



**ВОСЬМАЯ ВСЕРОССИЙСКАЯ НАУЧНО-ПРАКТИЧЕСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
ПО ИМИТАЦИОННОМУ МОДЕЛИРОВАНИЮ
И ЕГО ПРИМЕНЕНИЮ В НАУКЕ И ПРОМЫШЛЕННОСТИ
«ИМИТАЦИОННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ. ТЕОРИЯ И ПРАКТИКА»
(ИММОД-2017)**

ТРУДЫ КОНФЕРЕНЦИИ

Организаторы конференции



Генеральный спонсор



Санкт-Петербург, 2017

ISBN 978-5-905526-03-9

СОСТАВИТЕЛИ

А.М. Плотников, Б.В. Соколов, М.А. Долматов

Компьютерная верстка

А.В. Кротов

Редактирование

А.М. Плотников, Е.П. Смирнова, М.А. Долматов

ОПТИМИЗАЦИЯ РЕЖИМА РАБОТЫ БИОРЕАКТОРА ДЛЯ ПРОИЗВОДСТВА БИОГАЗА МЕТОДАМИ ИМИТАЦИОННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

А.Г. Топаж , В.А. Вигонт (Санкт-Петербург), Л.А. Хворова (Барнаул)

Важное место в области поиска альтернативных возобновляемых источников энергии занимают технологии так называемой «зеленой энергетики», когда для производства топлива или прямого преобразования в тепловую энергию используется накопленная в результате фотосинтеза энергия, содержащаяся в биомассе высших растений. Один из перспективных конечных продуктов «зеленой энергетики» – биогаз, получающийся путем анаэробного сбраживания произвольного органического сырья в специальных установках – биореакторах. Актуальной и значимой с практической точки зрения является идея производства и использования биогаза в сельском хозяйстве, то есть включения биогазового контура в технологический процесс растениеводческого предприятия.

Разработка системно-динамической модели технологического процесса производства биогаза из растительного сырья позволит оптимизировать режимы производственного цикла – определить наилучшее с экономической точки зрения соотношение между выходом биометана и темпами подачи/замены исходного субстрата в зависимости от состава сырья. Рассмотрены модели с дискретным и непрерывным циклом технологического процесса анаэробного сбраживания неоднородной многокомпонентной растительной биомассы. За основу взята известная стехиометрическая модель производства биометана, произведена ее модификация для случая многокомпонентного сырья и продемонстрированы возможности современных оболочек и сред моделирования в задачах комплексного анализа и оптимизации изучаемого процесса. В ходе проведенных исследований получен ряд нетривиальных результатов, позволивших сформулировать конкретные рекомендации по выбору оптимальных режимов работы биореактора, обеспечивающих его устойчивое функционирование в зависимости от характеристик используемого сырья и выбранных критериев эффективности.

Материалы и методы

К настоящему времени разработано множество моделей, описывающих стадии разложения органического сырья до биогаза с различным уровнем детальности [1,2]. Самой известной отечественной разработкой является модель «Метан», разработанная группой сотрудников Института водных проблем РАН под руководством В.А. Вавилина [3,4]. При этом в большинстве математических моделей прикладной направленности [5–7] считается допустимым без существенной потери точности ограничить рассмотрение описанием трех основополагающих процессов:

- гидролиз (первичное разложение) исходного субстрата (реакция, в первом приближении, протекающая без привлечения внешних катализаторов или ферментов);
- метаногенез – образование биогаза из продуктов первичного разложения органического сырья под действием специфических анаэробных микроорганизмов (таким образом, в описание обобщенного процесса метаногенеза неявно включаются также стадии ацито- и ацетогенеза);
- динамика роста и разложения самой микробной метаногенной биомассы, необходимой для протекания процессов анаэробного брожения.

