

**Universitat Politècnica de Catalunya
Programa de Doctorat en Enginyeria Ambiental**

Tesi doctoral

**MODELITZACIÓ MATEMÀTICA DE LA TRANSFERÈNCIA DE
MASSA I ENERGIA EN EL PROCÉS DE COMPOSTATGE**

Memòria presentada per

Josep Illa Alibés

per optar al grau de doctor

Barcelona, setembre de 2012

Director de tesi: Dr. Xavier Flotats Ripoll

Agraïments

En tot treball sempre hi ha una sèrie de persones que han contribuït directament a fer-lo possible i a les que cal reconèixer el seu recolzament. Així, vull agrair públicament:

A en Xavier Flotats, pel suggeriment, ja fa anys, de treballar amb ell i pel seu recolzament incondicional en tot moment.

A tots els membres del departament de Medi Ambient i Ciències del Sòl de la Universitat de Lleida, pel recolzament rebut durant l'etapa dels llargs i sovint incòmodes experiments realitzats als seus laboratoris.

Als companys del llavors Laboratori d'Enginyeria Ambiental de la Universitat de Lleida i que posteriorment passaren al GIRO, en Jordi, l'August, l'Albert, la Belén, en Francesc,...

A la Sílvia Porras, pel seu recolzament en les tasques de laboratori.

A la Francina Soler, amb qui varem començar l'atrevida aventura d'endinsar-nos en el món de la modelització del complex procés de compostatge, pel seu suport en la gestió del projecte 185/2006/3-4 del Ministerio de Medio Ambiente que va permetre fer el muntatge experimental descrit en aquesta tesi.

A la Núria Admetlla, per l'ajuda sense preu durant les innombrables hores que varem passar al laboratori, primer muntant els reactors i després fent-los funcionar.

A totes aquelles altres persones que des de l'ombra han contribuït a fer possible aquest treball.

ÍNDEX

RESUM	7
RESUMEN	8
SUMMARY	9
PRÒLEG	11
NOMENCLATURA	13

CAPITOL 1 INTRODUCCIÓ I REVISIÓ BIBLIOGRÀFICA

1.1 Introducció	15
1.1.1 El problema de la gestió de residus orgànics	15
1.1.2 Alternatives per la gestió de residus orgànics	16
1.1.3 Avantatges i inconvenients de les alternatives de tractament de residus orgànics	17
1.1.4 La definició del procés de compostatge	17
1.1.5 Les etapes del procés	18
1.1.6 Fenòmens físics, químics i biològics implicats	19
1.1.7 Els factors que afecten al procés de compostatge	20
1.1.8 Les diferents tecnologies per realitzar el compostatge	20
1.1.9 El perquè de la modelització	21
1.2. L'estat de l'art	21
1.2.1 Enfocaments clàssics en la modelització del procés de compostatge	22
1.2.2 L'estat de l'art dels models de mescla completa analitzats	24
1.2.3 L'estat de l'art dels models 1D analitzats	30
1.2.4 Conclusions sobre l'estat de l'art en la modelització mecanicista del compostatge	36

CAPÍTOL 2 OBJECTIUS DE LA TESI

2.1 Objectius	39
---------------	----

CAPÍTOL 3 MODEL BASE DE BALANÇ DE MASSA I ENERGIA

3.1 Introducció	41
3.2 Consideracions generals sobre la modelització del procés de compostatge	42
3.2.1 Descripció del sistema físic de compostatge	42
3.2.1.1 <i>Les tres fases en una matriu porosa</i>	42
3.2.1.2 <i>La transferència de massa i energia entre les fases</i>	43
3.2.1.3 <i>Aspectes biològics</i>	44
3.2.2 Bases per al desenvolupament d'un model del procés de compostatge	44
3.2.2.1 <i>Requisits generals exigibles a un model</i>	44
3.2.2.2 <i>La integració dels processos físics i biològics</i>	46
3.3 Desenvolupament del model base de balanç de massa i energia (BME)	49
3.3.1 Descripció general del sistema modelitzat	49
3.3.2 Processos físics considerats. Hipòtesis bàsiques del model BME	50
3.3.3 Variables d'estat	52
3.3.3.1 <i>Consideracions generals respecte a les variables d'estat</i>	52
3.3.3.2 <i>Variables d'estat del model base</i>	53
3.3.4 La transferència líquid gas	53

3.3.4.1	<i>Transferència líquid-gas dels gasos solubles</i>	53
3.3.4.2	<i>Transferència líquid-gas de l'aigua</i>	60
3.3.5	Les equacions de BM pels components de la fase gasosa	61
3.3.6	Les equacions de BM del model base	63
3.3.7	Equacions de BE del model base	64
3.3.7.1	<i>L'equació de BE per la fase gasosa</i>	64
3.3.7.2	<i>L'equació de BE de la fase sòlid-líquid</i>	69
3.4.	Anàlisi del comportament del model base	71
3.4.1	Simulacions de l'evolució de diferents variables del model	71
3.4.1.1	<i>Simulacions amb el model biològic de J. Kaiser</i>	71
3.4.1.2	<i>Simulacions amb el model biològic de Solé-Mauri</i>	72
3.4.2	Anàlisi de sensibilitat	74
3.4.2.1	<i>Anàlisi de sensibilitat amb el model biològic de J. Kaiser</i>	76
3.4.2.2	<i>Anàlisi de sensibilitat amb el model biològic de Solé-Mauri</i>	80
ANNEXE C3-A1.	El model biològic de J. Kaiser (1996)	87
ANNEXE C3-A1.	El model biològic adaptat de Solé-Mauri (2006)	89

CAPÍTOL 4

DESENVOLUPAMENT DEL MODEL 1-D

4.1	Introducció	93
4.2	Conceptes generals de flux gasós en medi porós	94
4.2.1	Relació entre moviment i gradient de pressió. Llei de Darcy	94
4.2.2	Flux isoterm d'un gas en un medi porós	95
4.2.3	Flux gasós en un medi porós vertical. Tiratge natural	97
4.3	Equacions diferencials del model de compostatge 1-D	98
4.3.1	Geometria del sistema modelitzat. Variables d'estat	98
4.3.2	Condicions de contorn	100
4.3.3	Equacions de balanç de massa pels components sòlids i en solució	101
4.3.4	Equacions de balanç de massa pels components de la fase gasosa	101
4.3.4.1	<i>La pressió total i la densitat del gas en funció de les variables d'estat</i>	101
4.3.4.2	<i>Llei de Darcy. Densitat de flux molar en una secció</i>	102
4.3.4.3	<i>Equació de conservació de massa per un component gasós</i>	102
4.3.5	L'equació de balanç d'energia en la fase gasosa	103
4.3.6	L'equació de balanç d'energia en la fase sòlid líquid	104
4.3.6.1	<i>L'energia interna de la fase sòlid-líquid</i>	104
4.3.6.2	<i>Equació de conservació de l'energia en la fase sòlid-líquid</i>	105
4.3.7	Establiment del model	106
4.4	Discretització de les equacions diferencials. El model numèric	107
4.4.1	La discretització	107
4.4.2	Els fluxos de transferència en funció dels valors nodals	109
4.4.2.1	<i>La transferència de massa líquid gas</i>	109
4.4.2.2	<i>El flux molar gasós a la frontera entre dos VC</i>	110
4.4.2.3	<i>Els fluxos molars gasosos a les fronteres externes</i>	112
4.4.2.4	<i>El flux d'escalfor conductiu a la frontera entre dos VC</i>	113
4.4.2.5	<i>El flux d'escalfor a través de les parets del reactor</i>	114
4.4.2.6	<i>El flux d'escalfor sensible entre les fase sòlida i gasosa</i>	114

4.4.3	Les equacions de BM del model 1D discretitzat	114
4.4.4	Les equacions de BE del model 1D discretitzat	115
4.4.5	La distribució inicial de pressió i masses molars en la fase gasosa	117
4.4.6	Algorisme de còmput utilitzat	119
4.5	Resultats de simulacions	121
4.5.1	Distribució de variables i indicadors	122
4.5.2	Efectes especials predits pel model 1D	124
4.5.2.1	<i>Refredament evaporatiu de la massa</i>	124
4.5.2.2	<i>Condensacions al plenum superior</i>	125
4.5.2.3	<i>Evolució de la sobrepressió al plenum inferior</i>	126
4.5.2.4	<i>Evolució del procés en condicions de tiratge natural</i>	127
4.5.3	Efectes de la discretització del domini 1D sobre els resultats numèrics	130
4.6	Anàlisi de sensibilitat	131

CAPÍTOL 5

DISSENY I OPERACIÓ DE REACTORS DE COMPOSTATGE 1D

5.1	Introducció	137
5.2	Descripció general de l'equip	138
5.3	Operació de l'equip	145
5.4	Determinació del nivell d'aïllament tèrmic dels reactors	147
5.5	Substrats utilitzats i preparació de les mescles	150
5.6	Descripció global dels experiments realitzats	152
5.7	Mètodes analítics	154

CAPÍTOL 6

CONTRAST DEL MODEL 1D AMB ELS RESULTATS EXPERIMENTALS

6.1	Introducció	159
6.2	Nivell d'aïllament tèrmic dels reactors	161
6.3	Anàlisi de l'evolució de les temperatures	164
6.3.1	Simetria en la distribució de les temperatures	164
6.3.2	Uniformitat de temperatura al plenum superior	166
6.3.3	Evolució de la distribució de temperatures	169
6.4	Evolució de les concentracions d'oxigen i CO ₂	174
6.5	Evolució del quocient respiromètric	179
6.6	Evolució de la massa total en compostatge	182
6.7	Distribució del contingut en humitat	184
6.8	Mesura de la permeabilitat i evolució de la resistència al flux gasós	186

CAPÍTOL 7

EMPIRICAL CHARACTERISATION AND MATHEMATICAL MODELLING OF SETTLEMENT IN COMPOSTING BATCH REACTORS

7.1	Introduction	190
7.2	Methods	191
7.2.1	Experimental setup	191
7.2.2	Organic substrates	191
7.2.3	Process monitoring	192
7.2.4	Numerical settlement description	193
7.2.5	Parameter estimation	194

7.3 Results and discussion	194
7.4 Conclusions	201
7.5 References	202
APPENDIX C7-A1 Annexed figures to settlement characterisation	204

CAPÍTOL 8

CONCLUSIONS I LÍNIES DE TREBALL FUTURES

8.1 Conclusions respecte al desenvolupament del model base	207
8.2 Conclusions respecte al desenvolupament del model 1D	208
8.3 Conclusions respecte al disseny i operació dels reactors	209
8.4 Conclusions respecte al contrast entre dades mesurades i simulacions	210
8.5 Línies de treball futures	211
8.5.1 Millores en el model biològic	212
8.5.2 Suggestiments pel desenvolupament futur del model físic	212
8.5.3 Millores en el disseny experimental	213

REFERÈNCIES	217
-------------	-----

ANNEXE 1: LLISTATS MATLAB DE LES RUTINES UTILITZADES	225
A1.1 Llistats de les rutines del model base utilitzant el model biològic de J. Kaiser	226
A1.2 Llistats de les rutines del model base utilitzant el model biològic adaptat de Solé-Mauri	235
A1.3 Llistats de les rutines del model 1D utilitzant el model biològic adaptat de Solé-Mauri	248

RESUM

El procés de compostatge és complex degut a que hi intervien simultàniament fenòmens de naturalesa molt diversa que interactuen entre ells. La modelització matemàtica és una eina que facilita l'anàlisi d'aquests sistemes complexos, però el nivell de desenvolupament i aplicació ha estat força limitat fins a l'actualitat. En el present treball es desenvolupa un model matemàtic determinista del procés de compostatge basat en les lleis bàsiques dels fenòmens físics i biològics que permet explicar i quantificar els principals fenòmens observats durant el procés.

El model desenvolupat estableix una metodologia de presentació dels fenòmens biològics que permet acoblar al model físic proposat models desenvolupats per altres autors. Aquest considera el substrat com una matriu porosa constituïda per les tres fases, sòlida, líquida i gasosa, entre les que s'estableixen fluxos de massa i energia governats per les lleis bàsiques de transferència. La fase gasosa, una mescla d'oxigen, CO₂, amoníac, vapor d'aigua i nitrogen, és considerada com de mescla completa en el model base. La seva extensió a l'espai 1D incorpora el moviment de la fase gasosa degut a gradients de pressió, el transport conductiu d'escalfor al sí de la matriu porosa, l'arrossegament convectiu d'energia, tant en forma de calor sensible com latent, i el transport dels components de la fase gasosa.

S'han dissenyat i construït tres reactors verticals estàtics d'aireig forçat a escala de laboratori i s'han operat amb diferents mescles de residus, a fi d'obtenir informació per contrastar la bondat del model desenvolupat. Durant els experiments s'ha mesurat i enregistrat l'evolució de diferents variables del procés: temperatura a diferents punts dels reactors, concentracions d'oxigen i CO₂ als gasos de sortida, massa total en els reactors, cabal d'aire insuflat, pressió de l'aire a l'entrada dels reactors, així com l'assentament a diferents nivells del material en compostatge. A principi i final de procés s'ha mesurat el contingut d'humitat a diferents nivells del material.

Les simulacions numèriques, realitzades amb un únic conjunt de paràmetres físics, estequiomètrics i cinètics per als diferents experiments amb substrats diferents, reproduïxen satisfactòriament les tendències observades en les dades experimentals, tot i que aquestes mostren que la hipòtesi de simetria radial en els reactors no sempre es verifica. L'anàlisi de sensibilitat realitzada ha permès identificar els paràmetres físics que més influeixen en l'evolució del procés. Es proposa una equació de 3 paràmetres per quantificar el camp d'assentaments dins el material en compostatge en funció del temps. A més, s'ha establert una equació que relaciona l'assentament del material amb el consum acumulat d'oxigen.

En síntesi, el model desenvolupat simula satisfactòriament les tendències en l'evolució de les variables de procés observades, integra els diferents fenòmens presents en el procés de compostatge i permet quantificar la seva importància relativa. L'estructura oberta del model facilita la incorporació de nous fenòmens.

RESUMEN

El proceso de compostaje es complejo debido a que en él intervienen simultáneamente fenómenos de naturaleza muy distinta interaccionando entre ellos. La modelización matemática es una herramienta que facilita el análisis de estos sistemas complejos, pero el nivel de desarrollo y aplicación al proceso de compostaje ha sido bastante limitado hasta la actualidad. En el presente trabajo se desarrolla un modelo matemático determinista del proceso de compostaje basado en las leyes básicas de los fenómenos físicos y biológicos que permite explicar y cuantificar los principales fenómenos observados durante el proceso.

El modelo desarrollado establece una metodología de presentación de los fenómenos biológicos que permite acoplar al modelo físico propuesto modelos desarrollados por otros autores. Este considera el sustrato como una matriz porosa constituida por las tres fases, sólida, líquida i gaseosa, entre las que se establecen flujos de masa y energía gobernados por las leyes básicas de transferencia. La fase gaseosa, una mezcla de oxígeno, CO₂, amoníaco, vapor de agua y nitrógeno, es considerada como de mezcla completa en el modelo base. Su extensión al espacio 1D incorpora el movimiento de la fase gaseosa debido a gradientes de presión, el transporte conductivo de calor dentro de la matriz porosa, el arrastre convectivo de energía, tanto en forma de calor sensible como latente, y el transporte de los componentes de la fase gaseosa.

Se han diseñado y construido tres reactores verticales estáticos de aireación forzada a escala de laboratorio y se han operado con distintas mezclas de residuos, a fin de obtener información para contrastar la bondad del modelo desarrollado. Durante los experimentos se ha medido y registrado la evolución de diferentes variables del proceso: temperatura a distintos puntos de los reactores, concentraciones de oxígeno y CO₂ en los gases de salida, masa total en los reactores, caudal de aire insuflado, presión del aire a la entrada de los reactores, así como el asentamiento a diferentes niveles del material en compostaje. A principio y final de proceso se ha medido el contenido de humedad a diferentes niveles del material.

Las simulaciones numéricas, realizadas con un único conjunto de parámetros físicos, estequiométricos y cinéticos para los diferentes experimentos con sustratos distintos, reproducen satisfactoriamente las tendencias observadas en los datos experimentales, a pesar de que éstos muestran que la hipótesis de simetría radial en los reactores no siempre se verifica. El análisis de sensibilidad realizado ha permitido identificar aquellos parámetros físicos con más influencia en la evolución del proceso. Se propone una ecuación de 3 parámetros para cuantificar el campo de asentamiento en el material en compostaje en función del tiempo. Además, se ha establecido una ecuación que relaciona el asentamiento del material con el consumo acumulado de oxígeno.

En síntesis, el modelo desarrollado simula satisfactoriamente las tendencias en la evolución de las variables de proceso observadas, integra los distintos fenómenos presentes en el proceso de compostaje y permite cuantificar su importancia relativa. La estructura abierta del modelo facilita la incorporación de nuevos fenómenos.

SUMMARY

The interaction of phenomena of different nature in the composting process makes it complex. Mathematical modelling is a helpful tool to analyse such complex systems, but its development and application to the composting process has been rather scarce up to date. The present study presents a deterministic mathematical model of the composting process which allows the explanation and quantification of the main phenomena observed during the process and is based on the basic laws of physical and biological elementary processes.

The developed model sets up a methodology for the presentation of the biological phenomena involved, making possible to couple models developed by different authors to the proposed physical model. This one considers the substrate as a porous media in which the three phases, solid, liquid and gaseous, are present. Mass and energy flows between them are governed by basic transfer laws. The gaseous phase is considered, in the base model, as a completely stirred mixture of oxygen, CO₂, ammonia, water vapour and nitrogen, both considered as ideal gases. Its extension to the 1D space incorporates the movement of the gaseous phase due to pressure gradient, the conductive heat transfer in the solid matrix, the convective energy transport, both as sensible and latent heat, and the convective mass transport of gaseous components.

Three vertical static reactors at lab scale with forced aeration have been designed, built up and operated with different solid waste mixtures in order to pick up data for checking the model predictions. Several process variables have been measured and registered during the experiments: temperature at different points inside the reactors, oxygen and CO₂ concentration in the exhaust gases, total mass in the reactors, airflow rate, air pressure at the reactors inlet, and the settlement at different levels of the composting mass. The moisture content at different positions of the material has also been measured at the start and at the end of the process.

The simulations, run with a unique set of physical, stoichiometric and kinetic parameters for the experiments with different substrates, reproduced satisfactorily the main trends observed by the experimental data, although these show that the hypothesis of radial symmetry in the reactors does not always holds on. A sensitivity analysis allowed the identification of the physical parameters with greater influence on the process. A three parameter equation is proposed to describe the settlement field inside the composting mass as a function of time. An equation linking settlement with the cumulative oxygen consumption has also been proposed.

In summary, the developed model simulates satisfactorily the main trends observed during the evolution of the observed process variables, integrates the different phenomena present in the composting process, and allows the quantification of its relative importance. The open structure of the model simplifies the incorporation of new phenomena.

PRÒLEG

Fou l'any 1994, al llavors Laboratori d'Enginyeria Ambiental del departament de Medi Ambient i Ciències del Sòl de la Universitat de Lleida quan, sota la direcció del Dr. Xavier Flotats, s'iniciaren una sèrie de línies de treball en el tractament dels residus orgànics. Una de les línies encetades fou la de compostatge, en la que vam començar a treballar-hi amb la Francina Solé l'any 2003. Ben aviat es va veure que la modelització del procés de compostatge no era una feina senzilla i que hi havia dos aspectes de naturalesa diferent, els fenòmens biològics de creixement de poblacions microbianes i degradació de substrats i els fenòmens de transport de massa i energia. Cadascun d'aquests dos aspectes es considerà que eren prou amplis per desenvolupar-hi una tesi. Així, la Francina es va centrar en els aspectes biològics, sobre els que va desenvolupar la seva tesi "*Mathematical modelling of the composting process*" (2006), i jo vaig començar a treballar en els models de balanços de massa i energia, al principi en el marc dels treballs al LEA-UdL i finalment en el marc de la col·laboració amb el GIRO Centre tecnològic i en el del Programa de Doctorat d'Enginyeria Ambiental de la UPC.. El resultat ha estat el present treball.

Com és obvi els dos aspectes estan fortament relacionats i el model biològic desenvolupat per F. Solé anava acoblat a un model físic que era una primera versió del que en el present treball s'anomena *model base*. Els detalls del model biològic desenvolupat i trets generals del model físic, juntament amb els resultats experimentals i de simulació, ja foren objecte d'una primera publicació (Solé-Mauri et al., 2007). En el present treball es desenvolupa el model físic (model base) i se'n fa una extensió a l'espai 1D (model 1D), acoblant-hi alternativament dos models biològics, el desenvolupat per J. Kaiser (1996) i una adaptació del model simplificat desenvolupat per F. Solé (2006).

La revisió bibliogràfica presentada al Capítol 1 posa de manifest la complexitat del procés de compostatge i la conseqüent manca d'un criteri unificat de presentació de models, fita que ja ha estat assolida en l'àmbit del tractament d'aigües, tant en sistemes de fangs activats com en sistemes de digestió anaeròbia.

Els objectius generals, definits al Capítol 2, contempnen la definició d'una estructura comuna de presentació dels diferents models biològics, el desenvolupament d'un model físic base que inclgui les transferències locals de massa i energia entre fases, l'extensió a l'espai 1D incorporant-hi el transport de massa i energia degut a gradients de pressió i temperatura, la mesura experimental de l'evolució de variables en un sistema de compostatge i el corresponent contrast amb els resultats de simulació.

Al Capítol 3 es desenvolupa la sistemàtica de presentació dels models biològics i les equacions del model base. En essència, es considera que el material en compostatge és una matriu porosa formada per partícules sòlides de dimensions prou reduïdes com per poder negligir els gradients de concentració i temperatura al seu interior. La fase gasosa, constituïda per una mescla d'oxigen, CO₂, amoníac, vapor i nitrogen, està a una temperatura diferent a la de les fases sòlida i líquides i es considera que es comporta com un sistema de mescla completa. Les transferències de gasos entre fases són provocades per la diferència entre la pressió parcial en la fase gasosa i la corresponent pressió de saturació dels gasos dissolts en la fase líquida. La transferència d'energia

entre fases, conseqüència de la diferència de temperatures, es fa tant en forma de calor sensible com latent. El model físic base s'acobla a dos models biològics diferents i es fa una anàlisi de sensibilitat, basada en la definició de 9 indicadors del procés, per identificar els paràmetres físics més sensibles.

El model físic 1D és el resultat d'incorporar al model base el flux de la fase gasosa provocat pel gradient de pressió. Al Capítol 4 es desenvolupen les equacions en derivades parcials que governen el flux gasós i es proposa una metodologia de resolució numèrica mitjançant la discretització del domini en volums de control, adoptant un esquema de diferències centrades pels fluxos difusius i un esquema *upwind* pels fluxos convectius. El model permet simular, a més a més de l'evolució de les variables d'estat, alguns dels fenòmens que s'observen en el procés de compostatge, com són: la formació de condensacions al plenum superior, el refredament evaporatiu, l'evolució del procés en condicions de tiratge natural i l'evolució de la pressió al plenum inferior. L'anàlisi de sensibilitat i la distribució dels indicadors als diferents nivells del reactor permeten entendre la dinàmica del procés i determinar la importància relativa dels diferents mecanismes de transferència.

El desenvolupament d'un model d'un sistema complex pot esdevenir una tasca allunyada de la realitat si no es disposa de dades experimentals per verificar les prediccions. Al Capítol 5 es descriu el muntatge experimental i els experiments realitzats a fi de fer el seguiment de diferents variables del procés. En l'operació amb sistemes biològics la mesura directa de variables de procés sovint és difícil, i a més a més la repetitivitat dels experiments és defectuosa quan es treballa amb materials heterogenis de procedència dispar.

El contrast entre les dades experimentals i els resultats de simulació es fa al Capítol 6. Es mesura el nivell d'aïllament dels reactors i es contrasten diferents hipòtesis del model, entre elles la de simetria radial als reactors. Les mesures en 4 càrregues de 3 reactors de les corbes de temperatura, concentració d'oxigen i CO₂, quocient respiromètric, massa total dels reactors, distribució dels contingut en humitat i la pressió al plenum inferior, es comparen amb les prediccions del model.

La deformació de la massa en compostatge o assentament dins dels reactors és un fenomen poc quantificat en la literatura i gairebé no introduït als models de compostatge. Al Capítol 7 s'exposen les corbes d'assentament mesurades als reactors i es proposen diferents equacions per quantificar-lo. Aquests resultats han estat l'objecte d'una publicació recent (Illa, J. et al., 2012).

Al Capítol 8 es presenten les conclusions generals, es proposen línies de desenvolupament futur en la modelització del compostatge i es donen algunes recomanacions a l'hora de fer dissenys experimentals.

El present treball contribueix a establir una metodologia general per afrontar els problemes que sorgeixen a l'hora de modelitzar el complex procés de compostatge i s'espera que sigui un primer pas per arribar a bastir un model d'utilitat tant en recerca com en l'optimització de l'operació de plantes industrials.

NOMENCLATURA

Símbol	Unitats	Descripció
A_L	m^2	Àrea de la paret lateral del reactor.
c_{pi}, c_{pw}	$J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$	Calors específiques dels components sòlids i de l'aigua.
\bar{c}_{pk}	$J \cdot kmol^{-1} \cdot K^{-1}$	Calor específica a pressió constant del gas k .
c_k	$kmol \cdot m^{-3}$	Concentració molar d'un component k en solució.
C_i	$kg \cdot m^{-3}$	Concentració en l'espai de component i .
C_k	$kmol \cdot m^{-3}$	Concentració molar en l'espai del component gasós k .
C_w	$kg \cdot m^{-3}$	Concentració en l'espai d'aigua del sistema.
e_0	-	Humitat relativa del corrent d'aire d'entrada.
ff_k	-	Fracció molar de gas k que es troba en forma volàtil respecte a totes les formes presents en solució, ($k=CO_2, NH_3$).
g	$N \cdot kg^{-1}$	Acceleració de la gravetat ($g=9.81 N \cdot kg^{-1}$).
h_{csv}	$J \cdot h^{-1} \cdot K^{-1} \cdot kg_{TM}^{-1}$	Coefficient de transferència d'escalfor entre les fases sòlid-líquid i la gasosa.
\bar{h}_k, \bar{h}_v	$J \cdot kmol^{-1}$	Entalpia molar del component gasós k i del vapor d'aigua.
H, H_k	J	Entalpia total de la fase gasosa i del component k .
He_k	Pa	Constant de Henry pel component volàtil k . ($k=O_2, CO_2, NH_3$).
J	$kmol \cdot h^{-1} \cdot m^{-2}$	Densitat de flux molar total en una secció.
J_k	$kmol \cdot h^{-1} \cdot m^{-2}$	Densitat de flux molar del component gasós k en una secció.
k	$J \cdot h^{-1} \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$	Conductivitat tèrmica de la matriu porosa.
k_{Lk}	$kg \cdot Pa^{-1} \cdot h^{-1} \cdot kg_{TM}^{-1}$	Coefficient de transferència de massa líquid gas pel component soluble k .
L	m	Longitud columna medi porós.
m_i	kg	Massa del component sòlid i .
m_w	kg	Massa d'aigua.
M_a	$kg \cdot kmol^{-1}$	Massa molecular mitjana de l'aire atmosfèric ($M_a=28.84 kg \cdot kmol^{-1}$).
M_k	$kg_k \cdot kmol^{-1}$	Massa molecular del component gasós k . ($k=O_2, CO_2, NH_3, H_2O, N_2$).
M_T	kg	Massa total del sistema.
n_k	$kmol$	Massa molar del component gasós k . ($k=O_2, CO_2, NH_3, H_2O_{vap}, N_2$).
n_T	$kmol$	Massa molar total de la fase gasosa.
\dot{n}_{ks}	$kmol \cdot h^{-1}$	Cabal molar en la secció s del component gasós k .
\dot{n}_{Ts}	$kmol \cdot h^{-1}$	Cabal molar total de la mescla de gasos a través de la secció s .
ρ_w	$kg \cdot m^{-3}$	Densitat de l'aigua ($\rho_w=1000 kg \cdot m^{-3}$).
P_k, P	Pa	Pressions parcials i total de la fase gasosa.
P_0, P_a	Pa	Pressió a l'entrada del reactor i pressió atmosfèrica.
$P_{sat}(\vartheta)$	Pa	Pressió de saturació del vapor a la temperatura ϑ .
P_v	Pa	Pressió parcial del vapor en la fase gasosa.
q	$J \cdot h^{-1}$	Flux d'escalfor conductiu total a través d'una secció.
q''	$J \cdot h^{-1} \cdot m^{-2}$	Flux de calor conductiu a través d'una secció de la matriu porosa.
q_G	$J \cdot h^{-1}$	Generació de calor per reacció en la fase sòlid-líquid.
q_{cw}	$J \cdot h^{-1}$	Flux total d'escalfor dissipat a través de les parets del reactor.
q''_{cw}	$J \cdot h^{-1} \cdot m^{-2}$	Flux d'escalfor dissipat a través de les parets laterals del reactor.
q_c^T	$J \cdot h^{-1}$	Flux d'escalfor transferit per convecció de la fase sòlid-líquid a la fase gasosa.
q_G'''	$J \cdot h^{-1} \cdot m^{-3}$	Generació de calor per reacció referida a unitat volum sistema.
q_{cw}'''	$J \cdot h^{-1} \cdot m^{-3}$	Flux d'escalfor a través parets del reactor per unitat de volum sistema
$q_c^{T'''}$	$J \cdot h^{-1} \cdot m^{-3}$	Flux d'escalfor transferit per convecció de la fase sòlid-líquid a la fase gasosa per unitat de volum del sistema.
$Q_0 (Q_a)$	$m^3 \cdot h^{-1}$	Cabal volumètric d'entrada al reactor, mesurat a ϑ_0 i P_0 , (T_a, P_a).
r_i	$kg_i \cdot h^{-1} \cdot kg_{TM}^{-1}$	Velocitat específica de reacció del component i .
R_i	$kg_i \cdot h^{-1}$	Velocitat total de reacció del component i .
R	$J \cdot kmol^{-1} \cdot K^{-1}$	Constant universal dels gasos ($R=8314 J \cdot kmol^{-1} \cdot K^{-1}$).

r_k^T	$\text{kg}\cdot\text{h}^{-1}\cdot\text{kg}_{\text{TM}}^{-1}$	Cabal màssic de component k que passa a la fase gasosa per unitat de massa total. Es verifica: $r_k^T = M_k \bar{r}_k^T$.
\bar{r}_k^T	$\text{kmol}\cdot\text{h}^{-1}\cdot\text{kg}_{\text{TM}}^{-1}$	Cabal màssic molar de component k que passa a la fase gasosa per unitat de massa total.
R_k^T	$\text{kg}\cdot\text{h}^{-1}$	Cabal màssic total de component k que passa a la fase gasosa. Es verifica: $R_k^T = M_T \bar{r}_k^T$.
\bar{R}_k^T	$\text{kmol}\cdot\text{h}^{-1}$	Cabal màssic molar de component k que passa a la fase gasosa. Es verifica: $\bar{R}_k^T = M_T \bar{r}_k^T$.
S	m^2	Àrea d'una secció transversal de la columna.
$S_{\text{ic}}, S_{\text{in}}$	$\text{kmol}\cdot\text{m}^{-3}$	Concentracions en solució aquosa de carbonats i amoníac-amoni.
t	h	Temps.
T	K	Temperatura de la fase sòlid-líquid.
T_a	K	Temperatura ambiental exterior.
T_{ref}	K	Temperatura de referència per l'entalpia i l'energia interna ($T_{\text{ref}}=273.15 \text{ K}$).
U	$\text{J}\cdot\text{h}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$	Coefficient global de transferència d'escalfor del reactor.
U, U_k	J	Energia interna total de la fase gasosa i del component k .
$U^{\text{'''}}$	$\text{J}\cdot\text{m}^{-3}$	Energia interna referida a la unitat de volum de matriu porosa.
v	$\text{m}\cdot\text{h}^{-1}$	Velocitat de la fase gasosa en secció lliure
V_g	m^3	Volum ocupat per la fase gasosa.
x	m	Coordenada en l'espai.
x_{klo2}	$\text{kg}_{\text{O}_2}\cdot\text{h}^{-1}\cdot\text{Pa}^{-1}\cdot\text{kg}_{\text{TM}}^{-1}$	Coefficient de transferència de massa per l'oxigen
x_{kico2}	$\text{kg}_{\text{CO}_2}\cdot\text{h}^{-1}\cdot\text{Pa}^{-1}\cdot\text{kg}_{\text{TM}}^{-1}$	Coefficient de transferència de massa pel CO_2
x_{klnh3}	$\text{kg}_{\text{NH}_3}\cdot\text{h}^{-1}\cdot\text{Pa}^{-1}\cdot\text{kg}_{\text{TM}}^{-1}$	Coefficient de transferència de massa per l'amoníac
x_{klw}	$\text{kg}_{\text{vap}}\cdot\text{h}^{-1}\cdot\text{Pa}^{-1}\cdot\text{kg}_{\text{TM}}^{-1}$	Coefficient de transferència de massa pel vapor d'aigua
X_k	$\text{mol}_k^{-1}\cdot\text{mol}_w^{-1}$	Fracció molar de component k dissolt en aigua.
Y_k	-	Fracció molar del component k en la fase gasosa.
Y_{k0}	-	Fracció molar del gas k en el corrent d'aire d'entrada al reactor.
z	m	Coordenada en l'espai.

Lletres gregues

ε	-	Porositat d'un medi, en general.
ε_g	-	Porositat del medi ocupada per la fase gasosa.
κ	m^2	Permeabilitat del medi al flux gasós.
μ	$\text{Pa}\cdot\text{h}$	Viscositat dinàmica de la fase gasosa.
ρ_i	$\text{kg}_i\cdot\text{h}^{-1}\cdot\text{kg}_{\text{tm}}^{-1}$	Velocitat específica de reacció del procés i .
ρ	$\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$	Densitat de la fase gasosa.
$\bar{\rho}$	$\text{kmol}\cdot\text{m}^{-3}$	Densitat molar de la fase gasosa.
ρ_T	$\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$	Densitat aparent del material en compostatge.
ϑ	K	Temperatura de la fase gasosa.
ϑ_0	K	Temperatura del corrent d'entrada d'aire al reactor.

Llista d'abreviacions

BE	Balanç d'energia
BM	Balanç de massa
BME	Balanç de massa i energia
DQO	Demanda química d'oxigen
EDAR	Estació Depuradora d'Aigües Residuals
FAS	Espai porós ocupat per fase gasosa (Free Air Space)
FORM	Fracció Orgànica de Residus Municipals
RQ	Quocient Respiromètric (Respiratory Quotient)
VC	Volum de control
db	Respecte a massa seca (dry basis)
wb	Respecte a massa humida (wet basis)

CAPITOL 1

INTRODUCCIÓ I REVISIÓ BIBLIOGRÀFICA

1.1 Introducció

1.1.1 El problema de la gestió de residus orgànics

La producció de residus o subproductes orgànics és un fenomen que s'inicia amb l'aparició de la vida sobre la terra. Els residus generats per uns organismes vius són utilitzats com a font d'energia i nutrients per altres, essent aquest reciclatge una funció integrada en tot ecosistema. El creixement quasi exponencial de la població humana en els darrers segles a dut a la corresponent massificació en la producció de residus orgànics. Les principals tipologies són:

-*Residus sòlids urbans (RSU)*. Inclouen els residus domèstics i els d'anàloga naturalesa generats en botigues, oficines i institucions, així com els residus de la neteja urbana, de mercats i de parcs i jardins. La producció mitjana europea de l'any 1995 s'estimà en 457 kg/persona-any i hi hagué un creixement constant del 2% anual fins a assolir 534 kg/persona-any el 2003, (Eurostat, 2005). A Espanya s'estimà que els RSU contenen un 48,9% de matèria orgànica (MMA, 2004).

