts (kg COD/m<sup>3</sup>)
- \* u[12] :  $X_c$  = composites (kg COD/m<sup>3</sup>)
- \* u[13] :  $X_{ch}$  = carbohydrates (kg COD/m<sup>3</sup>)
- \* u[14] :  $X_{pr}$  = proteins (kg COD/m<sup>3</sup>)
- \* u[15] :  $X_{li}$  = lipids (kg COD/m<sup>3</sup>)
- \* u[16] :  $X_{su}$  = sugar degraders (kg COD/m<sup>3</sup>)
- \* u[17] :  $X_{aa}$  = amino acid degraders (kg COD/m<sup>3</sup>)
- \* u[18] :  $X_{fa}$  = LCFA degraders (kg COD/m<sup>3</sup>)
- \* u[19] :  $X_{c4}$  = valerate and butyrate degraders (kg COD/m<sup>3</sup>)
- \* u[20] :  $X_{pro}$  = propionate degraders (kg COD/m<sup>3</sup>)
- \* u[21] :  $X_{ac}$  = acetate degraders (kg COD/m<sup>3</sup>)
- \* u[22] :  $X_{h2}$  = hydrogen degraders (kg COD/m<sup>3</sup>)
- \* u[23] :  $X_i$  = particulate inerts (kg COD/m<sup>3</sup>)
- \* u[24] :  $scat^+$  = cations (metallic ions, strong base) (kmole/m<sup>3</sup>)
- \* u[25] :  $san^-$  = anions (metallic ions, strong acid) (kmole/m<sup>3</sup>)
- \* u[26] : flow rate (m<sup>3</sup>/d)
- \* u[27] : temperature (deg C)
- \* u[28:32] : dummy states for future use
- \* u[33] : dynamic pH from the ADM1
- \* u[34] : wastewater temperature into the ASM2ADM interface, deg C
- \*
- \* Output vector:
- \* y[0] :  $S_i$  = soluble inert organic material (g COD/m<sup>3</sup>)
- \* y[1] :  $S_s$  = readily biodegradable substrate (g COD/m<sup>3</sup>)
- \* y[2] :  $X_i$  = particulate inert organic material (g COD/m<sup>3</sup>)
- \* y[3] :  $X_s$  = slowly biodegradable substrate (g COD/m<sup>3</sup>)
- \* y[4] :  $X_{bh}$  = active heterotrophic biomass (g COD/m<sup>3</sup>)
- \* y[5] :  $X_{ba}$  = active autotrophic biomass (g COD/m<sup>3</sup>)
- \* y[6] :  $X_p$  = particulate product arising from biomass decay (g COD/m<sup>3</sup>)
- \* y[7] :  $S_o$  = oxygen (g -COD/m<sup>3</sup>)

```

* y[8] : Sno = nitrate and nitrite nitrogen (g N/m3)
* y[9] : Snh = ammonia and ammonium nitrogen (g N/m3)
* y[10] : Snd = soluble biogradable organic nitrogen (g N/m3)
* y[11] : Xnd = particulate biogradable organic nitrogen (g N/m3)
* y[12] : Salk = alkalinity (mole HCO3-/m3)
* y[13] : TSS = total suspended solids (internal use) (mg SS/l)
* y[14] : flow rate (m3/d)
* y[15] : temperature (deg C)
* y[16:20] : dummy states for future use
*
* ADM1 --> ASM1 conversion, version 3 for BSM2
* Copyright: John Copp, Primodal Inc., Canada; Ulf Jeppsson, Lund
* University, Sweden; Damien Batstone, Univ of Queensland,
* Australia, Ingmar Nopens, Univ of Ghent, Belgium,
* Marie-Noelle Pons, Nancy, France, Peter Vanrolleghem,
* Univ. Laval, Canada, Jens Alex, IFAK, Germany and
* Eveline Volcke, Univ of Ghent, Belgium.
*/
#define S_FUNCTION_NAME adm2asm_v3_bsm2
#include "simstruc.h"
#include <math.h>
#define PAR    ssGetArg(S,0)
/*
* mdlInitializeSizes - initialize the sizes array
*/
static void mdlInitializeSizes(SimStruct *S)
{
ssSetNumContStates( S, 0); /* number of continuous states */
ssSetNumDiscStates( S, 0); /* number of discrete states */
ssSetNumInputs( S, 35); /* number of inputs */
ssSetNumOutputs( S, 21); /* number of outputs */

```



```

ssSetDirectFeedThrough(S, 1); /* direct feedthrough flag */
ssSetNumSampleTimes( S, 1); /* number of sample times */
ssSetNumSFcnParams( S, 1); /* number of input arguments */
ssSetNumRWork( S, 0); /* number of real work vector elements */
ssSetNumIWork( S, 0); /* number of integer work vector elements*/
ssSetNumPWork( S, 0); /* number of pointer work vector elements*/
}
/*
 * mdlInitializeSampleTimes - initialize the sample times array
 */
static void mdlInitializeSampleTimes(SimStruct *S)
{
ssSetSampleTime(S, 0, CONTINUOUS_SAMPLE_TIME);
ssSetOffsetTime(S, 0, 0.0);
}
/*
 * mdlInitializeConditions - initialize the states
 */
static void mdlInitializeConditions(double *x0, SimStruct *S)
{
}
/*
 * mdlOutputs - compute the outputs
 */
static void mdlOutputs(double *y, double *x, double *u, SimStruct *S, int tid)
{
double CODEquiv, fnaa, fnxc, fnbac, fxni, fsni, fsni_adm, frlixs, frlibac, frxs_adm, fdegrade_adm, frxs_as,
fdegrade_as;

double R, T_base, T_op, pK_w_base, pK_a_va_base, pK_a_bu_base, pK_a_pro_base, pK_a_ac_base,
pK_a_co2_base, pK_a_IN_base;

double pH_adm, pK_w, pK_a_co2, pK_a_IN, alfa_va, alfa_bu, alfa_pro, alfa_ac, alfa_co2, alfa_IN, alfa_NH, alfa_alk,
alfa_NO, factor;

