



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI NAPOLI FEDERICO II



Scuola Politecnica e delle Scienze di Base
Dipartimento di Ingegneria Civile, Edile e Ambientale

“MODELLAZIONE MATEMATICA DI PROCESSI FOTO-BIOLOGICI PER LA PRODUZIONE DI BIOCOMBUSTIBILI E BIOCHEMICALS”

Relatore

Ch.mo Prof. Massimiliano Fabbricino

Dott. Ing. Luigi Frunzo

Correlatore

Dott. Ing. Vincenzo Luongo

Candidata

Teresa Di Fiore

Matricola

324/230

Anno accademico 2017/2018



Oltre l'80% dell'energia primaria prodotta è ottenuta utilizzando combustibili fossili.

Cambiamenti climatici e impatti ambientali dovuti all'eccessivo utilizzo di combustibili fossili sono diventati problemi di scala mondiale.

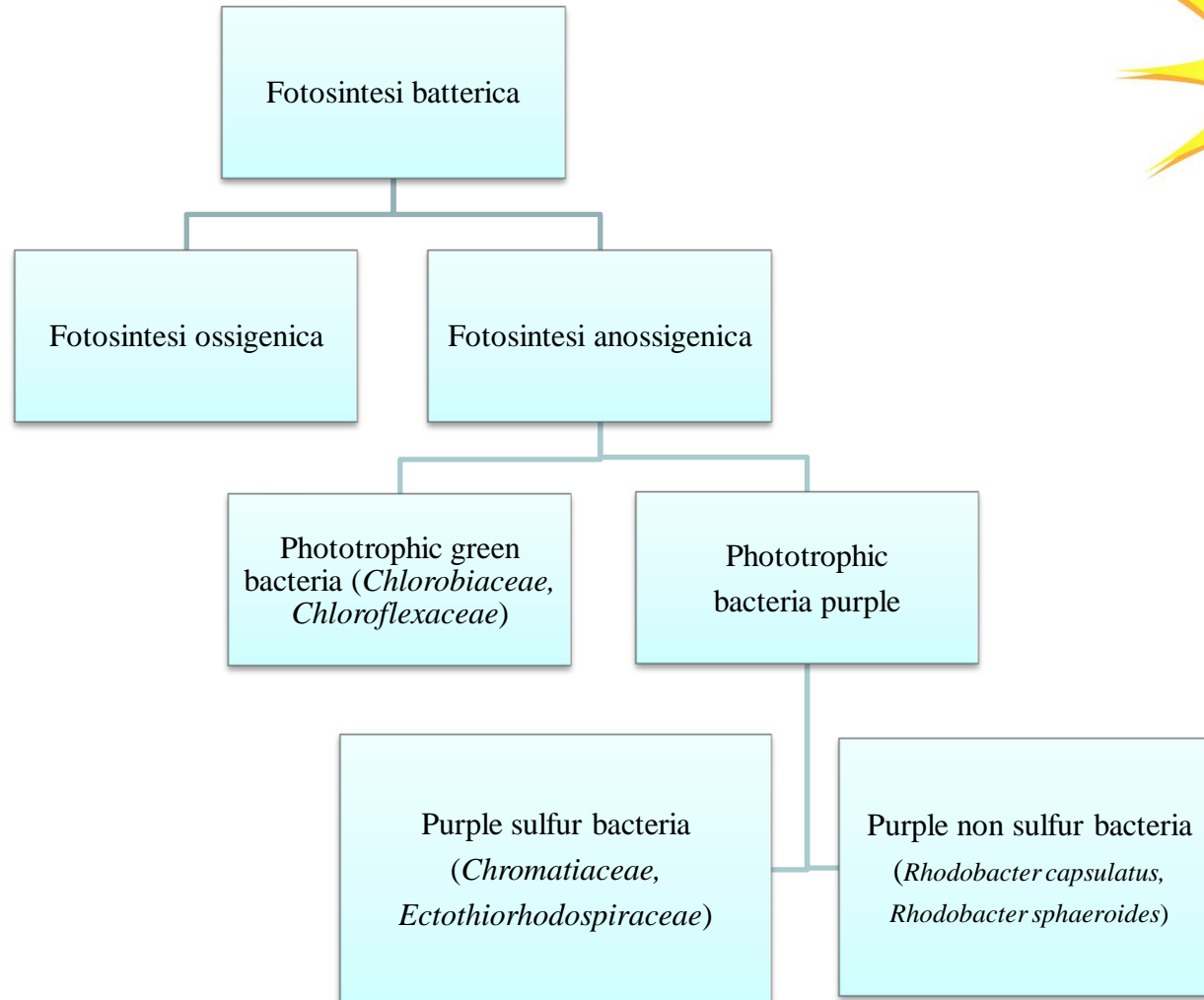
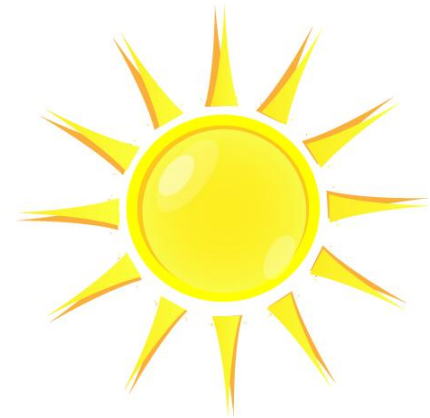


