

MATEMATICKÝ MODEL PŮDNÍHO BIOREAKTORU V PROSTŘEDÍ MATLAB A FEMLAB

Marta Palatová, Miloš Kmínek, Jana Finkeová

Vysoká škola chemicko-technologická, Ústav počítačové a řídicí techniky

1. ÚVOD

Půdní bioreaktor je technicky poměrně jednoduché zařízení, které může být použito k čištění odpadních vod kontaminovaných organickými látkami. Konstrukčně může být realizován jako pevný obdélníkový rám naplněný do určité výšky vrstvou zeminy obsahující mikroorganismy, které jsou schopné metabolizovat kontaminující organickou látku. Povrch zeminy se rovnoměrně skrání kontaminovanou vodou a zespoda se odebírá voda vyčištěná. Mikroorganismy spotřebovávají organickou látku jako zdroj uhlíku, který potřebují ke svému růstu a rozmnožování. Jestliže chceme vytvořit matematický model popisující závislost koncentrace kontaminující složky ve vyčištěné vodě na čase ve vztahu k dalším parametrům, jako jsou průtok vody a obsah kontaminantu na vstupu, můžeme použít různé úrovně zjednodušení.

Nejjednodušší model chápe bioreaktor jako systém se soustředěnými parametry, tj. jako dokonale míchanou nádrž. Tento přístup vede na soustavu dvou obyčejných diferenciálních rovnic pro časovou závislost koncentrace kontaminantu a mikroorganismů, [2].

Složitější přístup bere v úvahu i souřadnici, tedy chápe bioreaktor jako systém s rozloženými parametry. Tento model vede na soustavu dvou parciálních diferenciálních rovnic parabolického typu pro závislost koncentrace kontaminantu a mikroorganismů na čase a na souřadnici. Řešení modelu tohoto typu s využitím MATLABu a FEMLABu ukazuje tento příspěvek.

2. FORMULACE PROBLÉMU

Studovaný půdní bioreaktor, jehož matematický model je dále sestaven a řešen, je realizován jako rám o ploše 2 m^2 s náplní upravené zeminy o výšce vrstvy 2,5 dm obsahující bakterie *Pseudomonas stutzeri*, které rozkládají chlorované aromatické uhlovodíky. Těchto bakterií se používá k dekontaminaci vody s obsahem 0,5 g/l kyseliny 2,5-dichlorbenzoové. Náplň bioreaktoru sestává ze zeminy smíchané se suspenzí kultury bakterií obsahující 30 g sušiny buněk v 1 litru v poměru 100 l suspenze na 1 m^3 zeminy.

S protékající dekontaminovanou vodou je strhávána i část biomasy a bylo odhadnuto, že je to 1 % množství v daném místě. Pro 2,5-dichlorbenzoovou kyselinu bylo zjištěno, že rychlost růstu bakterií na ní lze popsat Monodovým vztahem s hodnotami kinetických konstant $K_S = 0,086 \text{ g/l}$, $\mu_{max} = 0,153 \text{ h}^{-1}$. Hodnota koeficientu Y_{SX} vyjadřujícího spotřebu substrátu na jednotkové množství narostlé biomasy byla zjištěna experimentálně a je rovna 1,65.

3. MATEMATICKÝ MODEL

3.1 Model se soustředěnými parametry

Jak již bylo řečeno, v prvním přiblížení můžeme bioreaktor uvažovat jako ideálně míchaný systém, tj. koncentrace mikroorganismů a kontaminantu jsou ve všech místech bioreaktoru stejné a koncentrace ve výstupním proudu jsou rovny koncentracím uvnitř bioreaktoru. Za těchto předpokladů lze pokládat půdní bioreaktor za systém se soustředěnými parametry.

Matematický model bioreaktoru je pro tento případ tvořen dvěma obyčejnými diferenciálními rovnicemi odvozenými z látkové bilance jednotlivých složek:

$$\frac{dX}{dt} = \mu X - \frac{QXp_V}{V} \quad (\text{bilance biomasy}) \quad (1)$$

$$\frac{dS}{dt} = \frac{Q(S_F - S)}{V} - \mu XY_{S/X} \quad (\text{bilance substrátu, tj. kontaminantu}) \quad (2)$$

s počátečními podmínkami, které definují počáteční stav při zahájení provozu reaktoru:

$$X(t = 0) = X_0, \quad S(t = 0) = S_0.$$

Kinetika růstu mikroorganismů je dána Monodovým vztahem:

$$\mu = \mu_{\max} \frac{S}{K_S + S} \quad (3)$$

Význam symbolů je uveden na konci příspěvku.