```

```

double  XPTemp, XSTemp, XSTemp2;

double biomass, biomass_nobio, biomass_bioN, remainCOD, inertX, noninertX, inertS, utemp[35];

int      i;

/* parameters defined in adm1init_bsm2.m, INTERFACEPAR */
CODEquiv = mxGetPr(PAR)[0]; /* not used in ADM2ASM */

fnaa = mxGetPr(PAR)[1];
fnxc = mxGetPr(PAR)[2];
fnbac = mxGetPr(PAR)[3];
fxni = mxGetPr(PAR)[4];
fsni = mxGetPr(PAR)[5];
fsni_adm = mxGetPr(PAR)[6];
frlixs = mxGetPr(PAR)[7]; /* not used in ADM2ASM */
frlibac = mxGetPr(PAR)[8]; /* not used in ADM2ASM */
frxs_adm = mxGetPr(PAR)[9]; /* not used in ADM2ASM */
fdegrade_adm = mxGetPr(PAR)[10]; /* not used in ADM2ASM */
frxs_as = mxGetPr(PAR)[11];
fdegrade_as = mxGetPr(PAR)[12];
R = mxGetPr(PAR)[13];
T_base = mxGetPr(PAR)[14];
T_op = mxGetPr(PAR)[15]; /* should be an input variable if dynamic temperature control is used */
pK_w_base = mxGetPr(PAR)[16];
pK_a_va_base = mxGetPr(PAR)[17];
pK_a_bu_base = mxGetPr(PAR)[18];
pK_a_pro_base = mxGetPr(PAR)[19];
pK_a_ac_base = mxGetPr(PAR)[20];
pK_a_co2_base = mxGetPr(PAR)[21];
pK_a_IN_base = mxGetPr(PAR)[22];
pH_adm = u[33];
factor = (1.0/T_base - 1.0/T_op)/(100.0*R);
pK_w = pK_w_base - log10(exp(55900.0*factor));
pK_a_co2 = pK_a_co2_base - log10(exp(7646.0*factor));

```

```

pK_a_IN = pK_a_IN_base - log10(exp(51965.0*factor));
alfa_va = 1.0/208.0*(-1.0/(1.0 + pow(10, pK_a_va_base - pH_adm)));
alfa_bu = 1.0/160.0*(-1.0/(1.0 + pow(10, pK_a_bu_base - pH_adm)));
alfa_pro = 1.0/112.0*(-1.0/(1.0 + pow(10, pK_a_pro_base - pH_adm)));
alfa_ac = 1.0/64.0*(-1.0/(1.0 + pow(10, pK_a_ac_base - pH_adm)));
alfa_co2 = -1.0/(1.0 + pow(10, pK_a_co2 - pH_adm));
alfa_IN = (pow(10, pK_a_IN - pH_adm))/(1.0 + pow(10, pK_a_IN - pH_adm));
alfa_NH = 1.0/14000.0; /* convert mgN/l into kmoleN/m3 */
alfa_alk = -0.001; /* convert moleHCO3/m3 into kmoleHCO3/m3 */
alfa_NO = -1.0/14000.0; /* convert mgN/l into kmoleN/m3 */

u[12]=0
u[13]=0
u[14]=0
u[15]=0
u[16]=0
u[17]=0
u[18]=0
u[19]=0
u[20]=0
u[21]=0
u[22]=0
u[23]=0

for (i = 0; i < 35; i++)
utemp[i] = u[i];

for (i = 0; i < 21; i++)
y[i] = 0.0;

/*=====
====*/

/* Biomass becomes part of XS and XP when transformed into ASM
* Assume Npart of formed XS to be fnxc and Npart of XP to be fxni

```

```

* Remaining N goes into the ammonia pool (also used as source if necessary) */
biomass = 1000.0*(utemp[16] + utemp[17] + utemp[18] + utemp[19] + utemp[20] + utemp[21] + utemp[22]);
biomass_nobio = biomass*(1.0 - frxs_as); /* part which is mapped to XP */
biomass_bioN = (biomass*fnbac - biomass_nobio*fxni);
remainCOD = 0.0;
if (biomass_bioN < 0.0) {
/* Problems: if here we should print 'WARNING: not enough biomass N to map the requested inert part of biomass'
*/
/* We map as much as we can, and the remains go to XS! */
XPtemp = biomass*fnbac/fxni;
biomass_nobio = XPtemp;
biomass_bioN = 0.0;
}
else {
XPtemp = biomass_nobio;
}
if ((biomass_bioN/fnxc) <= (biomass - biomass_nobio)) {
XStemp = biomass_bioN/fnxc; /* all biomass N used */
remainCOD = biomass - biomass_nobio - XStemp;
if ((utemp[10]*14000.0/fnaa) >= remainCOD) { /* use part of remaining S_IN to form XS */
XStemp = XStemp + remainCOD;
}
}
else {
/* Problems: if here we should print 'ERROR: not enough nitrogen to map the requested XS part of biomass' */
/* System failure! */
}
}
else {
XStemp = biomass - biomass_nobio; /* all biomass COD used */
}
}

```

```

utemp[10] = utemp[10] + biomass*fnbac/14000.0 - XPtemp*fxni/14000.0 - XStemp*fnxc/14000.0; /* any remaining
N in S_IN */

y[3] = (utemp[12] + utemp[13] + utemp[14] + utemp[15])*1000.0 + XStemp; /* Xs = sum all X except Xi, + biomass
as handled above */

y[6] = XPtemp; /* inert part of biomass */

/*=====
====*/

/* mapping of inert XI in AD into XI and possibly XS in AS

* assumption: same N content in both ASM1 and ADM1 particulate inerts

* special case: if part of XI in AD can be degraded in AS

* we have no knowledge about the contents so we put it in as part substrate (XS)

* we need to keep track of the associated nitrogen

* N content may be different, take first from XI-N then S_IN,

* Similar principle could be used for other states. */

inertX = (1.0-fdegrade_as)*utemp[23]*1000.0;
XStemp2 = 0.0;
noninertX = 0.0;
if (fdegrade_as > 0.0) {
noninertX = fdegrade_as*utemp[23]*1000.0;
if (fxni < fnxc) { /* N in XI(AD) not enough */
XStemp2 = noninertX*fxni/fnxc;
noninertX = noninertX - noninertX*fxni/fnxc;
if ((utemp[10]*14000.0) < (noninertX*fnxc)) { /* N in SNH not enough */
XStemp2 = XStemp2 + (utemp[10]*14000.0)/fnxc;
noninertX = noninertX - (utemp[10]*14000.0)/fnxc;
utemp[10] = 0.0;

/* Problems: if here we should print 'WARNING: Nitrogen shortage when converting biodegradable XI' */

/* Mapping what we can to XS and putting remaining XI back into XI of ASM */

inertX = inertX + noninertX;
}
else { /* N in S_IN enough for mapping */
XStemp2 = XStemp2 + noninertX;