Таким образом, двухстадийная динамика трансформации исходного сырья в биогаз может быть в первом приближении описана следующей системой обыкновенных дифференциальных уравнений [8]:

$$\begin{cases} \frac{\partial W}{\partial t} = -k \cdot W \cdot f_H(S), \quad W(0) = W_0, \\ \frac{\partial S}{\partial t} = \gamma \cdot k \cdot W \cdot f_H(S) - \rho_M \cdot f_M(S) \cdot \frac{S \cdot B}{K_S + S}, \quad S(0) = 0, \\ \frac{\partial P}{\partial t} = Y \cdot (1 - \theta) \cdot \rho_M \cdot f_M(S) \cdot \frac{S \cdot B}{K_S + S}, \quad P(0) = 0, \end{cases} \quad (1)$$

где W и S – концентрация исходного субстрата и продуктов гидролиза (жирных кислот); P – суммарный выход биогаза; k – константа скорости гидролиза; γ – коэффициент конверсии субстрата в жирные кислоты (стехиометрический коэффициент); ρ_M – максимальная удельная скорость метаногенеза в терминах утилизации биомассы летучих жирных кислот; K_S – константа полунасыщения в уравнении Моно для интенсивности метаногенеза; $(1-\theta)$ – доля субстрата, идущая на образование биогаза, Y – переводной коэффициент потока утилизации жирных кислот в единицы выхода конечного продукта (биогаза); B – концентрация биомассы метаногенных микроорганизмов.

В рамках принятых допущений динамика микробной биомассы может быть описана соотношением:

$$\frac{\partial B}{\partial t} = \theta \cdot \rho_M \cdot f_M(S) \cdot \frac{S \cdot B}{K_S + S} - K_D \cdot B, \quad B(0) = B_0, \quad (2)$$

где K_D – коэффициент распада. Функции $f_H(S)$ и $f_M(S)$ описывают ингибирование реакций гидролиза и микробной ферментации жирными кислотами. В исследуемой нами модели использовалось представление обеих функций ингибирования $f_H(S)$ и $f_M(S)$ в форме, предложенной в упрощенной версии модели «Метан»:

$$f_*(S) = \left(1 + \left(\frac{S}{A_*} \right)^{N_*} \right)^{-1}. \quad (3)$$

Нетрудно показать, что введение в рассмотрение фактора ингибирования различных стадий процесса продуктами гидролиза позволяет воспроизвести в модели эффект «пробки», возникающий в случае, когда начальная концентрация субстрата велика, а начальное содержание метаногенных микроорганизмов в реакторе мало. Способом, позволяющим избежать эффекта «пробки» и существенно повысить интенсивность производства биогаза, является искусственное разбавление субстрата или инокуляция метаногенных бактерий (увеличение начальной концентрации B_0), что увеличивает интенсивность расходного слагаемого во втором уравнении системы (1).

Система соотношений (1)–(3) представляет собой простую замкнутую однокомпонентную модель, описывающую динамику производства биогаза из однородного органического сырья. Естественной модификацией этой модели может быть ее расширение на многокомпонентный случай, то есть учет неоднородности исходного сырья путем замены скалярных величин в первом уравнении системы (1) на вектора и добавления операции суммирования по входным потокам продукта во второе уравнение этой системы. В результате система (1) трансформируется к виду:

$$\begin{cases} \frac{\partial W_i}{\partial t} = -k_i \cdot W_i \cdot f_H(S), \quad i = 1, \dots, M, \\ \frac{\partial S}{\partial t} = \gamma \cdot \sum_{i=1}^M k_i \cdot W_i \cdot f_H(S) - \rho_M \cdot f_M(S) \cdot \frac{S \cdot B}{K_S + S}, \\ \frac{\partial P}{\partial t} = Y \cdot (1 - \theta) \cdot \rho_M \cdot f_M(S) \cdot \frac{S \cdot B}{K_S + S}, \end{cases} \quad (4)$$

где W_i – составляющие вектора концентраций исходного сырья различных типов, k_i – характерные для этих типов константы скорости гидролиза, M – число рассматриваемых типов сырья.

Для численного исследования построенной динамической системы ее образ был реализован в специализированной среде многоподходного имитационного моделирования AnyLogic в виде стандартной модели системной динамики. В исследовании рассматривалась трехкомпонентная модель растительного сырья. Полагалось, что весь массив растительной биомассы, загружаемой в биореактор, можно условно разбить на три составные части, принципиально отличающиеся скоростями их гидролитического разложения: легкоразложимые соединения (сахара); скрепляющее вещество клеточных стенок травянистых растений (лигнин), характеризующееся средними скоростями гидролиза, и трудноразложимая клетчатка. В рамках этой классификации можно с приемлемой точностью описать широкий спектр потенциального растительного сырья – от качественных остатков специально выращиваемых энергетических культур, таких как рапс или кукуруза (преобладание легкоразлагаемой компоненты), до грубых древесных опилок (практически стопроцентное содержание целлюлозы). Полученная модель позволяет адекватно отразить влияние качества исходного сырья как на темпы производства, так и на интегральный выход конечного продукта (биогаза). Также в ней полностью воспроизводится эффект «пробки» – критическое замедление процесса и принципиальная невозможность переработать весь объем исходного субстрата при малой концентрации начальной биомассы метаногенных микробов.