Odvozením a řešením modelu se soustředěnými parametry jsme se zabývali v práci [2], kde je popsán také přístup vycházející z představy, že lze spojitý proces toku vody vrstvou zeminy aproximovat kaskádou míchaných reaktorů.

3.2 Model s rozloženými parametry

Ideálně míchaný reaktor, ve kterém jsou koncentrace ve všech místech stejné, neodpovídá reálnému stavu. Pro popis toku hmot bioreaktorem je vhodné použít fyzikální představu pístového toku. Matematický popis pak vede na parciální diferenciální rovnice.

Předpokládáme-li pístový tok, musíme vedle nezávisle proměnné čas t uvažovat jako další nezávisle proměnnou souřadnici, konkrétně vzdálenost daného místa od skrápěného povrchu zeminy; označíme ji z . Matematický model bioreaktoru je opět odvozen z látkové bilance jednotlivých složek, oproti kapitole 3.1. je však koncentrace substrátu i koncentrace biomasy závislá nejen na čase, ale též na souřadnici z , tj. $S=S(t, z)$, $X=X(t, z)$.

Výsledné rovnice mají tvar

$$\frac{\partial X}{\partial t} = -\frac{p_V Q}{A} \cdot \frac{\partial X}{\partial z} + \mu X \quad (4)$$

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -\frac{Q}{A} \cdot \frac{\partial S}{\partial z} - \mu X Y_{S/X} \quad (5)$$

kde kinetika růstu je opět dána Monodovým vztahem

$$\mu = \mu_{\max} \frac{S}{K_S + S}$$

Počáteční podmínky, které definují počáteční stav při zahájení provozu reaktoru, jsou

$$X(0, z) = X_0, \quad S(0, z) = S_0 \quad (6)$$

a okrajové podmínky definující situaci na horní a dolní ploše bioreaktoru jsou

$$\text{horní okraj: } z = 0: \quad \frac{\partial X(t, 0)}{\partial z} = 0 \quad S(t, 0) = S_F \quad (7)$$

(gradient koncentrace biomasy na povrchu bioreaktoru je nulový, koncentrace substrátu na povrchu se rovná koncentraci ve vstupující znečištěné vodě)

$$\text{dolní okraj: } z = h: \quad \frac{\partial X(t, h)}{\partial z} = 0 \quad \frac{\partial S(t, h)}{\partial z} = 0 \quad (8)$$

(koncentrace biomasy na dně bioreaktoru je extrémální, koncentrace substrátu na dně je extrémální - minimální).

4. VÝSLEDKY

4.1 Model se soustředěnými parametry

Pro případ ideálně míchaného reaktoru lze úlohu, sestávající ze dvou obyčejných diferenciálních rovnic řešit se základními znalostmi numerické matematiky a programování pomocí nějakého programovacího jazyka nebo využít nabídky různého simulačního software, více či méně složitě. Mnohdy pro základní představu o chování bioreaktoru tento přístup postačuje.

Výhodou tohoto přístupu je názorný pohled na modelovaný proces a jednoduchá realizace modelu. Více viz [2].

4.2 Model s rozloženými parametry

Soustavu dvou parciálních diferenciálních rovnic (PDR) lze řešit např. metodou přímeek, tj. převodem na soustavu obyčejných diferenciálních rovnic s časem jako nezávisle proměnnou, nebo využít nějaký komerční program na řešení PDR. Ty existují a jsou obecné či orientované na určitou problematiku. V programovém balíku MATLAB se nabízí jednak toolbox *pde* (pde –partial differential equations), jednak samostatný balík FEMLAB.

Ve FEMLABu lze využít jednak grafického prostředí pro zadávání problému, jednak přístupu, kdy využíváme vestavěných funkcí.

