

УДК 579.6; 004.9

ИМИТАЦИОННАЯ МОДЕЛЬ ПРОЦЕССА ПРОИЗВОДСТВА БИОГАЗА ИЗ МНОГОКОМПОНЕНТНОГО РАСТИТЕЛЬНОГО СЫРЬЯ. АНАЛИЗ И ПАРАМЕТРИЧЕСКАЯ ОПТИМИЗАЦИЯ

© А.Г. Топаж¹, В.А. Вигонт², Л.А. Хворова^{3*}

¹ООО «Бюро Гиперборея», ул. Подвойского, 40-2, пом. 87, Санкт-Петербург, 193312 (Россия)

²Агрофизический научно-исследовательский институт, Гражданский пр., 14, Санкт-Петербург, 195220 (Россия)

³Алтайский государственный университет, пр. Ленина, 61, Барнаул, 656049 (Россия), e-mail: KhvorovaLA@gmail.com

Статья посвящена описанию и анализу системно-динамической модели технологического процесса производства биогаза из многокомпонентного растительного сырья. Цель исследования – оптимизация процесса производства биогаза из растительного сырья методами имитационного моделирования, нахождение оптимальных режимов моделируемого производственного цикла – наилучшего с экономической точки зрения соотношения между выходом биометана и темпами подачи/замены исходного субстрата в зависимости от состава сырья.

В статье рассмотрены модели с дискретным и непрерывным циклом производства, приводится подробное описание реализации, выполненной в среде многоподходного моделирования AnyLogic для модели технологического процесса анаэробного сбраживания неоднородной многокомпонентной растительной биомассы. За основу взята известная стехиометрическая модель производства биометана, произведена ее модификация для случая многокомпонентного сырья (процентное разделение на условные составляющие – сахара, лигнин и целлюлоза) и продемонстрированы возможности современных оболочек и сред моделирования в задачах комплексного анализа и оптимизации изучаемого процесса. В ходе проведенных исследований получен ряд нетривиальных результатов по выбору оптимальных параметров режима работы модельного биореактора. Для случая дискретного процесса обновления содержимого в качестве параметров оптимизации выбирались частота и степень обновления, а для непрерывной проточной системы – скорость протока. Показано, что оптимальные с точки зрения интегрального выхода биометана значения параметров лежат близко к области критического закисления, приводящего к остановке процесса. А выбор в качестве критерия оптимизации экономических показателей дает оптимальные значения параметров, лежащих внутри области устойчивого функционирования модельного биореактора.

Ключевые слова: растительное сырье, биогаз, дифференциальные уравнения, имитационное моделирование, параметры оптимизации.

Работа выполнена при поддержке Благотворительного фонда В. Потанина.

Введение

Топаж Александр Григорьевич – ведущий научный сотрудник, доктор технических наук,
e-mail: alex.topaj@gmail.com;

Вигонт Владимир Александрович – научный сотрудник, кандидат биологических наук,
e-mail: KhvorovaLA@gmail.com

Хворова Любовь Анатольевна – заведующая кафедрой теоретической кибернетики и прикладной математики, кандидат технических наук, доцент,
e-mail: KhvorovaLA@gmail.com

Поиск альтернативных возобновляемых источников энергии уже давно рассматривается в качестве приоритетного направления развития промышленного и научного прогресса человечества. Важное место в этой сфере 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. Перспективным

* Автор, с которым следует вести переписку.

конечным продуктом «зеленой энергетики» является биогаз – смесь газов с преобладающим содержанием метана, получающимся путем анаэробного сбраживания произвольного органического сырья в специальных установках – биореакторах. Как правило, сырьем в таких установках служат различные отходы сельскохозяйственного производства, содержащие органическое вещество. Чаще всего это побочные продукты животноводства. В то же время принято считать, что целенаправленное культивирование растений как источников биомассы, используемой как сырье для биогазовых реакторов в общем и целом, оказывается экономически малоэффективно. Во-первых, энергоемкость зеленой биомассы даже у специальных энергетических культур гораздо ниже, чем, например, у навоза. Во-вторых, гораздо большей в этом случае оказывается длительность производственного цикла переработки. Существенно более выгодным в этом смысле оказывается выращивание масличных энергетических культур и их переработка в жидкое биотопливо.

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. При этом с экономической точки зрения производство биогаза из растительного сырья рассматривается исключительно как вспомогательный, дополнительный источник дохода. В качестве исходного субстрата биогазового реактора в этом случае могут быть использованы послеуборочные растительные остатки традиционных пищевых культур (солома, ботва), биомасса промежуточных культур, выращиваемых на полях сидерального пара, а также, возможно, специальные высокоэнергоёмкие энергетические культуры.

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.

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 может служить технология имитационного компьютерного моделирования. Создание имитационного комплекса из интегрированных моделей производства биогаза и продукционного процесса сельскохозяйственных культур позволит получить адекватный инструментарий, позволяющий заменить трудоемкий полевой опыт многофакторным вычислительным экспериментом.

Настоящая статья посвящена описанию и анализу системно-динамической модели технологического процесса производства биогаза из растительного сырья. Важным требованием при разработке данной модели выступала ее многокомпонентность. Действительно, в условиях реального севооборота имеющаяся зеленая биомасса, служащая сырьем для производства биогаза, может характеризоваться сильной неоднородностью состава. Для того чтобы включение контура производства биогаза в традиционный производственный цикл растениеводческого хозяйства было оправданным, гипотетический реактор должен быть «всеядным» и обеспечивать эффективное и бесперебойное функционирование независимо от качества и степени разнородности одновременно потребляемых ресурсов. Предполагается, что одновременно или последовательно в реактор могут быть загружены послеуборочные растительные остатки традиционных пищевых посевов (солома), качественная биомасса специально выращиваемых культур энергетического назначения с большим содержанием лабильных сахаров и низкокалорийные и труднорастворимые побочные продукты вспомогательных производств (например, древесные опилки). Ясно, что и энергетическая ценность и скорость разложения различных компонентов подобной сырьевой смеси очень сильно различаются, что должно находить адекватное отражение в соответствующей математической модели процесса.

Другим существенным требованием, предъявляемым к модели, является возможность ее использования для решения обратной задачи – определения значений входных данных и параметров, обеспечивающих требуемые или оптимальные значения выходных характеристик. В нашем случае это означает нахождение оптимальных режимов производственного цикла – нахождение наилучшего с экономической точки зрения соотношения между выходом биометана и темпами подачи/замены исходного субстрата в зависимости от состава сырья. Последнее предполагает необходимость множественных расчетов модели для разных вариантов в автоматическом режиме, то есть проведение специально спроектированных компьютерных экспериментов по оптимизации, варьированию параметров, анализу чувствительности и т.д.