-*Llots procedents de la depuració* biològica d'aigües, tant aeròbia com anaeròbia. La producció a Espanya s'estimà en 1,1 milions de tones (Ministerio de Agricultura Pesca i Alimentación, 2004). La reutilització dels llots és motiu de controvèrsia, ja que si bé tenen un bon potencial per la fertilització de sols agrícoles (són rics en matèria orgànica i elements com N i P) també poden tenir elevades concentracions de metalls pesants, organismes patògens i compostos orgànics poc biodegradables.

-*Residus agroindustrials*, incloent-hi tant els fens produïts en l'activitat ramadera com residus de la indústria agroalimentària (de la indústria sucraera, vitivinícola, cervesera, d'olis vegetals, de suc i concentrats, i els residus d'escorxadors i de la transformació de productes carnis). Molts dels residus produïts són ja reutilitzats en la pròpia indústria agroalimentària.

-Residus vegetals procedents de la jardineria, agricultura i activitat forestal. La quantificació de la seva producció no és senzilla. Sol fer-se una estimació a partir de les dades globals de la producció agrícola però és difícil quantificar la fracció que és reutilitzada per la ramaderia i l'agricultura.

Les polítiques europees de gestió de residus promouen la prevenció, el reciclatge i la valoració com a principal manera de fer front als problemes de pol·lució que aquests originen (Directiva Europea 2006/12/CE). S'entén per valoració la recuperació dels elements o energia que conté el residu per re introduir-los com a matèries primeres al procés productiu.

Els residus orgànics es poden considerar com un recurs energètic pel fet de provenir de la biomassa primària produïda mitjançant la fixació de l'energia solar en la fotosíntesi, i com un recurs agrícola pel seu contingut en nutrients pels vegetals (N, P, K i oligoelements) i matèria orgànica beneficiosa pel sòl.

1.1.2 Alternatives per la gestió de residus orgànics

Hi ha quatre alternatives bàsiques per l'eliminació dels residus orgànics: l'abocador, el compostatge, la digestió anaeròbia i la incineració.

-L'acumulació en abocador ha estat àmpliament utilitzada com a destí final dels llots de depuradora i RSU. Els problemes originats per la contaminació d'aigües subterrànies pels lixiviats, l'emissió de metà a l'atmosfera i el no aprofitament de la matèria orgànica fan que l'acumulació en abocador es restringeixi a aquells residus pels que no hi ha cap altra sortida. Segons la Directiva 99/31/CE tots aquells residus que continguin una fracció orgànica hauran de tenir un tractament previ i l'aportació a abocadors de matèria orgànica s'haurà d'anar reduint. Això ha provocat que en els darrers anys el compostatge aparegui com una de les principals opcions de tractament i valoració dels residus orgànics.

-El compostatge és un tractament senzill i robust que permet obtenir un producte final aplicable al sòl i tancar així el cicle de la matèria orgànica i dels nutrients de les plantes (N, P i oligoelements). Des del punt de vista ambiental el compostatge implica sempre emissions de CO₂ a l'atmosfera i el desaproveïment de l'energia alliberada. L'aplicació del producte final a l'agricultura i jardineria està condicionada pel nivell de metalls pesants i de sòlids inorgànics que contingui, d'ací la no viabilitat d'alguns residus pel compostatge.

-La digestió anaeròbia, tant per a residus sòlids com líquids, produeix biogàs utilitzable com a font d'energia, i un digestat orgànic estabilitzat. En general les instal·lacions pel tractament anaeròbic són més complexes i cares que les de compostatge.

-La incineració directa dels residus orgànics permet la producció d'energia elèctrica i tèrmica. La incineració produeix emissions de CO₂ a l'atmosfera, com qualsevol combustió, i cendres inerts. Els gasos de combustió han de ser degudament filtrats per evitar l'emissió a l'atmosfera de partícules i d'òxids de sofre i de nitrogen que poden causar la pluja àcida.

1.1.3 Avantatges i inconvenients de les alternatives de tractament de residus orgànics

Des del punt de vista ambiental el compostatge és preferible a l'abocador. Tanmateix els estudis basats en l'anàlisi del cicle de vida no arriben a donar una resposta unànime en quant a la preferència del compostatge, la digestió anaeròbia o la incineració (Sundberg, 2005). En aquests estudis els sistemes d'incineració analitzats produeixen electricitat i calor que s'utilitza en '*district heating*' i tenen un avançat sistema de neteja dels gasos emesos. Els sistemes de digestió anaeròbia produeixen biogàs, utilitzable com a vector energètic tant per electricitat com per energia tèrmica, i el digestat és usat com a fertilitzant agrícola. El compostatge es realitzava tant en piles a l'aire lliure (*windrows*) com en sistemes tancats i el producte final s'usava a l'agricultura i era valorat per l'aportació de nitrogen i fòsfor.

La preferència, des del punt de vista ambiental, del compostatge enfront la incineració o la digestió anaeròbia depèn de si es comptabilitza com a aprofitable l'energia tèrmica '*district heating*' i de si l'aportació del compost al sòl com a esmena orgànica és considerada com un estalvi de turba, recurs fòssil que contribueix a l'escalfament global.

Des del punt de vista econòmic la incineració només és viable si hi ha cogeneració i es valora econòmicament l'energia tèrmica. La digestió anaeròbia és un tractament més car que el compostatge, i la seva viabilitat econòmica depèn del preu de l'energia.

Altres raons, però, recolzen la viabilitat del compostatge com a opció en la gestió de residus. Per exemple, el fet de ser una tecnologia senzilla i que es pot implementar a qualsevol escala o el fet que contribueix a la conservació dels sòls agrícoles. Així, segons de Bertoldi (2008), cal prendre consciència del greu problema de degradació dels sòls per erosió i desertificació que comporta la pèrdua de matèria orgànica i nutrients. Els sòls mediterranis han estat explotats des de fa milers d'anys i tenen un baix contingut en matèria orgànica. Quan aquest contingut és inferior a l'1% comença la desertificació i desapareix la fertilitat del sòl. El contingut en matèria orgànica dels sòls del cinturó cerealista als USA era del 9% fa 25 anys i actualment ja està per sota del 4% (de Bertoldi, 2008). L'única manera d'afrontar aquest problema és reintroduint al sòl els residus orgànics. Cal veure'ls no com un residu per l'abocador sinó com un recurs. Amb el compostatge dels residus orgànics, enlloc de l'abocador o la incineració, es poden evitar importants emissions de metà i CO₂. Els beneficis per l'agricultura cal veure'ls en la millora de la matèria orgànica del sòl, la contribució a la fertilització química (N, P, K i oligoelements), l'augment de la capacitat de retenció hídrica, la reducció del lixiviat de nutrients i en general el fer una agricultura sostenible.

1.1.4 La definició del procés de compostatge

La matèria orgànica fresca dels residus és fitotòxica, no estable i conté agents patògens pels animals i les persones. Si s'aporta directament al sòl serà transformada pels microorganismes però aquests competiran amb les arrels de les plantes pels nutrients. Per això la matèria orgànica fresca s'ha d'estabilitzar i humificar parcialment abans d'aplicar-la al sòl. Això és el que es fa en el procés de compostatge (de Bertoldi, 2008).

Segons Haug (1993) el compostatge és la descomposició biològica i estabilització de substrats orgànics heterogenis sota condicions (aeròbies) que permeten el desenvolupament de temperatures termòfiles com a resultat de l'energia calorífica produïda biològicament per obtenir un producte final estable, lliure de patògens i llavors, i que pot ser aplicat al sòl de manera beneficiosa. El material de partida del compostatge ha de ser condicionat químicament i física i el procés controlat a fi d'optimitzar els principals paràmetres que regulen el procés: temperatura, oxigen, humitat i pH.

Des del punt de vista de gestió dels residus el compostatge és un procés que assoleix l'estabilització, la reducció de volum i humitat i la higienització per inactivació tèrmica dels organismes patògens. L'objectiu de l'estabilització és produir un material no putrescible, que no s'auto-escalfa, que no consumeix oxigen ni emet olors i que no atreu als insectes ni altres cuques. El producte final pot ser útil com a aportació de nutrients a les plantes, de matèria orgànica per la millora del sòl i d'agents supressius de malalties vegetals.

El procés de compostatge és realitzat per múltiples espècies de microorganismes, cadascuna adaptada a unes determinades condicions. Aquells microorganismes que tenen una temperatura òptima de desenvolupament entre 20 i 40 °C se'ls anomena mesòfils i aquells que es desenvolupen millor a temperatures superiors als 45 °C s'anomenen termòfils. La temperatura entre 40 i 45 °C és considerada com una transició entre l'etapa mesòfila i la termòfila.

Atenent a la forma d'alimentació d'un sistema de compostatge es pot distingir entre sistemes *batch*, on hi ha una càrrega inicial de material a compostar que evoluciona fins al producte final, i sistemes continus on el material fresc s'hi afegeix intermitentment més d'un cop al dia.

En general s'entén per substrat els residus que són objecte del procés. Esmena és qualsevol material que s'hi afegeix per millorar el procés, ja sigui estructuralment, biològic o químic. En termes microbiològics també es denomina substrat a aquella fracció de matèria orgànica que constitueix l'aliment directe dels microorganismes, ja sigui en forma soluble directament assimilable o en forma insoluble abans de la hidròlisi.

1.1.5 Les etapes del procés

En la descomposició aeròbia es produeix escalfor que bé pot quedar-se dins la massa provocant l'augment de la temperatura o bé pot dissipar-se cap a l'exterior per conducció o ser arrossegat pel flux d'aire. L'elevació de la temperatura de la massa en compostatge és doncs resultat de l'activitat microbiana i alhora determina la seva activitat. Cada espècie de microorganismes es desenvolupa en un determinat interval de temperatures i hi ha inactivació quan la temperatura el sobrepassa. Els mesòfils són actius fins a 40-45 °C i els termòfils tenen un òptim a temperatures superiors.

El procés en un sistema *batch* es pot considerar una seqüència de tres etapes (Fig.1.1). Una etapa inicial (A), l'etapa o fase activa (B) on s'asoleix la màxima velocitat de descomposició, i l'etapa de maduració (C).

L'etapa inicial es caracteritza per la pujada de temperatura i el increment en la producció de CO₂. El creixement microbià és limitat per la baixa biomassa, sovint associada a un pH baix. Aquesta etapa pot durar des d'un dia fins unes poques setmanes.

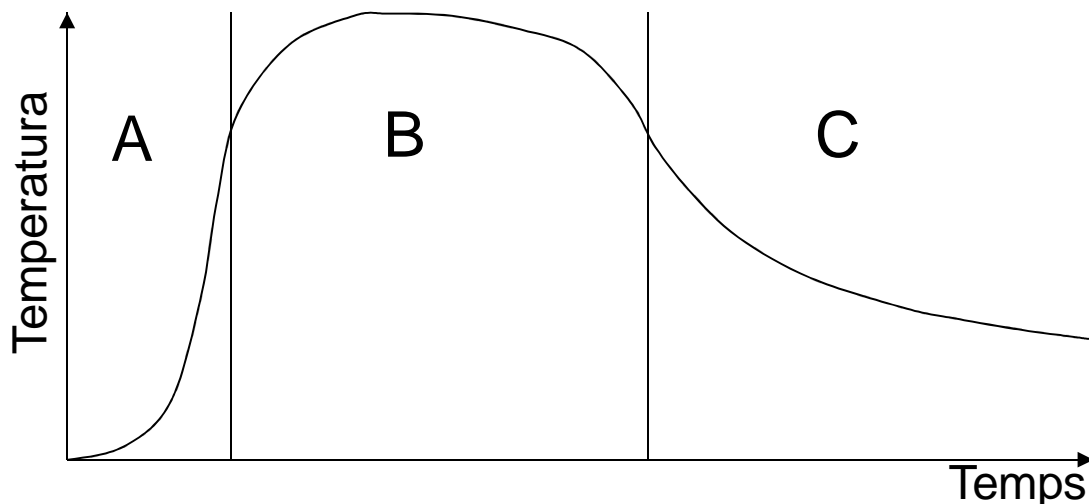


Figura 1.1 Les tres etapes en un procés de compostatge en un sistema *batch*. (A): etapa inicial, (B): etapa activa i (C) etapa de maduració.

En l'etapa activa s'assoleixen normalment temperatures termòfiles i s'esvaeixen les limitacions al creixement per manca de biomassa, d'accessibilitat al substrat o pel baix pH. La transferència d'oxigen cap a la fase sòlid-líquid és el factor que esdevé limitant. Pot durar des d'alguns dies fins a setmanes, depenent del material de càrrega.

En l'etapa de maduració ja s'ha consumit tot el substrat fàcilment biodegradable mentre que la massa microbiana encara és elevada. La poca disponibilitat de substrat pel creixement microbià és el factor limitant. tant la producció CO₂ com la temperatura decreixen gradualment.

1.1.6 Fenòmens físics, químics i biològics implicats

Des del punt de vista físic una massa de material en compostatge es pot considerar com un entramat de partícules sòlides o matriu porosa que conté espais buits i interfícies de diferent grandària. Els espais buits entre partícules s'omplen d'aire, aigua o una mescla d'aire i aigua, a més a més una fina pel·lícula d'aigua recobreix la superfície de les partícules. Si els buits s'omplen totalment d'aigua es restringeix la transferència d'oxigen. Si es treu part de l'aigua el volum de por que queda s'omple d'aire, hi ha transferència d'oxigen i el compostatge esdevé possible. Si s'elimina massa aigua l'activitat microbiana s'atura per manca d'humitat. El interval adequat d'humitat pel compostatge depèn de l'estructura del material en compostatge. Materials amb una estructura forta (materials fibrosos o esponjosos com la palla o fusta trinxada) poden absorbir més quantitat d'aigua. S'admet que tota l'activitat microbiana es desenvolupa en la fase líquida i en la interfície sòlid-líquid.

Dels molts fenòmens físics implicats en el procés cal mencionar la transferència de massa entre la fases gasosa i la líquida (essencialment O₂, CO₂, NH₃ i H₂O), la

transferència d'escalfor sensible i latent entre les fases gasosa i sòlid-líquid, la transferència d'escalfor per conducció a través de tota la massa, el flux gasós a través de la matriu porosa com a conseqüència d'un gradient de pressió, el moviment de la fase líquida en la matriu porosa degut a la diferència de potencial hídric i la deformació global de la matriu degut a l'assentament gradual de la massa.

Com a fenòmens químics cal remarcar els equilibris iònics en la fase líquida que determinen el pH i són els responsables de l'aparició de components en formes volàtils (CO₂, NH₃, olors).

Els fenòmens biològics inclouen el creixement de les diferents poblacions de microorganismes sobre substrats làbils, la hidròlisi de substrats insolubles lentament biodegradables a formes assimilables, i la mort de microorganismes. L'habilitat de cada grup de microorganismes per desenvolupar-se sota unes condicions donades i en créixer sota la competència dels altres pel substrat és el que provoca la coneguda successió de poblacions.

1.1.7 Els factors que afecten al procés de compostatge

L'objectiu general de les plantes de compostatge és oferir, a partir de la biomassa residual que els arriba (principalment fracció orgànica dels RSU, llots de depuradora, o altres com dejeccions ramaderes) un producte beneficiós pel sòl i la planta amb el menor cost ecològic possible. Els factors sobre els que es pot actuar en una planta de tractament es poden agrupar en:

- a) Paràmetres de control del procés: Temperatura, contingut d'humitat, cabal d'aireig (oxigen), i pH, (Haug, 1993; Nakasaki et al., 1987b; Sundberg et al., 2004).
- b) Paràmetres d'estructura i composició del substrat d'entrada: Relacions C/N i C/P, contingut en oligoelements, grandària de partícula i estructura del material, (Das et al., 2002; Ekinici et al., 2000; Morisaki et al., 1989).

En general, com que el compostatge és un procés de transformació realitzat per microorganismes, tots aquells factors que afectin el seu creixement també limitaran el procés.

1.1.8 Les diferents tecnologies per realitzar el compostatge

Hi ha diferents tecnologies per realitzar el procés de compostatge que estan descrites per diferents autors (Chica and García, 2007; Flotats and Solé, 2007) . Cadascuna d'elles permet obtenir un producte final de la mateixa qualitat per a un mateix substrat d'entrada. La diferència entre elles rau essencialment en el temps necessari pel procés i en l'equipament i mà d'obra requerits.

-Files regirades. La mescla de materials pel compostatge es col·loca sobre una superfície plana formant una fila de secció triangular o trapezoidal de 3-4 m de base i 2-2,5 m d'alt. Les mides s'han d'adequar a l'estructura i composició de la mescla. Així, una mescla amb poc estructurant o bé amb una fracció elevada de material làbil que tingui un fort consum d'oxigen requerirà piles més petites. Les piles són regades i regirades mecànicament amb una certa periodicitat, o en funció dels nivells de

temperatura o oxigen mesurats, a fi de mantenir la humitat i l'esponjositat de la massa per facilitar l'aireig. El procés és clarament discontinu, senzill d'implementar i pot tenir una durada de 100-120 dies. El cost de regirar, la possibilitat de manca d'oxigen en les capes més internes i l'emissió d'olors són factors a considerar.

-Pilots estàtics airejats. En aquest sistema la mescla pel compostatge es col·loca sobre una base porosa (generalment fusta trossejada) que cobreix un sistema de tubs foradats pels que s'hi aspira o insufla l'aire. Una altra capa externa de material estable i porós (compost acabat) de 18-30 cm de gruix cobreix el pilot. Aquesta capa actua d'aïllant tèrmic, reté la humitat i, en els sistemes que s'hi insufla l'aire, absorbeix les olors. La capa base serveix per garantir la no obturació dels orificis dels tubs i la uniformitat en la distribució del flux d'aire. Cal tenir present que al no regirar-se poden haver-hi problemes en la distribució de l'aire degut a la formació de vies preferents durant l'assentament de la massa si el material no té una bona estructura.

-Trinxeres o canals semitancats. Una sèrie de canals paral·lels de 3-5 m d'ample i longituds que poden arribar a 150 m estan separats per uns murs de 2-3 m d'alt i són omplerts amb el material a compostar. Una màquina regiradora que es desplaça per rails col·locats sobre els murs remou la massa i la fa avançar 3-4 m cada vegada. Aquest sistema sol estar en una nau ben airejada i permet que el temps de tractament s'escurci fins a 30-50 dies.

-Túnels estàtics. El material a compostar es col·loca en uns contenidors d'obra d'uns 3 m d'alt per 4-5 m d'ample i 20-30 m de llarg. Hi ha un sistema d'aireig forçat a través d'orificis al terra que permet tant la injecció d'aire fresc de l'exterior com la recirculació d'una part del corrent de sortida. També hi ha un sistema de reg per mantenir la humitat. Això permet un major control del procés en funció dels nivells de temperatura, humitat i oxigen que es mesuren. El procés de la fase activa pot enllestir-se en 15-40 dies. Aquest sistema té l'avantatge de poder controlar millor les variables del procés, facilita la recollida dels lixiviats i permet passar per un biofiltre les emissions gasoses. És un dels sistemes que més s'està implantant a nivell europeu.

-Tambors rotatoris. Són grans cilindres que giren lentament entorn el seu eix que és horitzontal o lleugerament inclinat. El material a compostar és alimentat per un extrem, es desplaça longitudinalment alhora que és remogut i surt per l'altre extrem acabat ja el tractament. Aquest és un sistema complex mecànicament però que permet un bon control de les variables del procés. En general la permanència del material a l'interior del tambor és d'uns 5-7 dies, suficients per produir-s'hi la fase més activa. El material acaba la fase de maduració en túnels o files regirades.

1.1.9 El perquè de la modelització

La modelització matemàtica permet essencialment la integració del coneixement de tots els fenòmens físics, químics i biològics que se sap són presents en el procés, predir l'evolució d'un sistema i dissenyar processos optimitzats. L'anàlisi de les interaccions entre els diferents fenòmens i la seva importància relativa en la determinació del procés és moltes vegades impossible de fer experimentalment i llavors cal recórrer a la modelització. També es pot utilitzar com una eina d'aprenentatge per a professionals, ja sigui per a dissenyadors-projectistes com per a operadors.

Tot i que el procés de compostatge és ben conegut hi ha pocs treballs encaminats a la seva modelització i molts dels que hi ha es concentren en aspectes concrets sense considerar la globalitat del procés.

L'optimització del procés de compostatge a partir d'un model que integri els aspectes físics, químics i biològics fora una millora de la tecnologia actual que està basada principalment en el coneixement obtingut de l'experiència. Aquest és important, però a vegades està limitat per la manca d'un cos de coneixement estructurat. La modelització dels diferents fenòmens que intervenen alhora i interfereixen entre ells en el complex procés del compostatge ha de permetre:

- a) Fer una anàlisi de sensibilitat: Identificar els principals paràmetres que afecten al procés.
- b) L'optimització del procés: Determinar el valor o rang de valors dels paràmetres més influents que més s'adeqüen al fi buscat. Exemples d'això poden ser l'estimació de la durada del tractament, l'elecció de l'estratègia d'aireig o la cerca de les millors característiques de la mescla de residus inicial.

1.2. L'estat de l'art

1.2.1. Enfocaments clàssics en la modelització del procés de compostatge

Un model matemàtic és una imatge simplificada d'un procés real que reflecteix els paràmetres i relacions més importants que influeixen en un procés real.

L'objectiu de la modelització del procés de compostatge és crear una eina conceptual que permeti integrar els diferents aspectes (físics, químics i biològics) en un algorisme que serveixi de base per la interpretació de dades experimentals, pel contrast d'hipòtesis, per la determinació de relacions entre variables, per predir l'evolució del sistema i en definitiva per optimitzar el procés i les estratègies de gestió.

Atès que el compostatge és l'oxidació parcial per via biològica de la matèria orgànica a fi d'obtenir un producte estable (que ja no es pot oxidar més per aquesta via) i que aquest procés comporta sempre un consum d'oxigen i una producció de CO₂, quan es parla de taxa o velocitat de degradació es fa referència o bé a la velocitat de consum d'oxigen (OUR, Oxygen Uptake Rate) o bé a la velocitat de producció de CO₂.

Tradicionalment hi ha hagut dos enfocaments diferents en el desenvolupament de models:

- a) *L'enfocament empíric o inductiu.* L'objectiu de la modelització empírica és trobar una equació que s'adapti el millor possible a les dades del sistema. Es basa en les múltiples correlacions observades en les dades experimentals entre paràmetres ambientals o d'operació i variables de resposta biològiques (essencialment la taxa de degradació). Aquest mètode no entra en explicar el perquè d'aquesta relació ni en el seu sentit físic. El seu principal punt feble és l'elevat nombre de factors que afecten al procés i que no són mesurables així

com la quantitat d'experiments necessaris per quantificar amb una certa fiabilitat el sistema. Seguint aquest enfocament I.G. Mason (2008) analitza més de 30 conjunts de dades de compostatge de la literatura i intenta trobar-hi un patró comú per la degradació del substrat. Menys d'un quart de les dades dels treballs analitzats aconseguixen ajustar-se a un patró comú.

Entre els treballs considerats que prenen aquest enfocament cal mencionar la predicció de la temperatura en el nucli d'una pila de compostatge a partir de la temperatura superficial (Turner et al., 2005) i la predicció de la temperatura mitjana en funció del temps utilitzant la funció de Gompertz (Yu et al., 2008). Molts models es poden considerar semi-empírics en la mesura que utilitzen correlacions entre variables i alhora equacions fonamentals de balanços de massa i energia. Entre ells es poden mencionar la predicció de l'evolució de la temperatura tenint present els efectes d'inèrcia tèrmica de la massa (Barrena et al., 2006) o la predicció de la temperatura a efectes d'inactivació de patògens (Cekmecelioglu et al., 2005).

b) L'enfocament mecanicista o deductiu. Es basa en l'aplicació de les lleis bàsiques de la física, química i biologia als fenòmens considerats i en la deducció del comportament del sistema a partir de la resolució simultània de les equacions que representen les lleis bàsiques.

Aquest enfocament proporciona un coneixement estructurat del procés. El seu punt flac és que moltes de les lleis bàsiques de transferència de massa i energia o de desenvolupament microbià inclouen paràmetres característics del medi o del procés que són difícils de mesurar experimentalment. Llavors cal recórrer a ajustar els seus valors a partir de les dades que es tinguin de l'evolució del sistema, però si el nombre de paràmetres és elevat no sempre es troba un conjunt de valors únic i amb sentit físic (Liang et al., 2004; Solé-Mauri, 2006).

La descripció del compostatge és molt més complex que els processos de tractament d'aigües residuals aeròbics o anaeròbics. Aquests es produeixen en medi líquid on la distribució de components és homogènia i això ha permès desenvolupar models que prenen la concentració en l'aigua com a variables d'estat. Alguns d'aquests models, ADM n°1 i ASM1, (Batstone et al., 2002; Henze et al., 2000) són àmpliament utilitzats a nivell industrial. En el compostatge els processos passen en un medi sòlid porós d'estructura variable que està parcialment impregnat d'aire enrarit i d'aigua que conté components en solució. A més a més els balanços energètics i l'evolució de la temperatura són determinats.

S'han desenvolupat diferents models deterministes pel procés de compostatge. Alguns es centren en els processos químic-biològics i altres en aspectes físics. Utilitzen diferents aproximacions per simular la distribució espacial de la massa, les seves propietats i els balanços de matèria i energia (Mason, 2006). Atenent a com es tracta la cinètica del procés poden classificar-se en:

Models amb cinètica química. Són aquells models que consideren els processos de transformació de la matèria en el compostatge con una simple reacció química, generalment de primer ordre.

Models biològics. Consideren que els processos de transformació de la matèria són provocats per una o més poblacions de microorganismes que creixen i moren en funció de les condicions de l'entorn (temperatura, pH, disponibilitat de substrats i oxigen, presència de substàncies inhibidores).

Atenent a la manera de modelitzar la distribució espacial de la massa en compostatge es pot distingir entre:

Models de mescla completa, en els que la massa en compostatge és considerada com una matriu porosa homogènia i tant la fase líquida com la gasosa són fluids en mescla completa (CSTR). Les propietats intensives (Φ_i) prenen, en un determinat instant, el mateix valor en cadascun dels punts del reactor ($\Phi_i = \Phi_i(t)$).

Models amb distribució espacial (ja sigui 1D, 2D ò 3D). Són aquells que les seves propietats intensives (Φ_i) es descriuen amb un camp transitori continu en l'espai (x), ($\Phi_i = \Phi_i(t, x)$). Els fenòmens de transport són deguts als gradients d'aquests camps i venen governats per equacions en derivades parcials. La seva solució sovint s'aproxima discretitzant el domini en volums de control (VC) que s'admet són zones de mescla completa. Les variables d'estat en cada VC aproximen el valor representatiu del camp en aquest VC, són els anomenats models espacials truncats (*lumped models*) o models basats en volums de control. En oposició a aquests hi ha alguns models on la solució de les variables d'estat s'aproxima amb el mètode dels elements finits (Bongochgetsakul and Ishida, 2008).

Aquestes dues classificacions són independents, per tant de la seva intersecció en surten les quatre classes que es presenten al Quadre 1.1.

Quadre 1.1. Classificació dels principals models de compostatge segons l'enfocament adoptat per la cinètica del procés i per la distribució espacial.

	Mescla completa	Distribució espacial
Cinètica química	Ahn et al., 2007 Bach et al., 1987 Bari et al., 2000 Ghaly et al., 2006 Higgins and Walker, 2001 Keener et al., 1993 Mohee et al., 1998 Ndegwa et al., 2000 Bach et al., 1987 Bari et al., 2000	Bari and Koenig, 2005 Das and Keener, 1997 Finger et al., 1976 Mason, 2009 Smith and Eilers, 1980 Van Lier et al., 1994 VanderGheynst et al., 1997
Biològics	Hotta and Funamizu, 2009 Kaiser, 1996 Liang et al., 2004 Lin et al., 2008 Lopez Zavala et al., 2004 Sole-Mauri et al., 2007 Tremier et al., 2005 Xi et al., 2005	Bongochgetsakul and Ishida, 2008 Sangsurasak and Mitchell, 1998 Saucedo-Castañeda et al., 1990 Stombaugh and Nokes, 1996 Yu et al., 2009

1.2.2 L'estat de l'art dels models de mescla completa analitzats

Els trets dels models de mescla completa que es consideren més significatius s'exposen a continuació (Bach et al., 1987; Kaiser, 1996; Keener et al., 1993; Tremier et al.,

2005). En el Quadre 1.2 se'n fa una síntesi comparativa. Es considera que cadascun d'aquests quatre aporta conceptes bàsics per la modelització del procés de compostatge. Així el model de Bach et al. (1987) introdueix la idea de considerar el flux gasós com a suma de fluxos molars de cadascun dels components gasosos. Keener et al. (1993) considera la massa de components gasosos com a variable d'estat del sistema considerant una cinètica de reacció de primer ordre. Kaiser (1996) és el primer autor que detalla un model biològic amb diferents poblacions i tipus de substrats i hi acobla un sistema físic senzill. Tremier (2005 i 2006) introdueix la hidròlisi en un sistema biològic simplificat i planteja les equacions diferencials de conservació de massa i energia en 1D.

Hi ha altres models en la literatura que no s'analitzen amb tant deteniment per alguna de les següents raons:

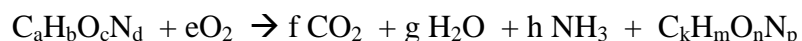
- Models que són innovadors només des del punt de vista biològic (Sole-Mauri et al., 2007).

- Models que, si bé són interessants per alguns detalls o dades, però que no aporten cap concepte general nou des del punt de vista físic, (Nakasaki et al., 1987a).

-Model de P.D. Bach (1987)

Aquest model (Bach et al., 1987) és interessant des del punt de vista dels balanços màssic i energètic. L'autor treballava en el compostatge de fangs premsats de depuradores d'aigües residuals i descriu dos tipus de reactors. L'un era un reactor batch a escala de laboratori i l'altra era una planta industrial tipus trinxera amb una màquina mescladora que alhora feia avançar el material.

El procés en sí era considerat mitjançant una sola reacció química exotèrmica sense presència de microorganismes amb la següent forma,



on la velocitat de reacció hauria estat determinada prèviament en laboratori. Des del punt de vista del balanç de massa pels gasos d'entrada (O_2 , N_2 i vapor) i sortida (O_2 , N_2 , CO_2 i vapor) s'utilitzen els cabals màssics molars i es considera que el nitrogen no intervé en la reacció. Això permet determinar les velocitats de consum i producció a partir de l'anàlisi en fraccions molars a l'entrada i a la sortida i del cabal molar total d'aire sec d'entrada. No es contempla l'acumulació en fase gasosa ni la transferència gas-líquid. És interessant remarcar que en les mesures fetes experimentalment del nivell d'humitat en el corrent de sortida s'observà que aquesta era independent del cabal d'aire insuflat i depenia només del contingut d'humitat de la massa. Per a continguts superiors al 50% l'aire sortia saturat, si el contingut estava entre el 45 i el 50% la temperatura de rosada del corrent era d'1 °C inferior a la temperatura de la massa, i per humitats inferiors al 45% la temperatura de rosada era 3 °C inferior.

En el balanç energètic s'hi consideraven els següents termes: a) Acumulació d'escalfor només com a calor sensible en la massa d'aigua, de matèria seca i en el contenidor. b) Pèrdues d'escalfor a través de la paret calculades en base a un coeficient global de conducció-convecció que fou mesurat experimentalment mesurant la caiguda de

temperatura en el reactor ple d'aigua. Aquest terme podia arribar a representar fins al 60% de totes les pèrdues d'escalfor en un reactor a escala laboratori. c) Producció d'escalfor per reacció lligada al consum d'oxigen. d) Arrossegament convectiu de calor sensible pel corrent d'aire sec. S'utilitza una calor específica molar mitjana per l'aire sec i es distingeix el cabal molar d'entrada del de sortida. e) Arrossegament convectiu de calor latent lligat als corrents de vapor d'entrada i de sortida. S'utilitza una calor latent molar de vaporització constant.

-Model de H.M. Keener (1993)

Un dels primers models que inclou el balanç de massa i energia i que és molt citat en la literatura és el de Keener et al., (1993). Adopta l'estructura física de matriu porosa amb partícules de matèria orgànica recobertes d'un film d'aigua i, per a un determinat volum de control, pren les següents variables d'estat: Massa seca de residu a compostar (m_c), massa d'aigua líquida (m_{cw}), massa d'aire sec en la fase gasosa (m_a), massa de vapor en la fase gasosa (m_{aw}) i temperatura de les tres fases. Tot el procés de compostatge es redueix a una reacció química de primer ordre respecte a la fracció degradable de matèria seca on el consum de matèria orgànica està lligat a estequiomètricament a la producció d'aigua, aire sec (diferència entre el consum d'oxigen i la producció de CO_2) i calor. La constant cinètica ve afectada per la temperatura del sistema. Els coeficients estequiomètrics es treuen d'altres treballs (Bach et al., 1987; Haug, 1993; Smith and Eilers, 1980).

Respecte al balanç de massa l'autor introdueix les següents hipòtesis simplificadores: a) La massa d'aire sec en un volum de control és constant. b) Es negligeix el terme d'acumulació en la fase gasosa en el balanç màssic de vapor. c) L'aire està saturat d'humitat a la temperatura que es troba, assumible si la humitat de la massa és superior al 50% (Bach et al., 1987). Aquestes hipòtesis li permeten eliminar una de les variables d'estat (m_a) i deixar la massa de vapor (m_{aw}) en funció de la temperatura. El flux d'aigua evaporada queda així en funció dels continguts d'humitat dels corrents d'entrada i sortida d'aire sec. El model no permet preveure la concentració d'oxigen en la fase gasosa i aquesta tampoc pot suposar una limitació a la velocitat de reacció. De fet el model fou desenvolupat per sistemes on hi havia un fort aireig que s'utilitzava per limitar la pujada de temperatura de la massa.

Respecte al balanç d'energia considera només els termes: a) Acumulació per calor sensible en la massa de matèria seca i aigua, b) Arrossegament convectiu lligat als cabals màssics d'aire sec, (entalpia específica aire sec i vapor) i c) Producció per reacció química. No es consideren fluxos d'escalfor a través de les parets del volum de control.

Aquest model l'hauria aplicat l'autor a un sistema 2D amb una discretització en volums de control rectangulars i hauria donat uns resultats de simulació acceptables (els detalls del model 2D no són disponibles). És interessant mencionar que en aquest treball s'haurien determinat els fluxos màssics d'aire a les fronteres del volum de control mitjançant l'aplicació de la llei de Darcy en medis porosos i resolent-ho per diferències finites. Això li permetia introduir la variació de la permeabilitat del medi a cada nivell en funció de l'alçària i tipus de material acumulat al damunt. La pressió requerida a la base de la pila i el cabal d'aire insuflat permeten determinar el consum energètic dels bufadors i fer estudis de viabilitat econòmica de diferents estratègies d'aireig.

-Model de J. Kaiser (1996)

El model desenvolupat per Kaiser (1996) considera quatre poblacions de microorganismes (bacteris, actinomicets, fongs vermells i fongs blancs) i quatre tipus de substrats de biodegradabilitat decreixent (sucres, hemicel·luloses, cel·luloses i lignines). Cada població és capaç de degradar un nivell més de substrat que la població anterior i els fongs blancs, que poden degradar-los tots, només poden degradar la lignina si encara hi ha algun altre substrat present. Les expressions cinètiques són del tipus Monod, multiplicades per una funció de limitació del creixement per la temperatura, i utilitzen concentracions màssiques (fraccions màssiques) referides a la massa total humida. Quan una població disposa de més d'un substrat per degradar consumeix de cadascun d'ells de manera proporcional a la quantitat que n'hi ha. No es contempen els components que continguin nitrogen ni les possibles emissions d'amoniac ni la possible limitació del creixement microbià en medis pobres en nitrogen. Aquest model fou el primer que, conseqüència de la cinètica emprada, pogué simular la successió de poblacions microbianes.