Dále je uveden přepis rovnic (4) a (5) do tzv. formy *general*

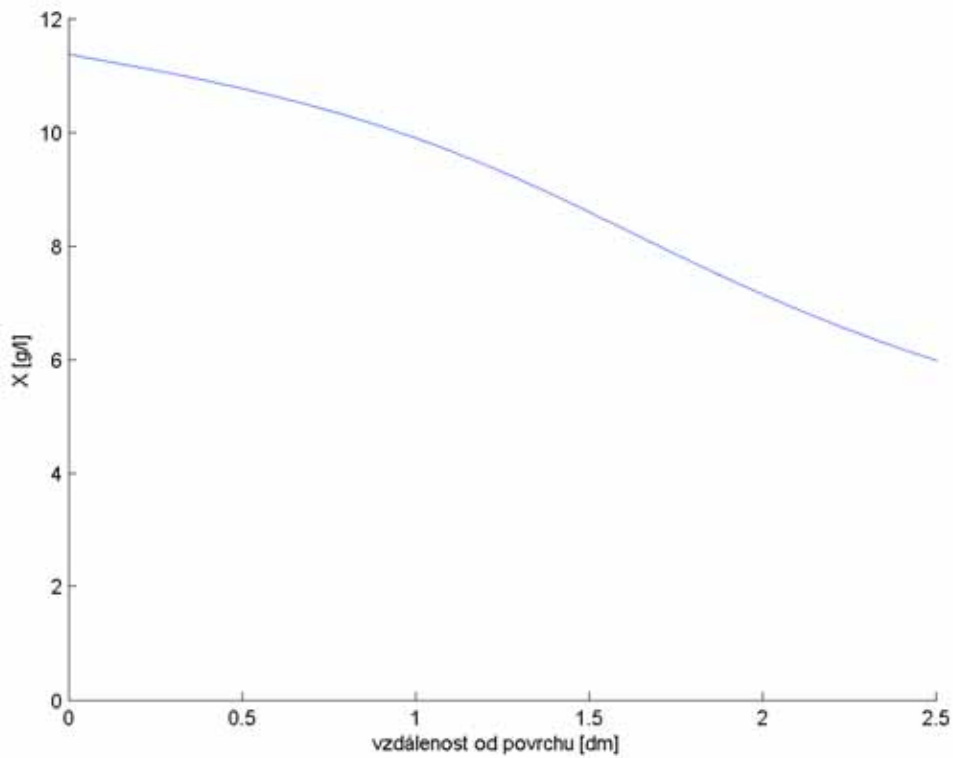
$$1 \cdot \frac{\partial S}{\partial t} + 0 \cdot \frac{\partial X}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} \left(0 \cdot \frac{\partial S}{\partial z} \right) = - \frac{Q}{A} \cdot \frac{\partial S}{\partial z} - \mu X \cdot Y_{S/X} \quad (4a)$$

$$0 \cdot \frac{\partial S}{\partial t} + 1 \cdot \frac{\partial X}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} \left(0 \cdot \frac{\partial X}{\partial z} \right) = - \frac{p_V Q}{A} \cdot \frac{\partial X}{\partial z} + \mu X \quad (5a)$$

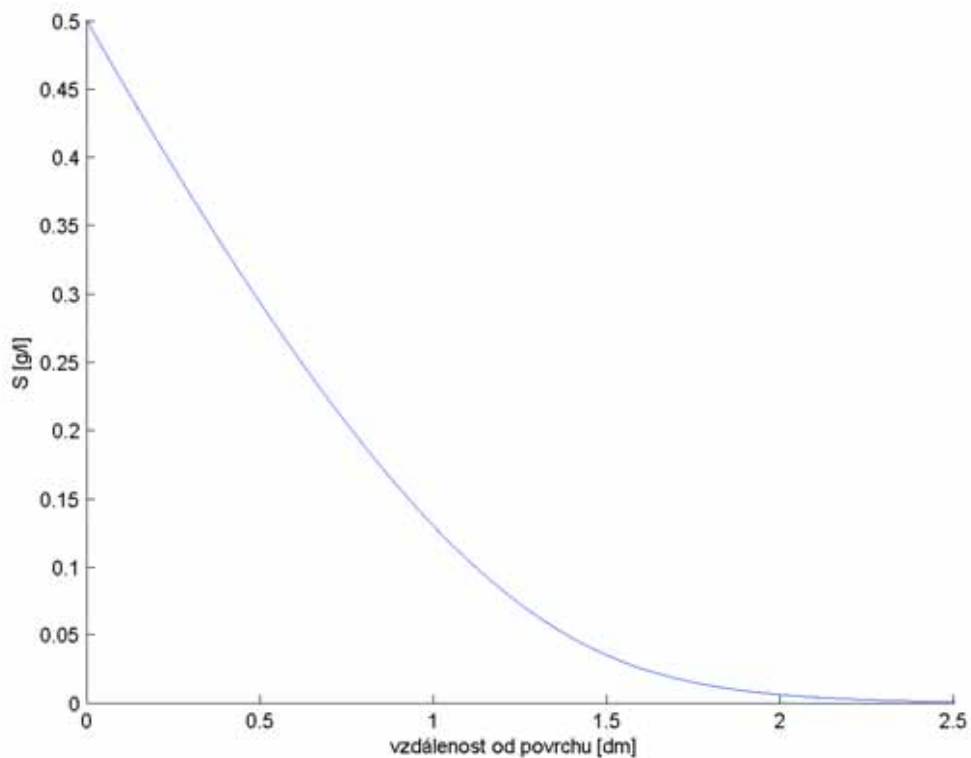
kteřou používáme pro zápis úlohy. Počáteční a okrajové podmínky jsou totožné s (6)-(8). Pro popis a řešení jsme použili funkce z FEMLABu; grafické prostředí se nám pro tuto úlohu nezdálo vhodné. Základní část, která vyjadřuje výše napsaný problém, vypadá takto:

```
fem.form='general';
fem.geom=solid1([0 2,5]);
fem.mesh=meshinit(fem,'hmax', 0.01);
fem.variables={'Q',1100,'A',200,'pv',0.01,'Ks',0.086,'Sf',0.5,'Ysx',1.65,'mimax',0.153};
fem.dim={'S','B'};
fem.equ.f={'-Q/A*Sx-mimax*S/(Ks+S)*Ysx*B' '-pv*Q/A*Bx+mimax*S/(Ks+S)*B'};
fem.equ.da={{1 1}};
fem.bnd.g={{'Sf-S' 0} 0};
fem=femdiff(fem);
fem.init={{0.5 3}};
fem.sol=femtime(fem,'report','on','tlist', 0:0.01:0.1);
```