Материалы и методы

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. Каждая выделяемая стадия требует функционирования своего пула специфических микроорганизмов и обладает характерной скоростью протекания химических процессов [1]. В любом случае для описания динамики этого процесса должны служить так называемые стехиометрические модели, основанные на численном решении уравнений химической кинетики, включенных в рассмотрение реакций [2, 3].

Принято выделять четыре главных стадии разложения органического сырья до биогаза. Первая стадия – гидролиз высокомолекулярных органических соединений (углеводов, белков и жиров) – их разложение до составляющих их полимеров (соответственно сахаров, аминокислот и жирных кислот). Только эти последние, более простые соединения, могут быть подвергнуты воздействию специфических микроорганизмов для дальнейшего разложения. Вторая и третья стадии носят название, соответственно, ацито- и ацетогенеза. В ходе ацетогенеза под действием анаэробных бактерий происходит образование сложных спиртов и карбоновых кислот, которые на третьей стадии ацетогенеза разлагаются до уксусной и муравьиной кислот, а также метанола с выделением водорода [4]. Наконец, в ходе последней, четвертой стадии метаногенеза происходит образование собственно биогаза. Именно на этом этапе в действие вступают специфические метанобразующие бактерии, в результате чего из продуктов ацетогенеза образуются углекислый газ и метан – основные компоненты смеси, называемой «биогаз». К настоящему времени разработано множество моделей, описывающих перечисленные процессы с различным уровнем детальности [5, 6]. Пожалуй, самой продвинутой и известной отечественной разработкой является модель «Метан», разработанная в начале 90-х годов прошлого века группой сотрудников института водных проблем РАН под руководством В.А. Вавилина [7, 8]. В качестве структурных компарментов или динамических переменных в эту модель включены все основные группы вовлеченных в процесс анаэробного разложения микроорганизмов (кислотогенных, ацетогенных и метаногенных), а также многомерный пул исходных, промежуточных и конечных органических и неорганических соединений различной агрегатного состояния, подвергающихся усвоению или являющихся продуктами сложной цепочки химических трансформаций.

Нетрудно заметить, что принципиальным отличием всех последующих этапов от стадии гидролиза является то, что они протекают при непосредственном участии специфических анаэробных организмов. Кроме того, коренное отличие разных видов растительного сырья с точки зрения его эффективности для производства биогаза проявляется именно в темпах гидролиза исходного сырья, так как последующие стадии анаэробного брожения в любом случае проходят над практически одними и теми же вторичными субстратами. В ряде работ [9] подчеркивается, что для субстратов, содержащих целлюлозу, лимитирующей стадией, как правило, будет являться гидролитическая. Исходя из этих соображений, в большинстве математических моделей прикладной направленности [10, 11] 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 биомассы, необходимой для протекания процессов анаэробного брожения.

Анализ существующих подходов к описанию процесса гидролиза показывает, что в первом приближении процесс разложения исходного субстрата может быть описан простейшим уравнением химической кинетики первого порядка, когда скорость протекания реакции полагается пропорциональной текущей концентрации разлагаемого реагента. Напротив, обобщенная реакция метаногенеза, будучи по своей природе ферментативной реакцией, в большинстве моделей описывается в форме производной от уравнения Моно, то есть кривой с насыщением, обусловленным лимитированием потенциальных темпов трансформации количеством доступного фермента. Кроме того, в целом ряде работ подчеркивается важность эф-

факта возможного ингибирования потенциальной скорости обеих реакций первичными продуктами гидролиза (при этом для самой реакции гидролиза соответствующий эффект будет иметь вид ингибирования продуктом, а для процесса ферментации – ингибирования субстратом). Таким образом, двухстадийная динамика трансформации исходного сырья в биогаз может быть в первом приближении описана следующей системой обыкновенных дифференциальных уравнений [12]:

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

где W и S – концентрация исходного субстрата и продуктов гидролиза (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, Y – переводной коэффициент потока утилизации жирных кислот в единицы выхода конечного продукта (биогаза).

Наряду с переменными состоянием, отвечающим последующим стадиям превращения органического субстрата, в уравнения стехиометрической модели (1) входит переменная B – концентрация биомассы метаногенных микроорганизмов. Динамика изменения (роста и разложения) анаэробных микробов в ходе брожения органического субстрата может быть достаточно сложной. В общем случае в соответствующей модели необходимо учитывать все стадии жизненного цикла роста бактериальной культуры [13, 14] – фазу задержки, ускорение темпов удельного роста, стабилизация темпов роста, замедление роста, нулевой рост, отрицательный рост (распад). Среди влияющих факторов важное значение имеют температура, кислотность и соотношение фазовых компонентов среды. Отдельным большим вопросом является интерпретация роли метаногенной микробной биомассы в процессе производства конечного продукта. Согласно известной классификации [15], в общем случае можно выделить три принципиальных типа кинетики ферментативной реакции. Первый тип характеризуется тем, что прирост продукта в точности определяется интенсивностью распада субстрата. В рамках рассматриваемой модели это означает, что метан выделяется как сопутствующий продукт непосредственно в ходе потребления микробами летучих жирных кислот, то есть рост микробов и выход метана оказываются жестко связанными между собой. Другие типы отвечают вариантам, когда производство продукта частично (второй тип) или полностью (третий тип) определяется не только скоростью распада субстрата, но и его текущей концентрацией. Для модели это означает, что метан выделяется как результат некоторых сторонних процессов жизнедеятельности микробов, не связанных напрямую с их ростом за счет потребления субстрата. Тем самым в динамической модели появляется дополнительное инерционное звено. В качестве наиболее простого приближения в исследуемой модели была описана ферментативная кинетика первого типа, а распад микробной биомассы представлялся простейшей линейной моделью. В рамках этих 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 (закисление). В исследуемой нами модели использовалось представление обеих функций ингибирования $f_H(S)$ и $f_M(S)$ в форме