```

```

utemp[10] = utemp[10] - noninertX*fnxc/14000.0;
noninertX = 0.0;
}
}
else { /* N in XI(AD) enough for mapping */
XStemp2 = XStemp2 + noninertX;
utemp[10] = utemp[10] + noninertX*(fxni - fnxc)/14000.0; /* put remaining N as S_IN */
noninertX = 0;
}
}
y[2] = inertX; /* Xi = Xi*fdegrade_AS + possibly nonmappable XS */
y[3] = y[3] + XStemp2; /* extra added XS (biodegradable XI) */
/*=====
====*/
/* Mapping of ADM SI to ASM1 SI
* It is assumed that this mapping will be 100% on COD basis
* N content may be different, take first from SI-N then from S_IN.
* Similar principle could be used for other states. */
inertS = 0.0;
if (fsni_adm < fsni) { /* N in SI(AD) not enough */
inertS = utemp[11]*fsni_adm/fsni;
utemp[11] = utemp[11] - utemp[11]*fsni_adm/fsni;
if ((utemp[10]*14.0) < (utemp[11]*fsni)) { /* N in S_IN not enough */
inertS = inertS + utemp[10]*14.0/fsni;
utemp[11] = utemp[11] - utemp[10]*14.0/fsni;
utemp[10] = 0.0;
/* Problems: if here we should print 'ERROR: Nitrogen shortage when converting SI' */
/* System failure: nowhere to put SI */
}
else { /* N in S_IN enough for mapping */
inertS = inertS + utemp[11];

```

```

utemp[10] = utemp[10] - utemp[11]*fsni/14.0;
utemp[11] = 0.0;
}
}
else { /* N in SI(AD) enough for mapping */
inertS = inertS + utemp[11];
utemp[10] = utemp[10] + utemp[11]*(fsni_adm - fsni)/14.0; /* put remaining N as S_IN */
utemp[11] = 0.0;
}
y[0] = inertS*1000.0;          /* Si = Si */

/*=====
====*/

/* Define the outputs including charge balance */
/* nitrogen in biomass, composites, proteins
* Xnd is the nitrogen part of Xs in ASM1. Therefore Xnd should be based on the
* same variables as constitutes Xs, ie AD biomass (part not mapped to XP), xc and xpr if we assume
* there is no nitrogen in carbohydrates and lipids. The N content of Xi is
* not included in Xnd in ASM1 and should in my view not be included. */
y[11] = fnxc*(XStemp + XStemp2) + fnxc*1000.0*utemp[12] + fnaa*1000.0*utemp[14];
/* Snd is the nitrogen part of Ss in ASM1. Therefore Snd should be based on the
* same variables as constitutes Ss, and we assume
* there is only nitrogen in the amino acids. The N content of Si is
* not included in Snd in ASM1 and should in my view not be included. */
y[10] = fnaa*1000.0*utemp[1];

/* sh2 and sch4 assumed to be stripped upon reentry to ASM side */
y[1] = (utemp[0] + utemp[1] + utemp[2] + utemp[3] + utemp[4] + utemp[5] + utemp[6])*1000.0; /* Ss = sum all S
except Sh2, Sch4, Si, Sic, Sin */
y[9] = utemp[10]*14000.0;          /* Snh = S_IN including adjustments above */
y[13] = 0.75*(y[2] + y[3] + y[4] + y[5] + y[6]);
y[14] = utemp[26]; /* flow rate */
y[15] = u[34]; /* temperature, degC, should be equal to AS temperature into the AD/AS interface */

```

```

y[16] = utemp[28]; /* dummy state */
y[17] = utemp[29]; /* dummy state */
y[18] = utemp[30]; /* dummy state */
y[19] = utemp[31]; /* dummy state */
y[20] = utemp[32]; /* dummy state */

/* charge balance, output S_alk (molHCO3/m3) */

y[12] = (u[3]*alfa_va + u[4]*alfa_bu + u[5]*alfa_pro + u[6]*alfa_ac + u[9]*alfa_co2 + u[10]*alfa_IN - y[8]*alfa_NO -
y[9]*alfa_NH)/alfa_alk;

/* Finally there should be a input-output mass balance check here of COD and N */
}
/*
* mdlUpdate - perform action at major integration time step
*/
static void mdlUpdate(double *x, double *u, SimStruct *S, int tid)
{
}
/*
* mdlDerivatives - compute the derivatives
*/
static void mdlDerivatives(double *dx, double *x, double *u, SimStruct *S, int tid)
{
}
/*
* mdlTerminate - called when the simulation is terminated.
*/
static void mdlTerminate(SimStruct *S)
{
}

#ifdef MATLAB_MEX_FILE /* Is this file being compiled as a MEX-file? */
#include "simulink.c" /* MEX-file interface mechanism */
#else

```



```
#include "cg_sfun.h" /* Code generation registration function */
```

```
#endif
```

## O βασικός κώδικας του αντιδραστήρα (adm1 ODE bsm2)1a

```
/*
```

```
* adm1_ODE_bsm2.c is a C-file S-function for IAWQ AD Model No 1.
```

```
* In addition to the ADM1, temperature dependency and dummy states are added.
```

```
* Some details are adjusted for BSM2 (pH inhibition, gas flow output etc).
```

```
*
```

```
* Copyright (2006):
```

```
* Dr Christian Rosen, Dr Darko Vrecko and Dr Ulf Jeppsson
```

```
* Dept. Industrial Electrical Engineering and Automation (IEA)
```

```
* Lund University, Sweden
```

```
* http://www.iea.lth.se/
```

```
*/
```

```
#define S_FUNCTION_NAME adm1_ODE_bsm2
```

```
#include "simstruc.h"
```

```
#include <math.h>
```

```
#define XINIT ssGetArg(S,0)
```

```
#define PAR      ssGetArg(S,1)
```

```
#define V        ssGetArg(S,2)
```

```
/*
```

```
* mdlInitializeSizes - initialize the sizes array
```

```
*/
```

```
static void mdlInitializeSizes(SimStruct *S)
```

```
{
```

```
ssSetNumContStates( S, 42); /* number of continuous states */
```

```
ssSetNumDiscStates( S, 0); /* number of discrete states */
```

```
ssSetNumInputs( S, 33); /* number of inputs */
```

```
ssSetNumOutputs( S, 51); /* number of outputs */
```

```
ssSetDirectFeedThrough(S, 1); /* direct feedthrough flag */
```

```

ssSetNumSampleTimes( S, 1); /* number of sample times */
ssSetNumSFcnParams( S, 3); /* number of input arguments */
ssSetNumRWork( S, 0); /* number of real work vector elements */
ssSetNumIWork( S, 0); /* number of integer work vector elements*/
ssSetNumPWork( S, 0); /* number of pointer work vector elements*/
}
/*
 * mdlInitializeSampleTimes - initialize the sample times array
 */
static void mdlInitializeSampleTimes(SimStruct *S)
{
ssSetSampleTime(S, 0, CONTINUOUS_SAMPLE_TIME);
ssSetOffsetTime(S, 0, 0.0);
}
/*
 * mdlInitializeConditions - initialize the states
 */
static void mdlInitializeConditions(double *x0, SimStruct *S)
{
int i;
for (i = 0; i < 42; i++) {
x0[i] = mxGetPr(XINIT)[i];
}
}
/*
 * mdlOutputs - compute the outputs
 */
static void mdlOutputs(double *y, double *x, double *u, SimStruct *S, int tid)
{
double R, T_base, T_op, P_atm, p_gas_h2o, P_gas, k_P, q_gas, V_liq, procT8, procT9, procT10, p_gas_h2, p_gas_ch4,
p_gas_co2;