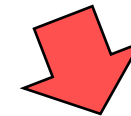
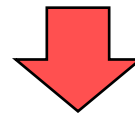
BIOCOMBUSTIBILI

BIOCHEMICALS



phos (luce) ***trophé*** (nutrimento)





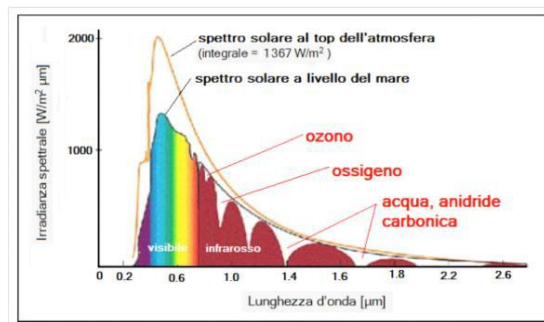
Basse
concentrazioni di
ossigeno

Disponibilità di
luce

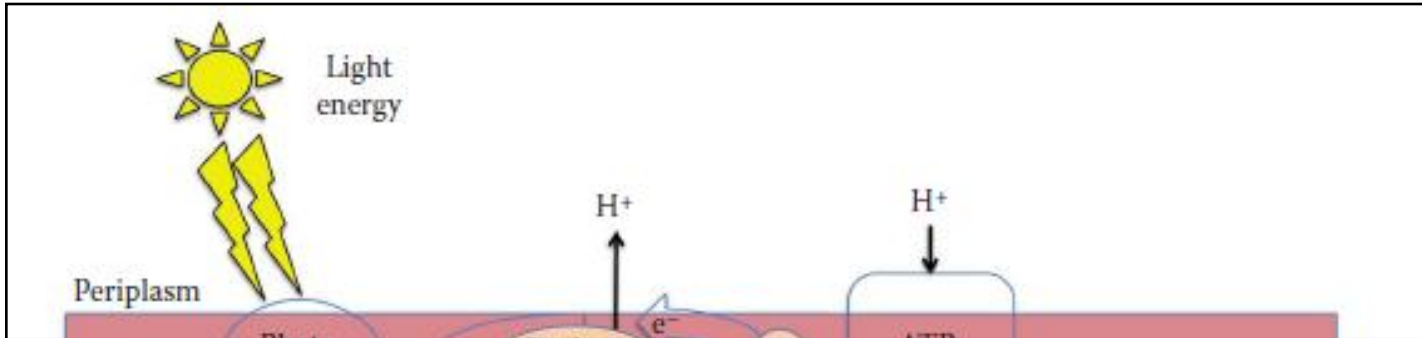
Sostanza
organica disciolta
e nei sedimenti

Sono spesso indicati in letteratura come i più promettenti
per la produzione fotobiologica di H_2