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

предложенной в упрощенной версии модели «Метан». 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. При этом сразу после запуска процесса образуется чрезмерное количество промежуточного продукта (летучих жирных кислот), блокирующее образование метана, а затем и гидролиз. Этот случай хорошо известен и часто наблюдается при анаэробном сбраживании в биореакторах. 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). Пример получения эффекта «пробки» в результатах компьютерных экспериментов с моделью (1–3) приведен на рисунке 1. Сплошными линиями на рисунке показаны кривые, соответствующие начальным значениям $W_0 = 100$ г/л, $B_0 = 0,1$ г/л и демонстрирующие нормальную работу анаэробного реактора. Другие линии соответствуют случаям, при которых воспроизводится эффект «пробки» при внесении слишком малого количества метаногенных микроорганизмов (серая линия; $W_0 = 100$ г/л; $B_0 = 0,01$ г/л) или же при внесении слишком большого количества органического вещества (пунктирная линия; $W_0 = 1000$ г/л; $B_0 = 0,1$ г/л). Интересно отметить, что эффекты разбавления и инокулирования для исследуемой модели не всегда являются линейными. Так при внесении в 10 раз большего количества органического вещества ($W_0 = 1000$ г/л вместо $W_0 = 100$ г/л) для полного преодоления эффекта «пробки» необходимо внести в 200 раз больше бактериальной биомассы ($B_0 = 20$ г/л вместо $B_0 = 0,1$ г/л).

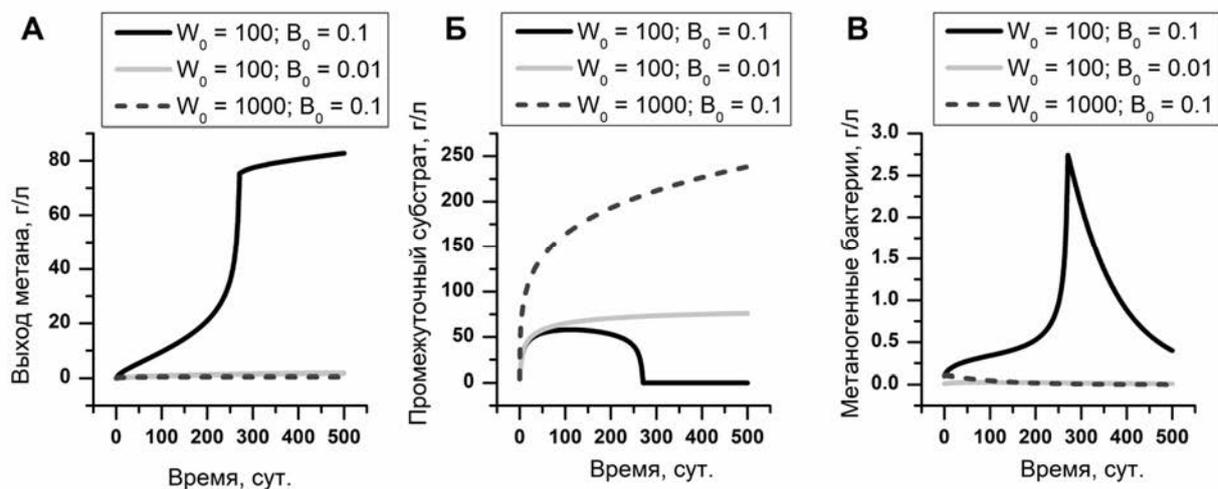


Рис. 1. Динамика роста выхода метана (А), промежуточного субстрата (Б) и бактериальной биомассы (В) при различных начальных значениях объема органического вещества и инокулированных бактерий

Система соотношений (1–3) представляет собой простую замкнутую однокомпонентную модель, описывающую динамику производства биогаза из однородного органического сырья. Однако даже в такой элементарной форме она может быть использована для численного исследования и численной оптимизации принципиальных параметров, определяющих соответствующий технологический процесс. Естественной модификацией этой модели может быть ее расширение на многокомпонентный случай, то есть учет неоднородности исходного сырья. Допустимо считать, что наиболее существенно эта неоднородность должна проявляться на стадии гидролиза, и что основное отличие разных видов растительного сырья проявляется именно 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 во второе уравнение этой системы. В результате можно записать:

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

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. При этом динамические переменные состояния модели представляются логическими компартаментами, перетоки вещества и энергии между ними (правые части соответствующих дифференциальных уравнений) изображаются в виде потоков, а логические связи между потоками и динамическими переменными изображаются в виде стрелок зависимостей. Общий вид модели в графической нотации среды AnyLogic приведен на рисунке 2А. Параметры булевского типа $isIng_W$ и $isIng_S$ управляют включением контуров обратной связи скоростей процессов гидролиза и метаногенеза, то есть фактов ингибирования соответствующих реакций жирными кислотами. Векторный параметр W_0 и скалярный параметр B_0 позволяют задать начальные значения переменным состояния W и B , то есть определить концентрации компонентов исходного сырья и микробной биомассы, с которых начинается расчет.

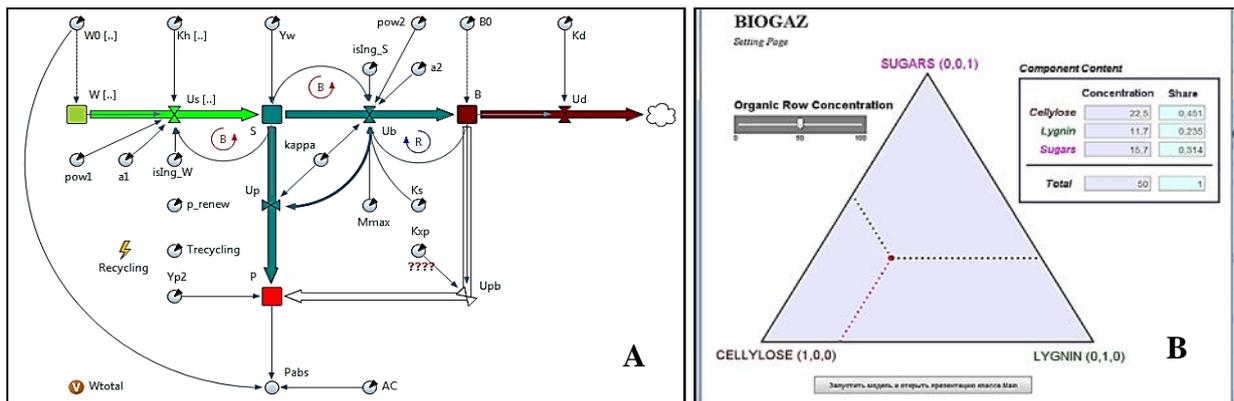


Рис. 2. Графическое представление системно-динамической модели производства биогаза в нотации системы AnyLogic (А) и интерфейс ввода ее входных параметров (В)

В описываемом 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 оказывается возможным с удовлетворительной 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 (преобладание целлюлозы). При этом для ввода и визуального представления структурного состава текущего вида исходного субстрата был разработан наглядный графический интерфейс, позволяющий вводить массовые доли выделенных компонентов указанием единственной точки на специальной номограмме в треугольных координатах, построенной по аналогии с треугольником Ферре [16] (рис. 2В). В ходе тестовых прогонов модели была осуществлена ее качественная верификация. 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. При этом наблюдалось как качественное, так и количественное соответствие графиков динамики переменных состояния с соответствующими результатами упрощенной версии модели «Метан».