```

```

double kLa, K_H_h2_base, K_H_ch4_base, K_H_co2_base, phi, S_H_ion, pK_w_base, K_H_h2o_base, K_H_h2,
K_H_ch4, K_H_co2, K_w, factor;

int i;

R = mxGetPr(PAR)[77];

T_base = mxGetPr(PAR)[78];

T_op = mxGetPr(PAR)[79];

P_atm = mxGetPr(PAR)[93];

V_liq = mxGetPr(V)[0];

kLa = mxGetPr(PAR)[94];

K_H_h2_base = mxGetPr(PAR)[98];

K_H_ch4_base = mxGetPr(PAR)[97];

K_H_co2_base = mxGetPr(PAR)[96];

K_H_h2o_base = mxGetPr(PAR)[95];

pK_w_base = mxGetPr(PAR)[80];

k_P = mxGetPr(PAR)[99];

factor = (1.0/T_base - 1.0/T_op)/(100.0*R);

K_H_h2 = K_H_h2_base*exp(-4180.0*factor); /* T adjustment for K_H_h2 */
K_H_ch4 = K_H_ch4_base*exp(-14240.0*factor); /* T adjustment for K_H_ch4 */
K_H_co2 = K_H_co2_base*exp(-19410.0*factor); /* T adjustment for K_H_co2 */
K_w = pow(10,-pK_w_base)*exp(55900.0*factor); /* T adjustment for K_w */

p_gas_h2o = K_H_h2o_base*exp(5290.0*(1.0/T_base - 1.0/T_op)); /* T adjustment for water vapour saturation
pressure */

for (i = 0; i < 26; i++) {

y[i] = x[i];

}

y[26] = u[26]; /* flow */

y[27] = T_op - 273.15; /* Temp = 35 degC */

y[28] = u[28]; /* Dummy state 1, soluble */

y[29] = u[29]; /* Dummy state 2, soluble */

y[30] = u[30]; /* Dummy state 3, soluble */

y[31] = u[31]; /* Dummy state 1, particulate */

```

```

y[32] = u[32]; /* Dummy state 2, particulate */
p_gas_h2 = x[32]*R*T_op/16.0;
p_gas_ch4 = x[33]*R*T_op/64.0;
p_gas_co2 = x[34]*R*T_op;
P_gas = p_gas_h2 + p_gas_ch4 + p_gas_co2 + p_gas_h2o;
q_gas = k_P*(P_gas - P_atm);
if (q_gas < 0)
q_gas = 0.0;
procT8 = kLa*(x[7] - 16.0*K_H_h2*p_gas_h2);
procT9 = kLa*(x[8] - 64.0*K_H_ch4*p_gas_ch4);
procT10 = kLa*((x[9] - x[30]) - K_H_co2*p_gas_co2);
phi = x[24]+(x[10]-x[31])-x[30]-x[29]/64.0-x[28]/112.0-x[27]/160.0-x[26]/208.0-x[25];
S_H_ion = -phi*0.5+0.5*sqrt(phi*phi+4.0*K_w);
y[33] = -log10(S_H_ion); /* pH */
y[34] = S_H_ion; /* SH+ */
y[35] = x[26]; /* Sva- */
y[36] = x[27]; /* Sbu- */
y[37] = x[28]; /* Spro- */
y[38] = x[29]; /* Sac- */
y[39] = x[30]; /* Shco3- */
y[40] = x[9] - x[30]; /* SCO2 */
y[41] = x[31]; /* Snh3 */
y[42] = x[10] - x[31]; /* SNH4+ */
y[43] = x[32]; /* Sgas,h2 */
y[44] = x[33]; /* Sgas,ch4 */
y[45] = x[34]; /* Sgas,co2 */
y[46] = p_gas_h2;
y[47] = p_gas_ch4;
y[48] = p_gas_co2;
y[49] = P_gas; /* total head space pressure from H2, CH4, CO2 and H2O */
y[50] = q_gas * P_gas/P_atm; /* The output gas flow is recalculated to atmospheric pressure (normalization) */

```

```

}

/*
 * mdlUpdate - perform action at major integration time step
 */
static void mdlUpdate(double *x, double *u, SimStruct *S, int tid)
{
}

/*
 * mdlDerivatives - compute the derivatives
 */
static void mdlDerivatives(double *dx, double *x, double *u, SimStruct *S, int tid)
{
double f_sl_xc, f_xl_xc, f_ch_xc, f_pr_xc, f_li_xc, N_xc, N_l, N_aa, C_xc, C_sl, C_ch;
double C_pr, C_li, C_xl, C_su, C_aa, f_fa_li, C_fa, f_h2_su, f_bu_su, f_pro_su, f_ac_su;
double N_bac, C_bu, C_pro, C_ac, C_bac, Y_su, f_h2_aa, f_va_aa, f_bu_aa, f_pro_aa, f_ac_aa;
double C_va, Y_aa, Y_fa, Y_c4, Y_pro, C_ch4, Y_ac, Y_h2;
double k_dis, k_hyd_ch, k_hyd_pr, k_hyd_li, K_S_IN, k_m_su, K_S_su, pH_UL_aa, pH_LL_aa;
double k_m_aa, K_S_aa, k_m_fa, K_S_fa, K_lh2_fa, k_m_c4, K_S_c4, K_lh2_c4, k_m_pro, K_S_pro;
double K_lh2_pro, k_m_ac, K_S_ac, K_l_nh3, pH_UL_ac, pH_LL_ac, k_m_h2, K_S_h2, pH_UL_h2, pH_LL_h2;
double k_dec_Xsu, k_dec_Xaa, k_dec_Xfa, k_dec_Xc4, k_dec_Xpro, k_dec_Xac, k_dec_Xh2;
double R, T_base, T_op, pK_w_base, pK_a_va_base, pK_a_bu_base, pK_a_pro_base, pK_a_ac_base,
pK_a_co2_base, pK_a_IN_base;
double K_w, K_a_va, K_a_bu, K_a_pro, K_a_ac, K_a_co2, K_a_IN, K_H_co2, K_H_ch4, K_H_h2;
double K_A_Bva, K_A_Bbu, K_A_Bpro, K_A_Bac, K_A_Bco2, K_A_BIN;
double P_atm, p_gas_h2o, P_gas, k_P, kLa, K_H_h2o_base, K_H_co2_base, K_H_ch4_base, K_H_h2_base, factor;
double V_liq, V_gas;
double eps, pH_op, phi, S_H_ion;
double proc1, proc2, proc3, proc4, proc5, proc6, proc7, proc8, proc9, proc10, proc11, proc12, proc13;
double proc14, proc15, proc16, proc17, proc18, proc19, procA4, procA5, procA6, procA7, procA10, procA11;
double procT8, procT9, procT10;
double I_pH_aa, I_pH_ac, I_pH_h2, I_IN_lim, I_h2_fa, I_h2_c4, I_h2_pro, I_nh3;

