

Исследование математической модели производства биогаза из растительного сырья*

А.Г. Топаж¹, Л.А. Хворова², А.В. Жариков², А.А. Байук²

¹ООО «Бюро Гиперборея» (Санкт-Петербург, Россия),

²Алтайский государственный университет (Барнаул, Россия)

Research of Mathematical Model of Biogas Production from Plant Raw Materials

A.G. Topaj¹, L.A. Khvorova², A.V. Zharikov², A.A. Bayuk²

¹LLC «Hyperborea Bureau» (St. Petersburg, Russia),

²Altai State University (Barnaul, Russia)

Описывается и анализируется математическая модель технологического процесса производства биогаза из растительного сырья.

В основе математической модели лежит нелинейная система дифференциальных уравнений, описывающая три основополагающих процесса: гидролиз исходного субстрата; метаногенез — образование биогаза из продуктов первичного разложения органического сырья под действием специфических анаэробных микроорганизмов; динамика роста и разложения микробной биомассы, необходимой для протекания процессов анаэробного брожения. За основу взята известная стехиометрическая модель производства биометана В.А. Вавилина, произведена ее модификация для случая проточного биореактора.

Цель работы — исследование устойчивости стационарных решений нелинейной системы дифференциальных уравнений. Задача решается путем линеаризации уравнений на стационарных решениях. Проведено качественное исследование поведения фазовых кривых с помощью собственных чисел матрицы линеаризованной системы.

Проведенное исследование позволит осуществить численную оптимизацию принципиальных параметров модели, определяющих соответствующий технологический процесс.

Ключевые слова: математическая модель, дифференциальные уравнения, устойчивость, растительное сырье, биогаз.

This paper is devoted to the description and analysis of the mathematical model of the technological process of biogas production from plant raw materials.

The mathematical model is based on a nonlinear system of differential equations that describes three fundamental processes: hydrolysis (primary decomposition) of the initial substrate (reaction, in the first approximation, proceeding without external catalysts or enzymes); methanogenesis – the formation of biogas from products of organic raw materials primary decomposition under the action of specific anaerobic microorganisms (thus, the stages of acito- and acetogenesis are implicitly included in the description of the generalized process of methanogenesis); dynamics of growth and decomposition of microbial biomass necessary for the course of anaerobic fermentation processes. A well-known stoichiometric model for the production of biomethane by V.A. Vavilin is taken as a basis; its modification was made for the case of a flow bioreactor.

The paper is aimed at studying the stability of stationary solutions of a non-linear system of differential equations. The problem is solved by linearizing the equations on stationary solutions. A qualitative study of phase curves behavior with the help of the eigenvalues of the matrix for the linearized system is conducted.

The carried out research will be helpful to perform the numerical optimization of the model principal parameters that determine the corresponding technological process.

Key words: mathematical model, differential equations, stability, plant raw materials, biogas.

DOI 10.14258/izvasu(2018)1-23

*Работа выполнена при поддержке благотворительного фонда В. Потанина.

Введение. Поиск альтернативных возобновляемых источников энергии — одно из приоритетных направлений развития современной науки. Одним из таких источников является биогаз — смесь газов с преобладающим содержанием метана. Его получают путем анаэробного сбраживания органического сырья. Важное место в этой сфере занимают технологии так называемой «зеленой энергетики», когда для производства топлива или прямого преобразования в тепловую энергию используется энергия, накопленная в биомассе высших растений в результате фотосинтеза. 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 специально выращиваемые высокоэнергоемкие энергетические культуры.

Работа посвящена описанию, анализу и исследованию математической модели технологического процесса производства биогаза из растительного сырья в части устойчивости стационарных решений нелинейной системы дифференциальных уравнений. Данная задача решается путем линеаризации уравнений на стационарных решениях и проведения качественного исследования поведения фазовых кривых с помощью собственных чисел матрицы линеаризованной системы.

Математическая модель. Анаэробная ферментация органического сырья с целью производства биогаза представляет собой достаточно сложный и многоступенчатый процесс, состоящий как из последовательных химических реакций (когда выход предшествующей реакции служит субстратом для последующей), так и из параллельных путей трансформации различных химических соединений с образованием одного и того же конечного продукта [1–3]. В процессе получения биогаза выделяют четыре стадии: первая стадия — гидролиз высокомолекулярных органических соединений (углеводов, белков и жиров) — их разложение до составляющих их полимеров (соответственно сахаров, аминокислот и жирных кислот); вторая стадия — ацетогенез, в процессе которого под действием анаэробных бактерий происходит образование сложных спиртов и карбоновых кислот; на третьей стадии, ацетогенеза, сложные спирты и карбоновые кислоты разлагаются до уксусной и муравьиной кислот, а также метанола с выделением водорода [4]; в ходе четвертой стадии, метаногенеза, происходит образование биогаза.