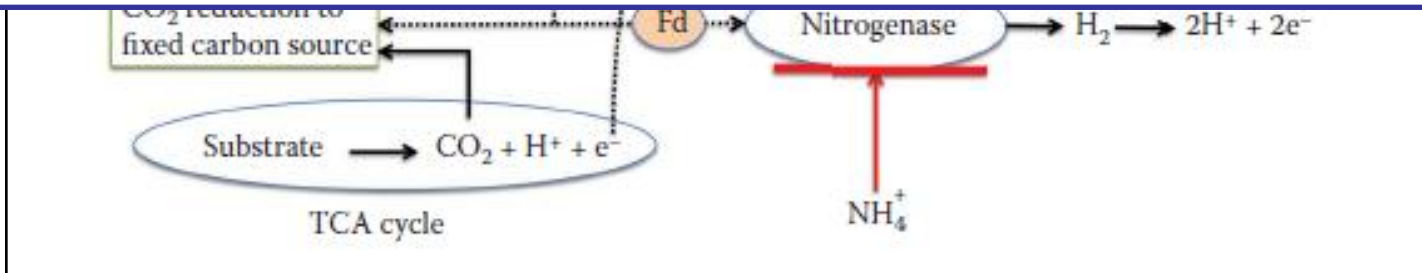
Elevata
Resa



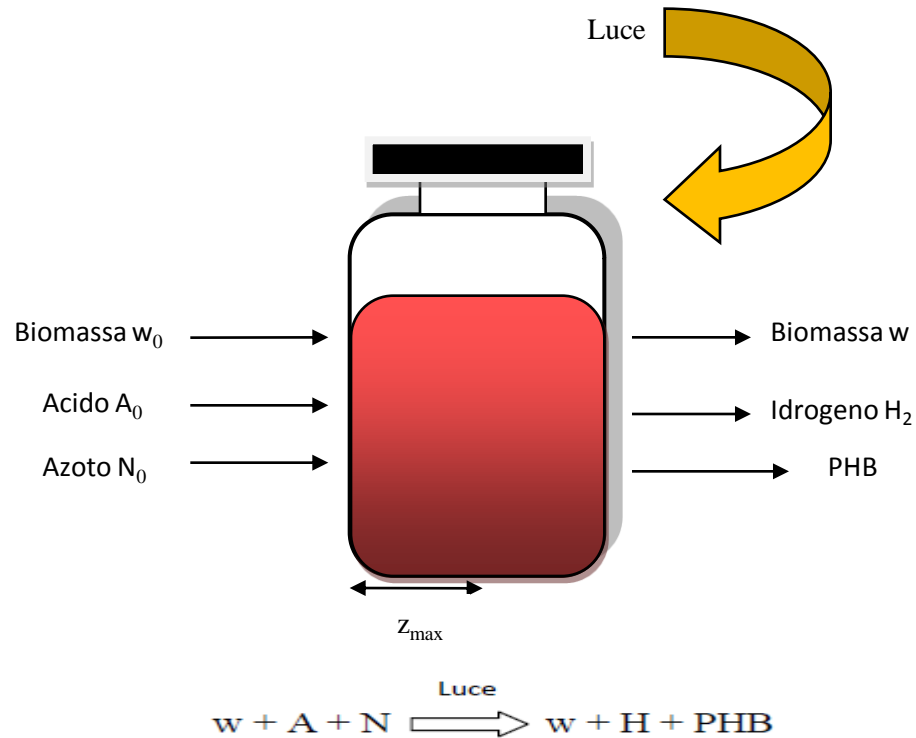
Schema complessivo del processo biologico di produzione di H₂



Messa a punto di un modello matematico per l'applicazione del processo fotofermentativo volto alla produzione di idrogeno e chemicals.



Schema del fotobioreattore completamente miscelato utilizzato



Il modello non lineare per la crescita dei PNSB è stato calibrato con dati relativi a sperimentazioni effettuate in scala di laboratorio atte a quantificare

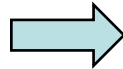
Crescita della
biomassa

Produzione di
idrogeno

Accumulo di
PHB

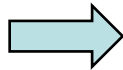
$$\frac{\partial w}{\partial t}(z, t) = D_M \frac{\partial^2 w}{\partial z^2}(z, t) + Y * [g(I_n(w, z, t)) f_1(A(t)) f_2(N(t)) w(z, t)] - H_A(w(z, t))$$