```

```
double reac1, reac2, reac3, reac4, reac5, reac6, reac7, reac8, reac9, reac10, reac11, reac12, reac13;

double reac14, reac15, reac16, reac17, reac18, reac19, reac20, reac21, reac22, reac23, reac24;

double stoich1, stoich2, stoich3, stoich4, stoich5, stoich6, stoich7, stoich8, stoich9, stoich10, stoich11, stoich12,
stoich13;

double xtemp[42], inhib[6];

double p_gas_h2, p_gas_ch4, p_gas_co2, q_gas;

double pHLim_aa, pHLim_ac, pHLim_h2, a_aa, a_ac, a_h2, n_aa, n_ac, n_h2;

int i;

eps = 0.000001;

f_sl_xc = mxGetPr(PAR)[0];
f_xl_xc = mxGetPr(PAR)[1];
f_ch_xc = mxGetPr(PAR)[2];
f_pr_xc = mxGetPr(PAR)[3];
f_li_xc = mxGetPr(PAR)[4];
N_xc = mxGetPr(PAR)[5];
N_l = mxGetPr(PAR)[6];
N_aa = mxGetPr(PAR)[7];
C_xc = mxGetPr(PAR)[8];
C_sl = mxGetPr(PAR)[9];
C_ch = mxGetPr(PAR)[10];
C_pr = mxGetPr(PAR)[11];
C_li = mxGetPr(PAR)[12];
C_xl = mxGetPr(PAR)[13];
C_su = mxGetPr(PAR)[14];
C_aa = mxGetPr(PAR)[15];
f_fa_li = mxGetPr(PAR)[16];
C_fa = mxGetPr(PAR)[17];
f_h2_su = mxGetPr(PAR)[18];
f_bu_su = mxGetPr(PAR)[19];
f_pro_su = mxGetPr(PAR)[20];
f_ac_su = mxGetPr(PAR)[21];
```

N\_bac = mxGetPr(PAR)[22];  
C\_bu = mxGetPr(PAR)[23];  
C\_pro = mxGetPr(PAR)[24];  
C\_ac = mxGetPr(PAR)[25];  
C\_bac = mxGetPr(PAR)[26];  
Y\_su = mxGetPr(PAR)[27];  
f\_h2\_aa = mxGetPr(PAR)[28];  
f\_va\_aa = mxGetPr(PAR)[29];  
f\_bu\_aa = mxGetPr(PAR)[30];  
f\_pro\_aa = mxGetPr(PAR)[31];  
f\_ac\_aa = mxGetPr(PAR)[32];  
C\_va = mxGetPr(PAR)[33];  
Y\_aa = mxGetPr(PAR)[34];  
Y\_fa = mxGetPr(PAR)[35];  
Y\_c4 = mxGetPr(PAR)[36];  
Y\_pro = mxGetPr(PAR)[37];  
C\_ch4 = mxGetPr(PAR)[38];  
Y\_ac = mxGetPr(PAR)[39];  
Y\_h2 = mxGetPr(PAR)[40];  
k\_dis = mxGetPr(PAR)[41];  
k\_hyd\_ch = mxGetPr(PAR)[42];  
k\_hyd\_pr = mxGetPr(PAR)[43];  
k\_hyd\_li = mxGetPr(PAR)[44];  
K\_S\_IN = mxGetPr(PAR)[45];  
k\_m\_su = mxGetPr(PAR)[46];  
K\_S\_su = mxGetPr(PAR)[47];  
pH\_UL\_aa = mxGetPr(PAR)[48];  
pH\_LL\_aa = mxGetPr(PAR)[49];  
k\_m\_aa = mxGetPr(PAR)[50];  
K\_S\_aa = mxGetPr(PAR)[51];  
k\_m\_fa = mxGetPr(PAR)[52];