Des del punt de vista físic es considera el medi com una matriu porosa impregnada d'humitat. La generació d'escalfor biològica va lligada estequiomètricament al consum d'oxigen i és la causa de la pujada de temperatura de la massa. Un corrent d'aire hi entra en les condicions de l'ambient exterior i en surt més calent, carregat de CO₂ i saturat de vapor. L'acumulació d'energia calorífica sensible es fa en la massa de material humit, en el contenidor i en l'aire saturat. Hi ha pèrdues d'escalfor a través de la paret del contenidor. Si bé el model físic contempla tots els termes importants de la transferència tèrmica, té els següents punts febles:

-Les entrades i sortides de massa del sistema es basen en un mateix cabal volumètric de gas, malgrat que en general el cabal volumètric de sortida serà superior al d'entrada degut a la dilatació i caiguda de pressió de l'aire. També les entalpies i humitats estan referides a una base volumètrica.

-S'admet que l'aire està sempre saturat d'humitat a la temperatura que estigui. Aquesta pot ser una bona aproximació en les condicions habituals d'operació però pot proporcionar resultats aberrants si la massa s'asseca. En aquesta situació podria seguir sortint un corrent d'aire saturat encara que s'hagués eixugat tota la massa d'aigua del sistema.

-La resistència a la transferència de l'oxigen des de la fase gasosa cap a la líquida es negligeix i només es considera que el creixement microbià s'atura si la concentració d'oxigen en l'aire es fa zero.

-Model de A.Tremier (2005)

Amb la finalitat de caracteritzar la composició de la matèria orgànica de residus per compostar Tremier (2005) desenvolupà un model biològic simple amb una sola població de microorganismes i dos nivells de substrat, un fàcilment biodegradable que podia ser consumit directament pels microorganismes i l'altre que requeria una hidròlisi per convertir-se en biodegradable (Tremier et al., 2005). El creixement dels microorganismes era modelitzat amb una cinètica de Monod amb funcions limitadores del creixement per temperatura i humitat del medi, la mort cel·lular, que produïa un producte orgànic inert, amb una cinètica de primer ordre influenciada per la temperatura i la hidròlisi amb una cinètica de Contois també influenciada per la temperatura. El

consum d'oxigen anava lligat estequiomètricament a la taxa de creixement microbià i a la taxa de mort cel·lular, considerada com a respiració endògena.

En aquest model totes les variables d'estat màssiques es mesuraven en unitats de DQO referides a la massa total. Les funcions limitadores per temperatura eren del tipus CTMI (*Cardinal Temperature Model with Inflection*) (Rosso et al., 1993) amb tres paràmetres (temperatures òptimes) i afectaven als valors de la taxa màxima de creixement (μ_m), a la constant d'hidròlisi (K_h) i a la mort cel·lular (k_d). L'autor proposa una metodologia per, mitjançant experiments a temperatura i humitat constants, determinar els paràmetres cinètics.

Els aspectes físics foren introduïts en un treball posterior (Tremier et al., 2006). Aquí ja es considerava que el medi era una matriu porosa amb tres fases, sòlida seca, líquida o aquosa i gasosa i a més a més es considerava ja una distribució espacial 1D escenificada en un reactor cilíndric vertical de 0,7 m de diàmetre per 0,8 m d'alt. La fase gasosa es desplaçava respecte a les altres arrossegant O_2 , CO_2 , vapor d'aigua i l'energia (entalpia) associada al corrent. Les reaccions biològiques es produïen en la fase aquosa consumint O_2 i produint CO_2 , aigua i calor. La transferència d'oxigen i CO_2 entre les fases líquida i gasosa es feia en virtut de la diferència de concentracions entre la part líquida de la interfície (C_{Li}^*) i la corresponent concentració en la part líquida (C_{Li}) que era presa com a constant. No es menciona com s'estimà la concentració a la interfície. La concentració de vapor en la fase gasosa s'introduïa com una funció empírica (no publicada) de la temperatura i humitat relativa de l'aire. Tampoc es menciona com es determinà el cabal d'aigua evaporada ni la producció per reacció biològica.

Respecte al balanç energètic considerava que en una determinada posició les tres fases tenien la mateixa temperatura. Els fluxos d'escalfor que es consideraven eren, *a*) flux convectiu associat al corrent d'aire humit, *b*) flux conductiu en la fase sòlid-líquid com a conseqüència del gradient tèrmic en la direcció del flux gasós, *c*) producció lligada al consum d'oxigen, *d*) consum lligat al flux d'aigua evaporada, i *e*) pèrdues radials a través de la paret del reactor. L'acumulació de calor es feia en la massa de sòlid i líquid, en l'aire sec i en el vapor. Els resultats de les simulacions reflectien les tendències generals de les dades experimentals. Els principals punts febles són la manca d'informació precisa sobre,

- La manera de tancar el balanç d'aigua amb els termes de producció i evaporació
- La quantificació dels fluxos gasosos interfases i com es determinava la concentració a la interfície.
- La metodologia emprada en la resolució matemàtica del sistema d'equacions en derivades parcials.
- Les funcions limitadores del creixement per humitat del medi i per la disponibilitat d'oxigen en la fase gasosa. Sembla una contradicció el fet que hi hagi una limitació al creixement per la concentració d'oxigen en la fase gasosa i que alhora es fixi la seva concentració en el líquid com a paràmetre constant si s'admet que tota l'activitat biològica es desenvolupa en el medi aquós.

Quadre 1.2 Trets característics de diferents models de compostatge de mescla completa

	P.D. Bach (1987)	H.M. Keener (1993)	J. Kaiser (1996)	A.Tremier (2005) (2006)
MODEL BIOLÒGIC				
Variables d'estat	--	Substrat matèria seca (1): m_c	Substrats (4): $m_{s1}, m_{s2}, m_{s3}, m_{s4}$ Biomassa morta: m_x Poblacions (4): $m_{x1}, m_{x2}, m_{x3}, m_{x4}$	Substrats (2): m_{sh}, m_{sS} Biomassa morta: m_l Poblacions (1): m_x
Processos biològics	--	El procés és considerat com una reacció química. (PO)	Creixement microbià: (MD) Mort microbiana: (PO)	Creixement microbià: (MD) Mort microbiana: (PO) Hidròlisi: (CT)
Funcions limitadores del creixement	--	La constant cinètica és funció de la temperatura. $k=k(T)$.	Per temperatura: f_{T1}, f_{T2} Per oxigen en gas: f_{O2}	Per temperatura: f_{T1}, f_{T2}, f_{T3} Per oxigen en gas: f_{O2} Per humitat: f_w
MODEL FÍSIC				
Variables d'estat	Matèria seca i aigua: m_d, m_w Conc. fase gas: O_2, CO_2 , vapor Temperatura	Aigua: m_{cw} Massa d'aire sec i vapor: m_a, m_{cw} Temperatura: T	Aigua i CO_2 gas: m_w, m_{CO2} Temperatura: T	Matèria seca i aigua: m_d, m_w Conc. fase gas: O_2, CO_2 , vapor Temperatura
Flux d'aire	Cabals molars: $\dot{n}_{T0} \neq \dot{n}_T$	Cabals màssics aire sec: $\dot{m}_a \neq \dot{m}_{ak}$	Cabal volumètric: $Q_{in}=Q_{out}$	Cabal volumètric: $Q_{in}=Q_{out}$
Balanç Màssic O_2	No hi ha acumulació en gas. Fracció molar a l'entrada i a la sortida.	Es considera BM d'aire sec. No hi ha acumulació en fase gasosa. No limita el procés.	--	Acumul. en fase gas Transferència gas-liquid Transport convectiu-difusiu
Balanç Màssic CO_2	No hi ha acumulació en gas. Fracció molar a la sortida. No n'hi ha a l'entrada.	Es considera BM d'aire sec. No hi ha acumulació en fase gasosa.	Acumulació en fase gasosa Flux de sortida: $C_{CO2} \cdot Q_{out}$ Producció per reacció biològica	Acumul. en fase gas Transferència gas-liquid Transport convectiu-difusiu
Balanç Màssic NH_3	--	--	--	--
Balanç màssic de vapor	--	No hi ha acumulació en fase gas Gas sempre saturat	--	Conc. en gas funció empírica de T i HR mesurats
Balanç Màssic Aigua	Acumulació només en fase líquida. Fluxos d'entrada i sortida en forma de vapor. Producció per reacció.	Acumulació només en fase líquida. Fluxos d'entrada i sortida en forma de vapor. Producció per reacció.	Acumulació només en fase líquida Fluxos d'entrada i sortida en forma de vapor. Gas sempre saturat a T Producció lligada esteq. a r_{CO2}	Acumulació en fase líquida Sortida per evaporació (n.d.) Producció biològica (n.d.)
Acumulació d'energia	En massa sòlids i aigua En el contenidor	En la massa de sòlids i aigua	En massa sòlids i aigua En l'aire saturat de vapor a T En el contenidor	En massa sòlids i aigua En fase gasosa (aire sec i vapor)
Generació d'energia	Lligada al consum d' O_2 $\Delta h=13.85$ MJ/kg O_2	Lligada al consum de matèria seca	Lligada al consum d' O_2 $\Delta h=14$ MJ/kg O_2	Lligada al consum d' O_2 $\Delta h=10$ MJ/kg O_2
Pèrdues d'energia a l'ambient	Conducció-convecció per paret	--	Conducció-convecció per paret. Coef. global nul·l si no hi ha aireig	Conducció-convecció per paret
Fluxos d'arrossegament convectiu	Entalpies sobre base molar (aire sec + vapor)	Entalpies sobre cabal màssic d'aire sec	Entalpies sobre base volumètrica: $Q_{in}(c_{pa} \cdot T_{in} + f_{in} \cdot h_v)$ $Q_{out}(c_{pa} \cdot T_{out} + f_{out} \cdot h_v)$	Entalpies sobre base volumètrica (aire sec + vapor)
Fluxos conductius	--	--	--	Conducció 1D

(MD): Cinètica de Monod. (PO): Cinètica de primer ordre. (CT): Cinètica de Contois. (n.d.): No definit. (--): No es considera

1.2.3 L'estat de l'art dels models 1D analitzats

S'han analitzat en detall quatre models que plantegen una distribució espacial (Bari and Koenig, 2005; Smith and Eilers, 1980; Stombaugh and Nokes, 1996; Van Lier et al., 1994). Els trets característics de cadascun s'exposen a continuació i en el Quadre 1.3 se'n fa un resum comparatiu. Altres treballs han fet aportacions interessants. Així Finger et al. (1976) menciona que el sistema més complicat de reaccions aeròbiques és probablement en una matriu semi sòlida i s'anomena compostatge. Presenta un model 2D on només hi ha els mecanismes de transport difusiu de calor i d'oxigen i una reacció biològica limitada per la concentració d'oxigen amb un terme de Monod (Finger et al., 1976). La transferència d'escalfor en bioreactors d'estat sòlid també ha estat objecte d'estudi en sistemes unidimensionals (Saucedo-Castañeda et al., 1990) i bidimensionals amb simetria radial (Sangsurasak and Mitchell, 1998). Al Quadre 1.3 es relacionen alguns dels treballs considerats.

-Model de Smith & Eilers (1980)

La introducció a gran escala del compostatge de fangs mesclats amb un agent estructurant als USA va propiciar un dels primers intents seriosos de modelitzar a nivell d'enginyeria el compostatge en una pila. Així Smith and Eilers (1980) desenvoluparen un model bidimensional en diferències finites per predir l'evolució de la temperatura i consum d'oxigen en la secció trapezoïdal d'una pila (*windrow*) amb aireig forçat. Tota la pila era considerada com una matriu porosa en la que s'hi establia un camp de pressions a l'insuflar-li aire per un o més punts. El flux d'aire, considerat com a fluid incompressible, era laminar i seguia la llei de Darcy, que juntament amb l'equació de continuïtat permetia determinar, mitjançant un esquema *upwind* en diferències finites sobre elements rectangulars, la distribució nodal de pressions i el corresponent camp de velocitats internodals. Aquesta distribució de fluxos d'aire s'admetia constant durant tot el procés i permetia determinar els balanços de massa i energia.

El model considerava quatre variables d'estat amb distribució bidimensional: substrat (fracció biodegradable de la matèria orgànica), concentració d'oxigen en la fase gasosa, contingut d'humitat i temperatura, i un sol procés de transformació que lliga estequiomètricament el consum de substrat i oxigen amb la producció d'aigua i energia. La cinètica de reacció era de primer ordre respecte a la concentració de substrat amb dues funcions contínues limitadores per temperatura i per humitat amb forma de campana de Gauss.

En els balanços de massa d'aigua i oxigen s'hi considerava el terme de reacció i els termes de transport per arrossegament convectiu i difusió, amb difusibilitat dependent linealment de la temperatura. No es considerava que hi hagués resistència al pas gasoliquid de l'oxigen ni que pogués limitar la velocitat del procés a baixes concentracions. L'aire d'un volum de control es considerava sempre saturat d'humitat a la temperatura de l'entorn.

En el balanç d'energia es considerava: a) L'acumulació en forma de calor sensible en els sòlids i l'aigua, b) El transport per arrossegament convectiu de l'aire, incloent-hi els termes de calor sensible i latent, i c) Transport conductiu en la massa porosa (tot i que s'estimava poc important). Els fluxos a les fronteres s'estimen utilitzant correlacions experimentals determinades en l'estudi de sòls.

Tot i que els resultats de simulació només s'ajusten qualitativament a les mesures experimentals presentades, aquest model té els següents aspectes innovadors:

- a) Presenta un mètode complet per determinar la distribució de pressions i velocitats d'aire en un domini 2D.
- b) Introdueix un terme de pressió hidrostàtica a la distribució de pressions en funció de la densitat del gas que permet simular el flux de convecció natural degut a l'escalfament de la pila.
- d) Introdueix un esquema exponencial en el balanç de massa d'oxigen que li permet utilitzar increments de temps llargs en la integració pas a pas i cap endavant en el temps.

-Model de J.J.C. van Lier (1994)

J.J.C. van Lier et al. (1994) proposen un model per descriure el comportament de reactors verticals de compostatge amb aireig vertical ascendent i recirculació d'una part de l'aire. Es consideren com a variables d'estat la concentració espacial de matèria seca, d'humitat, les concentracions en fase gasosa de vapor i d'oxigen i la temperatura. Les mesures experimentals de la temperatura en la fase sòlida i en el gas proporcionen valors significativament diferents en les capes inferiors i superiors del material, però en el model no es contemplà aquesta diferència. Posteriorment altres autors (von Meien and Mitchell, 2002) han fet també menció a aquesta diferència de temperatures i a la no exactitud de la hipòtesi de saturació de la fase gasosa. El substrat s'assimila a la fracció cel·lulòsica de la matèria seca. El material en compostatge s'assimila a una matriu porosa deformable. L'assentament gradual de la massa s'ajusta a una funció exponencial del temps. A efectes del model, per descriure les fenòmens de transport el compost és considerat com a rígid, però per calcular la densitat aparent i la porositat es considera deformable.

El model es basa en un sol procés de degradació biològica de la cel·lulosa amb consum d'oxigen i producció de CO₂, aigua i energia en una relació fixada per coeficients estequiomètrics. La velocitat de reacció està lligada estequiomètricament a la potència calorífica generada en una funció del temps i és considerada un input del model.

El balanç de matèria seca proporciona una equació en la que la variació de la densitat aparent de la matèria seca està relacionada amb la velocitat de degradació i amb la compactació. El terme d'acumulació en el balanç de massa d'aigua s'igualava als termes de producció per reacció, de compactació i d'evaporació. La fase gasosa s'admet que està sempre saturada de vapor i aquest és transportat per mecanismes de difusió i arrossegament convectiu. La taxa d'evaporació es calcula com el terme que quadra el balanç màssic de vapor en el volum de control amb els termes que expressen el canvi en la concentració de vapor saturat, de transport convectiu i difusiu, i la variació temporal de la porositat degut a l'assentament. El balanç màssic d'oxigen inclou els termes d'acumulació, transport convectiu i difusiu i consum per activitat microbiana que va lligat estequiomètricament a la producció de calor. En la mesura en que la relació estequiomètrica adoptada guarda una relació 1:1 entre el consum d'oxigen i la producció de CO₂ i que les difusibilitats dels dos gasos són similars, la concentració de CO₂ s'estima com la diferència entre la concentració d'oxigen i la de l'ambient (21%).

El balanç energètic inclou l'acumulació de calor sensible al compost (matèria seca i aigua) i a l'aire saturat, el transport per conducció i convecció, les pèrdues a través la paret del reactor, la generació per reacció i el consum per evaporació.

El sistema d'equacions en derivades parcials que governa el procés es resol numèricament utilitzant el mètode de diferències finites. El reactor 1D vertical es parteix en 10 capes horitzontals d'igual gruix i s'utilitza un esquema de diferències finites centrades pels processos de conducció i difusió i un esquema upwind pels termes de convecció.

Les simulacions que es presenten ajusten bé amb les dades experimentals, amb desviacions inferiors a 3 °C en la temperatura i inferiors al 5% en les pèrdues d'aigua i matèria seca. El principal punt feble del model és la poca informació que proporciona respecte a la funció que dona la producció d'energia.

-Model de D.P. Sombaugh (1996)

Aquest model (Stombaugh and Nokes, 1996) analitza un reactor vertical de compostatge com un sistema de capes horitzontals superposades. Cada capa és considerada un sistema de mescla completa i un cabal volumètric constant d'aire les travessa totes. És un dels primers models que en aquesta anàlisi 1D hi introdueix una població microbiana amb cinètica de Monod. Totes les variables d'estat màssiques (biomassa, substrat, aigua i oxigen) són concentracions referides al volum total de la massa en compostatge.

El sistema biològic inclou tres processos: creixement, manteniment i mort microbiana. tant en el creixement com en el manteniment hi ha consum de substrat, d'oxigen i producció d'aigua i energia, i es diferencien en que en el creixement hi ha, a més a més, formació de nova biomassa. La mort microbiana, amb cinètica de primer ordre, és considerada com el procés invers al creixement. tant el creixement com el manteniment segueixen una cinètica de Monod respecte al substrat (matèria orgànica biodegradable) amb termes multiplicadors que limiten el creixement per manca d'oxigen (Monod), per temperatura i per humitat (funcions lineals contínues definides a intervals).

El sistema físic 1D queda reduït a un conjunt de volums de control recorreguts en sèrie per un mateix cabal d'aire. S'utilitzen les següents hipòtesis simplificadores:

- 1) El cabal màssic d'aire sec que travessa el reactor és el mateix en cada secció. Es negligeix la variació degut a l'empobriment en oxigen i al progressiu enriquiment en CO₂.
- 2) La densitat de l'aire sec es manté constant. No es considera afectada per la temperatura, ni la pressió, ni la composició. Es comporta doncs com un fluid portador incompressible.
- 3) Es considera que l'aire ocupa tot el volum del reactor i no només el FAS, el que és equivalent a admetre un FAS=1. Això implica que no hi hagi diferència entre la concentració d'oxigen en l'aire i la concentració d'oxigen en el volum del reactor.

- 4) En cada volum de control l'aire està a la mateixa temperatura que els sòlids i l'aigua.
- 5) No es considera la transferència d'escalfor per conducció en la direcció del corrent d'aire (entre capes). Només es consideren unes pèrdues volumètriques cap a l'exterior.
- 6) En el balanç energètic es negligeixen els termes de variació en el temps de la massa dels components.
- 7) S'utilitza el següent criteri per la transferència d'humitat líquid-gas: La humitat absoluta de l'aire en un volum de control es la corresponent a la de saturació a la temperatura del volum de control quan el contingut d'humitat és superior al 18%, o és la mateixa que la del volum de control precedent si el contingut d'humitat és inferior o igual al 18%. Cal observar que aquest criteri pot impedir condensacions si el material està molt sec.

Els resultats de simulació de l'evolució de la temperatura a les diferents capes poden explicar qualitativament els principals trets que s'observen en les dades experimentals que es presenten. El desplaçament de l'activitat microbiana predita pel model és coherent amb les dades de temperatura observades.

-Model de Q.H. Bari (2005)

Bari et al. (2005) proposen un model multicapa (*lumped model*) per analitzar la distribució de temperatures en un reactor vertical amb aireig forçat. Es considera que només hi ha variació dels paràmetres i variables físicoquímiques en la direcció vertical i que el transport d'escalfor per conducció és negligible enfront el transport convectiu (Mysliwiec et al., 2001).

El model té tres variables d'estat: substrat, assimilat als sòlids volàtils biodegradables, contingut d'humitat, que inclou el vapor, i temperatura. Un únic procés de degradació de substrat amb consum d'oxigen produeix CO₂, aigua, amoníac i energia en proporcions fixes donades per coeficients estequiòmètrics. La velocitat de reacció segueix una cinètica de primer ordre respecte al substrat amb factors limitadors per temperatura i humitat. Atès que el cabal d'aire necessari per mantenir la temperatura és molt superior al requerit biològicament no es considera que l'oxigen pugui ser un factor limitador.

Des del punt de vista físic cada capa es considera homogènia i amb una mateixa temperatura per la fase sòlid-líquid i la gasosa. Aquesta es considera sempre saturada d'humitat. El cabal d'aireig es descomposa en cabal de vapor i cabal màssic d'aire sec, que s'incrementa en cada capa amb els gasos produïts (CO₂ i amoni) menys el consum d'oxigen.

El balanç màssic d'aigua inclou els termes de reacció, acumulació en fase líquida i acumulació en forma de vapor.

El balanç energètic conté els termes d'acumulació de calor sensible en la fase sòlid-líquida, l'entrada i sortida associada al corrent d'aire sec, el terme de generació per

reacció, les pèrdues a l'entorn, i l'absorció d'energia per evaporació i per canvi d'entalpia del vapor saturat. Es planteja una equació diferencial de balanç d'energia en diferències finites per cada capa i s'integren numèricament pas a pas prenent increments d'una hora.

Els resultats de simulació presentats mostren una evolució de la distribució vertical de temperatures que reproduïx amb força fidelitat la distribució mesurada en reactors experimentals quan el flux d'aire era ascendent. Les simulacions amb fluxos descendents divergeixen més de les dades mesurades.

Quadre 1.3 Trets característics de diferents models de compostatge amb distribució espacial

	R. Smith (1980)	J.J.C. van Lier (1994)	D.P. Stombaugh (1996)	Q.H. Bari (2005)
MODEL BIOLÒGIC				
Variables d'estat	Substrat: BVS	Substrat: massa de cel·lulosa	Substrat: S Biomassa: X	Substrat: BVS
Processos biològics	Cap. Es considera com una reacció química. (PO)	Cap. Es considera com una reacció química. La velocitat de reacció és input del model.	Creixement microbià: (MD) Manteniment microbià: (MD) Mort microbiana: (PO)	Cap. Es considera com una reacció química. (PO)
Funcions limitadores del creixement	Limitació velocitat reacció per -Temperatura: f_T -Humitat: f_w	--	Per temperatura: f_T Per oxigen en gas: f_{O_2} Per humitat: f_w	Per temperatura: k_T Per humitat: k_w
MODEL FÍSIC				
Variables d'estat	Contingut d'humitat: W Conc. fase gas: O_2 Temperatura	Contingut d'humitat Concentració oxigen en gas: C_{Ox} Temperatura: T	Contingut d'humitat Concentració absoluta d'oxigen Temperatura: T	Contingut d'humitat: W Temperatura: T
Flux d'aire	Distribució 2D Llei de Darcy	Distribució 1D Caball volumètric aire: $Q=S \cdot v$	Distribució 1D Caball màssic: $m_a = \rho Q$	Distribució 1D Caball màssic aire sec: m_a Terme esteq. generació gas
Balanç Màssic O_2	Acumulació en gas. Transport convectiu-difusiu Consum lligat esteq. a substrat	Acumulació en fase gasosa. Transport convectiu- difusiu Consum lligat esteq. a vel. reacció	Acumulació al volum control Flux: esquema upwind Consum lligat a consum substrat	--
Balanç Màssic CO_2	--	No es fa Substitueix 1:1 a l'oxigen	--	--
Balanç Màssic NH_3	--	No es fa. Menciona emissions	--	--
Balanç màssic de vapor	No hi ha acumulació en gas Gas sempre saturat	Gas saturat. Transport convectiu- difusiu. BM per det. evaporació	No hi ha acumulació al gas. Gas saturat si $MC > 18\%$	Gas sempre saturat
Balanç Màssic Aigua	Acumulació només en fase líquida. Fluxos convectius i difusius en forma de vapor. Producció per reacció.	Acumulació en fase líquida Producció per reacció Pèrdua per evaporació	Acumulació només en líquid Fluxos d'entrada i sortida en forma de vapor Producció per reacció	Acumulació a fase líquida i vapor Fluxos per arrossegament convectiu
Acumulació d'energia	En massa sòlids i aigua	En la massa de sòlids i aigua i en l'aire humit	En massa sòlids i aigua	En massa sòlids, a l'aigua i al vapor
Generació d'energia	Lligada a consum substrat $\Delta h = 38.9 \text{ MJ/kg substr.}$	Input del model. Funció del temps i la temperatura: $W=W(t,T)$	Lligada a consum substrat $\Delta h = 19,1 \text{ MJ/kg}_s (=13,94 \text{ MJ/kg}_{O_2})$	Lligada al consum substrat
Pèrdues d'energia a l'ambient	Conducció-convec. -radiació Correl. empír. a fronteres	Conducció-convecció. Coeficient global.	Conducció-convecció per paret. Coeficient global	Conducció-convecció per paret Coeficient global
Fluxos d'arrossegament convectiu	Entalpies aire humit sobre cabal volumètric d'aire	Calor específica per l'aire humit	Entalpies aire humit sobre cabal màssic d'aire sec	Entalpies específiques per l'aire sec i el vapor
Fluxos conductius	Llei Fourier. S'estima k	Llei Fourier. S'estima $k=k(T)$	--	Es negligeix respecte al flux convectiu

(MD): Cinètica de Monod. (PO): Cinètica de primer ordre. (CT): Cinètica de Contois. (n.d.): No definit. (--): No es considera

1.2.4 Conclusions sobre l'estat de l'art en la modelització mecanicista del compostatge

L'anàlisi de la literatura sobre la modelització del procés de compostatge ofereix un panorama dispers que es pot sintetitzar en les següents conclusions:

a) *Conclusions sobre la presentació de models*

- En molts models hi ha una manca de claredat en la definició de les variables d'estat utilitzades i en les seves unitats.
- Alguns autors se centren només en els aspectes físics o en els aspectes biològics sense presentar un acoblament dels dos aspectes.
- A vegades es donen dades experimentals de relacions entre variables d'estat sense mencionar o haver mesurat les condicions de contorn o altres variables que poden influir-hi.

b) *Conclusions sobre els models biològics*

- Tot i ser ben sabut que els microorganismes són els actors principals en el compostatge hi ha molts models que els ignoren i consideren el procés com una reacció química.
- La presentació dels processos considerats i els balanços de massa dels components és a vegades poc clara.

c) *Conclusions sobre les balanços de massa i energia en els models de mescla completa*

- Hi ha models que no consideren l'acumulació de massa i energia en la fase gasosa.
- Tot i ser àmpliament acceptat que els processos biològics i químics passen en la fase líquida, molts models no incorporen la transferència líquid-gas.
- El flux gasós és considerat sovint com un cabal volumètric mitjà constant malgrat ser ben sabut que la densitat d'un gas canvia amb la temperatura, pressió i composició.
- En tots els models analitzats les entalpies del flux gasós es basen en valors mitjans de la calor específica de l'aire sec i del vapor, sense tenir en compte que varien amb la temperatura i composició del gas.
- El fet que la diferència de temperatura entre les fases sòlid-líquid i gasosa sigui difícil de mesurar i de valor suposadament baix duu a assumir que és nul·la. Tanmateix és un fet àmpliament acceptat que el corrent d'aire s'enduu calor sensible de la massa i la refreda. Com pot explicar-se una transferència calorífica si les dues fases estan a la mateixa temperatura? Aquest fet ha estat mesurat experimentalment (Van Lier et al., 1994) i mencionat per alguns autors (von Meien and Mitchell, 2002).

d) *Conclusions sobre les balanços de massa i energia en els models espacials*

- Hi ha models que no consideren la transferència d'escalfor conductiva dins la massa.
- La distribució de flux d'aire es considera sovint fix, sense ser influenciada per la temperatura, pressió o composició del gas.
- Els efectes del tiratge natural degut a l'escalfament de l'aire, i que constitueix l'únic mecanisme d'aireig continu en les piles estàtiques regirades i en l'etapa de maduració, només són considerats en un dels models analitzats.

- Els efectes de deformació de la matriu porosa sobre la cinètica i les transferències de massa i energia només és considerat parcialment en un model (van Lier et al., 1994).

Molts dels fenòmens de transport que es mencionen com a omesos (punts *c*) i *d*) poden tenir poca rellevància en models de mescla completa, però en els models 1D i 2D, on el flux que surt d'un volum de control és el que entra al volum de control contigu, petites negligències poden tenir un efecte additiu que deformi la solució numèrica de les equacions governants. De fet això representa una infracció de les quatre regles que segons Patankar (1980) cal respectar per garantir la convergència dels models numèrics.

CAPÍTOL 2

OBJECTIUS DE LA TESI

La falta d'unicitat en la presentació de models de compostatge i les mancances i contradiccions que hi ha en els models publicats fins ara cal entendre-ho com un estadi inicial en el desenvolupament de models del procés de compostatge. Aquest estadi ja ha estat superat en l'àmbit del tractament d'aigües residuals on, tant els sistemes de fangs activats com els de digestió anaeròbia, disposen de models àmpliament acceptats (Batstone et al., 2002; Henze et al., 2000) que unifiquen el llenguatge matemàtic i permeten la introducció de nous fenòmens. La necessitat d'un model d'anàlogues característiques pel procés de compostatge es fa evident en les conclusions de l'apartat 1.2.4. Per tot això es plantegen els següents objectius generals de la present tesi, cadascun d'ells desglossats en objectius particulars.

2.1 Objectius

1. Desenvolupar un model base que inclogui tant els fenòmens biològics com els fenòmens físics que intervenen en el procés de compostatge. El model base estarà format per dos submodels, el corresponent als fenòmens biològics (model biològic) i el corresponent als fenòmens físics (model físic), de manera que tot model biològic, estructurat en la forma adient, hi pugui ser acoblat. Així el model ha de servir com a *benchmark* per comparar la bondat predictiva dels diferents models biològics publicats.

1.1 Desenvolupar una sistemàtica general de presentació del model biològic, basada en el principi de conservació de la massa dels seus components, que permeti la representació simple dels diferents processos i cinètiques de reacció.

1.2 Desenvolupar les equacions del model base per a un sistema de compostatge de mescla completa que inclogui els fenòmens de transferència de massa i energia entre les fases i amb l'entorn.

1.3 Posar a punt una estratègia numèrica de resolució de les equacions que governen el model base.

1.4 Utilitzant models biològics diferents, visualitzar els resultats de les simulacions i fer una anàlisi de la sensibilitat d'aquests resultats enfront la variació del valor dels paràmetres del model físic.

2. Desenvolupar en detall la modelització dels fenòmens físics en un geometria 1D, prioritzant la capacitat explicativa en base a les lleis bàsiques dels fenòmens de

transferència enfront la simplicitat del model. El desenvolupament del model biològic en sí no és objectiu de la present tesi, només ho és la definició de l'estructura que ha de tenir per acoblar-lo al model físic. Les simulacions es faran utilitzant models biològics ja publicats estructurats en la forma adient.

2.1 Desenvolupar les equacions teòriques que governarien un sistema de compostatge distribuït en un espai 1D.

2.2 Desenvolupar una metodologia per la resolució numèrica del model 1D i implementar-la informàticament.

2.3 Visualització dels resultats de les simulacions. Efectes predits pel model i anàlisi de sensibilitat respecte als paràmetres del model físic.

3. Dissenyar, construir i operar un muntatge experimental per poder mesurar en continu l'evolució de variables del procés. Entre aquestes hi haurà: la distribució de temperatures als reactors, la concentració d'oxigen i CO₂ als gasos de sortida, la massa total i el cabal d'aireig.

3.1 Disseny de reactors verticals de compostatge amb aireig forçat i dels corresponents sistemes de mesura i enregistrament de dades.

3.2 Realització d'experiments i enregistrament de dades.

3.3 Determinació experimental de paràmetres dels reactors i comprovació d'hipòtesis del model.

4. Contrastar les prediccions fetes pel model amb les dades experimentals i detectar els aspectes a millorar del model.

4.1 Contrast de les dades d'evolució de temperatures a diferents punts dels reactors amb els resultats de simulació.

4.2 Contrast de les dades d'evolució de les concentracions d'oxigen i CO₂ en el gas de sortida dels reactors amb els resultats de simulació.

4.3 Contrast de les corbes d'evolució del quocient respiromètric obtingudes a partir de les dades experimentals amb les corbes simulades.

4.4 Contrast de l'evolució de la massa total dels reactors amb els resultats de simulació.

4.5 Contrast de les distribucions d'humitat mesurades a inici i a final de procés amb les prediccions del model.

4.6 Contrast de l'evolució de la sobrepressió requerida al plenum inferior amb les prediccions del model.

CAPÍTOL 3

MODEL BASE DE BALANÇ DE MASSA I ENERGIA

3.1 Introducció

La tasca de modelitzar el procés de compostatge implica la transcripció en equacions dels fenòmens de diferent naturalesa que hi intervenen. A grans trets tots aquests fenòmens s'enquadren en dues categories: els biològics i els físicoquímics. El present treball se centra en l'anàlisi dels fenòmens físico-químics i deixa els fenòmens biològics en un segon pla, adaptant un model biològic desenvolupat per altres autors.

La modelització d'un fenomen complex comença típicament amb l'anàlisi de situacions simples a les que s'hi van afegint nivells de detall fins arribar a obtenir el model desitjat. Amb aquesta idea el compostatge s'analitza en el present treball amb dos nivells de complexitat creixent. En un primer nivell, que és l'objecte del present capítol, s'analitza el compostatge com a fenomen local, limitat a un volum de control de dimensions reduïdes on les variables no varien en l'espai. Això equival a un model de reactor de mescla completa i les equacions que descriuen la transferència de massa i energia en aquestes condicions es desenvolupen en el present capítol i constitueixen el que es designa com a model base de balanç de massa i energia (BME) o simplement model físic. Al capítol 4 es desenvolupen les equacions que descriuen la variació de les variables en l'espai, el que es denomina model 1-D.

En el desenvolupament del model base de BME es comença descrivint l'estructura física assumida de la massa en compostatge, que inclou les fases sòlida, líquida i gasosa així com els fluxos de transferència entre elles. S'estableixen els criteris generals que ha de verificar un model i es defineix una estructura que permet acoblar els fenòmens físics i biològics i que permet utilitzar qualsevol model biològic amb el model físic desenvolupat. Es defineixen les variables d'estat del sistema i s'utilitzen correlacions empíriques donades per diferents autors per lligar les constants d'equilibris químics i de Henry amb la temperatura de la fase líquida. Es desenvolupen les equacions de transferència de massa i energia que, juntament amb les cinètiques de reacció del model biològic, permeten definir un sistema d'equacions diferencials ordinàries que governen l'evolució del sistema a partir d'un estat inicial definit.

Per demostrar la versatilitat del model de BME es presenten resultats de simulacions acoblant el model físic a dos models biològics diferents. L'un fou desenvolupat per J. Kaiser (1996) i contempla quatre poblacions de microorganismes i quatre categories de

substrat. L'altre, desenvolupat per Solé-Mauri (2006), considera tres poblacions de microorganismes i sis categories de substrat i a més a més contempla la hidròlisi dels substrats particulars i la dinàmica del nitrogen.

Per últim es presenta una anàlisi de sensibilitat per separat amb cadascun d'aquests dos models biològics a fi de visualitzar els efectes sobre l'evolució del sistema de modificacions en el valor dels paràmetres del model físic. En tots dos casos els paràmetres que més poden alterar l'evolució del sistema són el cabal d'aire insuflat al reactor i el seu nivell d'aïllament tèrmic.

La contrastació detallada de resultats experimentals amb les simulacions és complicada degut a l'elevat nombre de paràmetres dels models físic i biològic i a la dificultat de determinar-los per separat. En tot cas es remet al lector interessat a dos treballs ja publicats (Solé-Mauri et al., 2007; Solé-Mauri, 2006) en els que s'utilitzà el model físic descrit en el present capítol i dades experimentals obtingudes en un reactor de mescla completa amb agitació mecànica.