Для приближения модели к реальности необходима еще одна ее модификация – учет цикличности работы биореактора, то есть периодической подгрузки на вход процесса новых партий сырья по мере его переработки в конечные продукты. Одновременно необходимо обеспечить изъятие из реактора отработанной биомассы. Этот технологический прием, то есть рециклизация процесса анаэробного брожения, может быть учтен в модели двумя различными способами, описывающими соответственно дискретный и непрерывный режим работы реактора. В первом случае полагается, что обновление содержимого реактора производится мгновенно в равноотстоящие моменты времени. Математически соответствующие мгновенные изменения величин переменных состояния модели могут быть выражены следующими соотношениями:

$$\begin{aligned} W_i(t+0) &= (1 - \rho_{rec}) \cdot W_i(t-0) + \rho_{rec} \cdot W_{i0}, \\ S(t+0) &= (1 - \rho_{rec}) \cdot S(t-0), \\ B(t+0) &= (1 - \rho_{rec}) \cdot B(t-0), \\ t &= n \cdot T_{rec}, \quad n \in N, \end{aligned}$$

где ρ_{rec} – параметр рециклизации (доля рабочего объема реактора, замещаемая за один такт обновления), T_{rec} – период рециклизации. Введение в исходную классическую непрерывную поточно-балансовую формализацию триггерной составляющей приводит к тому, что исследуемая модель приобретает черты как системно-динамического, так и дискретно-событийного подхода, то есть превращается в так называемую многоподходную, или гибридную модель [9].

Альтернативный способ описания рециклизации – рассмотрение непрерывного режима работы с поддержанием динамического равновесия в смысле сохранения суммарной массы вещества, находящегося в биореакторе. С точки зрения культивирования метаногенных бактерий можно сказать, что подобная система непрерывного обновления сырья представляет собой хемостат. Для адекватного описания подобного биореактора проточного типа требуется модификация структуры и внутреннего содержания используемой модели. А именно: в уравнения системной динамики добавляются дополнительные непрерывные потоки вещества, а уравнения для переменных состояния (1)–(4) переписываются в виде:

$$\begin{cases} \frac{\partial W_i}{\partial t} = -k_i \cdot W_i \cdot f_H(S) + K_{flow} \cdot (W_{0i} - W_i), \quad i = 1, \dots, M, \\ \frac{\partial S}{\partial t} = \gamma \cdot \sum_{i=1}^M k_i \cdot W_i \cdot f_H(S) - \rho_M \cdot f_M(S) \cdot \frac{S \cdot B}{K_S + S} - K_{flow} \cdot S, \\ \frac{\partial B}{\partial t} = \theta \cdot \rho_M \cdot f_M(S) \cdot \frac{S \cdot B}{K_S + S} - K_D \cdot B - K_{fi}, \end{cases}$$

где K_{flow} – интенсивность притока свежего субстрата неизменного структурного состава, равная интенсивности оттока общего интермедиата из рабочей области реактора.

Результаты. Как для непрерывной, так и дискретной постановки можно поставить и решить задачу нахождения наиболее эффективного режима работы биореактора. В первом случае оптимизируемыми параметрами будут выступать период и степень рециклизации T_{rec} и ρ_{rec} , а во втором – скорость протока K_{flow} . В качестве же критерия оптимизации могут выбираться различные показатели – выход метана за цикл или за единицу времени, выход метана на единицу затраченного сырья, сводный экономический критерий вида «норма прибыли», учитывающий цены сырья и продукта и интенсивность производства и т.д. В ходе данного исследования для различных типов растительного сырья были получены достаточно интересные результаты. Так, например, с экономической точки зрения оказывается выгодным менять более качественное сырье чаще, но в меньшем объеме, чем дешевые и трудноразлагаемые растительные остатки с преимущественным содержанием целлюлозы. Кроме того, крайне интересным представляется тот факт, что области максимальных значений параметров оказываются достаточно близкими к своеобразной «пропасти» на фазовой плоскости. Эта область соответствует сочетанию параметров рециклизации, при которых наблюдается упомянутый выше эффект «пробки», то есть критическое торможение всех химических реакций промежуточными продуктами гидролиза. Вместе с тем пик оптимума для исследуемых функций достаточно гладкий. Это позволяет сделать заключение о том, что с практической точки зрения имеет смысл эксплуатировать реактор в области технологических параметров, отстоящей от их критических значений, определяющих интенсивность обновления содержимого реактора. При выборе такого решения экономические потери окажутся незначительными, но зато может быть обеспечена устойчивая работа реактора без опасности случайного срыва в полное прекращение процесса метаногенеза.