K\_S\_fa = mxGetPr(PAR)[53];  
K\_lh2\_fa = mxGetPr(PAR)[54];  
k\_m\_c4 = mxGetPr(PAR)[55];  
K\_S\_c4 = mxGetPr(PAR)[56];  
K\_lh2\_c4 = mxGetPr(PAR)[57];  
k\_m\_pro = mxGetPr(PAR)[58];  
K\_S\_pro = mxGetPr(PAR)[59];  
K\_lh2\_pro = mxGetPr(PAR)[60];  
k\_m\_ac = mxGetPr(PAR)[61];  
K\_S\_ac = mxGetPr(PAR)[62];  
K\_l\_nh3 = mxGetPr(PAR)[63];  
pH\_UL\_ac = mxGetPr(PAR)[64];  
pH\_LL\_ac = mxGetPr(PAR)[65];  
k\_m\_h2 = mxGetPr(PAR)[66];  
K\_S\_h2 = mxGetPr(PAR)[67];  
pH\_UL\_h2 = mxGetPr(PAR)[68];  
pH\_LL\_h2 = mxGetPr(PAR)[69];  
k\_dec\_Xsu = mxGetPr(PAR)[70];  
k\_dec\_Xaa = mxGetPr(PAR)[71];  
k\_dec\_Xfa = mxGetPr(PAR)[72];  
k\_dec\_Xc4 = mxGetPr(PAR)[73];  
k\_dec\_Xpro = mxGetPr(PAR)[74];  
k\_dec\_Xac = mxGetPr(PAR)[75];  
k\_dec\_Xh2 = mxGetPr(PAR)[76];  
R = mxGetPr(PAR)[77];  
T\_base = mxGetPr(PAR)[78];  
T\_op = mxGetPr(PAR)[79];  
pK\_w\_base = mxGetPr(PAR)[80];  
pK\_a\_va\_base = mxGetPr(PAR)[81];  
pK\_a\_bu\_base = mxGetPr(PAR)[82];  
pK\_a\_pro\_base = mxGetPr(PAR)[83];



```

pK_a_ac_base = mxGetPr(PAR)[84];
pK_a_co2_base = mxGetPr(PAR)[85];
pK_a_IN_base = mxGetPr(PAR)[86];
K_A_Bva = mxGetPr(PAR)[87];
K_A_Bbu = mxGetPr(PAR)[88];
K_A_Bpro = mxGetPr(PAR)[89];
K_A_Bac = mxGetPr(PAR)[90];
K_A_Bco2 = mxGetPr(PAR)[91];
K_A_BIN = mxGetPr(PAR)[92];
P_atm = mxGetPr(PAR)[93];
kLa = mxGetPr(PAR)[94];
K_H_h2o_base = mxGetPr(PAR)[95];
K_H_co2_base = mxGetPr(PAR)[96];
K_H_ch4_base = mxGetPr(PAR)[97];
K_H_h2_base = mxGetPr(PAR)[98];
k_P = mxGetPr(PAR)[99];
V_liq = mxGetPr(V)[0];
V_gas = mxGetPr(V)[1];
for (i = 0; i < 42; i++) {
if (x[i] < 0)
xtemp[i] = 0;
else
xtemp[i] = x[i];
}
factor = (1.0/T_base - 1.0/T_op)/(100.0*R);
K_w = pow(10,-pK_w_base)*exp(55900.0*factor); /* T adjustment for K_w */
K_a_va = pow(10,-pK_a_va_base);
K_a_bu = pow(10,-pK_a_bu_base);
K_a_pro = pow(10,-pK_a_pro_base);
K_a_ac = pow(10,-pK_a_ac_base);
K_a_co2 = pow(10,-pK_a_co2_base)*exp(7646.0*factor); /* T adjustment for K_a_co2 */

```

```

K_a_IN = pow(10,-pK_a_IN_base)*exp(51965.0*factor); /* T adjustment for K_a_IN */
K_H_h2 = K_H_h2_base*exp(-4180.0*factor); /* T adjustment for K_H_h2 */
K_H_ch4 = K_H_ch4_base*exp(-14240.0*factor); /* T adjustment for K_H_ch4 */
K_H_co2 = K_H_co2_base*exp(-19410.0*factor); /* T adjustment for K_H_co2 */
p_gas_h2o = K_H_h2o_base*exp(5290.0*(1.0/T_base - 1.0/T_op)); /* T adjustment for water vapour saturation
pressure */
phi      =      xtemp[24]+(xtemp[10]-xtemp[31])-xtemp[30]-xtemp[29]/64.0-xtemp[28]/112.0-xtemp[27]/160.0-
xtemp[26]/208.0-xtemp[25];
S_H_ion = -phi*0.5+0.5*sqrt(phi*phi+4.0*K_w); /* SH+ */
pH_op = -log10(S_H_ion); /* pH */
p_gas_h2 = xtemp[32]*R*T_op/16.0;
p_gas_ch4 = xtemp[33]*R*T_op/64.0;
p_gas_co2 = xtemp[34]*R*T_op;
P_gas = p_gas_h2 + p_gas_ch4 + p_gas_co2 + p_gas_h2o;
/* STRs pH inhibition function
if (pH_op < pH_UL_aa)
I_pH_aa = exp(-3.0*(pH_op-pH_UL_aa)*(pH_op-pH_UL_aa)/((pH_UL_aa-pH_LL_aa)*(pH_UL_aa-pH_LL_aa)));
else
I_pH_aa = 1.0;
if (pH_op < pH_UL_ac)
I_pH_ac = exp(-3.0*(pH_op-pH_UL_ac)*(pH_op-pH_UL_ac)/((pH_UL_ac-pH_LL_ac)*(pH_UL_ac-pH_LL_ac)));
else
I_pH_ac = 1.0;
if (pH_op < pH_UL_h2)
I_pH_h2 = exp(-3.0*(pH_op-pH_UL_h2)*(pH_op-pH_UL_h2)/((pH_UL_h2-pH_LL_h2)*(pH_UL_h2-pH_LL_h2)));
else
I_pH_h2 = 1.0;
*/
/* Hill function on pH inhibition
pHLim_aa = (pH_UL_aa + pH_LL_aa)/2.0;
pHLim_ac = (pH_UL_ac + pH_LL_ac)/2.0;

```

```

pHLim_h2 = (pH_UL_h2 + pH_LL_h2)/2.0;
I_pH_aa = pow(pH_op,24)/(pow(pH_op,24)+pow(pHLim_aa ,24));
I_pH_ac = pow(pH_op,45)/(pow(pH_op,45)+pow(pHLim_ac ,45));
I_pH_h2 = pow(pH_op,45)/(pow(pH_op,45)+pow(pHLim_h2 ,45));
*/
/* MNPs function on pH inhibition, ADM1 Workshop, Copenhagen 2005.
a_aa = 25.0/(pH_UL_aa-pH_LL_aa+eps);
a_ac = 25.0/(pH_UL_ac-pH_LL_ac+eps);
a_h2 = 25.0/(pH_UL_h2-pH_LL_h2+eps);
I_pH_aa = 0.5*(1+tanh(a_aa*(pH_op/pHLim_aa - 1.0)));
I_pH_ac = 0.5*(1+tanh(a_ac*(pH_op/pHLim_ac - 1.0)));
I_pH_h2 = 0.5*(1+tanh(a_h2*(pH_op/pHLim_h2 - 1.0)));
*/
/* Hill function on SH+ used within BSM2, ADM1 Workshop, Copenhagen 2005. */
pHLim_aa = pow(10,-(pH_UL_aa + pH_LL_aa)/2.0);
pHLim_ac = pow(10,-(pH_UL_ac + pH_LL_ac)/2.0);
pHLim_h2 = pow(10,-(pH_UL_h2 + pH_LL_h2)/2.0);
n_aa = 3.0/(pH_UL_aa-pH_LL_aa);
n_ac = 3.0/(pH_UL_ac-pH_LL_ac);
n_h2 = 3.0/(pH_UL_h2-pH_LL_h2);
I_pH_aa = pow(pHLim_aa,n_aa)/(pow(S_H_ion,n_aa)+pow(pHLim_aa ,n_aa));
I_pH_ac = pow(pHLim_ac,n_ac)/(pow(S_H_ion,n_ac)+pow(pHLim_ac ,n_ac));
I_pH_h2 = pow(pHLim_h2,n_h2)/(pow(S_H_ion,n_h2)+pow(pHLim_h2 ,n_h2));
I_IN_lim = 1.0/(1.0+K_S_IN/xtemp[10]);
I_h2_fa = 1.0/(1.0+xtemp[7]/K_lh2_fa);
I_h2_c4 = 1.0/(1.0+xtemp[7]/K_lh2_c4);
I_h2_pro = 1.0/(1.0+xtemp[7]/K_lh2_pro);
I_nh3 = 1.0/(1.0+xtemp[31]/K_I_nh3);
inhib[0] = I_pH_aa*I_IN_lim;
inhib[1] = inhib[0]*I_h2_fa;
inhib[2] = inhib[0]*I_h2_c4;