Как следует из зарубежных и российских источников, принципиальным отличием всех последующих этапов от стадии гидролиза является то, что они протекают при непосредственном участии специфических анаэробных организмов. В ряде работ подчеркивается, что для субстратов, содержащих целлюлозу,

лимитирующей стадией, как правило, будет являться гидролитическая. Исходя из этих соображений в большинстве математических моделей прикладной направленности [5–8] считается допустимым без существенной потери точности ограничиться рассмотрением трех основополагающих процессов.

В основе математической модели лежит нелинейная система дифференциальных уравнений, описывающая только эти три основополагающих процесса: 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 стадии ацито- и ацетогенеза); динамика роста и разложения микробной биомассы, необходимой для протекания процессов анаэробного брожения. За основу взята известная стехиометрическая модель производства биогаза В.А. Вавилина [8–10], произведена ее модификация для случая проточного биореактора.

Модель представляет собой систему нелинейных дифференциальных уравнений первого порядка:

$$\frac{\partial W}{\partial t} = -k \cdot W \cdot f_H(S) + K_{flow} \cdot (W_0 - W), \quad (1)$$

$$\frac{\partial S}{\partial t} = \gamma \cdot k \cdot W \cdot f_H(S) - \rho_M \cdot f_M(S) \cdot \frac{S \cdot B}{K_S + S} - K_{flow} \cdot S, \quad (2)$$

$$\frac{\partial B}{\partial t} = \theta \cdot \rho_M \cdot f_M(S) \cdot \frac{S \cdot B}{K_S + S} - K_D \cdot B - K_{flow} \cdot B, \quad (3)$$

$$\frac{\partial P}{\partial t} = Y \cdot (1 - \theta) \cdot \rho_M \cdot f_M(S) \cdot \frac{S \cdot B}{K_S + S}, \quad (4)$$

где W и S — концентрация исходного субстрата и продуктов гидролиза соответственно (г/л); P — суммарный выход биогаза (г/л); 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, K_D — коэффициент распада микробной биомассы, Y — переводной коэффициент потока утилизации жирных кислот в единицы выхода конечного продукта (биогаза), K_{flow} — интенсивность притока свежего

субстрата неизменного структурного состава, равная интенсивности оттока общего интермедиата из рабочей области реактора (1/сут). Таким образом, эту величину можно интерпретировать как долю содержащегося всего объема реактора, замещающую в единицу времени исходным субстратом.

Функции $f_H(S)$ и $f_M(S)$ описывают ингибирование реакций гидролиза и микробной ферментации жирными кислотами:

$$f_i(S) = \left(1 + \left(\frac{S}{A_i} \right)^{N_i} \right)^{-1}.$$

Для замыкания системы укажем начальные условия:

$$W(0) = W_0, S(0) = 0; B(0) = B_0; P(0) = 0.$$

Исследование математической модели. Система (1) – (4) является нелинейной. Поскольку P представляет собой конечный продукт и не входит в первые три уравнения, то исследовали на стационарность и устойчивость по первому приближению решение системы (1) – (3) [11]:

$$-k \cdot W \cdot f_H(S) + K_{flow} \cdot (W_0 - W) = 0,$$

$$\gamma \cdot k \cdot W \cdot f_H(S) - \rho_M \cdot f_M(S) \cdot \frac{S \cdot B}{K_S + S} - K_{flow} \cdot S = 0,$$

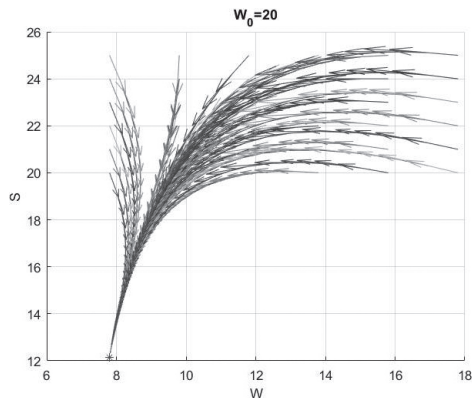


Рис 1. Фазовый портрет при $W_0 = 20$

$$\theta \cdot \rho_M \cdot f_M(S) \cdot \frac{S \cdot B}{K_S + S} - K_D \cdot B - K_{flow} \cdot B = 0, \quad (5)$$

где $f_H(S) = \left(1 + (S/A_H)^3 \right)^{-1}$.

Первый случай: в (5) $B = 0$.

Численное исследование в этом случае показывает, что устойчивость точки покоя системы главным образом зависит от начального количества исходного субстрата W_0 и коэффициента интенсивности притока свежего вещества K_{flow} . Исследование устойчивости точки покоя для параметра K_{flow} осуществлялось на интервале [0.05, 0.1]. Выбор данного интервала обусловлен физическими характеристиками исследуемой системы.