Primo termine



Mescolamento

Secondo termine



Influenza luce, acido e azoto

Terzo termine



Tasso di morte della biomassa

L'effetto dell'intensità di luce è rappresentato da una funzione di tipo Monod:

$$g(I) = \mu_0 \frac{I_n}{H_L + I_n}$$

L'intensità luminosa è data da una legge di tipo *Arrhenius* :

$$I_n(w, z, t) = I_0(t) e^{-kz} e^{-rs \int_0^z w(s, t) ds}$$

$$I_0(t) = 100 * \max \left(\sin \left(\frac{t - 4 * 3600}{2\pi} \right), 0 \right)$$

$$\frac{dA}{dt}(t) = -\frac{1}{z_{MAX}} \left(\int_0^{z_{MAX}} g(I_n(w, z, t)) f_1(A) f_2(N) w(z, t) dz \right) + S_A$$

$$\frac{dN}{dt}(t) = -\frac{1}{z_{MAX}} \left(\int_0^{z_{MAX}} g(I_n(w, z, t)) f_1(A) f_2(N) w(z, t) dz \right) + S_N$$

$$\frac{dH}{dt}(t) = +(1 - Y) \frac{F}{z_{MAX}} \left(\int_0^{z_{MAX}} g(I_n(w, z, t)) f_1(A) f_2(N) w(z, t) dz \right) + S_H$$

$$\frac{dPhb}{dt}(t) = +(1 - Y) \frac{(1-F)}{z_{MAX}} \left(\int_0^{z_{MAX}} g(I_n(w, z, t)) f_1(A) f_2(N) w(z, t) dz \right) + S_{Phb}$$

Anche per l'acido e l'azoto si considerano funzioni di tipo Monod:

$$f_1(A) = \frac{A}{H_a + A}$$

$$f_2(N) = \frac{N}{H_N + N}$$

Per risolvere numericamente queste cinque equazioni differenziali è stato utilizzato il *Metodo delle linee*

PASSO 1:



Discretizzazione rispetto a z con $n = 10$

PASSO 2:



$$\frac{dP}{dt} \approx -\frac{h \cdot f_1(A) \cdot f_2(N)}{z_{MAX}} \sum_{i=1}^m w(z_i, t) \cdot G(I_n(w_i, z_i, t)) + S_A$$

$$\frac{dN}{dt} \approx -\frac{h \cdot f_1(A) \cdot f_2(N)}{z_{MAX}} \sum_{i=1}^m w(z_i, t) \cdot G(I_n(w_i, z_i, t)) + S_N$$

$$\frac{dH}{dt} \approx +(1 - Y) \cdot F \cdot \frac{h \cdot f_1(A) \cdot f_2(N)}{z_{MAX}} \sum_{i=1}^m w(z_i, t) \cdot G(I_n(w_i, z_i, t)) + S_H$$

$$\frac{dPhb}{dt} \approx +(1 - Y) \cdot (1 - F) \cdot \frac{h \cdot f_1(A) \cdot f_2(N)}{z_{MAX}} \sum_{i=1}^m w(z_i, t) \cdot G(I_n(w_i, z_i, t)) + S_{Phb}$$

$$W' = F(W, t)$$

METODO A DUE PASSI IMPLICITO

$$W_n = \frac{4}{3}W_{n-1} - \frac{1}{3}W_{n-2} + \tau \left(\frac{2}{3}F(W_n, t_n) \right)$$

$W(t_1)$

Condizioni iniziali

$$W(t_2) = W(t_1) + dt * F(t_1, W(t_1))$$

Metodo di Eulero esplicito

Metodo predictor-corrector

$$W_n^P = W_{n-1} + \tau F(W_{n-1}, t)$$

$$W_n = \frac{4}{3}W_{n-1} - \frac{1}{3}W_{n-2} + \tau \left(\frac{2}{3}F(W_n^P, t_n) \right)$$

Caratteristiche reattori fotofermentativi

Volume totale	500 cm ³
Volume utile	400 cm ³
Superficie illuminata	301.44 cm ²
Superficie specifica	0.75
Tipologia di chiusura	ermetica

Caratteristiche substrato	Condizioni anaerobiche	Effetto miscelazione	Condizioni ambientali
Mix VFAs (acido acetico, acido butirrico e acido propionico) + 10 ml/l micronutrienti. COD = 2100 mg/l	Flussaggio con Argon per 20 minuti.	Stirrer (agitatore) magnetico con un'ancoretta metallica inserita nel reattore. La velocità di agitazione di 250 giri/min.	Temperatura ambiente. Illuminazione costante a 4000 lux.