```

```

inhib[3] = inhib[0]*I_h2_pro;
inhib[4] = I_pH_ac*I_IN_lim*I_nh3;
inhib[5] = I_pH_h2*I_IN_lim;
proc1 = k_dis*xtemp[12];
proc2 = k_hyd_ch*xtemp[13];
proc3 = k_hyd_pr*xtemp[14];
proc4 = k_hyd_li*xtemp[15];
proc5 = k_m_su*xtemp[0]/(K_S_su+xtemp[0])*xtemp[16]*inhib[0];
proc6 = k_m_aa*xtemp[1]/(K_S_aa+xtemp[1])*xtemp[17]*inhib[0];
proc7 = k_m_fa*xtemp[2]/(K_S_fa+xtemp[2])*xtemp[18]*inhib[1];
proc8 = k_m_c4*xtemp[3]/(K_S_c4+xtemp[3])*xtemp[19]*xtemp[3]/(xtemp[3]+xtemp[4]+eps)*inhib[2];
proc9 = k_m_c4*xtemp[4]/(K_S_c4+xtemp[4])*xtemp[19]*xtemp[4]/(xtemp[3]+xtemp[4]+eps)*inhib[2];
proc10 = k_m_pro*xtemp[5]/(K_S_pro+xtemp[5])*xtemp[20]*inhib[3];
proc11 = k_m_ac*xtemp[6]/(K_S_ac+xtemp[6])*xtemp[21]*inhib[4];
proc12 = k_m_h2*xtemp[7]/(K_S_h2+xtemp[7])*xtemp[22]*inhib[5];
proc13 = k_dec_Xsu*xtemp[16];
proc14 = k_dec_Xaa*xtemp[17];
proc15 = k_dec_Xfa*xtemp[18];
proc16 = k_dec_Xc4*xtemp[19];
proc17 = k_dec_Xpro*xtemp[20];
proc18 = k_dec_Xac*xtemp[21];
proc19 = k_dec_Xh2*xtemp[22];
procA4 = K_A_Bva*(xtemp[26]*(K_a_va+S_H_ion)-K_a_va*xtemp[3]);
procA5 = K_A_Bbu*(xtemp[27]*(K_a_bu+S_H_ion)-K_a_bu*xtemp[4]);
procA6 = K_A_Bpro*(xtemp[28]*(K_a_pro+S_H_ion)-K_a_pro*xtemp[5]);
procA7 = K_A_Bac*(xtemp[29]*(K_a_ac+S_H_ion)-K_a_ac*xtemp[6]);
procA10 = K_A_Bco2*(xtemp[30]*(K_a_co2+S_H_ion)-K_a_co2*xtemp[9]);
procA11 = K_A_BIN*(xtemp[31]*(K_a_IN+S_H_ion)-K_a_IN*xtemp[10]);
procT8 = kLa*(xtemp[7]-16.0*K_H_h2*p_gas_h2);
procT9 = kLa*(xtemp[8]-64.0*K_H_ch4*p_gas_ch4);
procT10 = kLa*((xtemp[9]-xtemp[30])-K_H_co2*p_gas_co2);

```

```

stoich1 = -C_xc+f_sl_xc*C_sl+f_ch_xc*C_ch+f_pr_xc*C_pr+f_li_xc*C_li+f_xl_xc*C_xl;
stoich2 = -C_ch+C_su;
stoich3 = -C_pr+C_aa;
stoich4 = -C_li+(1.0-f_fa_li)*C_su+f_fa_li*C_fa;
stoich5 = -C_su+(1.0-Y_su)*(f_bu_su*C_bu+f_pro_su*C_pro+f_ac_su*C_ac)+Y_su*C_bac;
stoich6 = -C_aa+(1.0-Y_aa)*(f_va_aa*C_va+f_bu_aa*C_bu+f_pro_aa*C_pro+f_ac_aa*C_ac)+Y_aa*C_bac;
stoich7 = -C_fa+(1.0-Y_fa)*0.7*C_ac+Y_fa*C_bac;
stoich8 = -C_va+(1.0-Y_c4)*0.54*C_pro+(1.0-Y_c4)*0.31*C_ac+Y_c4*C_bac;
stoich9 = -C_bu+(1.0-Y_c4)*0.8*C_ac+Y_c4*C_bac;
stoich10 = -C_pro+(1.0-Y_pro)*0.57*C_ac+Y_pro*C_bac;
stoich11 = -C_ac+(1.0-Y_ac)*C_ch4+Y_ac*C_bac;
stoich12 = (1.0-Y_h2)*C_ch4+Y_h2*C_bac;
stoich13 = -C_bac+C_xc;
reac1 = proc2+(1.0-f_fa_li)*proc4-proc5;
reac2 = proc3-proc6;
reac3 = f_fa_li*proc4-proc7;
reac4 = (1.0-Y_aa)*f_va_aa*proc6-proc8;
reac5 = (1.0-Y_su)*f_bu_su*proc5+(1.0-Y_aa)*f_bu_aa*proc6-proc9;
reac6 = (1.0-Y_su)*f_pro_su*proc5+(1.0-Y_aa)*f_pro_aa*proc6+(1.0-Y_c4)*0.54*proc8-proc10;
reac7 = (1.0-Y_su)*f_ac_su*proc5+(1.0-Y_aa)*f_ac_aa*proc6+(1.0-Y_fa)*0.7*proc7+(1.0-Y_c4)*0.31*proc8+(1.0-
Y_c4)*0.8*proc9+(1.0-Y_pro)*0.57*proc10-proc11;
reac8 = (1.0-Y_su)*f_h2_su*proc5+(1.0-Y_aa)*f_h2_aa*proc6+(1.0-Y_fa)*0.3*proc7+(1.0-Y_c4)*0.15*proc8+(1.0-
Y_c4)*0.2*proc9+(1.0-Y_pro)*0.43*proc10-proc12-proc13;
reac9 = (1.0-Y_ac)*proc11+(1.0-Y_h2)*proc12-proc13;
reac10 = -stoich1*proc1-stoich2*proc2-stoich3*proc3-stoich4*proc4-stoich5*proc5-stoich6*proc6-stoich7*proc7-
stoich8*proc8-stoich9*proc9-stoich10*proc10-stoich11*proc11-stoich12*proc12-stoich13*proc13-
stoich13*proc14-stoich13*proc15-stoich13*proc16-stoich13*proc17-stoich13*proc18-stoich13*proc19-proc10;
reac11 = (N_xc-f_xl_xc*N_l-f_sl_xc*N_l-f_pr_xc*N_aa)*proc1-Y_su*N_bac*proc5+(N_aa-Y_aa*N_bac)*proc6-
Y_fa*N_bac*proc7-Y_c4*N_bac*proc8-Y_c4*N_bac*proc9-Y_pro*N_bac*proc10-Y_ac*N_bac*proc11-
Y_h2*N_bac*proc12+(N_bac-N_xc)*(proc13+proc14+proc15+proc16+proc17+proc18+proc19);
reac12 = f_sl_xc*proc1;
reac13 = -proc1+proc13+proc14+proc15+proc16+proc17+proc18+proc19;
reac14 = f_ch_xc*proc1-proc2;