3.2 Consideracions generals sobre la modelització del procés de compostatge

El compostatge té un seguit de peculiaritats que fan la seva modelització més complexa que la d'altres processos biològics de tractament de residus. Aquesta complexitat és segurament la causa de l'escassetat de models publicats i del fet que molts d'ells siguin semi empírics i el seu ús quedi restringit al tipus de residu i condicions d'operació per les que s'han desenvolupat. L'objectiu principal de present treball és desenvolupar un model que permeti explicar els trets característics del procés de compostatge a partir de les lleis bàsiques que regeixen els processos de transferència de massa i energia.

3.2.1 Descripció del sistema físic de compostatge

3.2.1.1 Les tres fases en una matriu porosa

Una de les dificultats que sorgeix en la modelització del procés de compostatge és la complexitat en l'estructura física del material. A diferència dels sistemes constituïts per una sola fase líquida, tals com els processos de tractament d'aigües residuals, ja siguin aerobis o anaerobis, el compostatge es desenvolupa en un medi constituït per les tres fases, sòlida, líquida i gasosa. Aquest és una matriu porosa deformable amb capacitat de retenció d'humitat, que permet el pas de l'aire i al si de la qual s'hi desenvolupen processos físics, químics i biològics. La matriu porosa pot deformar-se, ja sigui per l'aplicació d'una càrrega compressiva com el pes del propi material, o bé per l'afebliment de la seva estructura degut a la biodegradació progressiva dels seus constituents (veure Fig. 3.1). És àmpliament acceptat que la fase sòlida i la líquida són incompressibles i que la compressibilitat del material és deguda a la reducció del volum ocupat per la fase gasosa (McCartney and Chen, 2001; Schaub-Szabo and Leonard, 1999).

La fase líquida, aigua amb components en solució, impregna la matriu sòlida i pot moure's tant degut a gradients de pressió, de potencial matriu o de concentració de soluts. Els lixiviats observables en moltes piles de compostatge són el resultat directe d'aquest moviment.

La fase gasosa també pot moure's dins la matriu porosa. En els sistemes de compostatge d'aireig forçat el moviment és provocat per un gradient artificial de pressió, mentre que en les piles estàtiques el moviment s'origina per gradients hidrostàtics de pressió causats per la diferència de densitats de la fase gasosa que es troba localment a diferents temperatures.

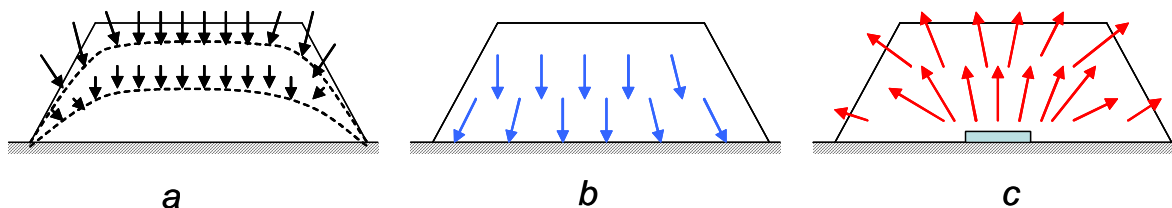


Figura 3.1 Els camps de velocitat simultanis que defineixen els moviments de les fases sòlida, líquida i gasosa en una pila de compostatge. a) deformació de la matriu sòlida, b) moviment dels líquids, c) flux gasós a través de la matriu porosa.

3.2.1.2 La transferència de massa i energia entre les fases

A part dels tres moviments bàsics representats en la Fig. 3.1, deformació de la massa, moviment de líquids i flux gasós, hi ha altres mecanismes de transport, tals com la difusió de components gasosos dins la fase gasosa (essencialment O_2 , CO_2 i NH_3) o bé el transport convectiu-difusiu d'aigua en forma de vapor que condensa a l'arribar a zones més fredes i que és la causa del major contingut d'humitat observable en les capes superiors dels reactors de laboratori o bé en els costats obacs de piles de compostatge estàtiques.

Entre les fases líquida i gasosa hi ha la transferència de components volàtils en dissolució. L'oxigen es transfereix de la fase gasosa a la líquida on és consumit pels microorganismes, mentre que el diòxid de carboni i l'amoníac, produïts en la fase líquida, són transferits cap a la gasosa i arrossegats fora del medi. Les velocitats de transferència líquid-gas venen determinades per la diferència de concentracions en l'equilibri de les dues fases i són influenciades per la temperatura i el pH. A més a més, l'aigua també es transfereix entre les fases líquida i gasosa per evaporació o condensació, procés que comporta una important absorció d'energia calorífica (evaporació) i que és un dels principals termes del balanç energètic.

La transferència de massa entre la fase sòlida i la líquida és deguda principalment a la hidròlisi dels constituents de la matriu sòlida sota l'acció d'enzims secretats pels microorganismes, mentre que la transferència directa sòlid-gas cal contemplar-la dins els processos d'adsorció de components volàtils.

Els processos biològics de degradació aeròbia de la matèria orgànica són exotèrmics i l'energia alliberada provoca l'escalfament de la massa. La generació d'energia tèrmica es produeix dins les fases sòlida i líquida d'on es dissipa per conducció a través de la massa cap a les fronteres del sistema o bé es transfereix per convecció cap a la fase gasosa, ja sigui en forma de calor sensible o latent, d'on és arrossegada cap a l'exterior o cap a zones més fredes del medi. L'aireig de la matriu porosa permet tant l'aportació de l'oxigen necessari pels microorganismes i l'evacuació del CO_2 i NH_3 produïts, com l'arrossegament de calor que altrament provocaria l'escalfament excessiu de la massa i la inhibició de l'activitat microbiana.

3.2.1.3 Aspectes biològics

S'admet que els microorganismes, actors principals en el compostatge, es troben en la fase aquosa, ja individualment o agregats, o bé formant un biofilm adherit sobre la fase sòlida. Per créixer necessiten una font de carboni (matèria orgànica), oxigen i nutrients, tals com nitrogen, fòsfor i altres en menor quantia, i unes condicions adequades de temperatura, humitat i pH. Hi ha diferents poblacions de microorganismes (bacteris, actinomicets, fongs, etc.), cadascuna adaptada a unes condicions específiques i capaç de desenvolupar-se sobre una determinada classe de substrat. Els microorganismes competeixen entre ells pels substrats disponibles en cada instant.

L'evolució de les condicions ambientals fa que en cada estadi hi predominin certes poblacions, establint-se una seqüència poblacional durant el procés de compostatge. Al principi sol haver-hi un desenvolupament de les poblacions bacterianes que creixen ràpidament sobre sucres i altres substrats fàcilment biodegradables, mentre que les poblacions de fongs, de creixement més lent però amb capacitat de degradar les hemicel·luloses i cel·luloses, es desenvolupen en estadis posteriors quan ja s'han exhaurit els substrats làbils. La taxa de creixement d'una població es relaciona sovint amb la disponibilitat de substrat mitjançant cinètiques de Monod.

3.2.2 Bases per al desenvolupament d'un model del procés de compostatge

El desenvolupament d'un model que descriu adequadament el comportament d'un sistema és una tasca complexa. Tot model conté un conjunt de paràmetres als que cal assignar un valor, i sovint poden haver-hi diferents conjunts de valors per aquests paràmetres que produeixin ajusts similars del model. En models que inclouen processos biològics és difícil aconseguir ajustos tan bons com en models on només hi intervenen processos físico-químics degut a la multitud de paràmetres que no es corresponen a constants físiques determinables amb experiments simples. La tasca d'ajustar un model a unes dades experimentals sovint comporta la introducció de modificacions al model. Tanmateix hi ha alguns requisits generals que per coherència sempre ha de verificar un model. Evidentment, tot model ha de verificar els principis de conservació de la massa i l'energia en qualsevol part del sistema. Alhora, tot model ha de seguir uns criteris uniformes en la presentació de les equacions que el governen i això s'ha de fer de la manera més simple possible.

3.2.2.1 Requisits generals exigibles a un model

-Requisit 1. La cinètica del model s'ha de basar en les propietats intensives del sistema. Consideris un reactor elemental com el de la Fig. 3.2 on una massa M de substrat sotmesa a un corrent d'aireig forçat m_a es degrada aeròbiament consumint O_2 i produint CO_2 i calor. És evident que si es divideix el sistema en dos subsistemes iguals amb un pla adiabàtic A-B, cadascun dels dos subsistemes resultants, amb la meitat de la massa inicial ($M/2$), la meitat del cabal insuflat i la meitat de la superfície de dissipació d'escalfor, tindrà la mateixa evolució de les propietats intensives (temperatura, concentracions, fraccions màssiques) que el sistema sencer. Ara bé, això només passarà si les relacions cinètiques estan basades en propietats intensives.

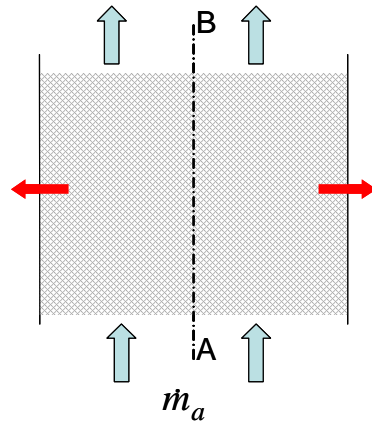


Figura 3.2. Partició d'un sistema en dos subsistemes iguals per un pla adiabàtic A-B. L'evolució de les propietats intensives de cada subsistema no s'altera.

En efecte, suposis que la velocitat específica d'una certa reacció $r_{O_2}[\text{kg}_{O_2} \cdot \text{h}^{-1} \cdot \text{kg}_{\text{TM}}^{-1}]$ ve donada per l'expressió (3.1),

$$r_{O_2} = k \left(\frac{m_i}{M} \right)^n, \quad (3.1)$$

on k i n són constants cinètiques, m_i és la massa d'un determinat component i M la massa total del sistema. La velocitat específica de reacció es manté constant encara que s'apliqui per separat als dos subsistemes. Això no passaria si s'hagués utilitzat una cinètica basada en propietats extensives, tals com la massa del component m_i ,

$$r_{O_2} = km_i^n.$$

-Requisit 2. La cinètica del model no pot estar basada en concentracions dels components en l'espai.

Els substrats utilitzats per compostatge tenen una estructura porosa i són fàcilment compressibles als sotmetre'ls a una càrrega. Consideris dos reactors de compostatge idèntics (Fig. 3.3), omplerts amb la mateixa massa de substrat i airejats amb cabals iguals, la massa d'un d'ells ocupa el volum V_1 , mentre que l'altre, sotmès a una càrrega compressiva, només ocupa el volum V_2 ($V_2 < V_1$). Si la cinètica de reacció d'un determinat component i fos funció de la seva concentració espacial, $r_i = f(C_i)$, essent $C_i = m_i / V$, els dos reactors de la Fig. 3.3 tindrien diferents velocitats de reacció, ja que $C_{i1} < C_{i2}$.

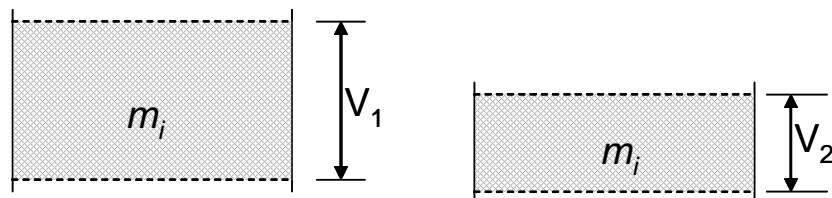


Figura 3.3. La cinètica de degradació no està directament afectada per l'estat de compressió de la matriu porosa.

Estudis de l'activitat biodegradativa en el compostatge de diferents residus sotmesos a càrregues compressives creixents no mostraren diferències significatives en l'evolució de la temperatura, consum d'oxigen i producció de CO_2 , (Gea and Richard, 2008), fet explicable si es té present que els processos degradadors es produeixen en les fases

sòlida i líquida que són pràcticament incompressibles. Evidentment, la compressió de la matriu porosa comporta canvis en la seva porositat i permeabilitat i poden afectar a la disponibilitat d'oxigen pel procés. Experimentalment s'ha observat un lleuger alentiment de l'activitat biològica en mostres sotmeses a compressió, fet atribuïble a la major dificultat en l'accés a l'oxigen per part dels microorganismes (Malinska and Richard, 2006). Per tant, els efectes que la deformació de la matriu pugui causar sobre l'evolució del procés caldrà modelitzar-los a partir dels canvis induïts en les propietats de transport de la matriu porosa.

3.2.2.2 *La integració dels processos físics i biològics*

Es consideren com a fenòmens biològics (model biològic) tots els referents al creixement i mort microbiana, consum de substrat, producció de substrat fàcilment assimilable per hidròlisi de substrats més recalcitrants, descomposició de la biomassa morta, consum d'oxigen pels microorganismes i la producció de CO₂, NH₃ i calor. Per fenòmens químics s'entenen els relacionats amb els equilibris iònics en la fase aquosa que determinen el pH de la solució i la fracció de components que estan en forma volàtil. Per fenòmens físics s'entenen tots aquells referents al transport de components i energia entre les fases del sistema o bé a través de les seves fronteres (model físic).

En el procés de compostatge els processos químico-biològics i físics estan acoblats per dos aspectes:

- El flux d'energia calorífica que és generada en els processos químico-biològics i que es dissipa mitjançant els mecanismes de conducció i convecció descrits en el model físic.

- Els fluxos d'oxigen, de diòxid de carboni i d'amoniac originats per l'activitat biològica i que venen governats pels mecanismes de transport descrits en el model físic.

La substitució d'aquests nexes d'unió per unes accions equivalents permet l'estudi per separat de les dues tipologies de processos. En la literatura hi ha models amb diferents nivells de complexitat que se centren en descriure els processos químico-biològics mentre que altres se centren en la transferència de massa i energia. Una representació sistemàtica conjunta dels processos ha de permetre l'acoblament de diferents models biològics amb un sol model físic.

La transferència de massa entre els components del sistema provocada pels processos químico-biològics i físics es descriu amb la matriu de Petersen (ZMAT) (Henze et al., 2000), l'estructura de la qual es representa a la Fig. 3.4. Diferents models publicats poden representar-se amb aquesta estructura comú, (Kaiser, 1996).

Cada columna representa una variable d'estat massica, les primeres corresponen a substrats particulars, seguides pels components de la biomassa, components solubles i aigua. Les darreres columnes corresponen als components de la fase gasosa. Cada fila representa un procés amb una velocitat específica de reacció (ρ_i) continguda a la corresponent posició del vector P , (Fig. 3.4). A les primeres files s'hi col·loquen tots els processos bioquímics i biològics i a les darreres els de transferència líquid-gas. D'aquesta manera sempre hi haurà dues submatrius de zeros: la corresponent a la intersecció de les files de processos biològics amb les columnes de components de la fase gasosa i la formada en la intersecció de les files dels processos de transferència

líquid-gas amb les columnes dels components no volàtils. També hi ha dues submatrius diagonals i una única columna de zeros corresponent al nitrogen gas que s'admet no intervé en cap reacció però sí en els balanços de massa i energia de la fase gasosa. L'element v_{ij} de la matriu és un coeficient estequiomètric tal que al multiplicar-lo per la velocitat de reacció del procés i s'obté la velocitat específica de generació de component j en el procés i , $r_{ij}=v_{ij}\rho_i$. Evidentment, la velocitat específica de reacció d'un component j que intervingui en diferents processos serà $r_j = \sum_i v_{ij}\rho_j$.

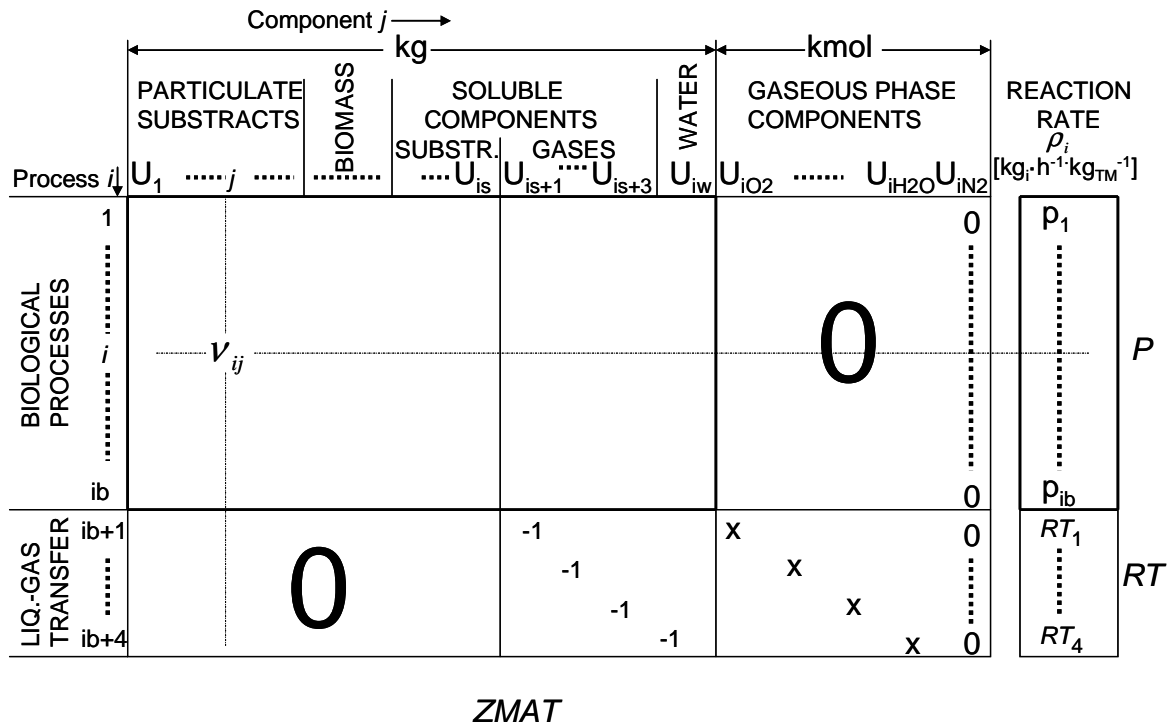


Figura 3.4. Estructura que pren la matriu de coeficients estequiomètrics (ZMAT), el vector de velocitats de reacció (P) i el vector de velocitats de transferència líquid-gas (RT) emprats en la modelització del procés de compostatge.

A efectes pràctics de càlcul, s'aprofita l'estructura particular de la matriu de coeficients estequiomètrics ZMAT i s'opera per un costat amb la submatriu de processos biològics $ZMAB = ZMAT(1:ib, 1:iw)$ i el corresponent vector columna de velocitats específiques de reacció $P(1:ib)$ i per l'altra amb el subvector corresponent a les cinètiques específiques de transferència líquid-gas $RT(1:5)$. D'aquesta manera la matriu ZMAB i el vector P només depenen de les constants cinètiques i dels coeficients estequiomètrics del model biològic emprat, el que permet acoblar diferents models biològics al model físic desenvolupat. Els coeficients estequiomètrics designats amb 'x' a la submatriu diagonal inferior (Fig. 3.4) corresponen al canvi d'unitats màssiques a molars. Tots els coeficients estequiomètrics i les cinètiques corresponents als processos de transferència de massa líquid-gas formen part del model físic i són independents del model biològic utilitzat.

En un volum de control (VC) que es pugui considerar de mescla completa hi haurà només entrades i sortides de components gasosos arrossegats pel cabal d'aireig (Fig. 3.5). Les equacions de conservació de massa per cadascun dels components màssics representat per una variable d'estat (U_i) poden representar-se en la forma vectorial de l'equació (3.2),

$$\begin{array}{c}
 \text{F} \qquad \qquad \text{EN} \qquad \qquad \text{EX} \qquad \qquad \text{RX} \\
 \begin{array}{|c|} \hline \frac{dU_1}{dt} \\ \vdots \\ \frac{dU_{is}}{dt} \\ \frac{dU_{is+1}}{dt} \\ \vdots \\ \frac{dU_{is+3}}{dt} \\ \frac{dU_{iw}}{dt} \\ \frac{dU_{iw+1}}{dt} \\ \vdots \\ \frac{dU_{iw+5}}{dt} \\ \hline \end{array}
 \end{array}
 =
 \begin{array}{c}
 \begin{array}{|c|} \hline 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \text{EN}_{iw+1} \\ \vdots \\ \text{EN}_{iw+5} \\ \hline \end{array}
 -
 \begin{array}{c}
 \begin{array}{|c|} \hline 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \text{EX}_{iw+1} \\ \vdots \\ \text{EX}_{iw+5} \\ \hline \end{array}
 +
 \begin{array}{c}
 \begin{array}{|c|} \hline \text{RXB}_1 \\ \vdots \\ \text{RXB}_{iw} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \hline \end{array}
 +
 \begin{array}{|c|} \hline 0 \\ \vdots \\ 0 \\ -\overline{\text{RG}}_1 \\ \vdots \\ -\overline{\text{RG}}_4 \\ \overline{\text{RG}}_1 \\ \vdots \\ \overline{\text{RG}}_4 \\ 0 \\ \hline \end{array}
 \end{array}
 \quad (3.2)$$

essent:

F [kg/h ò kmol/h]: Vector que conté les derivades temporals de totes les variables d'estat màssiques.

EN, EX [kmol/h]: Vectors de fluxos màssics d'entrada i sortida dels components. Tots els components del model biològic (índexs 1 a i_w) són nuls quan no es considera la deformació de la matriu porosa ni el moviment de lixiviat.

RX [kg/h]: Vector de termes de reacció. S'obté de la suma de dos vectors, el primer conté els termes de reacció biològica en les posicions 1 a i_w (subvector $RXB_{i_w \times 1}$) i les posicions corresponents als components de la fase gasosa són zeros degut a que no s'hi considera cap tipus de reacció. El subvector de termes de reacció biològica s'obté a partir del producte matricial $RXB_{i_w \times 1} = ZMAB'_{i_w \times i_b} * P_{i_b \times 1} * TM_{1 \times 1}$, on P [kg·h⁻¹·kgTM⁻¹] és el vector de velocitats de reacció dels processos biològics (Fig. 3.4) i TM [kg] és la massa total instantània del sistema, $TM = \sum_{j=1}^{i_w} U_j$. El segon vector té tots els components nuls excepte els corresponents als components volàtils en solució (índexs $is+1$ a i_w) i en fase gasosa (índexs i_w+1 a i_w+4). El darrer component (índex i_w+5 , que correspon al nitrogen gas) és nul degut a que no es considera la transferència líquid gas del nitrogen.

RG [kg/h]: Vector de velocitats de transferència líquid-gas dels components volàtils. En la seva determinació només hi intervenen paràmetres del model físic. S'obté del producte del vector de velocitats específiques de transferència líquid gas (RT) amb la massa total del sistema (TM), $RG_{4 \times 1} = RT_{4 \times 1} * TM_{1 \times 1}$.

\overline{RG} [kmol/h]: Vector de velocitats de transferència líquid-gas dels components volàtils en unitats molars. S'obté al dividir cadascun dels termes del vector RG pel seu pes molecular.

El conjunt d'equacions diferencials ordinàries (eq.3.2) corresponents als balanços de massa, juntament amb les equacions de balanç d'energia i unes condicions inicials determinades, governen l'evolució dels sistema.

3.3 Desenvolupament del model base de BME

A diferència dels processos que es desenvolupen només en fase líquida una massa de material en compostatge és una matriu orgànica porosa tridimensional operant sota condicions de no uniformitat. El model BME descriu els processos físics en un volum de control d'extensió V , ocupat per un medi homogeni que conté les tres fases, dues de les quals, la sòlida i la líquida, es consideren sense moviment, i la gasosa que ocupa un volum V_g constant i es manté a la pressió fixa P . En un reactor de compostatge de mescla completa el volum de control pot assimilar-se a tot el reactor, mentre que un reactor vertical de laboratori d'aireig forçat pot assimilar-se a un conjunt de VC connectats en sèrie, suficientment petits com per què cadascun d'ells es pugui considerar homogeni, de manera que el flux gasós que surt d'un és el que entra al següent. Evidentment, el model BME necessita estar acoblat a un model biològic. L'acoblament es fa posant tots els processos en la forma descrita per la Fig. 3.4 i l'equació 3.2.

3.3.1 Descripció general del sistema modelitzat

L'estructura bàsica d'un volum de control (VC) que conté les tres fases i representa el sistema físic on es produeixen tots els processos s'esquematitza a la Fig. 3.5. El material en compostatge es considera una barreja homogènia de partícules sòlides rígides prou petites com per poder negligir gradients de concentració i temperatura al seu interior. L'aigua s'admet que impregna i recobreix parcialment les superfícies sòlides, de manera que l'augment o disminució de la humitat del material no modifica substancialment el volum V_g de la fase gasosa. Aquesta ocupa l'espai lliure entre les partícules i és considerada una mescla homogènia de gasos i vapor d'aigua.

Un volum de control amb aquestes característiques es pot utilitzar com a unitat bàsica d'un sistema més extens en l'espai (models 1, 2 i 3D) o bé es pot utilitzar directament en la modelització d'un reactor de mescla completa. En un cas el corrent gasós d'entrada seria el de sortida del VC precedent, en l'altre seria el cabal d'aire d'entrada al reactor.

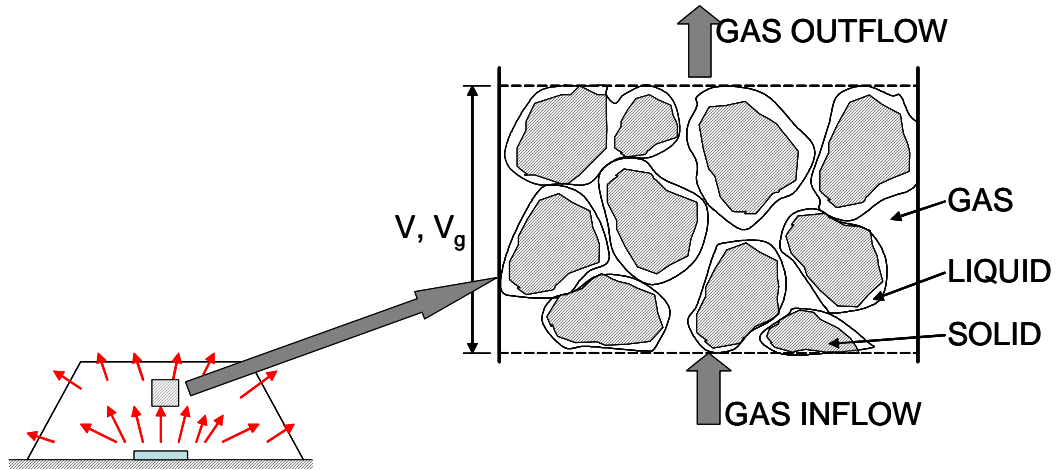


Figura 3.5. Estructura de les tres fases considerades en un volum de control arbitrari representatiu d'una massa en compostatge. La fase gasosa ocupa el volum V_g i tot el volum de control ocupa V . La porositat del medi ocupada per la fase gasosa és $\varepsilon_a = V_g/V$.

3.3.2 Processos físics considerats. Hipòtesis bàsiques del model BME

Els processos físics considerats (Fig. 3.6), així com les hipòtesis assumides en el desenvolupament de les equacions que regeixen el model de BME, per a una massa en compostatge continguda en un volum de control d'extensió V , són les següents:

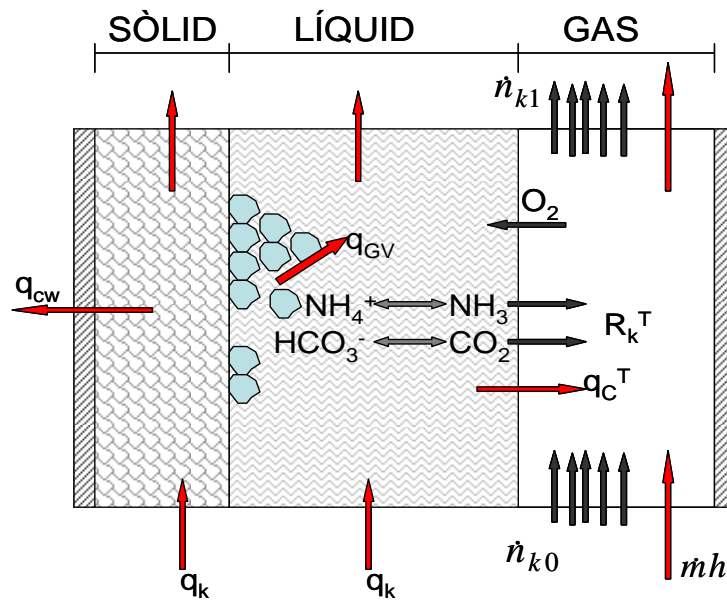


Figura 3.6 Les tres fases en una unitat de volum elemental d'un material en compostatge. Les transferències de massa se situen a la interfície líquid-gas (R_k^T) i a la fase gasosa (n_{k0} , n_{k1}). Els termes de transferència d'energia: generació pels microorganismes (q_{GV}), dissipació per la paret del reactor (q_{cw}), dissipació conductiva (q_k), dissipació convectiva (q_c^T) i arrossegament convectiu (mh). Les fletxes indiquen els sentits predominants dels fluxos.

- 1.- En el volum V la fase sòlida té estructura granular i està constituïda pels diferents components considerats en el model biològic, cadascun d'ells presents amb la massa m_i .
- 2.- L'aigua es troba adherida sobre la superfície sòlida. Aquesta hipòtesi es fa necessària per evitar entrar en el detall de la difusió intraparticular, tanmateix és ben conegut que l'aigua pot impregnar les partícules sòlides.
- 3.- La fase gasosa ocupa el volum V_g constant i està formada per una mescla homogènia d'oxigen, diòxid de carboni, amoníac, vapor d'aigua i nitrogen, tots considerats com a gasos perfectes a una pressió i temperatura uniformes (Bach et al., 1987). En realitat el volum de la fase gasosa pot variar en el temps degut a la variació de la massa d'aigua, a la compactació del material o a la progressiva desaparició de la matriu sòlida per biodegradació.
- 4.- En la situació més general, que es descriu al desenvolupar el model 1-D, el flux del corrent gasós a través del sistema té pèrdues de càrrega i la pressió varia temporalment. En el model base de BME es negligeixen les pèrdues de càrrega i s'admet que la pressió en la fase gasosa es manté constant en el temps i és igual a la pressió atmosfèrica (P).
- 5.- El flux gasós que entra al sistema té una composició molar coneguda i en surt amb la mateixa composició que té en l'espai porós que ocupa (V_g).
- 6.- Hi ha una transferència líquid-gas de O_2 , CO_2 i NH_3 provocada per la diferència entre les pressions parcials de saturació i de la fase gasosa. El diòxid de carboni és produït en la respiració dels microorganismes i l'amoníac en la degradació de les proteïnes. L'oxigen, consumit pels microorganismes aerobis, tindrà principalment un flux de gas a líquid, negatiu amb el criteri adoptat (Fig. 3.7). No es considera la transferència líquid-gas del nitrogen.
- 7.- El diòxid de carboni i l'amoníac en solució estan en equilibri amb les seves formes iòniques no volàtils. Aquests equilibris són influenciats per la temperatura i el pH, que és un paràmetre del model.
- 8.- L'aigua pot evaporar-se i passar a la fase gasosa d'on pot condensar. El flux d'aigua que s'evapora (condensa) ve governat per la diferència entre la pressió de saturació i la parcial en la fase gasosa. A diferència d'altres models clàssics (Kaiser, 1996) aquest mecanisme permet contemplar estats de l'aire no saturats d'humitat.
- 9.- L'activitat microbiana en les fases sòlid-líquid genera un flux d'escalfor (q_G). En primera aproximació s'assumeix que la producció d'escalfor és proporcional a l'oxigen consumit en cada procés biològic (Haug, 1993).
- 10.- Hi ha una dissipació d'escalfor per conducció a través de les parets del volum de control (q_{cw}) provocada per la diferència entre la temperatura de la fase sòlid-líquid i la de l'ambient exterior.
- 11.- La fase sòlid-líquid i la fase gasosa es troben a les temperatures uniformes T i ϑ respectivament. Els models de compostatge dels que es té referència assumeixen la mateixa temperatura per les tres fases. Tanmateix models de transferència d'escalfor en medis granulars d'ús en enginyeria sí que contemplen aquesta diferència de temperatures (Hausen, 1964). Sense aquesta hipòtesi no es podria explicar l'escalfament

gradual del corrent gasós al circular a través del medi ni la seva capacitat d'arrossegament d'aigua en forma de vapor.

12.- Hi ha un flux d'escalfor convectiu (q_c^T) entre les fases sòlid-líquid i la fase gasosa causat per la seva diferència de temperatures.

3.3.3 Variables d'estat

3.3.3.1. Consideracions generals respecte a les variables d'estat

En els models mecanicistes l'estat d'un sistema en un instant queda plenament definit pels valors que prenen les seves variables d'estat. Aquestes són independents entre elles i han de representar una magnitud característica del sistema. Les variables d'estat poden ser mesurables amb facilitat (temperatura), es pot haver de recórrer a tècniques més o menys complexes d'anàlisi (sensors de gasos) o que duguin a una destrucció de la mostra (humitat, sòlids volàtils, DQO) o poden ser senzillament no mesurables (concentració de gasos dissolts en la fase líquida, concentració de microorganismes). En els models de tractament d'aigües residuals (sèries ASM, ADM) (Batstone et al., 2002; Henze et al., 2000), on tot el procés passa en un medi líquid que és homogeni i incompressible, les variables d'estat utilitzades són concentracions referides a la unitat de volum de líquid.

En el compostatge la situació és més complexa. Tot el procés passa en la matriu sòlida que té el volum porós parcialment ple d'aigua, i els processos químics i biològics s'admet que transcorren en la fase líquida. Les expressions cinètiques han d'anar referides a concentracions en la fase líquida (C_i), definides de manera general com a $C_i = m_i/m_w$, on m_i representa la massa d'un component i m_w la massa d'aigua. Tanmateix l'elecció de la concentració C_i com a variable d'estat no és possible ja que al ser la massa d'aigua variable (pot evaporar-se, o el vapor condensar) no manté una relació biunívoca amb la massa m_i de component (un increment de C_i tant pot ser degut a un increment de la massa del component com a la pèrdua d'aigua). És per aquesta raó i pel fet que les equacions bàsiques de balanç són en termes de massa que la majoria de models de compostatge (veure quadres Capítol 1) prenen com a variables d'estat directament a la massa dels components (m_i) que hi ha dins el volum de control adoptat i en les expressions cinètiques s'utilitza la fracció màssica $X_i = m_i/M$, on M és la massa total del sistema.

En aquest context la velocitat específica de reacció r_i [$\text{kg}_i \cdot \text{h}^{-1} \cdot \text{kg}_M^{-1}$] d'un component es pot interpretar de les dues maneres següents (equacions 3.3 i 3.3bis):

$$r_i = \frac{1}{M} \frac{dm_i}{dt} \quad (3.3) \qquad r_i = \frac{d}{dt} X_i = \frac{d}{dt} \left(\frac{m_i}{M} \right). \quad (3.3\text{bis})$$

La velocitat total de reacció té una sola interpretació, $R_i = dm_i/dt$ [kg_i/h], però la relació que guarda amb la velocitat específica de reacció r_i és diferent segons s'interpreti amb l'equació 3.3 o amb la 3.3bis. En efecte,

$$R_i = \frac{dm_i}{dt} = M \cdot r_i \quad (3.4) \qquad R_i = \frac{dm_i}{dt} = \frac{d}{dt} (M \cdot X_i) = M \frac{dX_i}{dt} + X_i \frac{dM}{dt}. \quad (3.4\text{bis})$$

En aquells sistemes on la massa total es manté constant ($dM/dt=0$) les dues interpretacions (3.3) i (3.3bis) coincideixen. Aquest és el cas dels sistemes de reacció biològics en fase líquida on la concentració X_i d'un component es refereix a la unitat de

volum del sistema i que s'admet no sofreix alteracions apreciables (la densitat del medi s'assimila a la de l'aigua). En el present treball s'utilitzarà la interpretació donada per les equacions 3.3 i 3.4 ja que és la més simple i no duu a cap contradicció amb les expressions donades pels autors dels treballs analitzats (veure Capítol 1).