Закключение. Принято считать, что целенаправленное культивирование растений как источников биомассы, используемой в качестве сырья для биогазовых реакторов, в общем и целом оказывается экономически малоэффективно. Подход, способный реанимировать идею производства биогаза из растительного сырья в масштабе среднего растениеводческого хозяйства, состоит в том, что контур производства биогаза предлагается внедрить в производственный цикл растениеводческого хозяйства не вместо традиционных пищевых севооборотов, а вместе с ними. В качестве исходного субстрата биогазового реактора в этом случае могут быть использованы послеуборочные растительные остатки традиционных пищевых культур, биомасса промежуточных культур, выращиваемых на полях

сидерального пара, а также, возможно, специальные высокоэнергоемкие энергетические культуры. А дополнительным положительным эффектом внедрения биогазового контура в производственный процесс может служить получение большого количества высококачественного сидерального удобрения, поскольку шлам, остающийся после анаэробного сбраживания в биореакторе, богат базовыми питательными соединениями, но не содержит всхожих семян сорняков.

Комплексное исследование предлагаемой замкнутой технологической цепочки в масштабе среднего растениеводческого хозяйства в натуральных условиях может потребовать значительных временных и финансовых затрат. Альтернативным подходом к исследованию проблемы служит технология имитационного компьютерного моделирования. Создание имитационного комплекса из интегрированных моделей производства биогаза, подобных описанной, и моделей продукционного процесса сельскохозяйственных культур позволит получить адекватный инструментарий, позволяющий заменить трудоемкий полевой опыт многофакторным вычислительным экспериментом.

Литература

1. **Andrews J.F.** A Mathematical Model for the Continuous Culture of Microorganisms Utilizing Inhibitory Substrates // *Biotechnology and Bioengineering*. 1968. Vol. 10. P. 707–723.
2. **Gerber M., Span R.** An Analysis of Available Mathematical Models for Anaerobic Digestion of Organic Substances for Production of Biogas // *Proc., Int. Gas Union Research Conf., French Gas Association, Neuilly-sur-Seine, France*, 2008.
3. **Вавилин В.А., Васильев В.Б., Рытов С.В.** Моделирование деструкции органического вещества сообществом микроорганизмов. М.: Наука, 1993. 204 с.
4. **Vavilin V.A., Vasiliev V.B., Ponomarev A.V., Rytow S.V.** Simulation Model ‘Methane’ as a Tool for Effective Biogas Production during Anaerobic Conversion of Complex Organic Matter // *Bioresource Technology*. 1994. Vol. 48. P. 1–8.
5. Биотехнология и микробиология анаэробной переработки органических коммунальных отходов: коллективная монография / Под ред. А.Н. Ножевниковой, А.Ю. Каллистова и др. – М.: Университетская книга, 2016. 320 с.
6. **Вавилин В.А.** Исследование анаэробной деградации органических отходов: опыт математического моделирования // *Микробиология*. 2010. Т. 79. № 3. С. 352–359.
7. **Королев С.А., Майков Д.В.** Идентификация математической модели и исследование различных режимов метаногенеза в мезофильной среде // *Компьютерные исследования и моделирование*. 2012. Т. 4. № 1. С. 131–141.
8. **Вавилин В.А.** Как эффективно получать биогаз? // *Природа*. 2008. № 11. С. 14–19.
9. **Борщев А.** Как строить простые, красивые и полезные модели сложных систем // Сборник трудов шестой всероссийской научно-практической конференции «Имитационное моделирование. Теория и практика (ИММОД-2013)». Казань: «Фэн» АН РТ. 2016. Т. 1. С. 21–34.