Na obrázcích 1 a 2 jsou průběhy koncentrací biomasy a substrátu-kontaminantu po 10 hodinách. Pro náš problém je podstatný průběh koncentrace substrátu ve vodě, která opouští půdní čističku. Z obr.2 je vidět, že znečištění na výstupu z půdního bioreaktoru je po 10 hodinách téměř nulové, dokonce i hodnota koncentrace ve vzdálenosti 2 dm od povrchu je zanedbatelná a tak lze zvažovat, zda není postačující výška čističky pouze 2 dm. Další faktor, který ovlivní parametry půdního bioreaktoru je doba, za kterou by mělo znečištění ve vytékající vodě klesnout pod předem danou hodnotu.



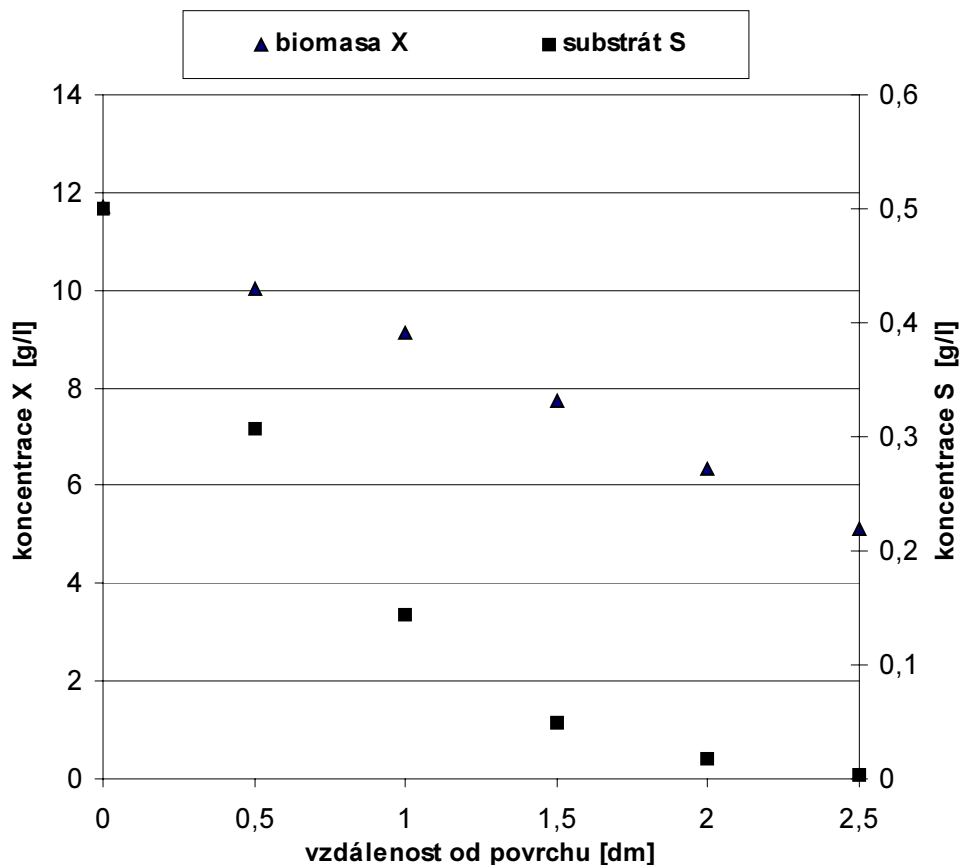
Obr.1. Rozložení koncentrace biomasy v závislosti na vzdálenosti od povrchu půdního bioreaktoru po 10 hodinách jeho činnosti.