3.3.3.2 Variables d'estat del model base

Les variables d'estat que utilitza el model base són la massa de cadascun dels components del sistema continguts dins d'un volum de control d'extensió V i les temperatures de les fases sòlid-líquid i de la fase gasosa (Taula 3.1).

Taula 3.1 Les variables d'estat del model base. La naturalesa i nombre dels components màssics depèn del model biològic adoptat. Els índexs creixents ix , is , iw i it defineixen el nombre de variables a cada categoria.

Símbol	Unitats	Descripció	Índexs
m_i	kg	Components sòlids del sistema, incloent-hi microorganismes i substrats	$1, \dots, ix$
m_i	kg	Components solubles i no volàtils en solució	$ix+1, \dots, is$
m_j	kg	Components solubles i volàtils en solució ($j=O_2, CO_2, NH_3$)	$is+1, \dots, is+3$
m_w	kg	Massa d'aigua del sistema	iw
n_k	kmol	Massa molar dels components de la fase gasosa ($k=O_2, CO_2, NH_3, H_2O_g, N_2$)	$iw+1, \dots, iw+5$
ϑ	K	Temperatura de la fase gasosa	it
T	K	Temperatura de les fases sòlida i líquida	$it+1$

3.3.4 La transferència líquid-gas

En el present model es considera la transferència dels gasos O_2 , CO_2 , NH_3 i l'evaporació de l'aigua entre les fase líquida i gasosa. En tots els cassos el flux màssic de transferència (r_k^T [$kg_k \cdot h^{-1} \cdot kg_{TM}^{-1}$]) es considera positiu si va de la fase líquida a la gasosa. Aquest serà el sentit predominant dels fluxos de CO_2 i amoníac. L'oxigen, consumit en la respiració dels microorganismes en la fase líquida, prendrà habitualment el sentit contrari.

3.3.4.1 Transferència líquid-gas dels gasos solubles.

Per cadascun dels gasos considerats ($k=O_2, CO_2$ i NH_3) s'admet que el flux màssic específic de transferència líquid-gas, r_k^T [$kg_k \cdot h^{-1} \cdot kg_{TM}^{-1}$], és proporcional a la diferència entre la pressió parcial en fase gasosa, que exerciria el gas si estigués en equilibri amb la concentració present en la fase líquida, i la pressió parcial del gas en la fase gasosa (P_k),

$$r_k^T = k_{Lk} (He_k \cdot ff_k X_k - P_k), \quad (3.5)$$

on He_k és la constant de Henry, ff_k la fracció en forma volàtil del gas en solució aquosa i X_k la fracció molar en solució de totes les formes iòniques del gas. k_{Lk} és la constant de transferència màssica del gas i és considerada un paràmetre del model.

La concentració en l'equilibri d'un gas k (C_k) dissolt en aigua a una determinada temperatura (T) depèn de la seva pressió parcial en la fase gasosa (P_k), a més pressió més quantitat se'n dissol. La llei de Henry afirma que a baixes concentracions la relació pressió-concentració és lineal i s'expressa tant amb l'eq. 3.6 com amb la 3.7,

$$C_k = K_{Hk} \cdot P_k \quad (3.6)$$

$$P_k = He_k \cdot X_k \quad (3.7)$$

L'equació 3.7, coneguda també com a forma inversa de la llei de Henry (Sander, 1999), representa la volatilitat del gas i proporciona la pressió parcial d'equilibri en la fase gasosa (P_k) en funció de la fracció molar de component volàtil en solució aquosa (X_k). La constant inversa (He_k) és la que s'utilitza en el present estudi i és funció de la temperatura. A la Taula 3.2 es donen almenys dues equacions de fonts diferents per cada gas i s'hi indiquen les que s'han seleccionat pel model. A la Fig. 3.7 es poden apreciar les diferències en el valor de He_k segons la referència utilitzada.

Taula 3.2. Les constants de Henry en funció de la temperatura T(K). Les expressions originals han estat adaptades a la forma de la taula per uniformitzar les unitats utilitzant els següents factors de conversió, 1 atm=1.01325 bar; densitat molar de l'aigua, 55.3 mol/L; constant dels gasos, R=8.314 J·mol⁻¹·K⁻¹.

He _k (Pa) a 298.15 K	He _k (Pa)	Referència
Oxigen		
46694·10 ⁵	$He_{o_2}=10^5 \cdot \exp(16.7886 - 1800/T)$	¹⁾ Carpenter, 1966 **
45458·10 ⁵	$He_{o_2}=10^5 \cdot \exp(152.1805 - 1.575701 \cdot 10^5/T + 6.642308 \cdot 10^7/T^2 - 1.2438 \cdot 10^{10}/T^3 + 8.621949 \cdot 10^{11}/T^4)$	⁴⁾ APHA et al., 1995
44199·10 ⁵	$He_{o_2}=10^5 \cdot \exp(66.74856 - 8747.55/T - 24.4526 \cdot \ln(T/100))$	Lide 1993 ^(a)
CO ₂		
1648.1·10 ⁵	$He_{CO_2}=10^5 \cdot \exp(15.4570 - 2400/T)$	¹⁾ Morgan and Maass, 1931 **
1658.8·10 ⁵	$He_{CO_2}=10^5 \cdot 10^{(-2025.3/T - 0.0104 \cdot T + 13.11344)}$	²⁾ Friend and Loewenthal, 1992 ^(b)
Amoníac		
1.000·10 ⁵	$He_{NH_3}=10^5 \cdot \exp(13.7521 - 4100/T)$	¹⁾ Dasgupta & Dong, 1986 **
0.932·10 ⁵	$He_{NH_3}=10^5 \cdot \exp(164.5895 - 8621.06/T - 25.6767 \cdot \ln(T) + 0.035388 \cdot T)$	³⁾ Beutier i Renon, 1978

Fonts originals citades per: 1) Sander, 1999; 2) Musvoto et al., 1997; 3) Blanes-Vidal et al., 2009; 4) A. Magrí, 2007. Tesi doctoral.

**Indica les equacions seleccionades pel model.

(a) Les dades originals són fracció molar d'oxigen dissolt en funció de la temperatura a una pressió de 1.01325 bar.

(b) Els valors proporcionats per aquesta equació per temperatures entre 0 i 60°C són pràcticament coincidents amb valors tabulats donats per Butler, J. N. (1998) citant l'original de L.G. Sillén & A.E. Martell (1964).

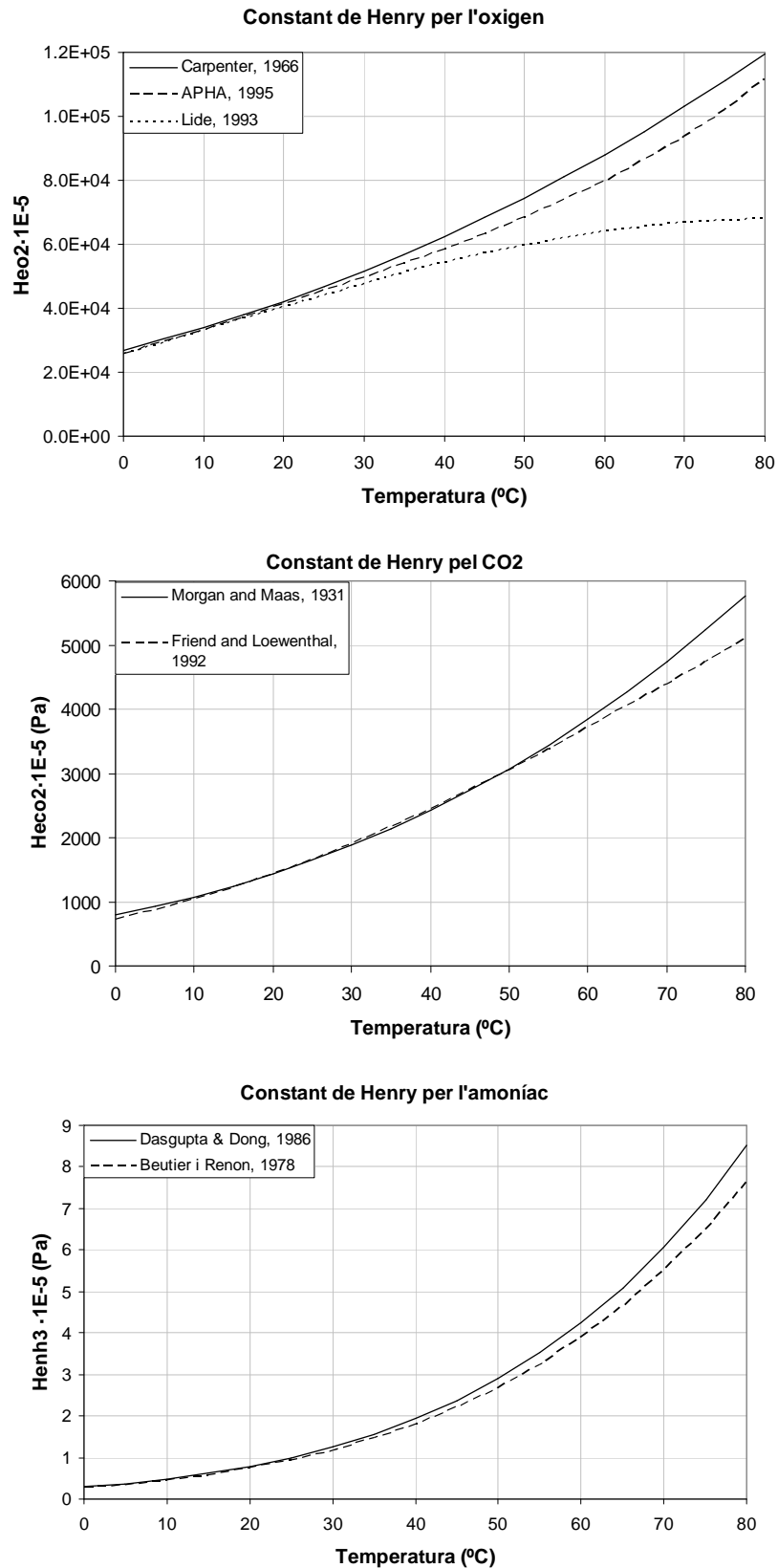
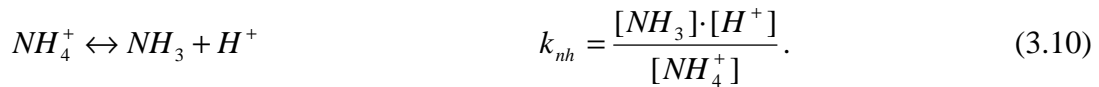
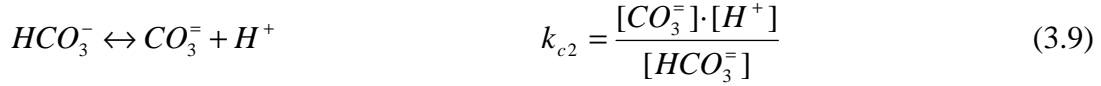
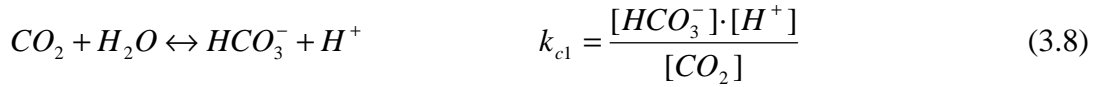


Figura 3.7 Influència de la temperatura en la constant de Henry pels gasos O₂, CO₂ i NH₃ segons diferents fonts. Les corbes en línia contínua són les utilitzades en el present model.

El CO_2 i l'amoníac dissolts en aigua es dissocien en les seves formes iòniques HCO_3^- , $\text{CO}_3^{=}$ i NH_4^+ . Tanmateix només la fracció no dissociada intervé en l'equilibri amb la fase gasosa. La fracció de la forma no dissociada respecte a totes les formes presents en solució (f_k) depèn del pH de la solució i és el resultat dels equilibris iònics següents:



Les concentracions molars totals d'anhidrid carbònic i d'amoníac en solució (S_{ic} , S_{in}) són la suma de les diferents formes, (eqs. 3.11 i 3.12):

$$S_{ic} = [\text{CO}_2] + [\text{HCO}_3^-] + [\text{CO}_3^{=}] \quad (3.11)$$

$$S_{in} = [\text{NH}_4^+] + [\text{NH}_3]. \quad (3.12)$$

Les respectives fraccions molars en solució aquosa es poden posar en funció de les variables d'estat del model m_{CO_2} , m_{NH_3} i m_w amb les eqs. (3.13) i (3.14),

$$X_{ic} = \frac{M_w}{M_{\text{CO}_2}} \frac{m_{\text{CO}_2}}{m_w} = \frac{18}{44} \frac{m_{\text{CO}_2}}{m_w} \quad (3.13)$$

$$X_{in} = \frac{M_w}{M_{\text{NH}_3}} \frac{m_{\text{NH}_3}}{m_w} = \frac{17}{17} \frac{m_{\text{NH}_3}}{m_w}, \quad (3.14)$$

on M_{CO_2} , M_{NH_3} i M_w són els pesos moleculars del diòxid de carboni, de l'amoníac i de l'aigua respectivament.

La matriu d'especiació iònica segons la càrrega per cadascuna de les formes presents en solució és,

	+1	0	-1	-2
S_{ic}		$[\text{CO}_2]$	$[\text{HCO}_3^-]$	$[\text{CO}_3^{=}]$
S_{in}	$[\text{NH}_4^+]$	$[\text{NH}_3]$		

i la corresponent matriu de factors de dissociació obtinguda a partir de les equacions de definició de les constants d'equilibri (eqs. 3.8, 3.9 i 3.10) i de les de conservació de la massa de cada component (eqs. 3.11 i 3.12) és,

	+1	0	-1	-2
S_{ic}		$\frac{1}{1 + \frac{k_{c1}}{[H^+]} + \frac{k_{c1} \cdot k_{c2}}{[H^+]^2}}$	$\frac{\frac{k_{c1}}{[H^+]}}{1 + \frac{k_{c1}}{[H^+]} + \frac{k_{c1} \cdot k_{c2}}{[H^+]^2}}$	$\frac{\frac{k_{c1}}{[H^+]} + \frac{k_{c1} \cdot k_{c2}}{[H^+]^2}}{1 + \frac{k_{c1}}{[H^+]} + \frac{k_{c1} \cdot k_{c2}}{[H^+]^2}}$
S_{in}		$\frac{1}{1 + \frac{k_{nh}}{[H^+]}}$	$\frac{\frac{k_{nh}}{[H^+]}}{1 + \frac{k_{nh}}{[H^+]}}$	

Les fraccions que estan en forma volàtil dels equilibris CO_2 -bicarbonat i amoni-amoniác venen donades en funció del pH per les eqs. 3.15 i 3.16,

$$ff_{CO_2} = \frac{1}{1 + 10^{pH - pk_{c1}} + 10^{2pH - pk_{c1} - pk_{c2}}} \quad (3.15)$$

$$ff_{NH_3} = \frac{1}{1 + 10^{pk_{nh} - pH}}, \quad (3.16)$$

i es representen a la Fig. 3.8.

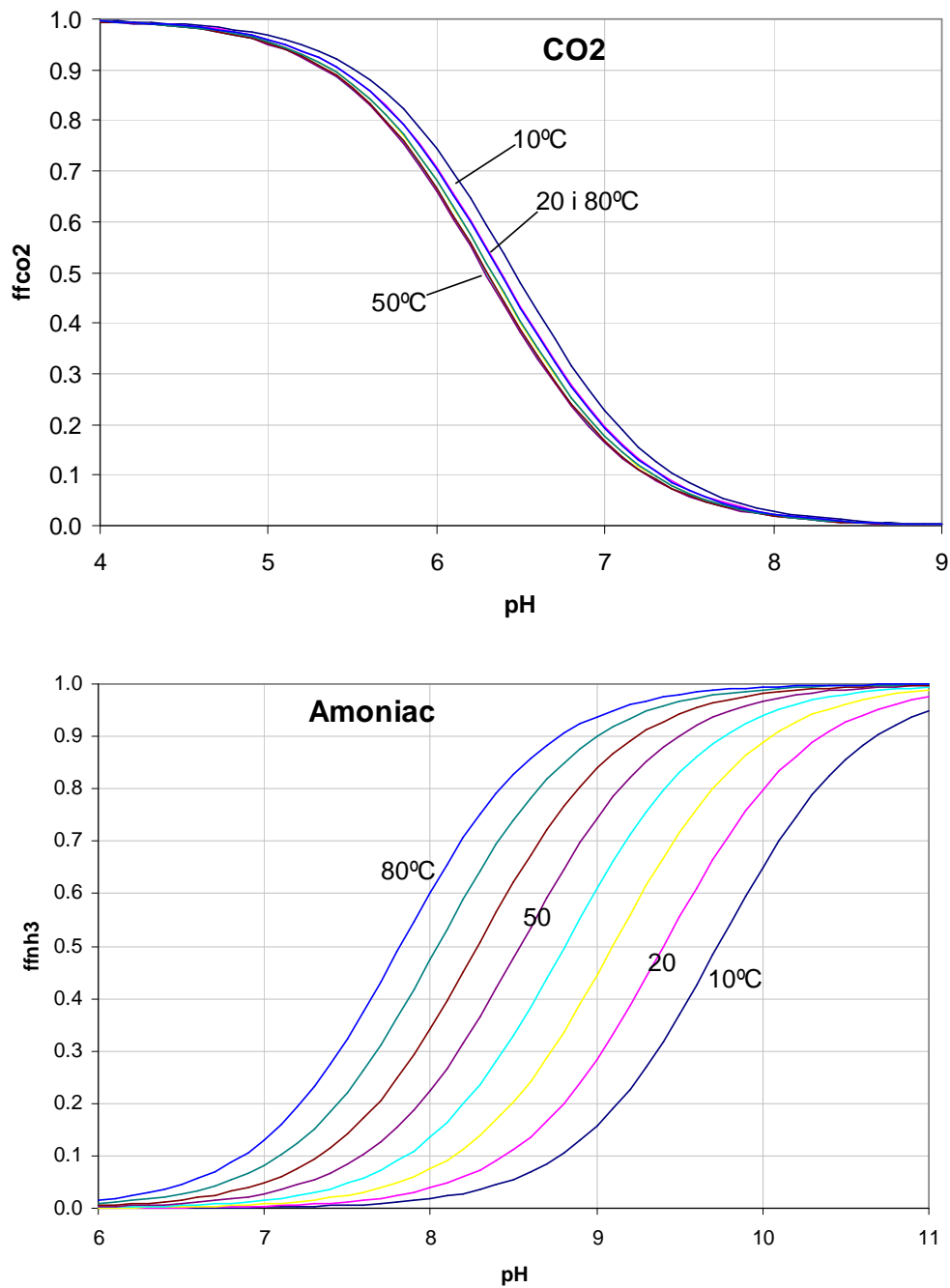


Figura 3.8. Fraccions en solució que estan en forma volàtil del CO_2 i de l'amoníac en funció del pH i la temperatura, segons les equacions (3.15) i 3.16).

Les constants d'equilibri iònica depenen de la temperatura. A la Taula 3.3 es mostren les expressions donades per diferents autors, i a la Fig. 3.9 es representen les funcions adoptades en el model.

Taula 3.3. Constants de dissociació en funció de la temperatura T (en Kelvin)

$pK_{25^{\circ}C}$	Equilibri	Constant	Referència
	CO₂ -bicarbonat $CO_2 + H_2O \leftrightarrow HCO_3^- + H^+$	K_{c1}	
	$HCO_3^- \leftrightarrow CO_3^{2-} + H^+$	K_{c2}	
6.345	$pK_{c1} = L \cdot (-80063.5/T + 0.714984 \cdot T - 478.653 \cdot \ln T + 2767.92)$		¹⁾ Beutier ans Renon, 1978
6.352	$pK_{c1} = -14.8435 + 0.03279 \cdot T + 3404.7/T$		²⁾ Loewenthal et al., 1989 **
6.351	$pK_{c1} = 356.309 + 0.0609196 \cdot T - 21834.4/T - 126.834 \cdot \log T + 1.68492 \cdot 10^6/T^2$		²⁾ Friend& Loewenthal,1992
10.326	$pK_{c2} = L \cdot (-6286.89/T - 0.050628 \cdot T + 12.405)$		¹⁾ Beutier and Renon, 1978
10.330	$pK_{c2} = -6.498 + 0.02379 \cdot T + 2902.4/T$		²⁾ Loewenthal et al., 1989 **
10.329	$pK_{c2} = 107.887 + 0.0325285 \cdot T - 5151.79/T - 38.9256 \cdot \log T + 563714/T^2$		²⁾ Friend& Loewenthal,1992
	Amoniac $NH_4^+ \leftrightarrow NH_3 + H^+$	K_{nh}	
9.245	$pK_{nh} = L \cdot (-1843.22/T - 0.0544943 \cdot T + 31.4335 \cdot \ln T - 177.95292)$		¹⁾ Beutier and Renon, 1978
9.214	$pK_{nh} = -0.6322 + 0.00123 \cdot T + 2835.8/T$		²⁾ Friend& Loewenthal,1992
9.246	$pK_{nh} = 0.09018 + 2729.92/T$		³⁾ Anthonisen et al.,1976 **
	Dissociació aigua $H_2O \leftrightarrow OH^- + H^+$	K_w	
13.995	$pK_w = L \cdot (-10294.83/T - 0.039282 \cdot T + 14.01708)$		¹⁾ Beutier i Renon, 1978
	$pK_w = 14.00$		

$L = -\log(e) = -0.434294482$. Referències originals citades per: 1) Blanes-Vidal et al., 2009 ; 2) Musvoto et al., 1997; 3) Koch et al., 2010. **Indica les equacions seleccionades pel model.

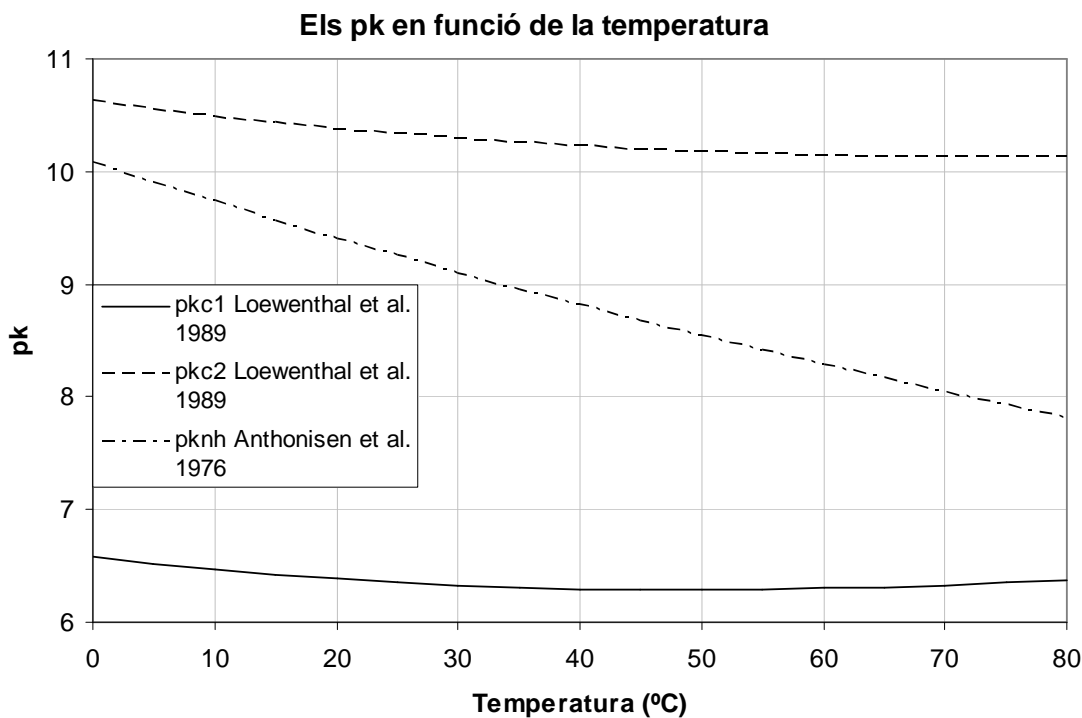


Figura 3.9. Influència de la temperatura en els valors dels pk. Les funcions donades per les diferents fonts (Taula 3.3) se superposen en la gràfica, en conseqüència, només s'han representat les equacions seleccionades.

La substitució de les fraccions molars dels gasos dissolts en funció de les variables d'estat del model, eqs. (3.13) i (3.14) pel CO₂ i per l'amoníac, així com l'expressió de la pressió parcial de cada gas en fase gasosa en funció de les variables d'estat lligades per l'equació d'estat dels gasos perfectes, permet escriure les següents equacions per la transferència líquid-gas per l'O₂, CO₂ i NH₃ (eqs. 3.17, 3.18 i 3.19):

$$r_{O_2}^T = k_{Lo_2} (He_{o_2} \cdot \frac{18}{32} \frac{m_{o_2}}{m_w} - n_{o_2} \frac{R\vartheta}{V_g}) \quad (3.17)$$

$$r_{CO_2}^T = k_{Lco_2} (He_{co_2} \cdot ff_{co_2} \cdot \frac{18}{44} \frac{m_{CO_2}}{m_w} - n_{co_2} \frac{R\vartheta}{V_g}) \quad (3.18)$$

$$r_{NH_3}^T = k_{Lnh_3} (He_{nh_3} \cdot ff_{nh_3} \cdot \frac{18}{17} \frac{m_{NH_3}}{m_w} - n_{nh_3} \frac{R\vartheta}{V_g}). \quad (3.19)$$

3.3.4.2 Transferència líquid-gas d'aigua.

L'aigua pot vaporitzar-se i passar a forma gasosa quan l'aire no està saturat de vapor, i al revés, un vapor d'aigua sobresaturat pot condensar. S'admet que la transferència de massa entre les fases líquida i gasosa (r_w^T) és proporcional a la diferència entre la pressió de saturació i la pressió de vapor en la fase gasosa, tal com expressa l'eq. (3.20),

$$r_w^T = k_{Lw} (P_s(\vartheta) - n_w \frac{R\vartheta}{V_g}), \quad (3.20)$$

on $P_s(\vartheta)$ és la pressió de vapor saturat a la temperatura ϑ , la pressió de vapor en la fase gasosa (P_v) s'ha posat en funció de les variables d'estat, $P_v = n_w R\vartheta/V_g$, i k_{Lw} és el coeficient de transferència de massa considerat paràmetre del model. Per l'aigua pura la pressió de vapor en funció de la temperatura es pot estimar en el interval 0-200 °C amb l'equació de Joseph Bertrand (eq. 3.21) (CPCU Compagnie Parisienne de Chauffage Urbain, 1987),

$$P_s = 10^{(22.443 - \frac{2795}{\vartheta} - 1.6798 \cdot \ln(\vartheta))}, \quad (3.21)$$

on P_s (Pa) és la pressió de vapor a la temperatura ϑ (K). A la Fig 3.10 es mostren els valors predits per l'eq. (3.21) i els valors donats per taules de propietats termodinàmiques. La diferència entre les dues fonts gairebé no és apreciable.

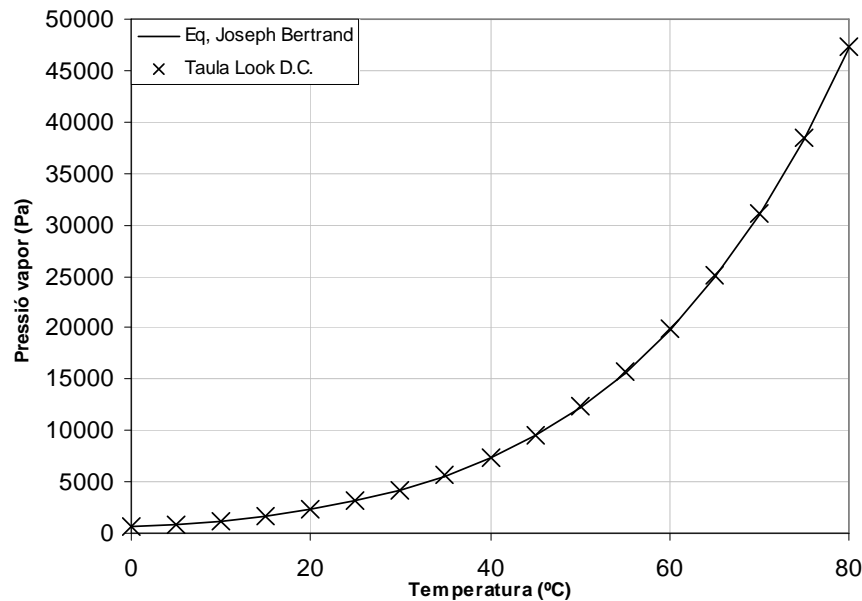


Figura 3.10 La pressió de vapor de l'aigua en funció de la temperatura en l'interval 0-80 °C segons diferents fonts. a) Equació 3.21, b) Taules de propietats de l'aigua (Look and Sauer, 1988).

3.3.5 Les equacions de BM pels components de la fase gasosa

Com ja s'ha indicat a l'apartat 3.2 la fase gasosa és considerada com una mescla de gasos perfectes a pressió total constant i igual a l'atmosfèrica que ocupa el volum fix V_g . La temperatura (ϑ) i la massa molar de cada component (n_k) són les variables d'estat. Un cabal d'aire continu de composició coneguda (\dot{n}_{k0}) entra al sistema a una temperatura ϑ_0 fixada (Fig. 3.11).

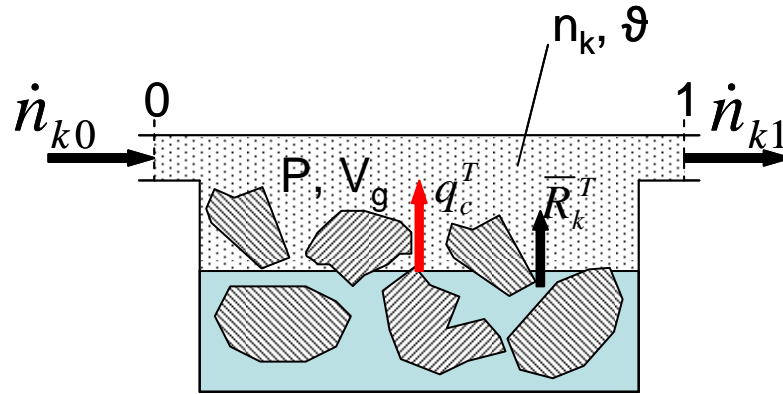


Figura 3.11. Els fluxos molars (fletxes negres) que intervenen en el BM dels components de la fase gasosa que ocupa el volum de control V_g a la pressió constant P . La fletxa vermella representa el flux de calor sensible entre les fases sòlid-líquid i gasosa (q_c^T).

Els cabals molars de sortida (\dot{n}_{k1}) no són constants degut a la variació dels fluxos molars de transferència líquid-gas (\bar{R}_k^T) i degut a la variació de la temperatura de la fase gasosa. Així, la hipòtesi de que la fase gasosa es manté isòbara implica que un augment de la temperatura provoqui la dilatació del gas i la conseqüent sortida del sistema de part de la massa gasosa. Les equacions que sota aquestes premisses governen els balanços de massa s'exposen tot seguit.

Equació d'estat dels gasos perfectes.

Per cadascun dels components gasosos ($k=1,\dots,5$) es verifica

$$P_k V_g = n_k R \vartheta, \quad (3.22)$$

i sumant l'eq. (3.22) membre a membre per a tots els k components s'obté

$$P V_g = n_T R \vartheta, \quad (3.23)$$

on es té present que la pressió total P és la suma de pressions parcials: $P = \sum_k P_k$ i que la massa molar total és $n_T = \sum_k n_k$.

Els mols totals n_T continguts en la fase gasosa poden expressar-se segons l'eq. (3.23) en funció de la pressió total i la temperatura de la fase gasosa,

$$n_T = \sum_k n_k = \frac{P V_g}{R \vartheta}, \quad (3.24)$$

i la seva derivada respecte al temps, sempre que no hi hagi variació de la pressió total P ni del volum V_g , és:

$$\frac{dn_T}{dt} = \sum_k \frac{dn_k}{dt} = -\frac{PV_g}{R} \frac{1}{\vartheta^2} \frac{d\vartheta}{dt}. \quad (3.25)$$

Equació de conservació de la massa molar d'un component k .

El balanç molar en el volum V_g (Fig 3.11), proporciona

$$\frac{dn_k}{dt} = \dot{n}_{k0} - \dot{n}_{k1} + \bar{R}_k^T, \quad (3.26)$$

on \dot{n}_{k0} i \dot{n}_{k1} són els cabals molars d'entrada i de sortida a través de les fronteres del volum de control del component k , i \bar{R}_k^T és el cabal molar d'entrada procedent de la fase líquida. Els cabals d'entrada s'admet que són coneguts, mentre que els de sortida són, en principi, desconeguts.

Cabals màssics molars del corrent d'entrada.

El corrent d'aire d'entrada al reactor està constituït per la mescla de gasos ideals O_2 , CO_2 , NH_3 i N_2 (aire sec) en les fraccions molars y_{10} , y_{20} , y_{30} i y_{50} respectivament, i pel vapor d'aigua. En cas d'entrada d'aire atmosfèric que només conté O_2 i N_2 serà $y_{10}=0.21$, $y_{20}=0$, $y_{30}=0$ i $y_{50}=0.79$. Aquest corrent d'aire humit està a la temperatura ϑ_0 , a la pressió total P_0 , té una humitat relativa e_0 , i el cabal volumètric mesurat en aquestes condicions és Q_0 . El cabal màssic molar de vapor d'aigua ve determinat per l'eq. (3.27),

$$\dot{n}_{40} = \frac{P_v Q_0}{R \vartheta_0}, \quad (3.27)$$

essent la pressió de vapor (P_v) funció de la humitat relativa e_0 i de la pressió de saturació a la temperatura ϑ_0 donada per l'eq. (3.21),

$$P_v(\vartheta_0) = e_0 P_s(\vartheta_0). \quad (3.28)$$

El cabal màssic molar total d'aire sec ve donat per l'eq. (3.29),

$$\dot{n}_a = \frac{(P_0 - P_v)}{R \vartheta_0} Q_0, \quad (3.29)$$

i en conseqüència, els cabals màssics molars pels components de l'aire sec són,

$$\dot{n}_{k0} = y_{k0} \dot{n}_a \quad k=1,2,3,5. \quad (3.30)$$

Cabals màssics molars del corrent de sortida.

Amb la restricció que la pressió total del sistema s'ha de mantenir constant, el cabal molar total de sortida \dot{n}_{T1} pot posar-se en funció dels cabals d'entrada i de la temperatura ϑ de la fase gasosa. Així, sumant per a tots els components gasosos ($k=1, \dots, 5$) l'eq. (3.26) i substituint el primer membre per l'expressió (3.25) s'obté,

$$\dot{n}_{T1} = \dot{n}_{T0} + \sum_k \bar{R}_k^T + \frac{PV_g}{R\vartheta^2} \frac{d\vartheta}{dt}, \quad (3.31)$$

on $\dot{n}_{T0} = \sum_{k=1}^5 \dot{n}_{k0}$ i $\dot{n}_{T1} = \sum_{k=1}^5 \dot{n}_{k1}$ són els cabals molars totals d'entrada i sortida.