Тип точки покоя по первому приближению является устойчивым узлом. Обе действительные части собственных чисел Якобиана системы являются отрицательными. Однако при увеличении W_0 больше критического значения система теряет устойчивость. Точка покоя становится неустойчивым седлом.

На рисунках 1–3 приведены фазовые портреты исследуемой системы при $K_{flow} = 0.09$. Точка покоя системы является устойчивым узлом при изменениях параметра W_0 в интервале [20, 60].

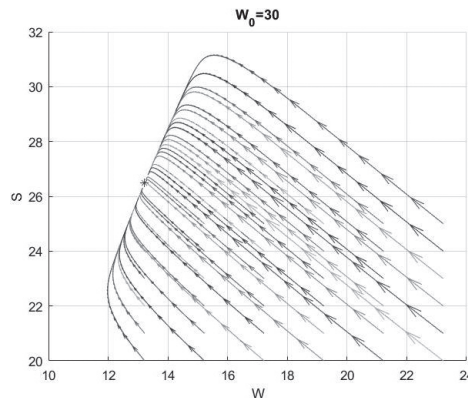


Рис 2. Фазовый портрет при $W_0 = 30$

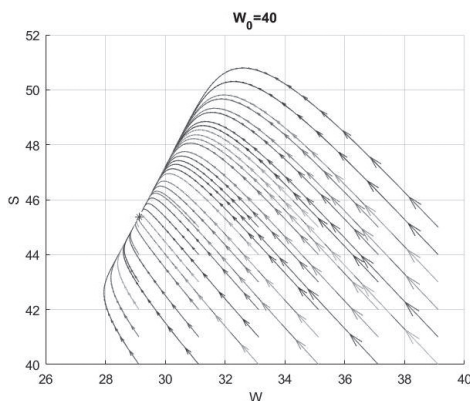


Рис 3. Фазовый портрет при $W_0 = 60$

На рисунках 4–5 приведены фазовые портреты исследуемой системы при $K_{flow} = 0.07$. Численное исследование показывает, что уменьшение K_{flow} влечет

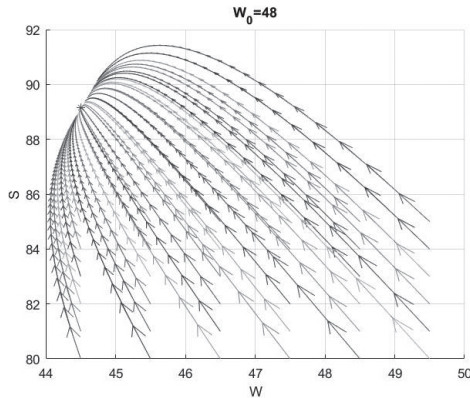


Рис 4. Фазовый портрет при $W_0 = 30, K_{flow} = 0.07$

уменьшение интервала устойчивости для W_0 . На рисунках 4–5 устойчивость достигает интервала $[20, 48]$.

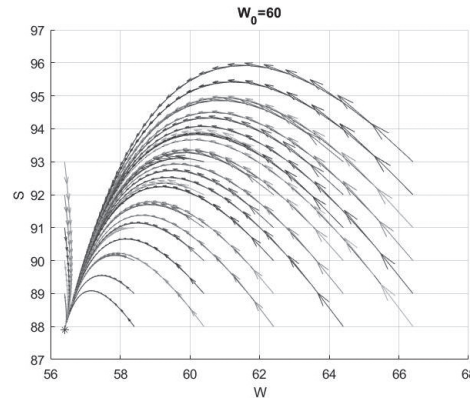


Рис 5. Фазовый портрет при $W_0 = 48, K_{flow} = 0.07$

Таким образом, численное исследование позволило выявить зависимость между параметрами W_0 и K_{flow} . Уменьшение интенсивности притока свежего субстрата неизменного структурного состава влияет на устойчивость развития системы и накладывает ограничения на начальное количество органического вещества W_0 .

Второй случай: в (5) $B \neq 0$.

Для системы (1) – (3) численно исследована устойчивость по первому приближению при различных значениях параметра W_0 .

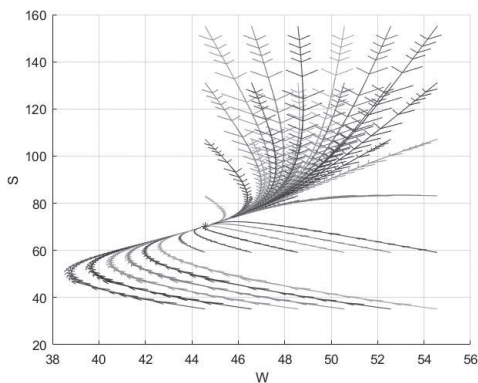


Рис 6. Фазовый портрет при $W_0 = 50, K_{flow} = 0.089$

Устойчивость точки покоя системы слабо зависит от количества начального органического вещества W_0 . Таким образом, данная система устойчива к значительным объемам начального органического вещества. На рисунках 6–7 приведены фазовые портреты для переменных W и S при разных значениях W_0 .