Список значений постоянных параметров, используемых нами в этих и дальнейших расчетах, и приводимый в таблице 1, был также взят нами из работающей версии этой модели.

Для того чтобы исследуемая модель имела практический смысл, необходимо провести еще одну ее модификацию. В случае задания постоянного значения начальной концентрации субстрата система уравнений (4) в состоянии описать только единственный цикл переработки одной партии исходного сырья. Однако принципиальный момент работы биореактора – периодическая подгрузка на вход процесса новых партий сырья по мере его переработки в конечные продукты. Одновременно необходимо обеспечить также соответственное изъятие из реактора отработанной биомассы. 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 обновления (доля рабочего объема реактора, замещаемая за один такт обновления), T_{rec} – период обновления (сут.). То есть полагается, что в дискретные моменты времени в ходе мгновенно проводимого обновления постоянная доля продуктов гидролиза несработанного сырья и микробной биомассы необратимо изымается из реактора и замещается свежим сырьем неизменного состава. При этом концентрации жирных кислот и микробов уменьшаются (для простоты принято, что сырая биомасса не содержит собственных метаногенных бактерий), а получившаяся концентрация компонентов сырья рассчитывается из соображений пропорциональности.

Исследование модели с учетом периодического обновления исходного сырья демонстрирует ожидаемое поведение исследуемой динамической системы. В течение некоторого количества циклов наблюдается переходный процесс (так называемая стадия «spin-up», в течение которой происходит достижение квазистационарных значений концентраций), после чего модельный биореактор выходит на устоявшийся режим функционирования, характеризующийся периодически повторяющейся динамикой переменных состояния и выхода конечного продукта внутри каждого цикла рабочего процесса. Естественно, количественные и качественные характеристики получающихся кривых оказываются существенно зависящими как от управляющих параметров выбранного технологического режима, так и от структурного состава сырья. Численное исследование установившейся периодической динамики системы по завершении переходных процессов позволяет ставить вопрос о нахождении оптимальных значений выбранных управляющих переменных, которыми в данном случае являются степень и период обновления сырья.

Таблица 1. Значения постоянных параметров системно-динамической модели

№	Обозначение	Наименование	Значение	Единица измерений
1	k_1	Константа скорости гидролиза для сахаров	0,15	1/сут
2	k_2	Константа скорости гидролиза для лигнина	0,0525	1/сут
3	k_3	Константа скорости гидролиза для целлюлозы	0,002	1/сут
4	A_H	Масштабный коэффициент в функции ингибирования гидролиза продуктом	30	г/л
5	N_H	Показатель степени в функции ингибирования гидролиза продуктом	3	б/р
6	γ	Переводной коэффициент в уравнении гидролиза	0,935	б/р
7	ρ_M	Максимальная скорость метаногенеза	2,2	1/сут
8	K_S	Константа полунасыщения в формуле интенсивности ферментации	0,05	г/л
9	A_M	Масштабный коэффициент в функции ингибирования ферментации субстратом	30	г/л
10	N_M	Показатель степени в функции ингибирования ферментации субстратом	3	б/р
11	K_D	Удельная интенсивность распада микробной биомассы	0,01	1/сут
12	θ	θ – доля субстрата, идущая на рост микробной биомассы	0,05	б/р
13	Y	Коэффициент перевода субстрата ферментации в биогаз	373,33	мл/г

Обоснованием того, что в этом случае действительно присутствует предмет оптимизации, то есть наилучшая эффективность работы системы достигается не в вырожденных случаях, могут служить следующие соображения. Позитивный эффект уменьшения периода обновления и/или увеличения его мощности (то есть сравнительной доли заменяемой за один такт биомассы) заключается в том, что процессы гидролиза всегда будут протекать на «свежем» субстрате с наибольшей интенсивностью. Однако при этом существует опасность того, что слишком частое или слишком активное обновление содержимого реактора будет приводить к неоправданно большим потерям полезной микробной компоненты, которая не сможет в достаточной степени быть восстановлена ростом микроорганизмов в течение каждого цикла непрерывной работы между актами обновления. При этом будет возникать описанный выше эффект «пробки», и конечный интегральный выход биогаза даже на постоянно обновляемом «свежем» сырье окажется незначительным.

И, наконец, нельзя оставлять в стороне простейшие соображения об экономической эффективности и разумности производства. Несмотря на то, что цена растительных остатков, потенциально задействованных в качестве биоэнергетического сырья, невелика, однако она отлична от нуля, а доступные резервы входного субстрата всегда ограничены. То есть нельзя рассматривать задачу только с точки зрения повышения объема конечного продукта в отрыве от проблемы ресурсного обеспечения. При слишком интенсивном расходовании сырья выход биогаза на единицу затраченного сырья может оказаться малым. С другой стороны, при очень медленном или очень незначительном пополнении исходного материала большую часть времени реактор будет функционировать крайне неэффективно, в то время как скорость разложения микробной биомассы может даже превысить скорость ее роста.