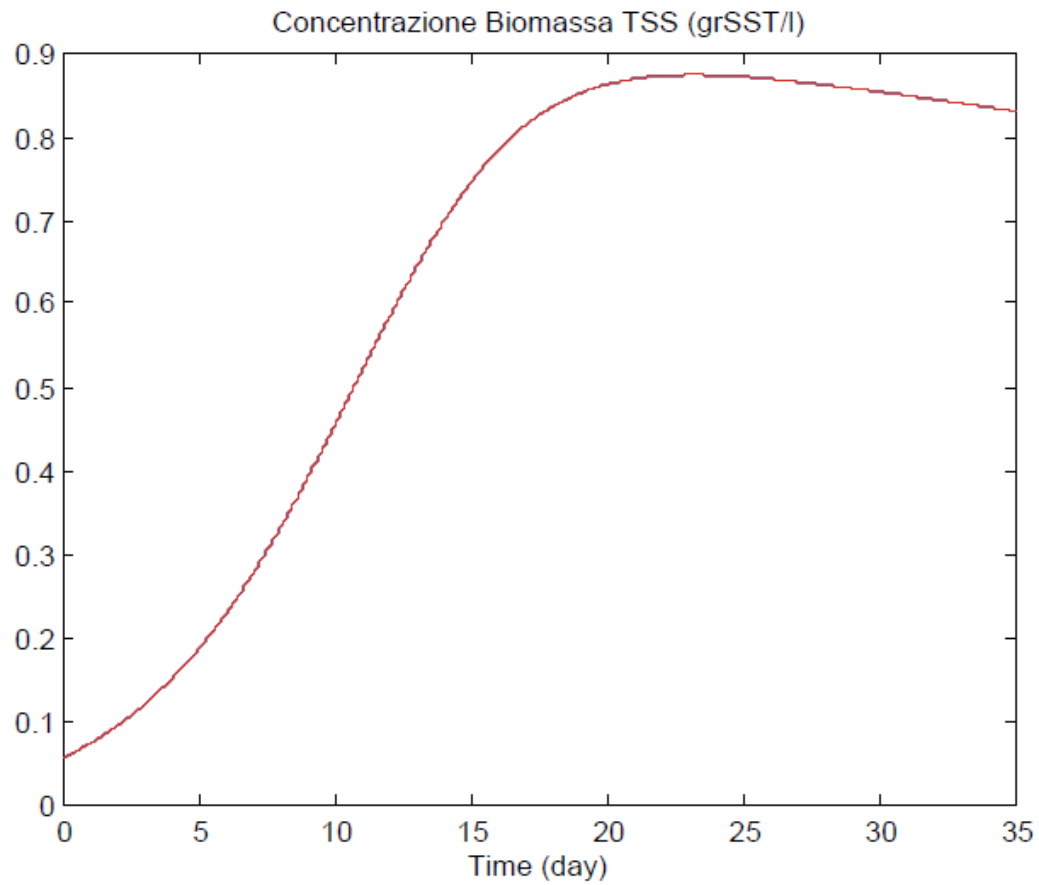
Parametri e coefficienti stechiometrici del modello