S'admet que el corrent de sortida manté la composició molar de la fase gasosa,

$$\dot{n}_{k1} = \frac{n_k}{n_T} \dot{n}_{T1}. \quad (3.32)$$

La substitució de l'eq. (3.31) i l'eq. (3.24) en l'eq. (3.32) proporciona la següent expressió pel corrent molar de sortida del component k ,

$$\dot{n}_{k1} = n_k aa, \quad (3.33)$$

on aa és un terme comú per a tots els components gasosos que ve donat per,

$$aa = \frac{R\vartheta}{PV_g} \sum_{k=1}^5 (\dot{n}_{k0} + \bar{R}_k^T) + \frac{1}{\vartheta} \frac{d\vartheta}{dt}. \quad (3.34)$$

La substitució de l'eq. (3.33) en l'eq. (3.26) proporciona l'eq. (3.35), que per a $k=1, \dots, 5$ són 5 equacions que relacionen només variables d'estat,

$$\frac{dn_k}{dt} = \dot{n}_{k0} - n_k aa + \bar{R}_k^T. \quad (3.35)$$

3.3.6 Les equacions de BM del model base

Per cadascuna de les variables d'estat del model que representa la quantitat de massa d'un component (veure Taula 3.1) s'estableix una equació diferencial ordinària que descriu l'acumulació de massa al sistema. Aquestes es poden agrupar segons la seva forma en tres tipus, les corresponents als components sòlids ò solubles no volàtils del sistema (índexs $1, \dots, ix, \dots, is$), les corresponents als components solubles volàtils i a l'aigua (índexs $is+1, \dots, is+3, iw$) i les dels components de la fase gasosa (índexs $iw+1, \dots, iw+5$):

$$\frac{dm_i}{dt} = M_T r_i \quad i=1, \dots, is \quad (3.36)$$

$$\frac{dm_j}{dt} = M_T (r_j - r_j^T) \quad j=is+1, \dots, iw \quad (3.37)$$

$$\frac{dn_k}{dt} = \dot{n}_{k0} - n_k \cdot aa + M_T \bar{r}_k^T \quad k=iw+1, \dots, iw+5. \quad (3.38)$$

Els termes de reacció específica r_i i r_j venen determinats per les equacions de cinètica del model biològic en funció de les variables d'estat. Les velocitats de transferència

líquid-gas r_j^T es determinen amb les equacions (3.17) a (3.20). Observis que la relació entre els fluxos de transferència màssics (r_k^T) i molars (\bar{r}_k^T) és $r_k^T = M_k \bar{r}_k^T$, on M_k és la massa molar del component k . La transferència líquid-gas del nitrogen es considera nul·la.

3.3.7 Les equacions de BE del model base

3.3.7.1 L'equació de BE per la fase gasosa

El increment de l'energia interna de la fase gasosa es reflecteix en un augment de la seva temperatura que és considerada variable d'estat (ϑ) del sistema. Els fluxos energètics d'entrada i de sortida que s'hi consideren són (veure Fig. 3.10),

- Flux energètic associat al corrent principal de gasos d'entrada ($\dot{n}_{k0} \bar{h}_{k0}$).
- Flux energètic associat als fluxos màssics de transferència líquid-gas ($\bar{R}_k^T \bar{h}_k^*$).
- Flux de calor convectiu entre les fases sòlida-líquida i la gasosa (q_c^T).
- Flux energètic associat al corrent de gasos de sortida ($\dot{n}_{k1} \bar{h}_{k1}$).

Entalpia d'un gas ideal

L'entalpia molar d'un gas ideal (\bar{h}_k) és només funció de la seva temperatura (ϑ) i guarda la següent relació amb la calor específica a pressió constant (\bar{c}_{pk}),

$$d\bar{h}_k = \bar{c}_{pk} d\vartheta, \quad (3.39)$$

i la seva integració, sota la suposició de que la calor específica es mantingui constant, proporciona l'eq. (3.40),

$$\bar{h}_k(\vartheta) = \bar{c}_{pk} (\vartheta - T_{ref}). \quad (3.40)$$

S'adopta, per definir un origen d'entalpies, que cada component gasós té entalpia zero a 0°C ($T_{ref}=273.15$ K). Pel vapor es considera que l'aigua líquida a 0°C té entalpia zero. L'entalpia (H) d'una mescla de gasos ideals és la suma de les entalpies totals de cada gas,

$$H = \sum_k H_k = \sum_k n_k \bar{h}_k.$$

En general, per pressions similars a l'atmosfèrica o inferiors, el comportament dels gasos considerats en el present model (O_2 , CO_2 , NH_3 , H_2O_{vap} , i N_2) pot assimilar-se a un gas perfecte amb una calor específica funció de la temperatura. L'equació polinòmica (3.41) és una de les utilitzades habitualment,

$$\bar{c}_{pk} = a + bT + cT^2 + dT^3 + eT^4. \quad (3.41)$$

A la Taula 3.4 es donen els valors dels corresponents coeficients segons (Reklaitis and Schneider, 1989), i a la Taula 3.5 els corresponents valors de les calors específiques

calculades. Atès que en l'interval de temperatures d'interès (20-80 °C) la desviació dels valors en les temperatures extremes respecte al valor a 50°C és poc important (inferior al 3.5% en tots els cassos) s'assumeix per a cada gas un valor constant de la seva calor específica i igual al valor a 50°C.

Taula 3.4 Coeficients per la determinació de la calor específica d'un gas en funció de la seva temperatura T(K) segons l'equació (3.41).

Gas	<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>	<i>d</i>	<i>e</i>
O ₂	2.98832E+01	-1.13842E-02	4.33779E-05	-3.70082E-08	1.01006E-11
CO ₂	1.90223E+01	7.96291E-02	-7.37067E-05	3.74572E-08	-8.13304E-12
NH ₃	2.75510E+01	2.56278E-02	9.90042E-06	-6.68639E-09	0.00000E+00
H ₂ O _{vap}	3.40471E+01	-9.65064E-03	3.29983E-05	-2.04467E-08	4.30228E-12
N ₂	2.94119E+01	-3.00681E-03	5.45064E-06	5.13186E-09	-4.25308E-12

Segons Reklaitis (1989) l'elaboració d'aquestes dades fou a càrrec de D.R. Schneider de la Monsanto Company a partir de la base de dades FLOWTRAN.

Taula 3.5 Valors de les calors específiques determinades amb l'equació 3.41 i els coeficients de la Taula 3.4 per a la temperatura mitjana T=50°C, i per les temperatures extremes de 20 i 80°C, expressant en % la desviació dels valors a 20 i 80°C respecte al valor a 50°C.

Gas	\bar{c}_{pk} (50°C) J·mol ⁻¹ ·K ⁻¹	\bar{c}_{pk} (20°C) J·mol ⁻¹ ·K ⁻¹	$\Delta T_{20/50}$ (%)	\bar{c}_{pk} (80°C) J·mol ⁻¹ ·K ⁻¹	$\Delta T_{80/50}$ (%)
O ₂	29.595	29.416	-0.61	29.800	0.69
CO ₂	38.233	36.915	-3.45	39.474	3.25
NH ₃	36.641	35.746	-2.44	37.542	2.46
H ₂ O _{vap}	33.731	33.570	-0.48	33.921	0.56
N ₂	29.136	29.097	-0.14	29.190	0.18

Entalpia del vapor i de l'aigua

S'assumeix que el vapor d'aigua a baixa pressió es comporta com un gas ideal i per tant la seva entalpia específica només depèn de la temperatura. En conseqüència, l'entalpia d'un vapor sobreescalfat és la mateixa que la d'un vapor saturat a la mateixa temperatura. A la Taula 3.6 es donen les entalpies específiques de l'aigua i el vapor saturats. S'assigna una energia interna específica nul·la a l'aigua líquida a 0.01 °C, la corresponent entalpia també és zero a efectes pràctics.

En el interval d'interès, 20-80 °C, la recta de regressió en funció de la temperatura, tant de l'entalpia de l'aigua com de la del vapor (dades Taula 3.6), proporciona molt bons ajustos ($R^2 > 0.9998$), essent les correlacions,

$$h_w \text{ (J/kg)} = 172.5 + 4183.2 T \quad (3.42)$$

$$h_v \text{ (J/kg)} = 2504.2 \cdot 10^3 + 1742.7 T, \quad (3.43)$$

o bé en unitats molars pel vapor,

$$h_v \text{ (J/kmol)} = 45075.6 \cdot 10^3 + 31368.6 T, \quad (3.43b)$$

expressions en les que la temperatura ve en °C.

Taula 3.6. Entalpia específica de l'aigua (h_w) i del vapor saturat (h_v) en funció de la temperatura segons (Reklaitis and Schneider, 1989). Font original citada per l'autor és R.W. Haywood, Thermodynamic Tables in SI (Metric) Units, Cambridge University Press, 1968.

T (°C)	h_w (kJ/kg)	h_v (kJ/kg)
0.01	0.0	2501.6
20	83.9	2538.2
25	104.8	2547.3
30	125.7	2556.4
35	146.6	2565.4
40	167.5	2574.4
45	188.4	2583.3
50	209.3	2592.2
55	230.2	2600.5
60	251.1	2609.0
65	272.1	2617.5
70	293.0	2626.0
75	314.0	2634.5
80	334.9	2643.0

En conseqüència, en l'interval 20-80 °C s'adopta per l'aigua líquida la calor específica $c_{pw}=4183.2 \text{ J}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ i l'entalpia del vapor es determina amb l'expressió,

$$\bar{h}_v = \bar{\lambda}_v + \bar{c}_{pv} (\vartheta - T_{ref}), \quad (3.44)$$

amb els valors per la calor específica i la calor latent de vaporització,

$$\begin{aligned} \bar{c}_{pv} &= 31368.6 \text{ J}\cdot\text{kmol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1} & (c_{pv} &= 1742.7 \text{ J}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}) \\ \bar{\lambda}_v &= 45075.6 \cdot 10^3 \text{ J/kmol} & (\lambda_v &= 2504.2 \text{ J/kg}). \end{aligned}$$

Equació de balanç energètic de la fase gasosa

L'aplicació del principi de conservació de l'energia a un sistema obert en règim transitori com el de la Fig. 3.11 proporciona,

$$\frac{dU}{dt} = q_c^T + \sum_k \dot{n}_{k0} \bar{h}_{k0}^* + \sum_k \bar{R}_k^T \bar{h}_k^* - \sum_k \dot{n}_{k1} \bar{h}_{k1}^*, \quad (3.45)$$

on U (J) és l'energia interna total de la fase gasosa, q_c^T és el flux d'escalfor transferit de la fase sòlid-líquid cap a la gasosa, \dot{n}_{k0} i \dot{n}_{k1} són els fluxos molars de gas k a les fronteres 0 i 1, considerats positius si entra (\dot{n}_{k0}) i surt (\dot{n}_{k1}), respectivament, i \bar{R}_k^T ($\text{kmol}\cdot\text{h}^{-1}$) és el flux molar de transferència del gas k de la fase líquida a la gasosa (sentit positiu). Com a criteri general s'adopta el criteri *upwind* per avaluar les entalpies a les fronteres de sistema. Així, \bar{h}_{k0}^* , \bar{h}_{k1}^* i \bar{h}_k^* ($\text{J}\cdot\text{kmol}^{-1}$) representen l'entalpia molar del gas k avaluada a la temperatura de la fase de procedència. En el cas general en què els fluxos molars d'entrada i sortida també puguin ser negatius s'utilitzaran sempre els següents criteris:

$$\begin{aligned} \bar{h}_{k0}^* &= \bar{h}_k(\vartheta_0) & \text{si } \dot{n}_{k0} &\geq 0 \\ \bar{h}_{k0}^* &= \bar{h}_k(\vartheta) & \text{si } \dot{n}_{k0} &< 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\bar{h}_{k1}^* &= \bar{h}_k(\vartheta) & \text{si} & \dot{n}_{k1} \geq 0 \\
\bar{h}_{k1}^* &= \bar{h}_k(\vartheta_1) & \text{si} & \dot{n}_{k1} < 0 \\
\bar{h}_k^* &= \bar{h}_k(T) & \text{si} & \bar{R}_k^T \geq 0 \\
\bar{h}_k^* &= \bar{h}_k(\vartheta) & \text{si} & \bar{R}_k^T < 0.
\end{aligned}$$

Terme d'energia interna. S'admet que l'energia interna U d'una mescla de gasos és la suma de l'energia interna U_k de cadascun d'ells. Aquesta pot posar-se en funció de l'entalpia atenent a que $H_k=U_k+P_kV_g$,

$$U = \sum_k U_k = \sum_k (H_k - P_k V_g) = \sum_k H_k - V_g \sum_k P_k = \sum_k n_k \bar{h}_k - P V_g, \quad (3.46)$$

on s'ha tingut present que la pressió total P és la suma de les pressions parcials P_k de cada gas. En el cas més general la pressió i el volum seran funció del temps i el producte $P V_g$ pot posar-se en funció de les variables d'estat,

$$P V_g = R \vartheta \sum_k n_k,$$

essent la seva derivada temporal,

$$\frac{d}{dt}(P V_g) = R \frac{d\vartheta}{dt} \sum_k n_k + R \vartheta \sum_k \frac{dn_k}{dt}. \quad (3.47)$$

La derivada respecte al temps de l'energia interna resulta així de derivar l'eq. (3.46):

$$\frac{dU}{dt} = \sum_k \frac{dn_k}{dt} \bar{h}_k - R \vartheta \sum_k \frac{dn_k}{dt} + \frac{d\vartheta}{dt} \sum_k (\bar{c}_{pk} - R) n_k, \quad (3.48)$$

on s'ha tingut present que segons l'eq. (3.39) és,

$$\frac{d\bar{h}_k}{dt} = \frac{d\bar{h}_k}{d\vartheta} \frac{d\vartheta}{dt} = \bar{c}_{pk} \frac{d\vartheta}{dt}. \quad (3.48a)$$

La substitució de l'eq. (3.48) en l'eq. (3.45) de balanç energètic proporciona,

$$\sum_k \frac{dn_k}{dt} \bar{h}_k - R \vartheta \sum_k \frac{dn_k}{dt} + \frac{d\vartheta}{dt} \sum_k (\bar{c}_{pk} - R) n_k = q_c^T + \sum_k \dot{n}_{k0} \bar{h}_{k0}^* + \sum_k \bar{R}_k^T \bar{h}_k^* - \sum_k \dot{n}_{k1} \bar{h}_{k1}^*$$

que al reordenar-la resulta en,

$$\sum_k (\bar{c}_{pk} - R) n_k \frac{d\vartheta}{dt} = q_c^T + \sum_k \dot{n}_{k0} \bar{h}_{k0}^* - \sum_k \dot{n}_{k1} \bar{h}_{k1}^* + \sum_k \bar{R}_k^T \bar{h}_k^* - \sum_k \bar{h}_k \frac{dn_k}{dt} + R \vartheta \sum_k \frac{dn_k}{dt}. \quad (3.49)$$

Tenint present el balanç de massa molar d'un component (eq. 3.26) i agrupant els termes de l'eq. (3.49) s'obté,

(3.50)

$$\begin{aligned} \sum_k (\bar{c}_{Pk} - R)n_k \frac{d\vartheta}{dt} &= q_c^T + \sum_k \dot{n}_{k0} (\bar{h}_{k0}^* - \bar{h}_{k1}^*) + \sum_k \bar{R}_k^T (\bar{h}_k^* - \bar{h}_{k1}^*) - \sum_k \frac{dn_k}{dt} (\bar{h}_k - \bar{h}_{k1}^*) + R\vartheta \sum_k \frac{dn_k}{dt} = \\ &= q_c^T + \sum_k \dot{n}_{k0} \bar{c}_{Pk} (\vartheta_0^* - \vartheta_1^*) + \sum_k \bar{R}_k^T \bar{c}_{Pk} (\vartheta^* - \vartheta_1^*) - \sum_k \frac{dn_k}{dt} \bar{c}_{Pk} (\vartheta - \vartheta_1^*) + R\vartheta \sum_k \frac{dn_k}{dt}, \end{aligned}$$

on s'ha tingut present que $\bar{h}_{k0}^* - \bar{h}_{k1}^* = \bar{c}_{Pk} (\vartheta_0^* - \vartheta_1^*)$, que $\bar{h}_k^* - \bar{h}_{k1}^* = \bar{c}_{Pk} (\vartheta^* - \vartheta_1^*)$ i que $\bar{h}_k - \bar{h}_{k1}^* = \bar{c}_{Pk} (\vartheta - \vartheta_1^*)$. L'equació (3.50) correspon al cas més general (veure desenvolupament del model 1-D, capítol 4) en que hi hagi una variació temporal de la pressió i volum de la fase gasosa i en que els fluxos molars d'entrada i sortida de gasos (\dot{n}_{k0} i \dot{n}_{k1}) vinguin determinats per una diferència de pressions. La temperatura a les fronteres 0 i 1 (ϑ_0^* i ϑ_1^*) és sempre la de la zona de procedència del corrent gasós:

$$\begin{aligned} \vartheta_0^* &= \vartheta_0 & \text{si } \dot{n}_{T0} &\geq 0 \\ \vartheta_0^* &= \vartheta & \text{si } \dot{n}_{T0} &< 0 \\ \vartheta_1^* &= \vartheta & \text{si } \dot{n}_{T1} &\geq 0 \\ \vartheta_1^* &= \vartheta_1 & \text{si } \dot{n}_{T1} &< 0. \end{aligned}$$

Per la transferència líquid-gas és:

$$\begin{aligned} \vartheta^* &= T & \text{si } \bar{R}_k^T &\geq 0 \\ \vartheta^* &= \vartheta & \text{si } \bar{R}_k^T &< 0. \end{aligned}$$

En el model base de BME els fluxos molars a les seccions d'entrada i sortida són sempre positius, de manera que $\vartheta_0^* = \vartheta_0$ i $\vartheta_1^* = \vartheta$. Aleshores l'eq. (3.50) se simplifica i esdevé l'eq. (3.50a),

(3.50a)

$$\frac{d\vartheta}{dt} \sum_k (\bar{c}_{Pk} - R)n_k = q_c^T + (\vartheta_0 - \vartheta) \sum_k \dot{n}_{k0} \bar{c}_{Pk} + \sum_k \bar{R}_k^T \bar{c}_{Pk} (\vartheta^* - \vartheta) + R\vartheta \sum_k \frac{dn_k}{dt}.$$

Els fluxos molars a les fronteres dels diferents components gasosos prenen tots el mateix signe en cada instant degut a que el flux molar total és originat per una diferència en la pressió total als costats de la frontera. En canvi cadascun dels fluxos molars a la interfície líquid-gas (\bar{R}_k^T) és originat per la diferència de pressions parcials de cada component i poden tenir sentits diferents en un mateix instant. Aquesta dependència del sentit del flux pot expressar-se en la següent forma simplificada,

$$\sum_k \bar{R}_k^T \bar{c}_{Pk} (\vartheta^* - \vartheta) = (T - \vartheta) \sum_k \bar{c}_{Pk} \max\{0, \bar{R}_k^T\}. \quad (3.51)$$

Un cas particular és la situació plantejada en el model base de BME on el volum i la pressió de la fase gasosa es mantenen sempre constants (veure apartat 3.2, hipòtesis 3 i 4). En aquestes condicions es verifica:

$$\frac{d}{dt}(PV_g) = 0,$$

i l'eq. (3.47) esdevé:

$$\frac{d\vartheta}{dt} \sum_k n_k + \vartheta \sum_k \frac{dn_k}{dt} = 0. \quad (3.52)$$

Aquesta expressió permet la simplificació de l'eq. (3.50a) d'on, al separar-ne la derivada temporal de la temperatura del gas i substituir-hi l'eq. (3.51), s'obté l'eq. (3.53) que és la usada en el model base de BME:

$$\frac{d\vartheta}{dt} = \frac{q_c^T + (\vartheta_0 - \vartheta) \left(\sum_k \bar{c}_{pk} \dot{n}_{k0} \right) + (T - \vartheta) \sum_k \bar{c}_{pk} \max\{0, \bar{R}_k^T\}}{\sum_k n_k \bar{c}_{pk}}. \quad (3.53)$$

El flux de calor sensible entre la fase sòlida-líquida i la fase gasosa q_c^T ($\text{J}\cdot\text{h}^{-1}$) s'admet que ve governat per la llei de Newton,

$$q_c^T = M_T h_c S_1 (T - \vartheta),$$

on h_c ($\text{J}\cdot\text{h}^{-1}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$) és el coeficient global de transferència d'escalfor entre les dues fases i S_1 ($\text{m}^2\cdot\text{kg}_{\text{TM}}^{-1}$) és la superfície específica de contacte entre les dues fases. Atesa la dificultat de determinar per separat els valors de h_c i de S_1 s'assumeix que el seu producte és proporcional a l'extensió del sistema, massa total del sistema, de manera que el flux calorífic és,

$$q_c^T = M_T h_{\text{csv}} (T - \vartheta), \quad (3.54)$$

i h_{csv} ($\text{J}\cdot\text{h}^{-1}\cdot\text{kg}_{\text{TM}}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$) és un paràmetre del model que s'admet pren un valor constant.

3.3.7.2 L'equació de BE de la fase sòlida-líquida

Tots els components de la fase sòlida-líquida es consideren incompressibles. L'acumulació d'energia interna és sempre en forma de calor sensible i es verifica $du_i = c_{pi} dT$, és a dir,

$$u_i = c_{pi} (T - T_{\text{ref}}) \quad (3.55)$$

i, igual que els components de la fase gasosa, es pren com a nivell nul d'energia interna el corresponent a la temperatura de referència de 0°C ($T_{\text{ref}} = 273.15 \text{ K}$). L'equació de BE en règim transitori és,

$$\frac{dU}{dt} = q_G - q_{\text{cw}} - q_c^T - \sum_k \bar{R}_k^T \bar{h}_k^*, \quad (3.56)$$

on U és l'energia interna de la fase sòlida-líquida i comprèn els termes d'acumulació en els components orgànics, l'aigua i el contenidor,

$$U = \sum_i m_i u_i + m_w u_w + U_{con} = \sum_i m_i c_{pi} (T - T_{ref}) + m_w c_{pw} (T - T_{ref}) + C_{con} (T - T_{ref}).$$

En conseqüència, la seva derivada respecte al temps serà,

$$\frac{dU}{dt} = \left(\sum_i c_{pi} m_i + c_{Pw} m_w + C_{con} \right) \frac{dT}{dt} + \left(\sum_i c_{pi} \frac{dm_i}{dt} + c_{Pw} \frac{dm_w}{dt} \right) (T - T_{ref}). \quad (3.57)$$

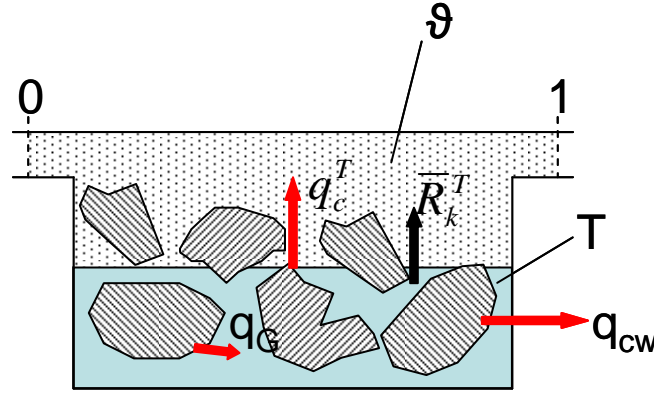


Figura 3.12. Els fluxos energètics considerats en el BE de la fase sòlida-líquida: dissipació d'escalfor a través de la paret (q_{cw}), transferència convectiva cap a la fase gasosa (q_c^T), transferència associada als fluxos massítics cap a la fase gasosa (\bar{R}_k^T) i generació d'escalfor per reacció biològica (q_G).

El terme de flux energètic associat als fluxos gasosos de transferència entre les fases líquida i gasosa és

$$\sum_k \bar{R}_k^T \bar{h}_k^*.$$

Els fluxos \bar{R}_k^T es consideren positius si van de la fase líquida a la gasosa i les seves entalpies s'avaluen a la temperatura de la fase de procedència, és a dir, les entalpies dels fluxos positius s'avaluen a la temperatura de la fase líquida (T) i les dels corrents negatius s'avaluen a la temperatura de la fase gasosa (ϑ),

$$\begin{aligned} \text{si } \bar{R}_k^T > 0 & \text{ serà } \bar{h}_k^* = \bar{h}_k(T) \\ \text{si } \bar{R}_k^T < 0 & \text{ serà } \bar{h}_k^* = \bar{h}_k(\vartheta) \end{aligned}$$

i en conseqüència es verificarà,

$$\sum_k \bar{R}_k^T \bar{h}_k^* = \sum_k [\max\{0, \bar{R}_k^T\} \bar{h}_k(T) + \min\{0, \bar{R}_k^T\} \bar{h}_k(\vartheta)]. \quad (3.58)$$

Les pèrdues d'energia per conducció-convecció a través de les parets del sistema venen quantificades per l'eq. (3.59),

$$q_{cw} = UA_L (T - T_a), \quad (3.59)$$

on U ($\text{J}\cdot\text{h}^{-1}\cdot\text{m}^{-2}$) és un coeficient global de transferència d'escalfor a través de la paret del sistema i considerat un paràmetre del model, A_L (m^2) és l'àrea de la paret i T_a (K) la temperatura de l'ambient exterior.

La transferència convectiva entre les fases sòlida-líquida i la gasosa ve donada per l'eq. (3.54). El terme de generació d'escalfor per reacció (q_G) està determinat per la cinètica dels processos exotèrmics considerats en el model biològic.

La substitució de les eqs. (3.57) i (3.58) en l'eq. (3.56) proporciona l'expressió (3.60) que dona en forma explícita la derivada respecte al temps de la temperatura de la fase sòlida-líquida:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{q_G - q_{cw} - q_c^T - \sum_k [\max\{0, \bar{R}_k^T\} \bar{h}_k(T) + \min\{0, \bar{R}_k^T\} \bar{h}_k(\vartheta)] - (T - T_{ref}) \left(c_{pw} \frac{dm_w}{dt} + \sum_i c_{pi} \frac{dm_i}{dt} \right)}{C_{con} + c_{pw} m_w + \sum_i c_{pi} m_i} \quad (3.60)$$

Atès que tant la temperatura de la fase gasosa com la de la fase sòlida-líquida són variables d'estat del sistema, les equacions de BE (3.53) i (3.60), juntament amb les equacions de BM de cadascun dels components del model (eqs. 3.36, 3.37 i 3.38) formen el sistema d'equacions diferencials ordinàries que governen l'evolució del sistema a partir de l'estat inicial.

3.4 Anàlisi del comportament del model base

3.4.1 Simulacions de l'evolució de diferents variables del model

Una de les peculiaritats del model de transferència de massa i energia desenvolupat és que es pot utilitzar amb qualsevol model biològic que pugui posar-se amb l'estructura definida a l'apartat 2.2.2 (Fig. 3.4). Tot seguit es presenten els resultats de simulacions de reactors batch utilitzant dos models biològics diferents: el model de J. Kaiser (1996) i el model adaptat de Solé-Mauri (2006).

Totes les simulacions s'han implementat en Matlab i per la resolució del sistema d'equacions diferencials ordinàries s'ha utilitzat la rutina *ode15s*. A la Taula A1.1 es mostren totes les rutines utilitzades i els corresponents llistats es donen a l'Annex 1.

3.4.1.1 Simulacions amb el model biològic de J. Kaiser.

Les variables d'estat utilitzades en la implementació del model es defineixen a la Taula C3-A1.1, el valor dels paràmetres biològics a la Taula C3-A1.2, i l'estructura general del model amb totes les seves cinètiques es presenta a la taula C3-A1.3. L'única modificació feta al model biològic respecte a la versió de J. Kaiser ha estat la introducció de la funció limitadora de creixement microbià a baixes concentracions d'oxigen dissolt. Aquesta limitació es fa necessària per evitar que la massa d'oxigen dissolt pugui fer-se negativa en situacions de baix cabal d'aireig al reactor. Evidentment, el model biològic no contempla la dinàmica del nitrogen, per això resulten nul·les totes les transferències d'amoniac. Les simulacions realitzades amb les condicions inicials donades per J. Kaiser (1996) reproduïxen satisfactòriament les evolucions de les diferents variables proporcionades per l'autor.

El model reproduïx la lleugera diferència de temperatures que s'estableix entre la fase sòlida, escalfada per les reaccions químic-biològiques que s'hi produeixen, i la fase gasosa, que rep l'escalfor pel contacte amb la matriu sòlida (Fig. 3.13A). Aquesta diferència de temperatures ha estat mesurada experimentalment per alguns autors (Van Lier et al., 1994) que obtingueren valors entorn 2-3 °C, tanmateix cal remarcar que cap dels models revisats de compostatge pot explicar-la. La humitat relativa de la fase gasosa, en contra de la hipòtesi assumida per J. Kaiser i altres autors (Keener et al., 1993) es manté elevada però no sempre saturada.

La massa total del contingut del reactor així com la massa d'aigua es redueixen gairebé a la meitat mentre que la humitat del producte augmenta lleugerament. El cabal d'aireig i el nivell d'aïllament del reactor hi tenen una influència decisiva (veure Taula 3.9). L'evolució de les concentracions d'oxigen i CO₂ presenten els típics patrons de simetria.

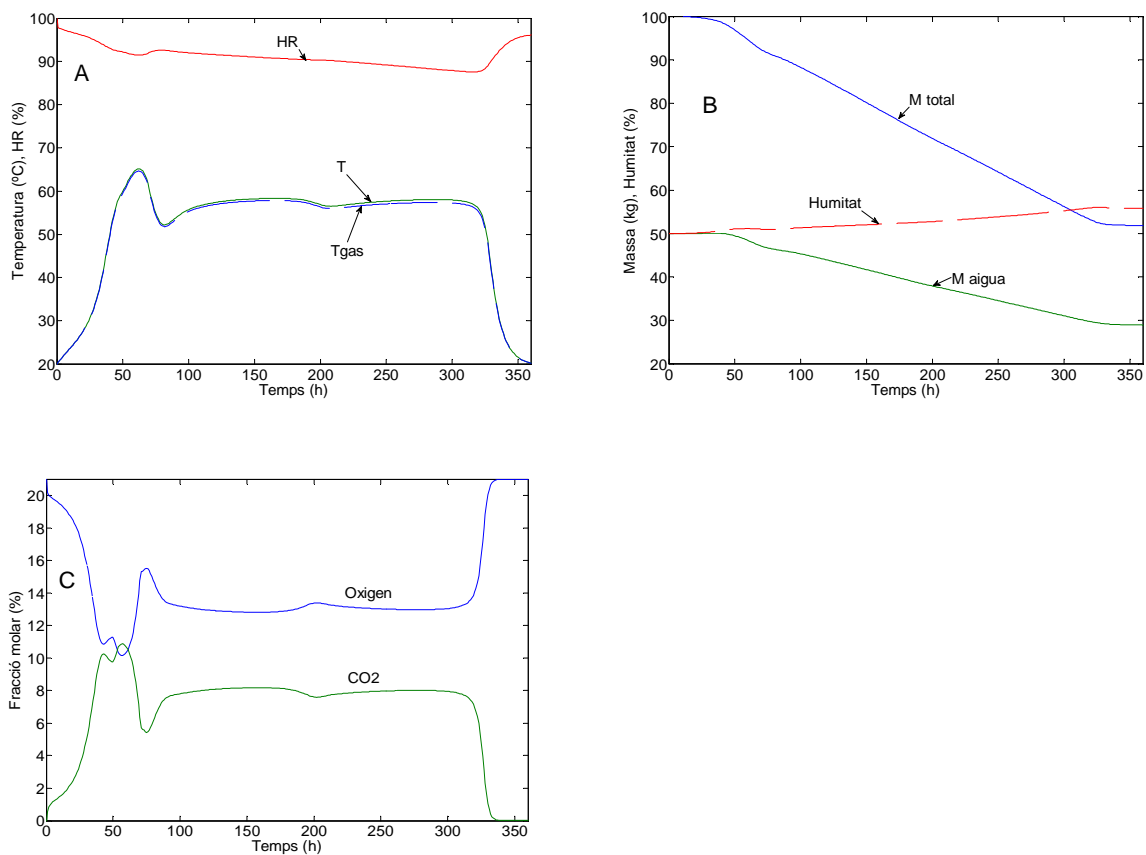


Figura 3.13. Evolució d'un reactor batch de compostatge amb aireig forçat constant ($Q_o=1 \text{ m}^3/\text{h}$) carregat amb una massa inicial de 100 kg de residu utilitzant el model de J. Kaiser. A) Temperatures de la fase sòlida, de la fase gasosa i humitat relativa del gas. B) Massa total (M_T), massa d'aigua (m_w) i humitat del producte, C) Concentració en fase gasosa (fracció molar respecte a gas sec) d'oxigen i CO₂.

3.4.1.2 Simulacions amb el model biològic de Solé-Mauri

A partir dels diferents models de compostatge descrits en la literatura Solé-Mauri et al. (2007) desenvoluparen un model biològic de compostatge per a reactors batch de mescla completa que incloïa la hidròlisi dels substrats com a pas previ a la seva assimilació pels microorganismes. L'anàlisi de sensibilitat dels paràmetres biològics mostrà que alguns processos eren poc rellevants i es podien negligir, el que va abocar a l'obtenció d'un model simplificat més senzill de manejar i pel que es proposaren un

conjunt de valors dels seus paràmetres (Solé-Mauri, 2006). Tots dos models es basaven en el model físic descrit en el present capítol. El model simplificat de Solé-Mauri (2006), amb algunes adaptacions, és el que s'usa en les presents simulacions. Les variables d'estat del model es defineixen a la taula C3-A2.1, els corresponents valors dels paràmetres biològics a la taula C3-A2.2, i l'estructura general del model amb totes els seves cinètiques i estequiometries es presenten a la taula C3-A2.3.

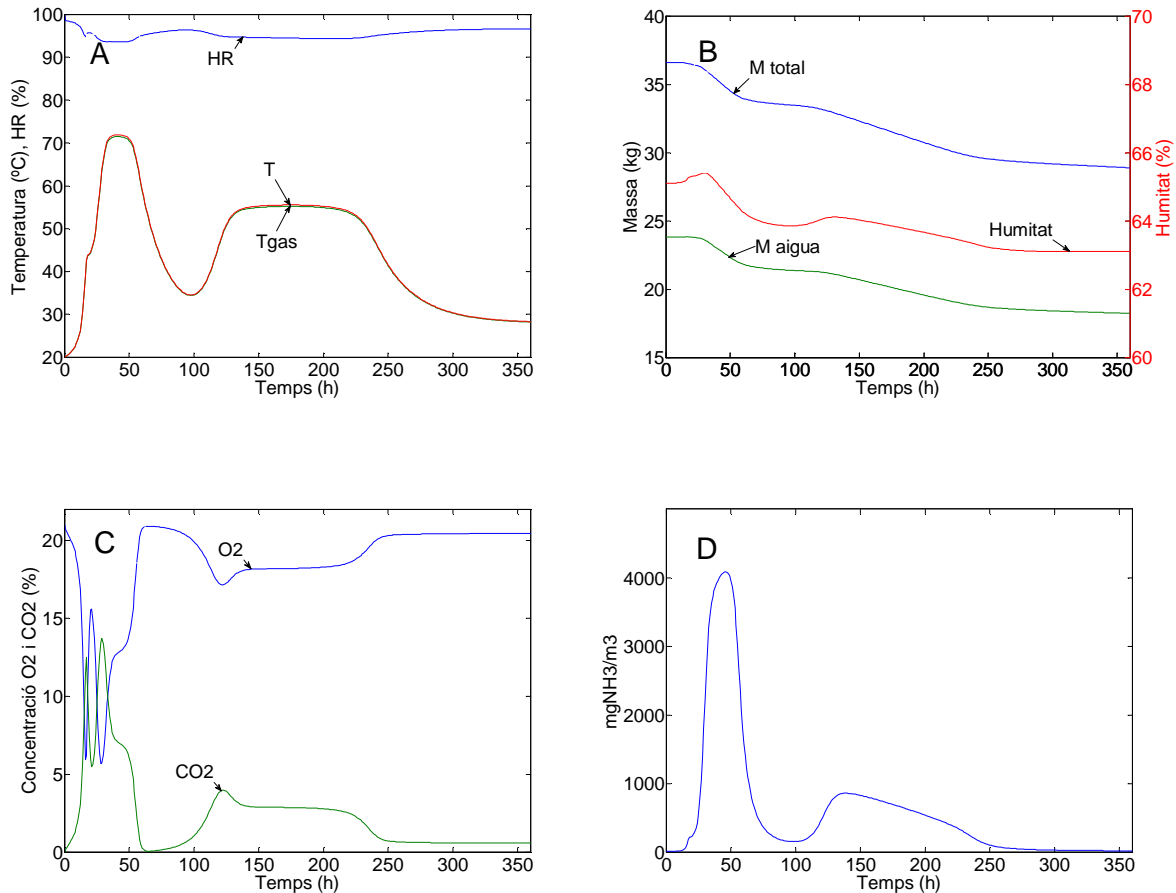


Figura 3.14. Evolució d'un reactor batch de compostatge carregat amb una massa inicial de 36.6 kg de mescla i sotmès a aireig forçat constant ($Q_0=0.24 \text{ m}^3/\text{h}$) segons el model adaptat de Solé-Mauri. A) Temperatures de les fases sòlida i gasosa i humitat relativa en la fase gasosa (HR), B) Massa total, massa d'aigua i humitat de la mescla (wb), C) Concentracions en la fase gasosa d'oxigen i diòxid de carboni, D) Concentració en fase gasosa d'amoniac.