Таким образом, формальная постановка задачи оптимизации параметров технологического режима анаэробного брожения (p_{rec} , T_{rec}) может быть записана в следующем виде:

$$(p_{rec}^*, T_{rec}^*) = \arg \max_{p_{rec}, T_{rec}} F(p_{rec}, W_{rec}, T_{rec}) ,$$

где W_{rec} – расход сырья за цикл, равный $\sum_{i=1}^M p_{rec} \cdot W_{io}$, p_{rec} – выход биометана за цикл, вычисляемый как

$$\int_{N \cdot T_{rec}}^{(N+1) \cdot T_{rec}} \frac{dP}{dt} \cdot dt ,$$

где мгновенная интенсивность производства биометана вычисляется согласно третьему

уравнению системы (4), а под N понимается достаточно большой номер такта обновления, соответствующий выходу динамической системы на установившийся режим функционирования. Варьируя вид функции F , можно получать различные критерии поставленной задачи оптимизации, имеющие тот или иной экономический смысл. Так, в простейшем случае, когда $F_1 \equiv p_{rec}$, – максимизируется выход метана за единственный цикл работы реактора между двумя последовательными обновлениями его содержимого независимо от длительности цикла. Ясно, что гораздо более содержательным и логичным выглядит критерий $F_2 \equiv p_{rec}/T_{rec}$. В этом случае оптимизации подлежит средняя интенсивность производства метана в единицу времени. Критерий $F_3 \equiv p_{rec}/W_{rec}$ ставит во главу угла производство продукта на единицу затраченного сырья, то есть некую не зависящую от времени норму прибыли. Наконец, в случае когда необходимо учесть скорость оборачиваемости вложений (расходов на сырье), соответствующие критерии должны включать в себя как сырьевую, так и временную составляющие. Например, можно рассмотреть критерий $F_4 \equiv p_{rec}/(W_{rec} \cdot T_{rec})$ – удельный выход биогаза в единицу времени на единицу затраченного сырья. При этом, однако, неявно закладывается предположение о равенстве сравнительных полезностей ускорения цикла производства и понижения его материалоемкости. Видимо, наиболее информативным критерием, позволяющим адекватно учесть все экономические аспекты, может быть признана формализация $F_5 \equiv (C_{prod} \cdot p_{rec} - C_{row} \cdot W_{rec})/T_{rec}$, где C_{prod} – цена конечной продукции (биогаза), C_{row} – цена сырья. Иными словами, максимизируется абсолютная величина прибыли в денежном исчислении, получаемая в единицу времени. Выбор последнего соотношения в качестве критерия оптимальности исследуемого процесса позволяет, в частности, исследовать, как меняется представление о наиболее эффективном режиме работы реактора в зависимости от экономической конъюнктуры. Особенно интересны подобные исследования

в случае использования неоднородного сырья, когда условная ценность его различных компонентов существенно различается. В этом случае «стоимостная» компонента в критерии F_5 приобретает вид $\sum_{i=1}^M C_{row}^i \cdot W_{rec}^i$ и можно ставить и решать вопрос о выборе наиболее экономически выгодного режима управления работой реактора в зависимости от качественного состава сырья.

В ходе исследования и оптимизации полученной системы с периодическим дискретным обновлением содержимого биореактора выделяется один интересный случай. Поведение системы носит вырожденный характер при раздельном стремлении к нулю или времени обновления или доли обновляемого субстрата. В первом случае система всегда находится в точке своего начального состояния, во втором – мы имеем дело с полным «срабатыванием» исходного субстрата. Однако при совместном стремлении к нулю обеих этих величин вырождения системы не происходит, и получившийся «сингулярный» режим работы (бесконечно частое обновление бесконечно малого объема субстрата) может оказаться формально оптимальным при выборе конкретных значений определяющих параметров системы. Этот режим может быть интерпретирован как работа реактора в гипотетическом «проточном» режиме 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 типичный хемостат. Для адекватного описания подобного биореактора проточного типа требуется модификация структуры и внутреннего содержания используемой модели. А именно, дискретная процедура обновления заменяется на дополнительные непрерывные потоки вещества (рис. 3), а уравнения системной динамики переменных состояния (2–4) переписываются в виде

$$\frac{\partial W_i}{\partial t} = -k_i \cdot W_i \cdot f_H(S) + K_{flow} \cdot (W_{0i} - W_i), \quad i = 1, \dots, M,$$

$$\frac{\partial S}{\partial t} = \gamma \cdot \sum_{i=1}^M k_i \cdot W_i \cdot f_H(S) - \rho_M \cdot f_M(S) \cdot \frac{S \cdot B}{K_S + S} - K_{flow} \cdot S,$$

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

где 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 содержимого всего объема реактора, замещаемую в единицу времени исходным субстратом.

Компьютерные эксперименты по исследованию динамики основных переменных состояния получившейся модели «непрерывно-проточной» установки для производства биогаза показывают, что поведение исследуемой системы разбивается на два типичных периода – некоторое время с начала счета наблюдается переходный процесс, после чего система выходит на устоявшийся равновесный режим функционирования. При этом, как и в дискретном случае, в зависимости от начальных концентраций органического сырья и инокулируемых микроорганизмов может наблюдаться как режим эффективной работы реактора, так и эффект «пробки», когда накопившийся излишек жирных кислот полностью блокирует производство биометана. В результате на границе гипотетических областей притяжения различных режимов в фазовой плоскости параметров наблюдаются случаи, когда установившаяся интенсивность производства конечного продукта будет отличаться на несколько порядков при незначительной вариации начальных концентраций компонентов.

В качестве критериев оптимизации для варианта проточной установки могут быть выбраны те же выражения, что и для модели с дискретной перезагрузкой субстрата. Однако вместо величин выхода продукции и расхода сырья за один цикл обновления теперь следует использовать интенсивности соответствующих процессов в установившемся режиме работы биореактора. Так, «стоимостной» критерий в данном случае необходимо записать в виде

$$F_5 \equiv C_{prod} \cdot \frac{dP}{dt} - C_{row} \cdot K_{flow} \cdot \sum_{i=1}^M W_{oi}$$

Что же касается переменных оптимизации, то, в отличие от дискретного случая, таковая переменная оказывается единственной, и это – интенсивность «протока» K_{flow} , который показывает, какая доля общего содержимого реактора обновляется за заданный промежуток времени эксплуатации.