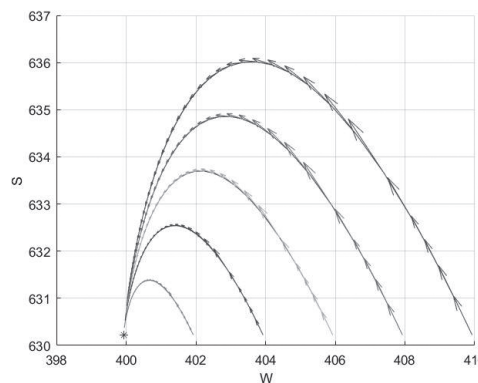


Рис 7. Фазовый портрет при $W_0 = 400, K_{flow} = 0.089$

Зависимость устойчивости решения системы от изменения K_{flow} не позволила выявить какой-либо явной закономерности и требует дополнительных исследований.

Заключение. Естественной модификацией рассмотренной модели может быть ее расширение на многокомпонентный случай, т.е. учет неоднородности исходного сырья (процентное разделение на условные составляющие — сахара, лигнин и целлюлозу). Принято считать, что наиболее существенно эта неоднородность проявляется на стадии гидролиза и основное отличие разных видов растительного сырья проявляется имен-

но в темпах его разложения до легкоусвояемых полимеров, поскольку дальнейшие трансформации идут уже над одними и теми же «смешавшимися в единый пул» продуктами гидролиза, генезис которых не имеет принципиального значения. Тогда элементарное расширение модели с целью учета многокомпонентного состава сырья получается путем замены скалярных величин в первом уравнении системы (1) на вектора и добавления операции суммирования по входным потокам продукта в уравнение (2) этой системы.

Исследование данной технологической цепочки в натуральных условиях может потребовать значитель-

ных временных и финансовых затрат, поэтому альтернативным подходом к исследованию проблемы может служить технология имитационного компьютерного моделирования [12, 13]. Создание имитационного комплекса моделей производства биогаза позволит

получить надежный инструментарий, позволяющий оптимизировать процесс производства биогаза в результате проведения многофакторных вычислительных экспериментов.

Библиографический список

1. Добрынина О.М., Калинина Е.В. Технологические аспекты получения биогаза // Вестн. Перм. гос. техн. ун-та: Охрана окружающей среды, транспорт, безопасность жизнедеятельности. — 2010. — № 2.
2. Aiba S., Shoda M., Nagatani M. Kinetics of Product Inhibition in Alcohol Fermentation // *Biotechnology and Bioengineering*. — 1968. — Vol. 10, № 6.
3. Grant D.J.W. Kinetic Aspects of the Growth of *Klebsiella aerogenes* with Some Benzenoid Carbon Sources // *Journal of General Microbiology*. — 1967. — Vol. 46.
4. Gujer, W., Zehnder A.J.B. Conversion Processes in Anaerobic Digestion // *Water Science and Technology*. — 1983. — Vol. 15.
5. Биотехнология и микробиология анаэробной переработки органических коммунальных отходов: коллективная монография / под ред. А.Н. Ножевниковой, А.Ю. Каллистова и др. — М., 2016.
6. 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.
7. Вавилин В.А. Как эффективно получать биогаз? // *Природа*. — 2008. — № 11.
8. Вавилин В.А., Васильев В.Б., Рытов С.В. Моделирование деструкции органического вещества сообществом микроорганизмов. — М., 1993.
9. Vavilin V.A., Vasiliev V.B., Ponomarev A.V., Rytov S.V. Simulation Model «Methane» as a Tool for Effective Biogas Production during Anaerobic Conversion of Complex Organic Matter // *Bioresource Technology*. — 1994. — Vol. 48.
10. Вавилин В.А. Исследование анаэробной деградации органических отходов: опыт математического моделирования // *Микробиология*. — 2010. — Т. 79, № 3.
11. Эрроусмит Д., Плейс К. Обыкновенные дифференциальные уравнения. Качественная теория с приложениями. — М., 1986.
12. Andrews J.F. A Mathematical Model for the Continuous Culture of Microorganisms Utilizing Inhibitory Substrates // *Biotechnology and Bioengineering*. — 1968. — Vol. 10.
13. Gerber M., Span R. An Analysis of Available Mathematical Models for Anaerobic Digestion of Organic Substances for Production of Biogas // In: Proc., Int. Gas Union Research Conf., French Gas Association, Neuilly-sur-Seine, France, 2008.