grSSV/grSST	0.89
grCOD/grSSV	1.78
grPHB/grCOD	1.385

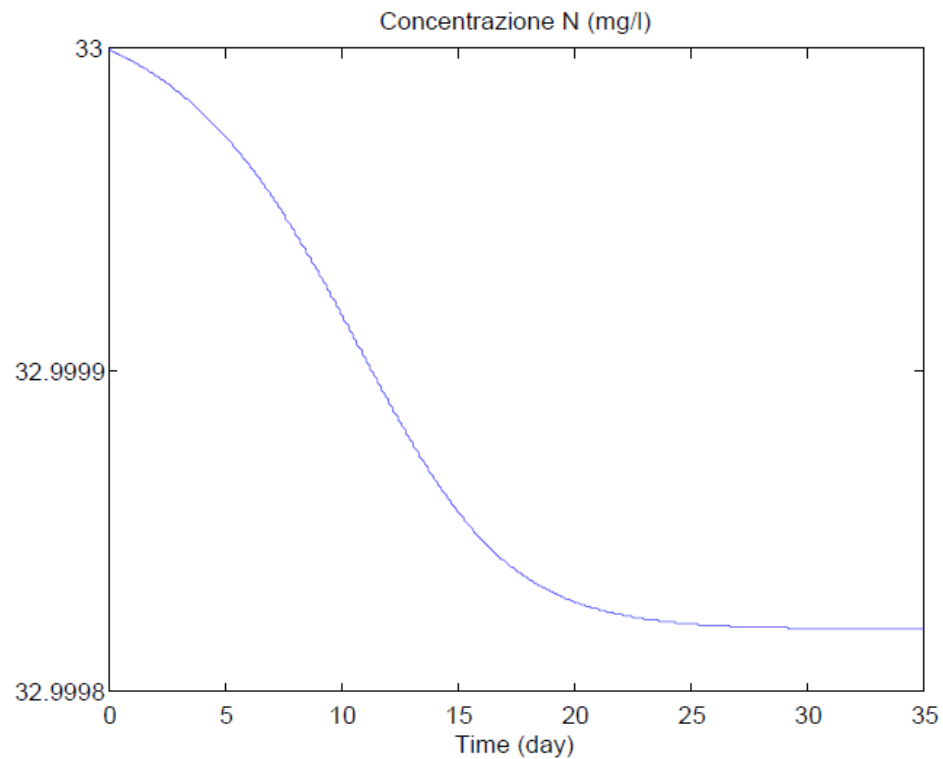
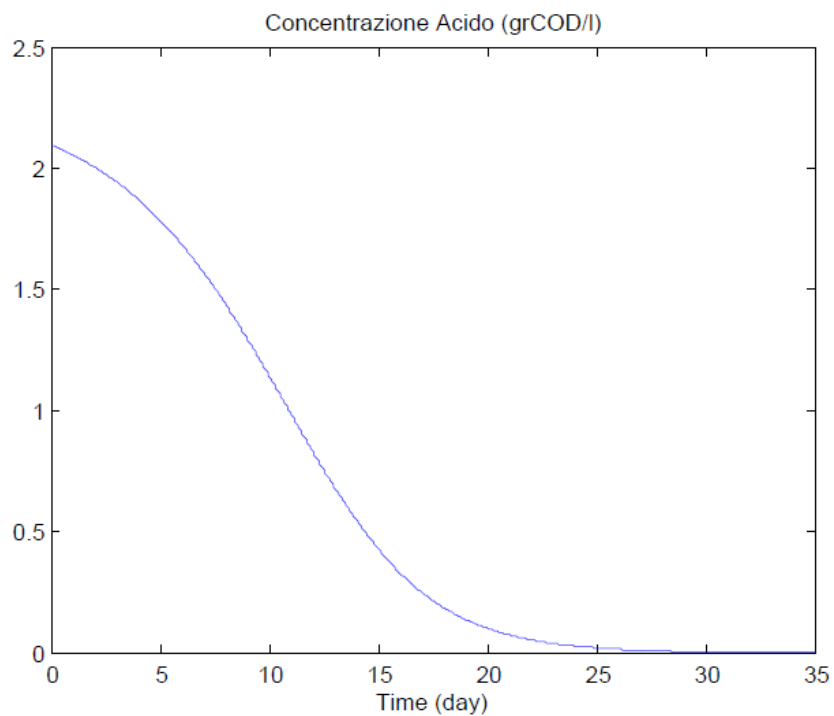
Parametri assunti per le simulazioni

PARAMETRO	UNITÀ DI MISURA	DESCRIZIONE	VALORE ASSUNTO NEL MODELLO
D_M	[m ² /s]	Coefficiente di diffusione molecolare	$5 \cdot 10^{-4}$
F	[adimensionale]	Fattore di carico	0.5
H_N	[mgN/L]	Costante di semisaturazione dell'azoto	0.02
H_a	[grCOD/L]	Costante di semisaturazione dell'acido	4.5
K_{dec}	[1/day]	Tasso di morte dei microrganismi PNSB	0.0075
$K_{S,E}$	[Watt/m ²]	Costante di semisaturazione per l'intensità di luce	88
Y	[adimensionale]	Yield della biomassa PNSB	0.6
μ_0	[1/day]	Tasso di crescita dei microrganismi	2.5