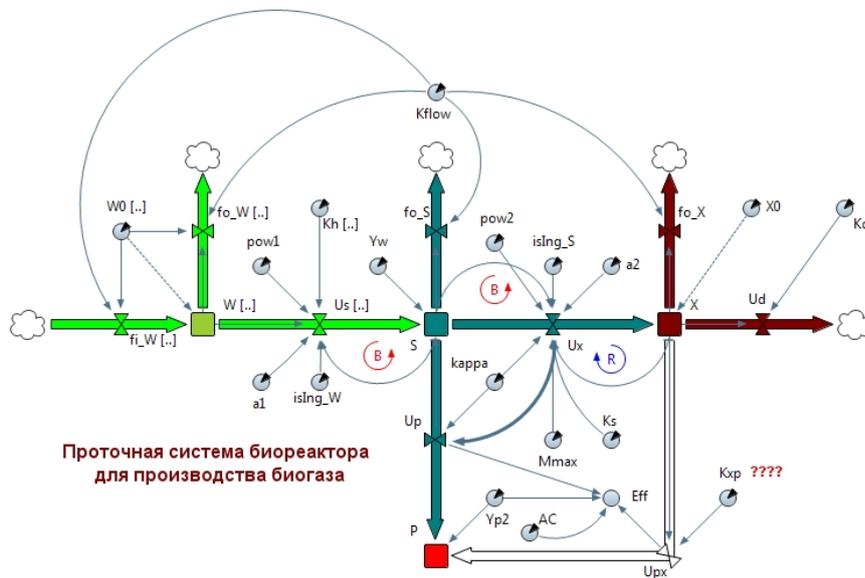


Рис. 3. Графическое представление модели производства биогаза в проточном биореакторе

Результаты и обсуждение

Приведем выборочные результаты компьютерных экспериментов с моделью, описывающей периодическое дискретное обновление растительного сырья в биореакторе в равноотстоящие моменты времени. На рисунке 4 приведен скриншот окна исполнения модели в среде имитационного моделирования AnyLogic, где представлены графики основных динамических переменных модели в установившемся режиме работы биореактора (когда влияние начальных значений оказывается полностью нивелировано). Нетрудно заметить существенную разницу в скорости «срабатывания» различных компонентов гетерогенного растительного сырья (график А), в то время как целлюлоза практически не успевает переработаться за один такт загрузки очередной порции сырья, лабильные сахара за это же время разлагаются почти полностью. Динамика продуктов гидролиза (график Б) и микробной биомассы (график В) подчиняются периодическому циклу обновления сырья, а интегральный выход метана (график Г) демонстрирует квазилинейный рост с незначительными колебаниями интенсивности внутри периодов обновления.

Исследование вопроса о нахождении оптимальных параметров технологического процесса (p_{rec}^*, T_{rec}^*) , обеспечивающих наилучшие значения того или иного критерия эффективности F_i , требует планирования и проведения другого типа компьютерных экспериментов. Та или иная процедура численной оптимизации или перебора предполагает множественный прогон исследуемой модели с постоянным варьированием влияющих параметров в ходе направленного поиска их экстремальных значений. Для нахождения точных значений координат локального максимума функции нами был использован функционал оптимизационного эксперимента, а для визуального представления этой гипотетической зависимости спроектирован и осуществлен эксперимент варьирования влияющих параметров по регулярной сетке значений. Выборочные результаты исследования представлены на рисунке 5. В качестве значений коэффициентов, используемых при вычислении «стоимостного» критерия F_5 , выбраны величины:

$$C_{row}^{Cellulose} = 150 \text{ y.e.}; \quad C_{row}^{Lignin} = 400 \text{ y.e.}; \quad C_{row}^{Sugars} = 3600 \text{ y.e.}; \quad C^{Methane} = 30 \text{ y.e.}$$

Как пример дешевого и, соответственно, труднорастворимого сырья рассматривалась смесь компонентов (целлюлоза, лигнин, сахара) в соотношении (60:30:10), а характерным представителем качественного сырья считалась смесь (20:30:50).

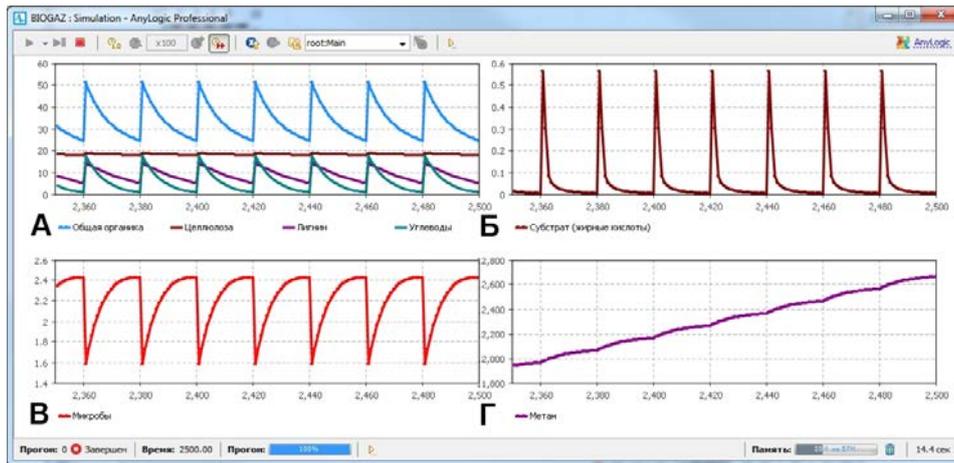


Рис. 4. Результаты эксперимента имитации работы биореактора с дискретным обновлением сырья ($T_{rec}=20$ сут.; $p_{rec}=0.4$). Динамика в установившемся режиме (А – органический субстрат, Б – продукты гидролиза, В – биомасса метаногенных микробов, Г – выход метана)