Obr.2. Rozložení koncentrace substrátu (znečištění) v závislosti na vzdálenosti od povrchu půdního bioreaktoru po 10 hodinách jeho činnosti.

Pro srovnání a pro případ, kdy uživatel nemá k dispozici programové vybavení pro řešení parciálních diferenciálních rovnic, jsme úlohu převedli na soustavu obyčejných

diferenciálních rovnic. Použili jsme k tomu metody přímek, kde jsme výšku bioreaktoru rozdělili na 5 dílů a následně získali soustavu 12 obyčejných diferenciálních rovnic. Ty jsme vyřešili v prostředí MATLAB pomocí funkce *ode23* a dostali časové průběhy koncentrací biomasy a substrátu v různých výškách bioreaktoru. Z nich jsme obdrželi hodnoty koncentrací biomasy a substrátu v závislosti na vzdálenosti od povrchu půdního bioreaktoru. Ty po 10 hodinách jsou na obr.3.



Obr.3. Rozložení koncentrací substrátu a biomasy v závislosti na vzdálenosti od povrchu půdního bioreaktoru po 10 hodinách jeho činnosti. Hodnoty jsou získány metodou přímek.

Je zřejmé, že charakter průběhu a i hodnoty jsou téměř stejné. Z FEMLABu dostaneme spojitou křivku, zatímco z metody přímek hodnoty pouze v několika bodech.

5. ZÁVĚR

V příspěvku je sestaven matematický model půdního bioreaktoru, resp. půdní čističky. Reaktor je popsán jako soustava s rozloženými parametry a matematický model obsahuje parciální diferenciální rovnice. Jejich řešení je hledáno s využitím FEMLABu. Model umožňuje sledovat vliv různých parametrů bioreaktoru (výška zeminy, skrácená plocha bioreaktoru), parametrů kontaminované vody (koncentrace substrátu ve vstupním proudu, objemový průtok znečištěné vody), parametrů zasahujících mikroorganismů (růstová rychlost, výtěžnostní koeficient) na kvalitu dekontaminované vody.

Seznam symbolů:

X	koncentrace biomasy [g/l]
V	objem reaktoru (vrstvy zeminy) [l]
A	průřez reaktoru [dm ²]
h	výška zeminy v reaktoru [dm]
Q	objemový průtok [l/hod]
p_V	podíl biomasy strhávané v odtoku
S	koncentrace substrátu [g/l]
S_F	koncentrace substrátu v přítoku [g/l]
$Y_{S/X}$	koeficient spotřeby substrátu na 1g vzniklé biomasy
μ	růstová rychlost mikroorganismů [h ⁻¹]
μ_{max}	maximální růstová rychlost mikroorganismů [h ⁻¹]
K_S	saturační konstanta Monodova vztahu [g/l]
t	čas [h]
z	souřadnice [dm]

Literatura

- [1] Melzoch, K. a kol.: Modelování bioprocесů, elektronický učební text. Praha : VŠCHT, 2002. <http://uprt.vscht.cz/ucebnice/mb>
- [2] Palatová M., Finkeová J., Kmínek M.: Matematický model půdního dekontaminačního bioreaktoru, MOSIS 2000, Sborník 34. mezinárodní konference Modelování a simulace systémů, str.161-164, ISBN-80-85988-46-1
- [3] Femlab. Model Library, COMSOL, Inc., Burlington, MA, 2000
-

RNDr. Marta Palatová, CSc., Doc. Miloš Kmínek, CSc., Ing. Jana Finkeová, CSc.
Vysoká škola chemicko-technologická
Ústav počítačové a řídicí techniky
Technická 5, 166 28 Praha 6
tel. +420 224 354 295, fax. +420 224 355 053
e-mail: Marta.Palatova@vscht.cz, Milos.Kminek@vscht.cz, Jana.Finkeova@vscht.cz