A la Fig. 3.14 es mostren les evolucions simulades de diferents variables del model. La composició de la mescla de càrrega del reactor es correspon a la del reactor R1 de l'experiment 1 (veure Taula 5.8, capítol 5). Les simulacions reproduïxen la pujada inicial de temperatura fins arribar a règim termòfil, la posterior davallada degut a l'esgotament dels substrats assimilables per les poblacions bacterianes, i la remuntada deguda al creixement de la població de fongs mesòfils que es nodreixen dels productes de la hidròlisi dels components carbonosos recalcitrants (fibra). Com en les simulacions amb el model de J.Kaiser (Fig. 3.13) s'aprecia una lleugera diferència de temperatura entre fases i un nivell elevat, però no saturat, d'humitat relativa en la fase gasosa (Fig. 3.14A). La massa total i la massa d'aigua disminueixen durant el procés (Fig. 3.14B) però la humitat del material augmenta lleugerament degut a l'aigua de reacció biològica.

L'evolució de la concentració d'oxigen i CO_2 segueix un patró de simetria (Fig. 3.14C), coincidint els mínims en la concentració d'oxigen amb instants de fort creixement microbià que produeixen ràpids increments de la temperatura. Aquest model biològic contempla la dinàmica del nitrogen i l'alliberament d'amoniac durant la degradació dels substrats nitrogenats. L'amoniac després en la fase de creixement microbià exponencial passa a la fase aquosa i volatilitza ràpidament quan hi ha una pujada de temperatura. La segona pujada de temperatura provocada pel desenvolupament de les poblacions de fongs mesòfils es produeix quan ja gairebé s'han exhaurit els compostos nitrogenats i acaben de volatilitzar gairebé tot el nitrogen present (Fig. 3.14D). El posterior creixement microbià pot estar alentit per la manca de nitrogen.

3.4.2 Anàlisi de sensibilitat

Una anàlisi de sensibilitat ha de permetre visualitzar els efectes de la modificació del valor dels paràmetres del model sobre l'evolució del sistema. La manera en com un paràmetre afecta la dinàmica del sistema és complexa i pot ser que no vagi en el mateix sentit durant tot el procés. Com que el compostatge és un procés industrial que té l'objectiu de produir un producte de qualitat amb un impacte ambiental mínim s'han escollit indicadors que reflecteixin l'estat final assolit o bé que proporcionin una informació integrada del procés. A la Taula 3.7 es donen els paràmetres del model físic considerats en l'anàlisi amb els corresponents valors de referència, i a la Taula 3.8 els indicadors seleccionats i la manera com s'avaluen.

És evident que els valors d'aquests indicadors depenen del model global utilitzat, conjunció del model biològic i del model físic. Atès que aquest darrer és l'objecte del present estudi només es consideren paràmetres del model físic en l'anàlisi de sensibilitat, el que de cap manera s'ha d'interpretar com una baixa rellevància dels paràmetres biològics.

L'indicador I_1 , oxigen consumit biològicament per unitat de massa inicial del procés, reflecteix la mesura en què s'ha assolit l'oxidació del substrat i es pot comparar amb la DBO i la DQO inicials. Els indicadors I_2 , I_3 i I_4 reflecteixen les emissions netes a l'atmosfera de CO_2 , NH_3 i vapor, aquest darrer, sense impacte ambiental, pot ser útil per preveure les condensacions que poden produir-se en instal·lacions industrials tancades. Els indicadors I_5 i I_6 reflecteixen el nivell d'eliminació de patògens i llavors de males herbes, i cal donar-los un valor qualitatiu útil en la comparació de processos, mentre que la humitat final, indicador I_7 , és un índex de la qualitat del producte. L'indicador I_8 representa la concentració mínima d'oxigen dissolt assolida durant el procés. Valors per dessota d'un determinat llindar indiquen un alentiment del procés biològic per manca d'oxigen. L'indicador I_9 és la durada del procés fins que la massa es refreda per dessota de la temperatura de referència T_{fp} i pot es utilitzar tant en la comparació de processos com en l'anàlisi de la seva viabilitat econòmica.

Taula 3.7. Valors de referència dels paràmetres del model físic emprats en l'anàlisi de sensibilitat utilitzant els models biològics de J. Kaiser i de Solé-Mauri.

Paràmetre	Valor refer.	Unitats	Descripció
<i>Físics</i>			
pH	7.5	--	pH de la fase líquida
xklo2	10 ⁻⁶	kg _{O2} ·h ⁻¹ ·Pa ⁻¹ ·kg _{MT} ⁻¹	Coefficient de transferència de massa per l'oxigen
xklo2	10 ⁻⁶	kg _{CO2} ·h ⁻¹ ·Pa ⁻¹ ·kg _{MT} ⁻¹	Coefficient de transferència de massa pel CO ₂
xklnh3	10 ⁻⁶	kg _{NH3} ·h ⁻¹ ·Pa ⁻¹ ·kg _{MT} ⁻¹	Coefficient de transferència de massa per l'amoniac
xklw	10 ⁻⁶	kg _w ·h ⁻¹ ·Pa ⁻¹ ·kg _{MT} ⁻¹	Coefficient de transferència de massa pel vapor
hcsv	10 ³	J·h ⁻¹ ·K ⁻¹ ·kg _{MT} ⁻¹	Coefficient de transferència d'escalfor entre les fases
<i>D'operació i disseny</i>			
Q _o	1 (0.24)	m ³ ·h ⁻¹	Cabal d'aire d'alimentació del reactor
P ₀	1.013·10 ⁵	Pa	Pressió atmosfèrica
ϑ ₀	20	°C	Temperatura corrent d'aire d'entrada al reactor
T _a	20	°C	Temperatura ambient exterior
e _o	0.70	--	Humitat relativa corrent d'aire d'alimentació
UA	3·10 ⁴ (4200)	J·h ⁻¹ ·K ⁻¹	Transferència d'escalfor paret del reactor
C _{con}	10 ⁵ (4·10 ⁴)	J·K ⁻¹	Capacitat calorífica del reactor
V _g	0.5 (0.35)	m ³	Volum fase gasosa

() Valors utilitzats en les simulacions amb el model biològic adaptat de Solé-Mauri.

Taula 3.8. Indicadors d'estat final del producte i d'evolució del procés utilitzats en l'anàlisi de sensibilitat.

Expressió de càlcul	Unitats	Descripció
$I_1 = \frac{-1}{M_{To}} \int_0^t (R_{O_2}^T + \frac{dm_{O_2}}{dt}) dt$	kg _{O2} ·kg _{MT0} ⁻¹	Consum biològic d'oxigen per unitat de massa inicial.
$I_2 = \frac{1}{M_{To}} \int_0^t (R_{CO_2}^T - 44 \frac{dn_{CO_2}}{dt}) dt$	kg _{CO2} ·kg _{MT0} ⁻¹	Emissió neta a l'atmosfera de CO ₂ per unitat de massa inicial.
$I_3 = \frac{1}{M_{To}} \int_0^t (R_{NH_3}^T - 17 \frac{dn_{NH_3}}{dt}) dt$	kg _{NH3} ·kg _{MT0} ⁻¹	Emissió neta a l'atmosfera d'amoniac per unitat de massa inicial.
$I_4 = \frac{1}{M_{To}} \int_0^t (R_w^T - 18 \frac{dn_w}{dt}) dt$	kg _{vap} ·kg _{MT0} ⁻¹	Emissió neta a l'atmosfera de vapor d'aigua per unitat de massa inicial.
$I_5 = \int_0^t (T > T_{r1}) dt$	h	Temps que la massa s'ha mantingut a una temperatura superior a T _{r1} .
$I_6 = \int_0^t (T > T_{r2})(T - T_{r2}) dt$	h·°C	Integral tèrmica a temperatura superior a T _{r2} .
$I_7 = \frac{m_w}{M_T} 100$	--	Humitat final del producte (respecte a massa humida).
$I_8 = \min \left\{ \frac{m_{O_2}}{m_w} \right\} \cdot 10^6$	mg _{O2} ·L ⁻¹	Concentració mínima d'oxigen dissolt assolida durant el procés.
$I_9 = \max \{ t_i \}, T(t_i) \geq T_{fp}$	h	Durada del procés fins que la massa es refreda per dessota de T _{fp} .

Les temperatures de referència T_{r1} i T_{r2} utilitzades en el present estudi pel càlcul dels indicadors I₅ i I₆ són: T_{r1}=55°C (328.15 K), T_{r2}=60°C (333.15 K). L'expressió (T>T_r) denota 1 si T>T_r i 0 en tots els altres casos, t és la durada del procés. Es pren com a temperatura de fi de procés la de l'ambient més 7 °C (T_{fp}=T_{amb}+7).

3.4.2.1 Anàlisi de sensibilitat amb el model biològic de J. Kaiser

A la Taula 3.9 es mostra com es modifiquen els valors dels indicadors al modificar, un a un, els paràmetres físics del model entorn del seu valor de referència (Taula 3.7). D'entrada s'observa que el pH, el coeficient de transferència de massa del CO₂ ($xklo2$) i el volum de la fase gasosa (V_g) gairebé no afecten a cap indicador. La quasi nul·la influència del pH és deguda a que no intervé en cap de les cinètiques biològiques i el seu efecte sobre l'equilibri amoni-amoníac no pot manifestar-se ja que el model biològic no contempla la dinàmica del nitrogen. La possibilitat d'acumulació de CO₂ en fase líquida sense afectar al pH ni a cap altra cinètica explica la irrellevància del valor del coeficient de transferència de massa del CO₂. Un model físic més realista hauria d'incorporar el pH com a variable d'estat i tenir en compte els principals equilibris que el defineixen. El efectes irrellevants del volum de la fase gasosa són deguts a la relativa poca massa dels components gasosos i a que en la transferència líquid gas només hi intervenen les propietats intensives pressió i temperatura.

A la Fig. 3.15 es visualitza la influència dels principals paràmetres físics del model sobre l'evolució del sistema. Així, s'observa que la transferència d'oxigen cap a la fase líquida no és un factor limitant per valors de $xklo2 \geq 0.5 \cdot 10^{-6} \text{ kgO}_2 \cdot \text{h}^{-1} \cdot \text{Pa}^{-1} \cdot \text{kg}_{\text{MT}}^{-1}$, en canvi si $xklo2$ és només un 10% del valor de referència la concentració d'oxigen dissolt pren valors similars (Fig. 3.15 B) a la concentració corresponent a la constant de saturació ($K_{\text{O}_2}=0.2 \text{ mg/L}$) i hi ha un alentiment del creixement microbià per manca d'oxigen, fet que es tradueix en una menor pujada de temperatura (Fig. 3.15A), reflectida en la tendència descendent de l'indicador I_6 , però en una major durada del procés degut a la baixa velocitat de consum dels substrats. El valor de l'indicador I_9 ($I_9=361 \text{ h}$, Taula 3.9) es correspon en aquest cas amb la durada de la simulació ($t=361 \text{ h}$), però el procés de degradació de la matèria orgànica encara no hauria acabat. La manca d'oxigen pel creixement microbià s'aprecia clarament amb la tendència descendent de l'indicador I_8 .

Els efectes del valor del coeficient de transferència líquid gas de vapor també són remarcables. Així, la disminució del seu valor dificulta l'evaporació d'aigua, la humitat relativa de la fase gasosa queda molt per dessota de la saturació i el contingut d'humitat de la massa augmenta (Fig. 3.15D) degut a l'acumulació d'aigua de reacció. La menor evaporació d'aigua provoca un retràs en el refredament de la massa (Fig. 3.15C) que queda reflectit en la tendència a l'alça dels indicadors I_5 , I_6 i I_9 .

El coeficient de transferència d'escalfor per convecció cap a la fase gasosa (hcv) determina, en part, la diferència de temperatures que s'estableix entre la matriu porosa i la fase gasosa. Així, valors superiors a $10^4 \text{ J} \cdot \text{h}^{-1} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{kg}_{\text{MT}}^{-1}$ fan gairebé imperceptible la diferència de temperatures $T-\vartheta$, mentre que a valors baixos ($hcv=10^2 \text{ J} \cdot \text{h}^{-1} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{kg}_{\text{MT}}^{-1}$) aquesta diferència arriba a ser de l'ordre de 5 °C (Fig. 3.15 E). La menor temperatura del gas redueix lleugerament la quantitat d'aigua evaporada (indicador I_4) i en conseqüència també el refredament evaporatiu i la massa es manté lleugerament més calenta (indicadors I_5 i I_6) durant més temps (indicador I_9).

Taula 3.9. Sensibilitat dels indicadors al modificar els valors dels paràmetres físics del model de J.Kaiser. Els valors de referència dels indicadors són els valors dels indicadors quan els paràmetres físics prenen el valor de referència de la Taula 3.7.

		I ₁	I ₂	I ₃	I ₄	I ₅	I ₆	I ₇	I ₈	I ₉
	Valors referència	0.319	0.438	0	0.363	257.95	67.76	55.73	1.25	340
pH	9.0	0.319	0.437	0	0.364	257.74	65.33	55.57	1.25	340
	8.5	0.319	0.438	0	0.363	257.89	67.00	55.70	1.25	340
	8.0	0.319	0.438	0	0.363	257.93	67.58	55.72	1.25	340
	7.0	0.319	0.438	0	0.363	257.95	67.81	55.73	1.25	340
	6.5	0.319	0.438	0	0.363	257.96	67.83	55.73	1.25	340
	6.0	0.319	0.438	0	0.363	257.96	67.83	55.73	1.25	340
xklo2	10·10 ⁻⁶	0.319	0.438	0	0.363	257.93	71.45	55.69	1.47	339
	5·10 ⁻⁶	0.319	0.438	0	0.363	257.93	71.09	55.69	1.45	339
	2·10 ⁻⁶	0.319	0.438	0	0.363	257.94	69.92	55.70	1.37	339
	0.9·10 ⁻⁶	0.319	0.438	0	0.363	257.95	67.23	55.73	1.22	340
	0.5·10 ⁻⁶	0.319	0.438	0	0.362	258.00	62.33	55.78	1.02	340
	0.1·10 ⁻⁶	0.305	0.419	0	0.309	37.57	0.00	58.28	0.06	361
xklo2	10·10 ⁻⁶	0.319	0.438	0	0.363	257.95	67.77	55.73	1.25	340
	5·10 ⁻⁶	0.319	0.438	0	0.363	257.95	67.77	55.73	1.25	340
	2·10 ⁻⁶	0.319	0.438	0	0.363	257.95	67.76	55.73	1.25	340
	0.9·10 ⁻⁶	0.319	0.438	0	0.363	257.95	67.75	55.73	1.25	340
	0.5·10 ⁻⁶	0.319	0.438	0	0.363	257.95	67.74	55.73	1.25	340
	0.1·10 ⁻⁶	0.319	0.438	0	0.363	257.93	67.62	55.72	1.25	340
xklw	10·10 ⁻⁶	0.319	0.438	0	0.397	251.68	60.15	52.57	1.20	333
	5·10 ⁻⁶	0.319	0.438	0	0.393	252.46	61.06	52.99	1.21	334
	2·10 ⁻⁶	0.319	0.438	0	0.381	254.67	63.68	54.13	1.23	336
	0.9·10 ⁻⁶	0.319	0.438	0	0.359	258.62	68.61	56.04	1.26	340
	0.5·10 ⁻⁶	0.319	0.438	0	0.333	263.37	74.95	58.14	1.29	346
	0.1·10 ⁻⁶	0.318	0.438	0	0.211	285.38	108.78	65.74	1.49	361
hcsv	10·10 ³	0.319	0.438	0	0.370	255.52	64.92	55.15	1.24	337
	5·10 ³	0.319	0.438	0	0.369	255.82	65.27	55.22	1.24	337
	2·10 ³	0.319	0.438	0	0.367	256.68	66.26	55.43	1.24	338
	0.9·10 ³	0.319	0.438	0	0.362	258.21	68.06	55.79	1.25	340
	0.5·10 ³	0.319	0.438	0	0.357	260.05	70.26	56.22	1.26	342
	0.1·10 ³	0.319	0.438	0	0.335	268.19	80.14	58.03	1.30	350
Qo	3.0	0.319	0.438	0	0.598	202.71	15.88	19.02	2.40	280
	2.0	0.319	0.438	0	0.520	222.10	34.40	36.40	2.03	300
	1.5	0.319	0.438	0	0.457	236.98	49.10	45.98	1.73	316
	0.9	0.319	0.438	0	0.339	263.17	71.16	57.67	1.11	346
	0.5	0.317	0.434	0	0.215	289.39	41.66	65.27	0.35	361
	0.1	0.096	0.128	0	0.008	0.00	0.00	56.02	0.02	361
ϑo	35	0.319	0.438	0	0.313	270.79	77.78	59.65	1.17	354
	30	0.319	0.438	0	0.333	265.79	73.88	58.13	1.20	348
	25	0.319	0.438	0	0.350	261.57	70.58	56.83	1.22	344
	15	0.319	0.438	0	0.374	254.78	65.28	54.81	1.28	336
	10	0.319	0.438	0	0.382	251.95	63.06	54.06	1.30	333
	5	0.319	0.438	0	0.388	249.38	61.04	53.44	1.32	331
e _o	1.0	0.319	0.438	0	0.348	260.28	69.57	56.95	1.25	342
	0.9	0.319	0.438	0	0.353	259.50	68.96	56.55	1.25	341
	0.8	0.319	0.438	0	0.358	258.72	68.35	56.14	1.25	340
	0.6	0.319	0.438	0	0.368	257.18	67.16	55.30	1.25	339
	0.5	0.319	0.438	0	0.373	256.42	66.57	54.87	1.25	338
	0.4	0.319	0.438	0	0.378	255.67	65.99	54.43	1.25	337
UA	10·10 ⁴	0.319	0.439	0	0.110	0.00	0.00	70.34	0.21	190
	5·10 ⁴	0.319	0.439	0	0.234	142.16	0.00	64.59	0.97	251
	4·10 ⁴	0.319	0.438	0	0.286	199.30	13.73	61.51	1.14	287
	1·10 ⁴	0.196	0.269	0	0.467	319.51	379.47	27.37	1.54	361
	0.5·10 ⁴	0.155	0.213	0	0.498	324.44	561.86	17.02	1.60	361
	0	0.114	0.157	0	0.541	326.40	857.34	3.01	1.67	361

Taula 3.9 (Continuació)

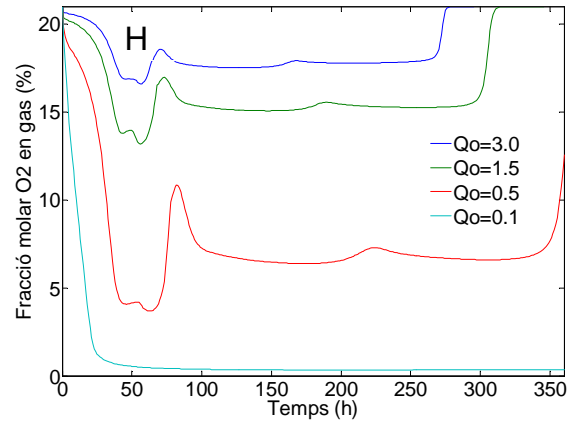
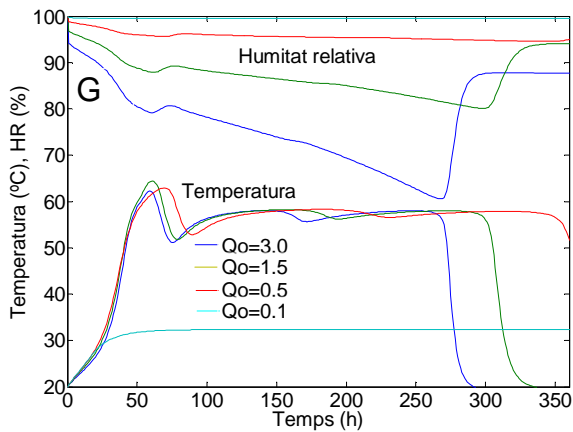
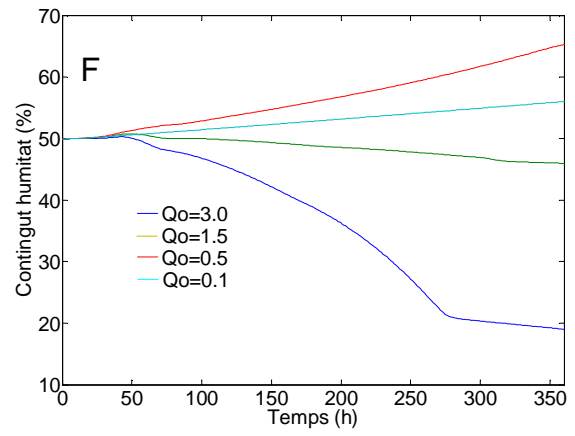
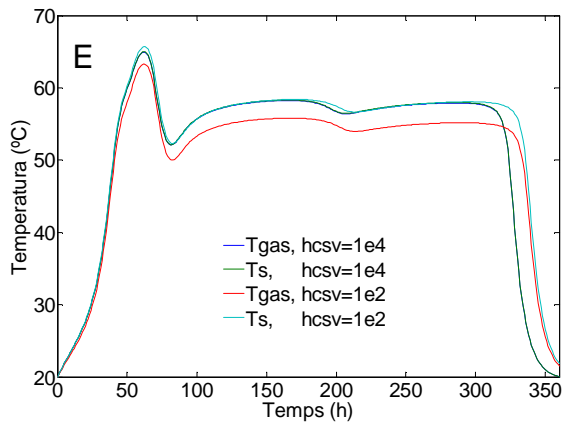
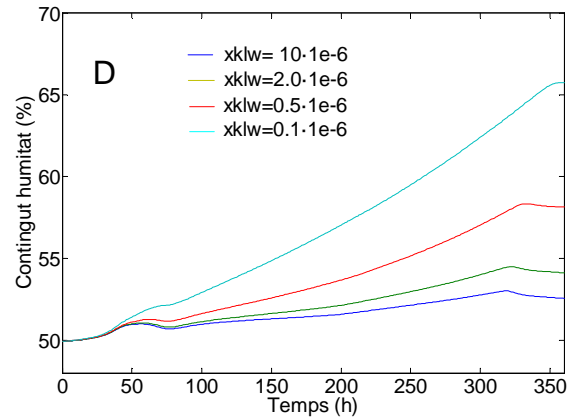
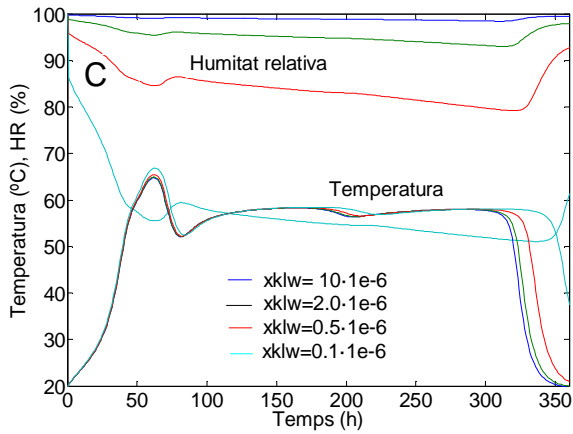
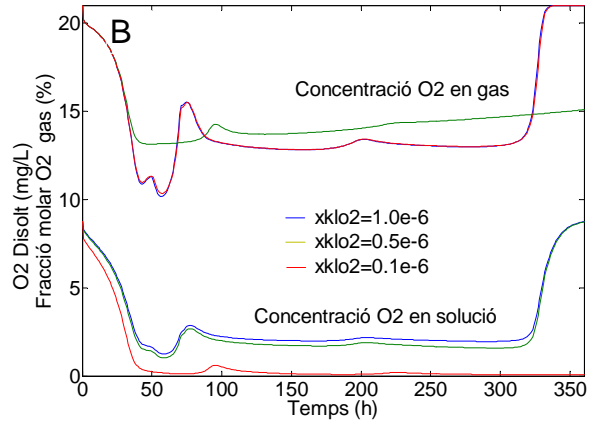
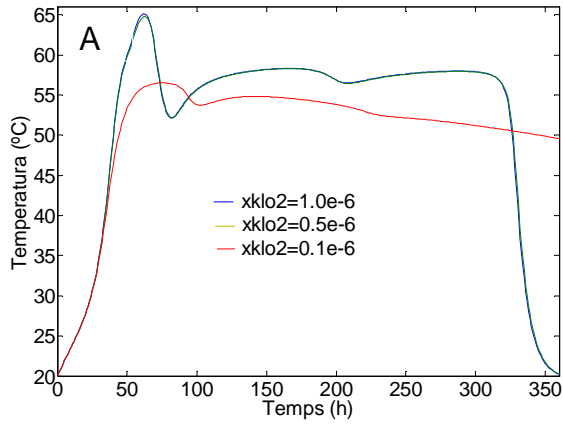
		I ₁	I ₂	I ₃	I ₄	I ₅	I ₆	I ₇	I ₈	I ₉
Ccon	2·10 ⁵	0.319	0.438	0	0.362	256.79	62.27	55.84	1.24	343
	1.5·10 ⁵	0.319	0.438	0	0.362	257.37	65.15	55.78	1.24	342
	1.1·10 ⁵	0.319	0.438	0	0.363	257.83	67.25	55.74	1.25	340
	0.9·10 ⁵	0.319	0.438	0	0.363	258.06	68.25	55.72	1.25	339
	0.5·10 ⁵	0.319	0.438	0	0.364	258.51	70.13	55.68	1.26	338
	0.1·10 ⁵	0.319	0.438	0	0.364	258.94	71.88	55.64	1.26	336
Vg	1.5	0.319	0.438	0	0.363	257.90	67.21	55.73	1.24	340
	1.0	0.319	0.438	0	0.363	257.93	67.49	55.73	1.25	340
	0.75	0.319	0.438	0	0.363	257.94	67.62	55.73	1.25	340
	0.25	0.319	0.438	0	0.363	257.96	67.89	55.73	1.25	340
	0.10	0.319	0.438	0	0.363	257.97	67.97	55.72	1.25	340
	0.05	0.319	0.438	0	0.363	257.97	68.00	55.72	1.25	340

El cabal d'aire insuflat al reactor (Q_o) és el paràmetre d'operació que més influeix en l'evolució del procés. Així (Fig. 3.15G), cabals elevats mantenen una humitat relativa a la fase gasosa baixa provocant una forta pèrdua d'aigua del material (Fig. 3.15F) i una ràpida evolució del procés (Fig. 3.15G i indicador I₉). Aquesta acceleració del procés és deguda a la bona disponibilitat d'oxigen (Fig. 3.15H). Per contra, un cabal d'aireig baix ($Q_o=0.1 \text{ m}^3/\text{h}$) asfixia l'activitat microbiana, allarga el procés (Fig. 3.15G) i proporciona un producte final amb elevat contingut d'humitat (indicador I₇). S'observa clarament la quasi nul·la influència del cabal d'aire en l'evolució de la temperatura durant les primeres 48 hores del procés.

La temperatura de l'aire d'entrada (T_o) té relativament poca influència en el procés i la que té és deguda essencialment a l'augment del contingut d'humitat de l'aire insuflat amb la temperatura al mantenir-se constant la humitat relativa. La reducció en la capacitat evaporativa a temperatures elevades de l'aire d'entrada s'observa en el contingut d'humitat del producte (Fig. 3.15 J i indicador I₇) i provoca un lleuger retràs en l'acabament del procés (Fig. 3.15 I i indicador I₉).

El nivell d'aïllament del reactor resulta ser un paràmetre de disseny amb una forta influència sobre el procés. Així, en un reactor perfectament aïllat ($UA=0$) tot l'escalfor produït biològicament s'utilitza en escalfar la massa i es dissipa principalment en forma de calor latent de vaporització, el que comporta l'obtenció d'un producte amb baixa humitat final (indicador I₇) i que podria fins i tot arribar a paraitzar el procés per assecatge excessiu. L'elevada temperatura que assoleix el reactor (Fig. 3.15K i indicadors I₅ i I₆) alenteix el creixement microbià i allarga la durada del procés (indicador I₉). S'observa (indicadors I₁ i I₂) que el substrat no s'ha degradat del tot amb la durada de procés simulada ($t=360 \text{ h}$).

En reactors a escala de laboratori, on la relació superfície-volum és elevada, cal tenir especial cura en mantenir-hi un bon nivell d'aïllament tèrmic, altrament les temperatures que s'hi assoleixen poden no ser representatives del comportament del substrat en un reactor a escala industrial.



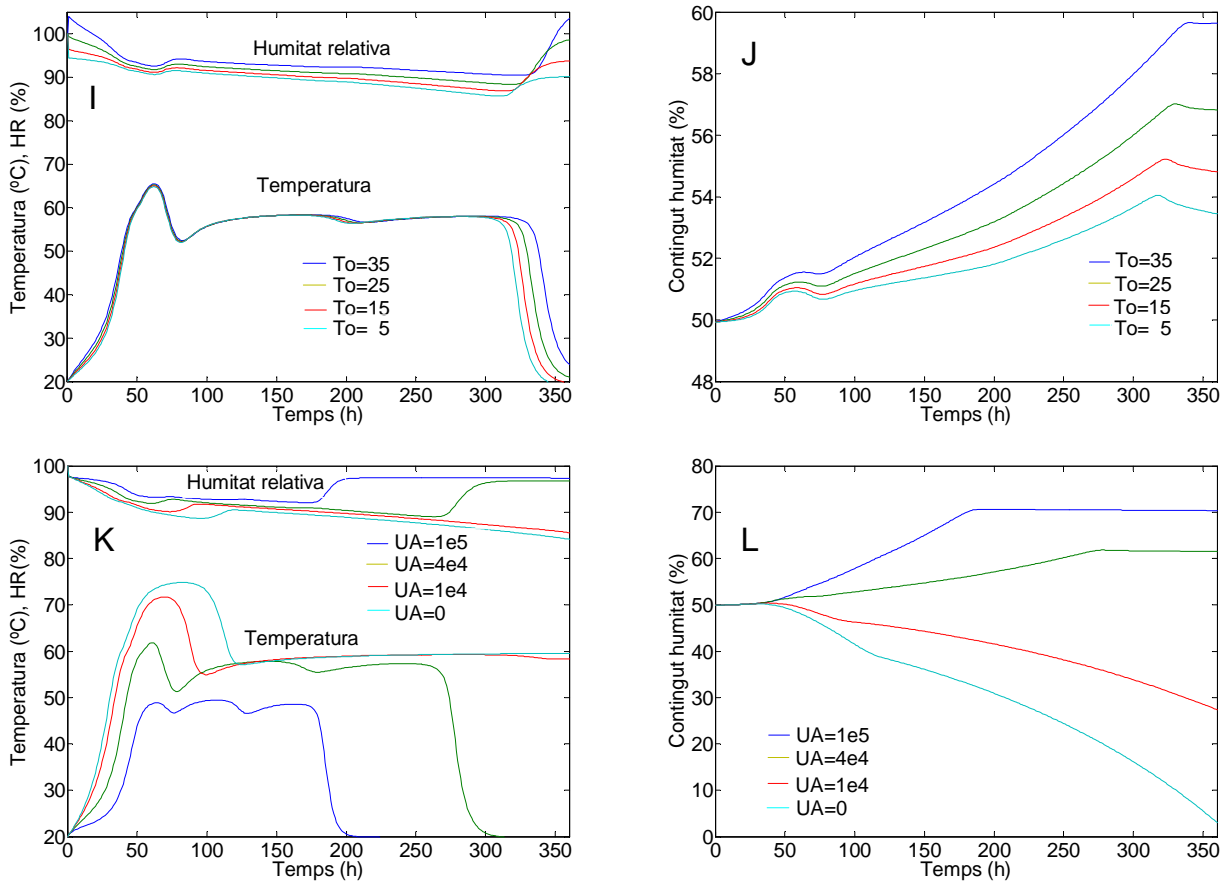


Figura 3.15. Efectes sobre l'evolució del sistema al modificar el valor dels diferents paràmetres físics i operacionals del model entorn els valors de referència (Taula 3.7, model de J. Kaiser). A i B: coeficient de transferència de massa per l'oxigen; C i D: coeficient de transferència de vapor; E: coeficient de transferència d'escalfor entre fase sòlida i gasosa; F, G i H: cabal d'aire insuflat al reactor; I i J: temperatura de l'aire insuflat (ϑ_0); K i L: coeficient global de transferència d'escalfor de la paret del reactor. Les unitats dels paràmetres s'indiquen a la Taula 3.7.

En conclusió, els paràmetres físics del model que tenen més influència sobre el procés són, per un costat els coeficients de transferència de massa d'oxigen i aigua, i per l'altre el cabal d'aire insuflat i el nivell d'aïllament del reactor. Sobre els primers s'hi pot actuar millorant l'estructura de la matriu porosa (adició d'estructurant, volteig), mentre que el cabal d'aireig es pot regular actuant senzillament sobre la velocitat de gir dels bufadors en sistemes d'aireig forçat. El nivell d'aïllament és important en reactors de petita escala, però en grans masses perd rellevància. A més a més, en grans masses els efectes de gradients interns són importants i el present model deixa de ser aplicable.

3.4.2.2 Anàlisi de sensibilitat amb el model biològic adaptat de Solé-Mauri

Les variacions dels indicadors al donar diferents valors a cadascun dels paràmetres físics objecte d'anàlisi (Taula 3.7) es presenten a la Taula 3.10. El model biològic de Solé-Mauri incorpora la dinàmica del nitrogen i la seva volatilització en forma d'amoníac, d'aquí que els valors del pH i del coeficient de transferència de massa de l'amoníac (x_{klnh3}) prenguin rellevància en el procés.

Per contra, el coeficient de transferència de massa de diòxid de carboni (x_{klco2}) gairebé no hi influeix. Igual que en l'anàlisi amb el model de J. Kaiser aquest fet és degut a que el CO_2 acumulat en la fase líquida no intervé ni en les cinètiques biològiques ni en la

determinació del pH per ser aquest un paràmetre del model. Els valors dels indicadors I_1 , I_2 i I_4 en el model adaptat de Solé-Mauri són inferiors als determinats en el model de J. Kaiser degut a què la càrrega té més humitat inicial i més fracció de matèria inert ja que el model només pren en consideració les fraccions de lípids, proteïna i fibra.

A la Fig. 3.16 es mostren els efectes de modificar els paràmetres físics en l'evolució del procés. El pH del sistema és el factor clau que determina la pèrdua per volatilització d'amoníac de la massa en compostatge. Així, un pH de 9.5 provocaria concentracions d'amoníac en la fase gasosa de fins a $3.5 \text{ g}_{\text{NH}_3}/\text{m}^3$ i pèrdues de $3.24 \text{ g}_{\text{NH}_3}$ per cada kg de massa fresca inicial (Figs. 3.16A i B), mentre que un pH lleugerament àcid (pH=6) reduiria aquestes emissions en gairebé dos ordres de magnitud (indicador I_3). La màxima velocitat de volatilització coincideix sempre amb els períodes d'elevada temperatura. A un pH>8.5 es produeix una aturada prematura del creixement de la població de fongs mesòfils degut a la volatilització de tot l'amoníac disponible i es reflecteix en el baix valor dels indicadors I_1 i I_2 (no s'acaba la biodegradació de la matèria carbonosa present per manca de font de nitrogen) i dels indicadors I_5 , I_6 i I_9 (hi ha menys activitat biològica i la temperatura es manté més baixa), La davallada de temperatura provoca alhora una menor evaporació d'aigua (indicador I_4).