```

```

reac15 = f_pr_xc*proc1-proc3;
reac16 = f_li_xc*proc1-proc4;
reac17 = Y_su*proc5-proc13;
reac18 = Y_aa*proc6-proc14;
reac19 = Y_fa*proc7-proc15;
reac20 = Y_c4*proc8+Y_c4*proc9-proc16;
reac21 = Y_pro*proc10-proc17;
reac22 = Y_ac*proc11-proc18;
reac23 = Y_h2*proc12-proc19;
reac24 = f_xl_xc*proc1;
q_gas = k_P*(P_gas-P_atm);
if (q_gas < 0)
q_gas = 0.0;
dx[0] = 1.0/V_liq*(u[26]*(u[0]-x[0]))+reac1;
dx[1] = 1.0/V_liq*(u[26]*(u[1]-x[1]))+reac2;
dx[2] = 1.0/V_liq*(u[26]*(u[2]-x[2]))+reac3;
dx[3] = 1.0/V_liq*(u[26]*(u[3]-x[3]))+reac4; /* Sva */
dx[4] = 1.0/V_liq*(u[26]*(u[4]-x[4]))+reac5; /* Sbu */
dx[5] = 1.0/V_liq*(u[26]*(u[5]-x[5]))+reac6; /* Spro */
dx[6] = 1.0/V_liq*(u[26]*(u[6]-x[6]))+reac7; /* Sac */
dx[7] = 1.0/V_liq*(u[26]*(u[7]-x[7]))+reac8;
dx[8] = 1.0/V_liq*(u[26]*(u[8]-x[8]))+reac9;
dx[9] = 1.0/V_liq*(u[26]*(u[9]-x[9]))+reac10; /* SIC */
dx[10] = 1.0/V_liq*(u[26]*(u[10]-x[10]))+reac11; /* SIN */
dx[11] = 1.0/V_liq*(u[26]*(u[11]-x[11]))+reac12;
dx[12] = 1.0/V_liq*(u[26]*(u[12]-(0.027*x[12]))) +reac13;
dx[13] = 1.0/V_liq*(u[26]*(u[13]-(0.027*x[13]))) +reac14;
dx[14] = 1.0/V_liq*(u[26]*(u[14]-(0.027*x[14]))) +reac15;
dx[15] = 1.0/V_liq*(u[26]*(u[15]-(0.027*x[15]))) +reac16;
dx[16] = 1.0/V_liq*(u[26]*(u[16]-(0.027*x[16]))) +reac17;
dx[17] = 1.0/V_liq*(u[26]*(u[17]-(0.027*x[17]))) +reac18;

```

```

dx[18] = 1.0/V_liq*(u[26]*(u[18]-(0.027*x[18]))) + reac19;
dx[19] = 1.0/V_liq*(u[26]*(u[19]-(0.027*x[19]))) + reac20;
dx[20] = 1.0/V_liq*(u[26]*(u[20]-(0.027*x[20]))) + reac21;
dx[21] = 1.0/V_liq*(u[26]*(u[21]-(0.027*x[21]))) + reac22;
dx[22] = 1.0/V_liq*(u[26]*(u[22]-(0.027*x[22]))) + reac23;
dx[23] = 1.0/V_liq*(u[26]*(u[23]-(0.027*x[23]))) + reac24;
dx[24] = 1.0/V_liq*(u[26]*(u[24]-x[24])); /* Scat+ */
dx[25] = 1.0/V_liq*(u[26]*(u[25]-x[25])); /* San- */
dx[26] = -procA4; /* Sva- */
dx[27] = -procA5; /* Sbu- */
dx[28] = -procA6; /* Spro- */
dx[29] = -procA7; /* Sac- */
dx[30] = -procA10; /* SHCO3- */
dx[31] = -procA11; /* SNH3 */
dx[32] = -xtemp[32]*q_gas/V_gas + procT8*V_liq/V_gas;
dx[33] = -xtemp[33]*q_gas/V_gas + procT9*V_liq/V_gas;
dx[34] = -xtemp[34]*q_gas/V_gas + procT10*V_liq/V_gas;
dx[35] = 0; /* Flow */
dx[36] = 0; /* Temp */
/* Dummy states for future use */
dx[37] = 0;
dx[38] = 0;
dx[39] = 0;
dx[40] = 0;
dx[41] = 0;
}
/*
 * mdlTerminate - called when the simulation is terminated.
 */
static void mdlTerminate(SimStruct *S)
{

```

```
}  
#ifdef  MATLAB_MEX_FILE /* Is this file being compiled as a MEX-file? */  
#include "simulink.c" /* MEX-file interface mechanism */  
#else  
#include "cg_sfund.h" /* Code generation registration function */  
#endif
```