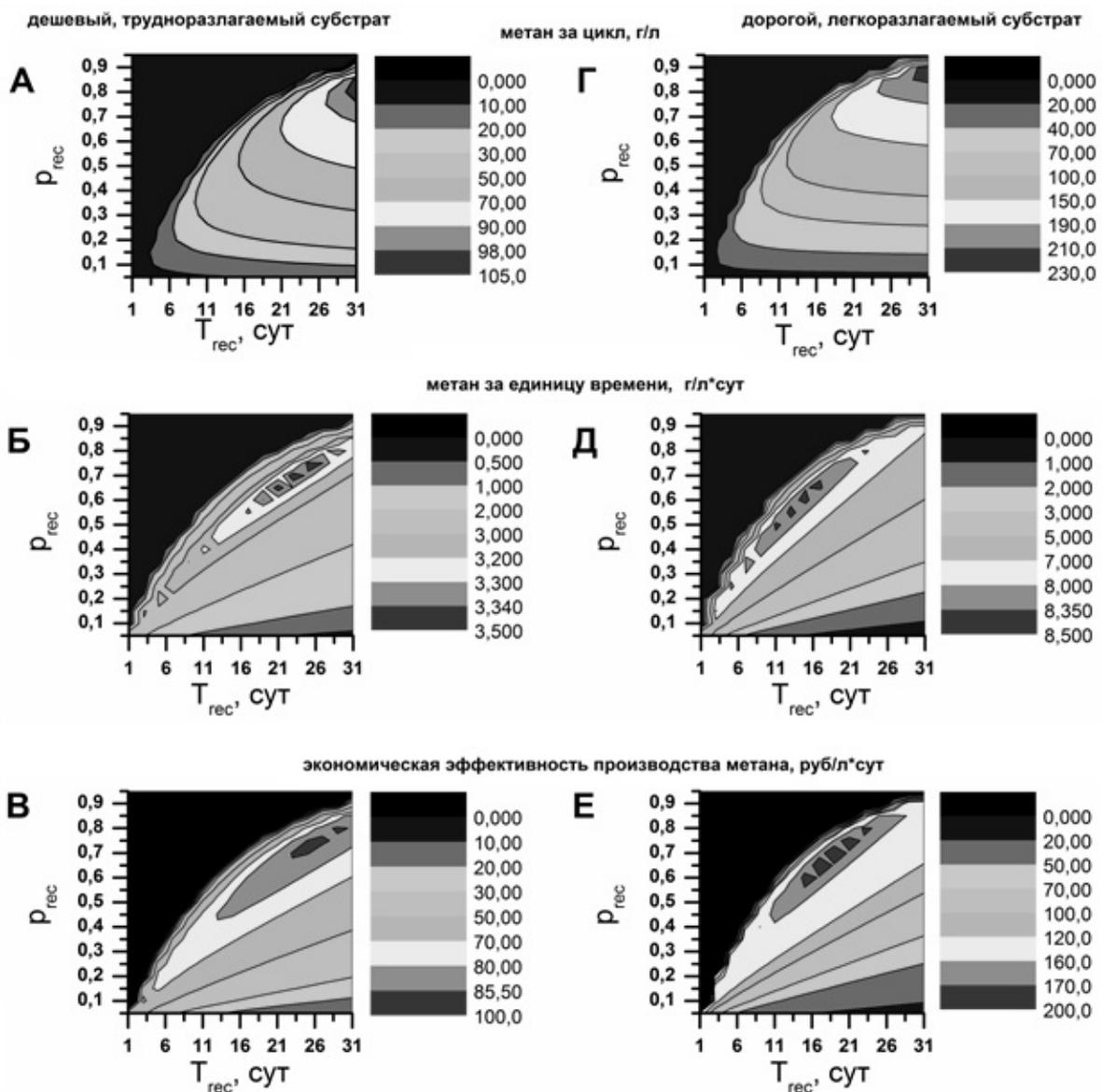


Рис. 5. Зависимость различных критериев эффективности процесса производства биогаза от параметров обновления для двух типов растительного сырья

Рассмотрение полученных графиков позволяет сделать несколько выводов. Почти для всех рассмотренных критериев оптимизации оказывается возможным получить невырожденные значения координат точки максимума. Исключение составляет критерий «выход метана за цикл», когда (что совершенно естественно) наилучшие показатели эффективности достигаются при максимально возможной длительности переработки единичной порции сырья. Напротив, параметр доли обновления сырья за перезагрузку в этом случае имеет локальный максимум внутри интервала варьирования; при этом повышение качества сырья сдвигает точку максимума в сторону более высоких значений. Это означает, что трудноразлагаемое сырье в целом необходимо менять менее интенсивно, давая возможность остающимся в реакторе растительным остаткам перерабатываться в течение нескольких тактов обновления. Введение в рассмотрение фактора оборачиваемости средств, то есть временной составляющей, меняет эту тенденцию. Область максимальных значений для дорогого качественного сырья сдвигается на фазовой плоскости варьируемых параметров влево и вниз. Иными словами, исследования показывают, что для данного случая 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. И наконец, крайне интересным представляется тот факт, что области максимальных значений параметров оказываются достаточно близко к своеобразной «пропасти» на фазовой плоскости. Эта область соответствует сочетанию параметров обновления, при котором наблюдается упомянутый выше эффект «пробки», то есть критического торможения всех химических реакций промежуточными продуктами гидролиза.

Заключение

Большинство прикладных задач, возникающих в производстве, связанном с технологией химической переработки органического сырья, требуют для своего исследования построения адекватных математических моделей изучаемого процесса. Как правило, в данной предметной области дело сводится к моделям химической кинетики, или так называемым стехиометрическим моделям, математической формой которых выступают обыкновенные нелинейные дифференциальные уравнения. Исключительно удобным инструментом комплексного исследования подобных моделей системной динамики могут служить современные высокопроизводительные и высокоуровневые среды имитационного моделирования. Встроенные в них стандартные процедуры параметрической идентификации, анализа чувствительности и устойчивости, оптимизации и статистической обработки результатов позволяют эффективно решать задачи численного исследования изучаемого процесса и находить наилучшие режимы функционирования рассматриваемых технических систем. В статье рассмотрено несколько альтернативных моделей гибридного типа, описывающих процесс получения метана в виртуальном биореакторе из неоднородного (многокомпонентного) растительного сырья. Для их построения и численного анализа нами использовалась платформа имитационного моделирования AnyLogic отечественной разработки. В ходе проведенных исследований получен ряд нетривиальных результатов по выбору оптимальных параметров режима работы модельного биореактора. Показано, что оптимальные с точки зрения интегрального выхода биометана значения параметров лежат близко к области критического закисления, приводящего к остановке процесса. А выбор в качестве критерия оптимизации экономических показателей, напротив, сдвигает точку оптимальных значений параметров в область его устойчивого функционирования.

Список литературы

1. Добрынина О.М., Калинина Е.В. Технологические аспекты получения биогаза // Вестник Пермского государственного технического университета. Охрана окружающей среды, транспорт, безопасность жизнедеятельности. 2010. №2. С. 33–40.
2. Aiba S., Shoda M., Nagatani M. Kinetics of Product Inhibition in Alcohol Fermentation // Biotechnology and Bioengineering. 1968. Vol. 10, №6. Pp. 845–864.
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. Pp. 213–224.
4. Gujer, W., Zehnder A.J.B. Conversion Processes in Anaerobic Digestion // Water Science and Technology. 1983. Vol. 15. Pp. 127–167.
5. Andrews J.F. A Mathematical Model for the Continuous Culture of Microorganisms Utilizing Inhibitory Substrates // Biotechnology and Bioengineering. 1968. Vol. 10. Pp. 707–723.