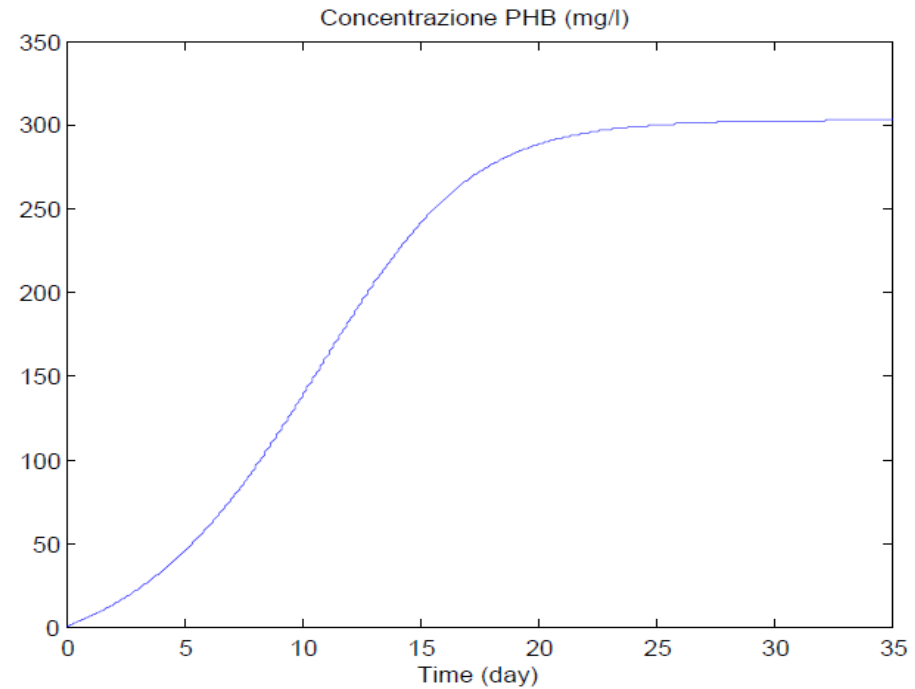
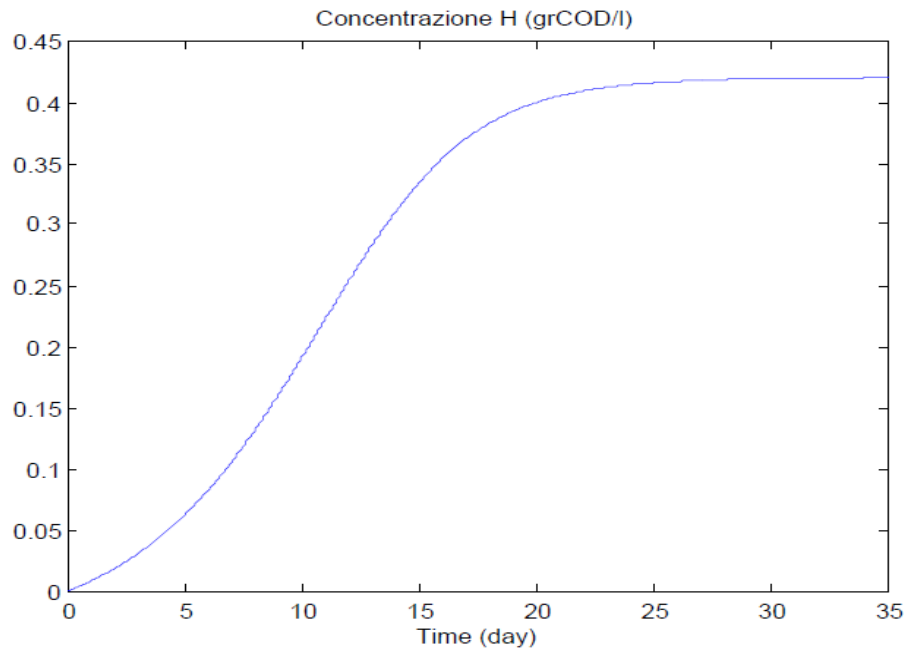
Variation of the concentration of the biomass PNSB as a function of time