6. 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.
7. Вавилин В.А., Васильев В.Б., Рытов С.В. Моделирование деструкции органического вещества сообществом микроорганизмов. М., 1993. 204 с.
8. 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. Pp. 1–8.
9. Биотехнология и микробиология анаэробной переработки органических коммунальных отходов: коллективная монография / Под ред. А.Н. Ножевниковой, А.Ю. Каллистова, Ю.В. Литти, М.В. Кеврина. М., 2016. 320 с.
10. Вавилин В.А. Исследование анаэробной деградации органических отходов: опыт математического моделирования // Микробиология. 2010. Т. 79, №3. С. 352–359.
11. 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.
12. Вавилин В.А. Как эффективно получать биогаз? // Природа. 2008. №11. С. 14–19.
13. Monod J. The Growth of Bacterial Cultures // Annual Reviews of Microbiology. 1949. Vol. 3. Pp. 371–394.
14. Yano T., Nakahara T., Kamiyama S., Yamada K. Kinetic Studies on Microbial Activities in Concentrated Solutions. Part I. Effect of Excess Sugars on Oxygen Uptake Rate of a Cell Free Respiratory System // Agricultural and Biological Chemistry. 1966. Vol. 30, N1. Pp. 42–48.
15. Gaden E.L. Fermentation Process Kinetics // Journal of Biochemical and Microbiological Technology and Engineering. 1959. Vol. 1, N4. Pp. 413–429.
16. Шейн Е.В., Гончаров В.М. Агрофизика. М., 2006. 400 с.

Поступило в редакцию 6 июля 2017 г.

После переработки 8 ноября 2017 г.

Topaj F.G.¹, Vigont V.A.², Khvorova L.A.^{3*} SIMULATION MODEL OF THE PROCESS OF BIOGAS PRODUCTION FROM MULTICOMPONENT PLANT RAW MATERIALS. ANALYSIS AND PARAMETRIC OPTIMIZATION

¹ООО «Биуро Гиперборея», Podvoiskogo st., 40-2, office 87, St. Petersburg, 193312 (Russia)

²Agrophysical Research Institute, Grazhdanskii ave., 14, St. Petersburg, 195220 (Russia)

³Altai State University, Lenina av., 61, Barnaul, 656049 (Russia), e-mail: KhvorovaLA@gmail.com

Article is devoted to the description and the analysis of the system-dynamic model of technological process of biogas production from multicomponent vegetable raw materials. A research objective – optimization of biogas production process from vegetable raw materials by methods of imitating modeling, finding of the optimal regimes of the simulated production cycle – the best ratio from the economic point of view between an exit of biomethane and rates of giving/replacement of the initial substratum depending on the composition of raw materials.

In article models with a discrete and continuous cycle of production are considered, the description of the similar realization executed in the environment of multiapproach modeling of AnyLogic for model of technological process of anaerobic digestion of non-uniform multicomponent vegetable biomass is provided.

The known stoichiometric model of production of biomethane is taken as a basis, her modification is made for a case of multicomponent raw materials (percentage division into conditional components – sugar, lignin and cellulose). Possibilities of modern software shells and environments of modeling in tasks of the complex analysis and optimization of the studied process are shown.

During the conducted researches a row of non-trivial results on a choice of optimum parameters of an operation mode of the model bioreactor is received. For a case of the discrete process of up-dating of contents as parameters of optimization the frequency and a level of up-dating, and for the continuous flowing system – channel speed were selected.

It is shown that the optimal values of the parameters from the point of view of the integrated output of the biomethane lie close to the cloud of critical acidification, which leads to the stoppage of the process. If the economic indicators are chosen as an optimization criterion, then we obtain optimal values of the parameters lying within the region of stable functioning of the model bioreactor.

Keywords: plant raw material, biogas, differential equations, simulation modeling, optimization parameters.

References

1. Dobrynina O.M, Kalinina E.V. *Vestnik Permskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta. Okhrana okruzhaiushchei sredy, transport, bezopasnost' zhiznedeiatel'nosti*, 2010, no. 2, pp. 33–40. (in Russ.).
2. Aiba S., Shoda M., Nagatani M. *Biotechnology and Bioengineering*, 1968, vol. 10, no. 6, pp. 845–864.
3. Grant D.J.W. *Journal of General Microbiology*, 1967, vol. 46, pp. 213–224.
4. Gujer, W., Zehnder A.J.B. *Water Science and Technology*, 1983, vol. 15, pp. 127–167.
5. Andrews J.F. *Biotechnology and Bioengineering*, 1968, vol. 10, pp. 707–723.
6. Gerber M., Span R. *In: Proc., Int. Gas Union Research Conf.*, French Gas Association, Neuilly-sur-Seine, France, 2008.
7. Vavilin V.A., Vasil'ev V.B., Rytov S.V. *Modelirovanie destruktii organicheskogo veshchestva soobshchestvom mikroorganizmov*. [Modeling of the destruction of organic matter by a community of microorganisms]. Moscow, 1993, 204 p. (in Russ.).
8. Vavilin V.A., Vasiliev V.B., Ponomarev A.V., Rytov S.V. *Bioresource Technology*, 1994, vol. 48, pp. 1–8.
9. *Biotekhnologiya i mikrobiologiya anaerobnoi pererabotki organicheskikh kommunal'nykh otkhodov*. [Biotechnology and microbiology of anaerobic processing of organic municipal waste]. Ed. A.N. Nozhevnikova, A.Iu. Kallistov, Iu.V. Litti, M.V. Kevbrin. Moscow, 2016, 320 p. (in Russ.).
10. Vavilin V.A. *Mikrobiologiya*, 2010, vol. 79, no. 3, pp. 352–359. (in Russ.).
11. Korolev S.A., Maikov D.V. *Komp'yuternye issledovaniia i modelirovanie*, 2012, vol. 4, no. 1, pp. 131–141. (in Russ.).
12. Vavilin V.A. *Priroda*, 2008, no. 11, pp. 14–19. (in Russ.).
13. Monod J. *Annual Reviews of Microbiology*, 1949, vol. 3, pp. 371–394.
14. Yano T., Nakahara T., Kamiyama S., Yamada K. *Agricultural and Biological Chemistry*, 1966, vol. 30, no. 1, pp. 42–48.
15. Gaden E.L. *Journal of Biochemical and Microbiological Technology and Engineering*, 1959, vol. 1, no. 4, pp. 413–429.
16. Shein E.V., Goncharov V.M. *Agrofizika*. [Agrophysics]. Moscow, 2006, 400 p. (in Russ.).

Received July 6, 2017

Revised November 8, 2017

* Corresponding author.