Variation of the concentration of acid and nitrogen over time

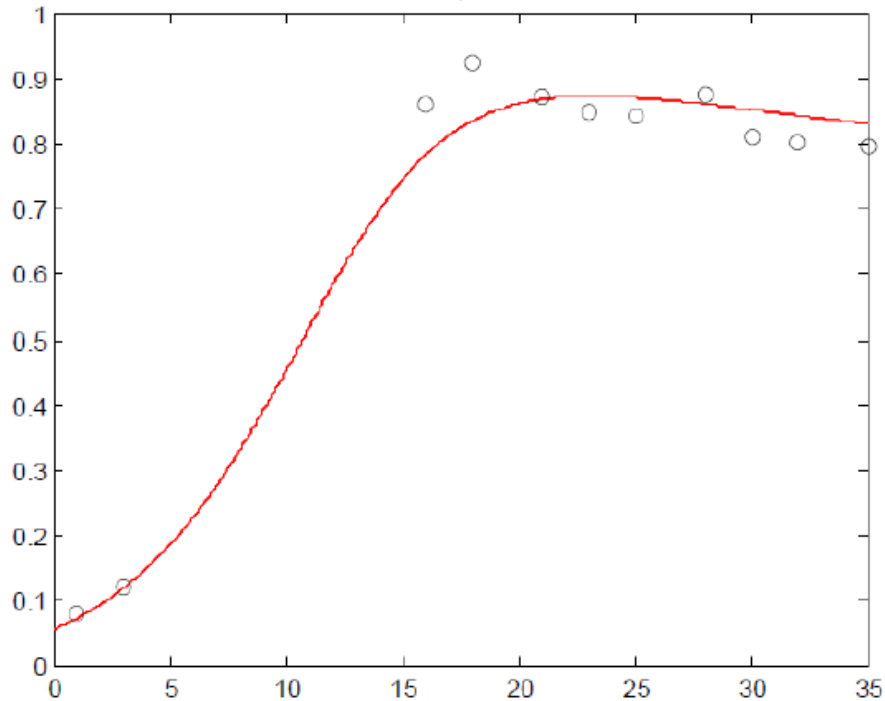


Produzione di H₂ e PHB in funzione del tempo

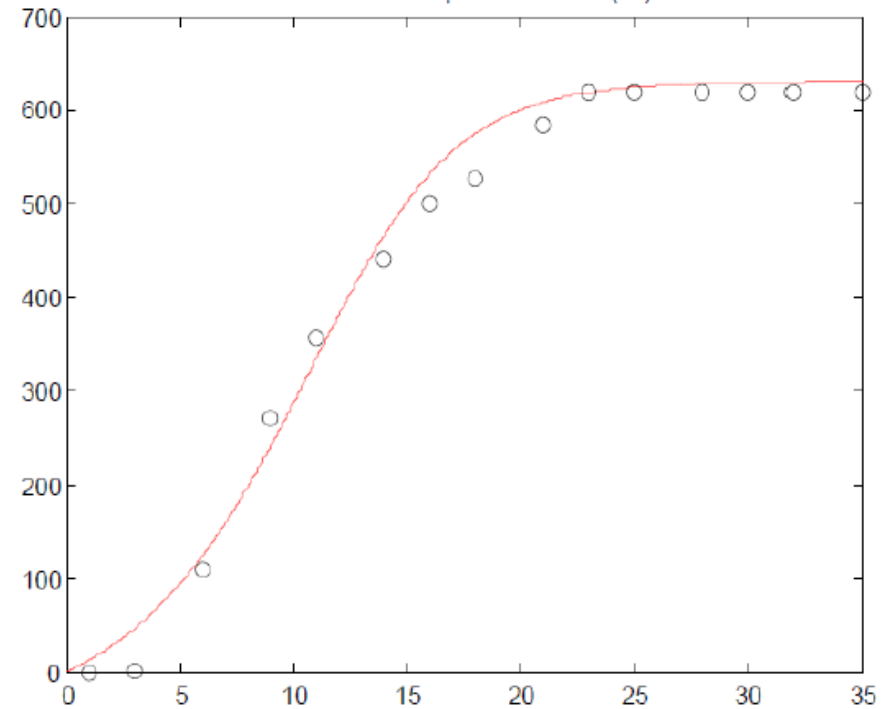


Confronto dei risultati del modello con i dati sperimentali

Confronto dati sperimentali SST



Confronto dati sperimentali H2 (ml)



- ***I risultati evidenziano che il modello può simulare con successo il fenomeno studiato***
- ***Il modello risulta originale e versatile***
- ***Tiene conto simultaneamente di molti aspetti trascurati dalla letteratura scientifica di settore***
- ***Un'interessante prospettiva futura è quella di considerare gli effetti della luce naturale, con l'alternanza di giorno e notte***



Grazie per la cortese attenzione