Valors baixos del coeficient de transferència d'oxigen ($xklo2$) alenteixen el procés (Figs. 3.16C i D) degut a la manca d'oxigen dissolt utilitzable pel creixement microbià (indicador I_8), provoca que les temperatures assolides siguin inferiors (indicadors I_5 i I_6) i que el procés s'allargui (indicador I_9). Les temperatures més baixes del procés causen una menor volatilització d'amoníac (indicador I_3) però no afecten al nivell d'oxidació final del substrat (indicadors I_1 i I_2), simplement, el procés és més lent.

El coeficient de transferència de massa de l'amoníac ($xklnh3$), tal com era d'esperar, determina també l'emissió total a l'atmosfera (Fig. 3.16E i indicador I_3) però no té influència rellevant en els altres indicadors.

El coeficient de transferència de massa de vapor ($xklw$) afecta la humitat relativa de l'aire i de manera indirecta a la temperatura del sistema. En efecte, a valors baixos hi ha poca vaporització, el que origina humitats relatives més baixes a la fase gasosa i menys pèrdua d'humitat del producte (Figs. 3.16F i G). L'evaporació d'humitat del sistema és un important mecanisme de refredament de la massa. Així, a la Fig. 3.16F s'aprecia amb claredat que a valors elevats de $xklw$ hi ha un refredament més ràpid de la massa després de cada pujada de temperatura, fet que també es reflecteix en els valors dels indicadors I_5 , I_6 i I_9 .

Igual que amb el model biològic de J. Kaiser, el cabal d'aireig és un paràmetre de gran rellevància en l'evolució del procés. Així, cabals d'aireig baixos (Figd 3.16I, J i K) retarden el procés degut a la manca d'oxigen pels microorganismes (indicador I_8) però alhora redueixen el refredament de la massa tant per convecció com per evaporació. Aquestes dues tendències oposades es reflecteixen en el màxim que presenta l'indicador I_9 i en la temperatura màxima assolida en el procés (Fig. 3.16I i indicadors I_5 i I_6). En tots els cassos, però, un cabal d'aireig elevat incrementa la volatilització d'amoníac.

Taula 3.10. Sensibilitat dels indicadors al modificar els valors dels paràmetres físics utilitzant el model biològic de Solé-Mauri. Els valors de referència són els que prenen els indicadors quan els paràmetres físics prenen el valor de referència donats a la Taula 3.7.

		I₁	I₂	I₃·10³	I₄	I₅	I₆	I₇	I₈	I₉
Valors referència		0.076	0.098	2.00	0.186	101.40	293.05	63.11	0.62	361*
pH	9.0	0.049	0.061	3.50	0.117	36.57	288.54	63.51	0.63	193
	8.5	0.055	0.069	3.29	0.134	36.67	289.67	63.35	0.61	214
	8.0	0.067	0.085	2.86	0.168	87.37	291.61	63.00	0.61	263
	7.0	0.076	0.098	0.94	0.186	102.98	293.91	63.04	0.62	361
	6.5	0.076	0.098	0.34	0.186	103.38	294.29	62.99	0.62	361
	6.0	0.076	0.098	0.11	0.186	103.49	294.42	62.98	0.62	361
xklo2	10·10 ⁻⁶	0.076	0.098	2.00	0.186	101.42	295.53	63.10	0.75	361
	5·10 ⁻⁶	0.076	0.098	2.00	0.186	101.42	295.28	63.10	0.73	361
	2·10 ⁻⁶	0.076	0.098	2.00	0.186	101.41	294.50	63.11	0.69	361
	0.9·10 ⁻⁶	0.076	0.098	2.00	0.186	101.40	292.71	63.11	0.60	361
	0.5·10 ⁻⁶	0.076	0.098	2.00	0.186	101.42	289.61	63.12	0.50	361
	0.1·10 ⁻⁶	0.076	0.098	1.91	0.182	103.37	227.48	63.27	0.15	361
xklo2	10·10 ⁻⁶	0.076	0.098	2.00	0.186	101.41	293.09	63.11	0.62	361
	5·10 ⁻⁶	0.076	0.098	2.00	0.186	101.41	293.09	63.11	0.62	361
	2·10 ⁻⁶	0.076	0.098	2.00	0.186	101.40	293.07	63.11	0.62	361
	0.9·10 ⁻⁶	0.076	0.098	2.00	0.186	101.40	293.05	63.11	0.62	361
	0.5·10 ⁻⁶	0.076	0.098	2.00	0.186	101.40	293.01	63.11	0.62	361
	0.1·10 ⁻⁶	0.076	0.098	2.00	0.186	101.36	292.71	63.10	0.61	361
xklnh3	10·10 ⁻⁶	0.076	0.098	2.06	0.186	101.21	293.00	63.11	0.62	361
	5·10 ⁻⁶	0.076	0.098	2.05	0.186	101.23	293.01	63.11	0.62	361
	2·10 ⁻⁶	0.076	0.098	2.03	0.186	101.30	293.02	63.11	0.62	361
	0.9·10 ⁻⁶	0.076	0.098	1.99	0.186	101.42	293.06	63.11	0.62	361
	0.5·10 ⁻⁶	0.076	0.098	1.93	0.186	101.58	293.11	63.10	0.62	361
	0.1·10 ⁻⁶	0.076	0.098	1.52	0.186	102.37	293.41	63.07	0.62	361
xklw	10·10 ⁻⁶	0.076	0.098	1.98	0.194	96.58	278.92	62.73	0.60	361
	5·10 ⁻⁶	0.076	0.098	1.99	0.193	97.15	280.58	62.77	0.60	361
	2·10 ⁻⁶	0.076	0.098	1.99	0.190	98.81	285.43	62.90	0.61	361
	0.9·10 ⁻⁶	0.076	0.098	2.00	0.185	101.95	294.68	63.15	0.62	361
	0.5·10 ⁻⁶	0.076	0.098	2.01	0.178	106.05	306.87	63.48	0.63	361
	0.1·10 ⁻⁶	0.076	0.098	2.08	0.135	129.43	379.06	65.37	0.73	361
hcsv	10·10 ³	0.076	0.098	1.99	0.188	100.02	289.14	63.02	0.61	361
	5·10 ³	0.076	0.098	2.00	0.188	100.18	289.58	63.03	0.61	361
	2·10 ³	0.076	0.098	2.00	0.187	100.64	290.89	63.06	0.61	361
	0.9·10 ³	0.076	0.098	2.00	0.186	101.57	293.53	63.12	0.62	361
	0.5·10 ³	0.076	0.098	2.00	0.184	102.89	297.29	63.21	0.62	361
	0.1·10 ³	0.076	0.098	2.04	0.169	113.21	327.64	63.90	0.66	361
Qo	2.00	0.072	0.094	2.65	0.343	12.47	52.80	53.55	2.49	152
	1.00	0.074	0.096	2.58	0.314	18.42	109.15	55.86	2.08	194
	0.50	0.076	0.098	2.39	0.259	31.44	190.07	59.39	1.51	291
	0.20	0.076	0.098	1.87	0.168	114.22	316.29	63.93	0.44	361
	0.10	0.076	0.098	1.29	0.103	156.71	335.35	66.56	0.12	361
	0.03	0.064	0.079	2.41	0.022	86.78	0.00	68.16	0.02	361
do	35	0.076	0.098	2.03	0.158	118.51	325.48	64.36	0.56	361
	30	0.076	0.098	2.02	0.170	111.85	312.99	63.85	0.58	361
	25	0.076	0.098	2.01	0.179	106.24	302.32	63.44	0.60	361
	15	0.076	0.098	1.99	0.191	97.14	284.86	62.85	0.64	361
	10	0.076	0.098	1.99	0.196	93.30	277.49	62.65	0.66	361
	5	0.076	0.098	1.98	0.199	89.77	270.73	62.51	0.68	325
e _o	1.0	0.076	0.098	2.01	0.177	104.22	298.85	63.53	0.62	361
	0.9	0.076	0.098	2.01	0.180	103.27	296.91	63.39	0.62	361
	0.8	0.076	0.098	2.00	0.183	102.33	294.98	63.25	0.62	361
	0.6	0.076	0.098	2.00	0.189	100.48	291.14	62.97	0.62	361
	0.5	0.076	0.098	1.99	0.192	99.56	289.23	62.83	0.62	361
	0.4	0.076	0.098	1.99	0.195	98.65	287.33	62.68	0.62	361
UA	20·10 ³	0.075	0.098	0.35	0.044	1.98	0.00	68.55	0.26	125
	10·10 ³	0.075	0.098	0.96	0.088	18.91	84.97	67.06	0.34	180
	6·10 ³	0.076	0.098	1.59	0.140	29.12	205.17	65.07	0.50	270
	2·10 ³	0.074	0.096	2.58	0.279	216.90	469.52	58.05	0.80	361
	0.5·10 ³	0.060	0.076	3.01	0.310	248.04	689.25	54.28	0.94	361
	0	0.055	0.068	3.17	0.323	242.61	800.16	52.77	0.98	361

Taula 3.10 (Continuació)

		I₁	I₂	I₃·10³	I₄	I₅	I₆	I₇	I₈	I₉
Ccon	15·10 ⁴	0.076	0.098	1.75	0.171	88.14	124.21	63.78	0.26	361
	10·10 ⁴	0.076	0.098	1.88	0.178	94.91	201.34	63.48	0.45	361
	6·10 ⁴	0.076	0.098	1.96	0.183	99.67	262.82	63.23	0.54	361
	3·10 ⁴	0.076	0.098	2.02	0.187	102.00	308.03	63.05	0.66	361
	2·10 ⁴	0.076	0.098	2.03	0.189	102.43	322.91	62.99	0.72	361
	0.4·10 ⁴	0.076	0.098	2.06	0.191	102.93	346.53	62.88	0.81	361
Vg	1.50	0.076	0.098	1.97	0.185	100.97	281.50	63.14	0.75	361
	1.00	0.076	0.098	1.98	0.185	101.18	286.88	63.13	0.68	361
	0.50	0.076	0.098	2.00	0.186	101.36	291.72	63.11	0.62	361
	0.20	0.076	0.098	2.00	0.186	101.43	294.44	63.11	0.62	361
	0.10	0.076	0.098	2.01	0.186	101.43	295.50	63.10	0.63	361
	0.02	0.076	0.098	2.01	0.186	101.42	296.47	63.10	0.64	361

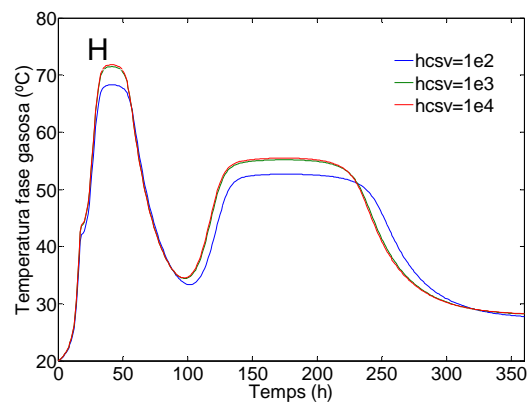
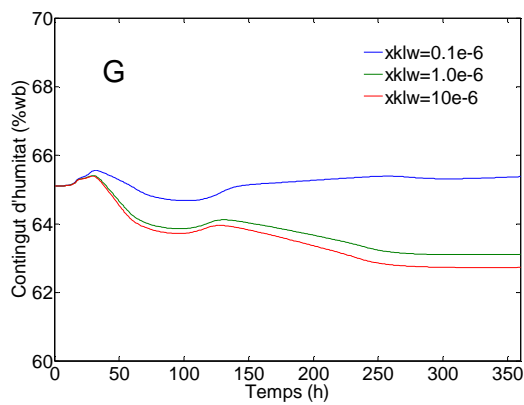
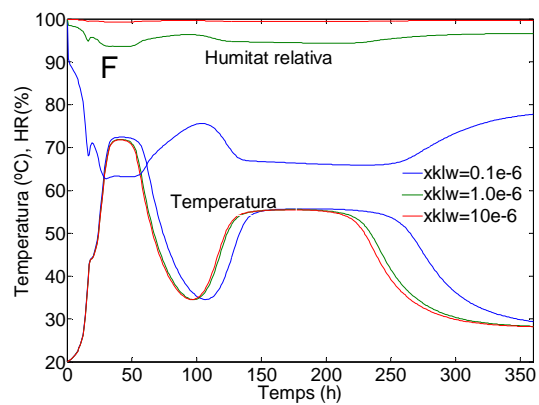
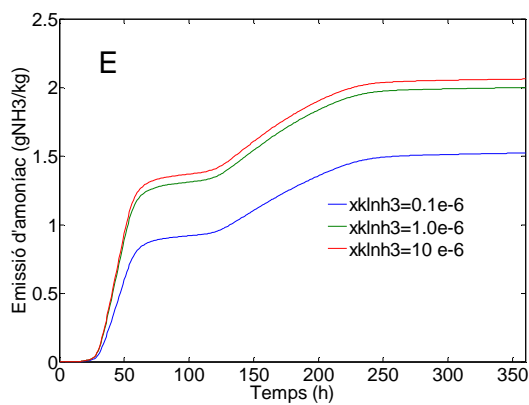
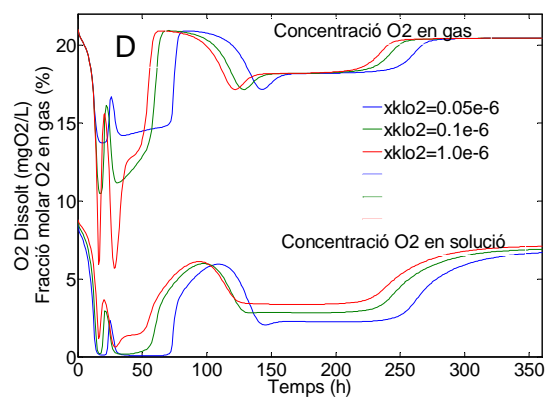
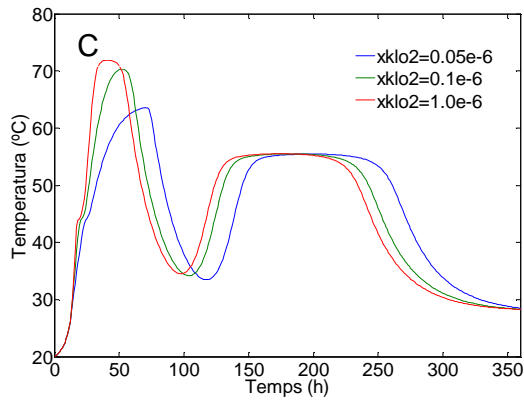
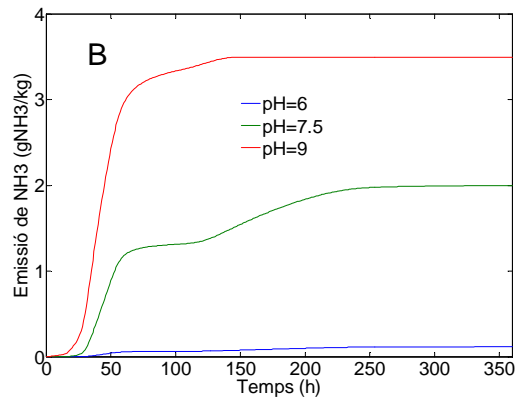
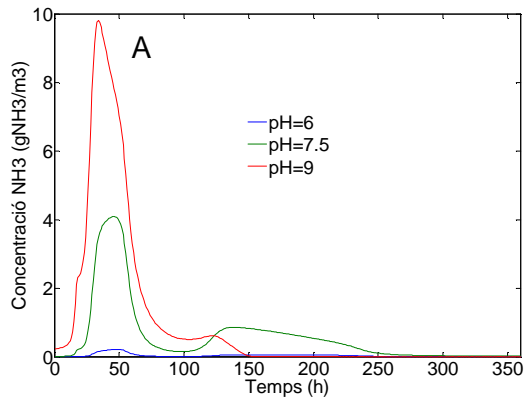
* I₉=361 indica que amb la durada del procés ($t=360 h$) la temperatura del reactor no ha baixat de 7°C per sobre de la temperatura de l'ambient.

Temperatures elevades d'entrada del corrent d'aireig afecten lleugerament el procés a l'accelerar-ne l'arrencada i allargar-ne l'acabament (Fig. 3.16L), tal com també reflecteix l'indicador I₉. Tanmateix no provoquen una major eliminació d'humitat de la massa (indicador I₄) degut a que l'aire d'entrada també conté més humitat (la humitat relativa es manté constant). Tal com s'observa a la Taula 3.10 una baixa humitat relativa del corrent d'aireig (e_0) augmenta l'aigua evaporada en el procés (indicador I₄) i escurça la seva durada (indicador I₉) al provocar un major refredament evaporatiu de la massa indicadors (I₅ i I₆).

El nivell d'aïllament del reactor (paràmetre UA) també presenta una forta influència sobre el desenvolupament del procés (Figs. 3.16M i N). Així, valors baixos del coeficient global de transferència d'escalfor de la paret del reactor redueixen la pèrdua de calor sensible amb el conseqüent augment en la temperatura (indicadors I₅, I₆ i I₉) que alhora incrementa la volatilització d'amoníac (indicador I₃) i l'evaporació d'humitat (indicadors I₄ i I₇). El procés s'alenteix degut a la frenada del creixement microbià per les elevades temperatures, provocant que amb la durada de la simulació ($t=360 h$) encara no s'arribi a degradar la matèria carbonosa present (indicadors I₁ i I₂). Al final del procés el creixement microbià s'atura degut a la manca d'amoníac.

Els efectes d'una baixa inèrcia tèrmica del reactor (C_{con}) es tradueixen en una punta de temperatura més elevada (indicadors I₅ i I₆) i en un refredament més ràpid de la massa a final del procés (indicador I₉). L'assoliment de temperatures més elevades provoca alhora una major volatilització d'amoníac.

El volum de la fase gasosa (V_g) no té influència decisiva en cap dels indicadors, a excepció de I₈, però a un nivell que no afecta el creixement microbià.



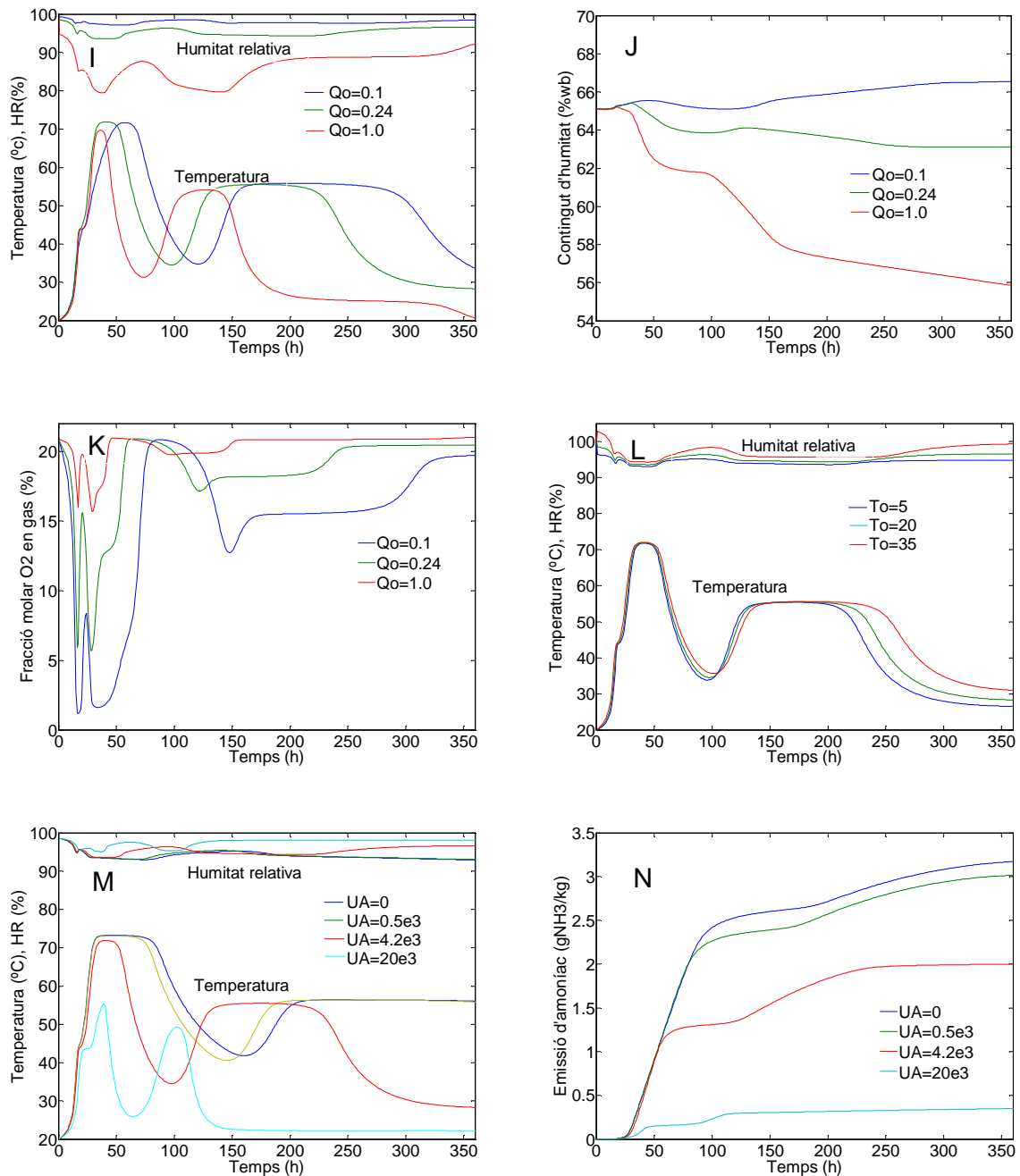


Figura 3.16. Efectes sobre l'evolució del sistema al modificar els valors de diferents paràmetres físics i operacionals del model adaptat de Solé-Mauri. A i B: pH; C i D: Coeficient de transferència de massa per l'oxigen; E: Coeficient de transferència de massa per l'amoníac; F i G: coeficient de transferència de massa pel vapor d'aigua; H: Coeficient de transferència d'escalfor convectiva entre les fases sòlid-líquid i la fase gasosa; I, J i K: Cabal d'aireig del reactor; L: Temperatura del cabal d'aireig; M i N: coeficient global de transferència d'escalfor de la paret del reactor. Les unitats dels paràmetres s'indiquen a la Taula 3.7.

ANNEXE C3-A1 EL MODEL BIOLÒGIC DE J. KAISER (1996)

Taula A3-1.1. Variables d'estat en la implementació del model biològic descrit per (Kaiser, 1996). Les variables 1-10, 14 i 21 són les utilitzades per l'autor. Aquest model biològic no contempla la dinàmica del nitrogen en conseqüència les variables 13 i 17 són nul·les.

Variable nº	Símbol	Unitats	Descripció
1	m_{s1}	kg	Massa de sucres i midons
2	m_{s2}	kg	Massa d'hemicel·luloses
3	m_{s3}	kg	Massa de cel·lulosa
4	m_{s4}	kg	Massa de lignina
5	m_{xh}	kg	Massa de substàncies húmiques
6	m_I	kg	Massa de materials inerts
7	m_{x1}	kg	Massa de bacteris
8	m_{x2}	kg	Massa d'actinomicets
9	m_{x3}	kg	Massa de brown-rot fungi
10	m_{x4}	kg	Massa de white-rot fungi
*11	m_{O2}	kg	Massa d'oxigen en solució
*12	m_{CO2}	kg	Massa de CO ₂ en solució
*13	m_{NH3}	kg	Massa d'amoníac en solució
14	m_w	kg	Massa d'aigua del sistema
*15	n_{O2}	kmol	Massa molar d'oxigen en la fase gasosa
*16	n_{CO2}	kmol	Massa molar de CO ₂ en la fase gasosa
*17	n_{NH3}	kmol	Massa molar d'amoníac en la fase gasosa
*18	n_{H2Ov}	kmol	Massa molar de vapor d'aigua en la fase gasosa
*19	n_{N2}	kmol	Massa molar de nitrogen en la fase gasosa
*20	ϑ	K	Temperatura de la fase gasosa
21	T	K	Temperatura de la fase sòlid-liquid

(*) Variables addicionals introduïdes pel model general de balanç de massa i energia proposat. Els indicadors de posició definits a la Taula 3.1 prenen els valors: $is=10$, $iw=14$, $it=20$.

Taula A 3-1.2. Valors dels paràmetres del model de J. Kaiser (1996) utilitzats en les simulacions.

	Símbol	Valor	Unitats	Descripció
Paràmetres cinètics				
	$\hat{\mu}_1$	0.2	h^{-1}	Creixement específic màxim dels bacteris
	$\hat{\mu}_2$	0.1	h^{-1}	Creixement específic màxim dels actinomicets
	$\hat{\mu}_3$	0.05	h^{-1}	Creixement específic màxim dels brown-rot fungi
	$\hat{\mu}_4$	0.03	h^{-1}	Creixement específic màxim dels white-rot fungi
	K_1	0.02	$kg_i \cdot kg_{TM}^{-1}$	Constant de saturació de Monod pels bacteris
	K_2	0.02	$kg_i \cdot kg_{TM}^{-1}$	Constant de saturació de Monod pels actinomicets
	K_3	0.02	$kg_i \cdot kg_{TM}^{-1}$	Constant de saturació de Monod pels brown-rot fungi
	K_4	0.02	$kg_i \cdot kg_{TM}^{-1}$	Constant de saturació de Monod pels white-rot fungi
	$K_{O2}^{(*)}$	0.2	$mg_{O2} \cdot L^{-1}$	Constant de saturació per manca d'oxigen dissolt
	k_d	0.001	h^{-1}	Taxa de mort (tots els microorganismes)
Paràmetres estequiòmètrics				
	Y	0.2	$kg_{xi} \cdot kg_{sj}^{-1}$	Rendiment en la conversió substrat-microorganismes
	C_c	0.4	$kg_C \cdot kg_{XSi}^{-1}$	Contingut en carboni dels substrats i microorganismes
	Δh	$14 \cdot 10^6$	J/kg _{O2}	Poder calorífic associat al consum d'oxigen
Calors específiques				
	c_{p0}	800	$J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$	Calor específica matèria mineral (cendres)
	c_{ps}	2300	$J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$	Calor específica matèria orgànica
	c_{pw}	4200	$J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$	Calor específica aigua i microorganismes
Paràmetres de planta i operació				
	ϑ_0	20	°C	Temperatura corrent d'aire d'entrada al reactor
	T_a	20	°C	Temperatura ambient exterior
	UA	$3 \cdot 10^4$	$J \cdot h^{-1} \cdot K^{-1}$	Coefficient global transmissió escalfor per àrea
	C_{con}	10^5	$J \cdot K^{-1}$	Capacitat calorífica del contenidor
	V_g	0.5	m^3	Volum de la fase gasosa
	P_0	1.013	bar	Pressió atmosfèrica
	Q_0	1.0	$m^3 \cdot h^{-1}$	Cabal insuflat en les condicions exteriors

Taula A3-1.3. Matriu de coeficients estequiomètrics i velocitats de reacció del model biològic de J.Kaiser (1996)

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	Reaction rates ρ_i [kg \cdot h $^{-1}$ ·kg $_{TM}^{-1}$]	
	m_{s1}	m_{s2}	m_{s3}	m_{s4}	m_{xh}	m_I	m_{x1}	m_{x2}	m_{x3}	m_{x4}	m_{O2}	m_{CO2}	m_{NH3}	m_w		
1.Growth of bacteria	$-\frac{1}{Y}$						1					$-f_{ox}$	f_{co2}		f_{aq}	$f_{o2} f_{T1} \hat{\mu}_1 \frac{S_1}{K_1 + S_1} X_1$
2. Growth of actinomycetes	$-\frac{1}{Y} \frac{s_1}{S_2}$	$-\frac{1}{Y} \frac{s_2}{S_2}$						1				$-f_{ox}$	f_{co2}		f_{aq}	$f_{o2} f_{T2} \hat{\mu}_2 \frac{S_2}{K_2 + S_2} X_2$
3.Growth of brown-rot fungi	$-\frac{1}{Y} \frac{s_1}{S_3}$	$-\frac{1}{Y} \frac{s_2}{S_3}$	$-\frac{1}{Y} \frac{s_3}{S_3}$						1			$-f_{ox}$	f_{co2}		f_{aq}	$f_{o2} f_{T2} \hat{\mu}_3 \frac{S_3}{K_3 + S_3} X_3$
4.Growth of white-rot fungi	$-\frac{1}{Y} \frac{s_1}{S_4}$	$-\frac{1}{Y} \frac{s_2}{S_4}$	$-\frac{1}{Y} \frac{s_3}{S_4}$	$-\frac{1}{Y} \frac{s_4}{S_4}$						1		$-f_{ox}$	f_{co2}		f_{aq}	$f_{o2} f_{T2} \hat{\mu}_4 \frac{S_3}{K_4 + S_3} X_4$
5.Decay of bacteria					1		-1									$k_d X_1$
6.Decay of actinomycetes					1			-1								$k_d X_2$
7.Decay of brown-rot fungi					1				-1							$k_d X_3$
8.Decay of white-rot fungi					1					-1						$k_d X_4$

Relacions entre les fraccions màssiques que apareixen en les expressions cinètiques i les variables d'estat	Coefficients estequiomètrics per l'oxigen, el CO ₂ i l'aigua	Funcions d'alentiment del creixement microbià
$s_i = \frac{m_{si}}{M_T}; \quad X_i = \frac{m_{xi}}{M_T} \quad i=1, \dots, 4$ $S_1 = s_1$ $S_2 = s_1 + s_2$ $S_3 = s_1 + s_2 + s_3$ $S_4 = s_1 + s_2 + s_3 + s_4$ $M_T = m_{s1} + \dots + m_{s4} + m_{xh} + m_I + m_{x1} + \dots + m_{x4} + m_w$	$f_{ox} = C_c \frac{32}{12} \left(\frac{1}{Y} - 1 \right)$ $f_{CO2} = C_c \frac{44}{12} \left(\frac{1}{Y} - 1 \right)$ $f_{aq} = (1 - C_c) \left(\frac{1}{Y} - 1 \right)$	<p>a) Per temperatura (T en °C)</p> $f_{T1} = \frac{T(80 - T)}{1600} \quad \text{si } 0 \leq T \leq 80^\circ\text{C}; \quad f_{T1} = 0 \quad \text{si } T > 80^\circ\text{C}$ $f_{T2} = \frac{T(60 - T)}{20(80 - T)} \quad \text{si } 0 \leq T \leq 60^\circ\text{C}; \quad f_{T2} = 0 \quad \text{si } T > 60^\circ\text{C}$ <p>b) Per manca d'oxigen</p> $^{(*)} f_{O2} = \frac{m_{O2} \cdot 10^6}{K_{O2} m_w + m_{O2} \cdot 10^6}$

^(*) El model original de J.Kaiser no considerava l'alentiment del creixement per manca d'oxigen. Valor adoptat (Taula A 3-1.2.) de K_{O2} segons Henze et al., (2000).

ANNEXE C3-A2 EL MODEL BIOLÒGIC ADAPTAT DE SOLÉ-MAURI (2006)

Taula C3-A2.1. Variables d'estat en l'adaptació del model biològic simplificat descrit per Solé-Mauri.

Varble n°	Símbol	Unitats	Descripció	Fórmula general
1	X _{LC}	kg	Components particulars carbonosos làbils	C ₂₅ H ₄₅ O ₃
2	X _{CN}	kg	Components particulars nitrogenats	C ₁₆ H ₂₄ O ₅ N ₄
3	X _{RC}	kg	Components particulars carbonosos recalcitrants	C ₁₀ H ₁₈ O ₉
4	X _{MB}	kg	Biomassa de bacteris mesòfils	C ₅ H ₇ O ₂ N
5	X _{TB}	kg	Biomassa de bacteris termòfils	C ₅ H ₇ O ₂ N
6	X _{MF}	kg	Biomassa de fongs mesòfils	C ₁₀ H ₁₇ O ₆ N
7	X _{DB}	kg	Biomassa morta procedent de bacteris i inerts	C ₅ H ₇ O ₂ N
8	X _{DF}	kg	Biomassa morta procedent de fongs	C ₁₀ H ₁₇ O ₆ N
9	S _{LC}	kg	Components carbonosos làbils hidrolitzats	C ₂₅ H ₄₅ O ₃
10	S _{CN}	kg	Components nitrogenats hidrolitzats	C ₁₆ H ₂₄ O ₅ N ₄
11	S _{RC}	kg	Components carbonosos recalcitrants hidrolitzats	C ₁₀ H ₁₈ O ₉
12	m _{O2}	kg	Massa d'oxigen en solució	O ₂
13	m _{CO2}	kg	Massa de CO ₂ en solució	CO ₂
14	m _{NH3}	kg	Massa d'amoníac en solució	NH ₃
15	m _w	kg	Massa d'aigua del sistema	H ₂ O
16	n _{O2}	kmol	Massa molar d'oxigen en la fase gasosa	O ₂
17	n _{CO2}	kmol	Massa molar de CO ₂ en la fase gasosa	CO ₂
18	n _{NH3}	kmol	Massa molar d'amoníac en la fase gasosa	NH ₃
19	n _{H2Ov}	kmol	Massa molar de vapor d'aigua en la fase gasosa	H ₂ O
20	n _{N2}	kmol	Massa molar de nitrogen en la fase gasosa	N ₂
21	ϑ	K	Temperatura de la fase gasosa	
22	T	K	Temperatura de la fase sòlid-liquid	

Els indicadors de posició definits a la Taula 3.1 prenen els valors: $is=11$, $iw=15$, $it=21$.

Taula C3-A2.1b. Variables i funcions intermèdies de les expressions cinètiques del model adaptat de Solé-Mauri

Variables intermèdies		
$S_i^* = \frac{S_i}{m_w} \cdot 10^3, \quad i=LC, CN, RC, O_2, NH_3 \quad [\text{kg} \cdot \text{m}_{\text{aq}}^{-3}]$	$S_3 = S_{LC}^* + S_{CN}^* + S_{RC}^* \quad [\text{kg} \cdot \text{m}_{\text{aq}}^{-3}]$	$S_2 = S_{LC}^* + S_{CN}^* \quad [\text{kg} \cdot \text{m}_{\text{aq}}^{-3}]$
$M_T = X_{LC} + X_{CN} + \dots + m_w = \sum_{j=1}^{15} m_j \quad [\text{kg}]$		
Funcions d'alentiment del creixement		
Per temperatura ($i=1,2,3$)		
$f_{Ti} = \frac{(T - T_{\max,i})(T - T_{\min,i})^2}{(T_{\text{opt},i} - T_{\min,i})((T_{\text{opt},i} - T_{\min,i})(T - T_{\text{opt},i}) - (T_{\text{opt},i} - T_{\max,i})(T_{\text{opt},i} + T_{\min,i} - 2T))}$		
Per manca d'oxigen	Per manca d'humitat	Per manca d'amoníac
$f_{O_2} = \frac{S_{O_2}^*}{K_{O_2} + S_{O_2}^*}$	$f_{IW} = 0, \quad \text{Si } m < m_2$ $f_{IW} = \frac{m - m_2}{m_3 - m_2}, \quad \text{Si } m_2 < m < m_3$ $f_{IW} = 1, \quad \text{Si } m > m_3$ $m = m_w / M_T, \quad m_2=0.4, \quad m_3=0.6$	$f_{NH_4} = \frac{S_{NH_3}^*}{K_{NH_3} + S_{NH_3}^*}$

Taula C3-A2.2. Valors dels paràmetres del model biològic adaptat de Solé-Mauri (2006) utilitzats en les simulacions.

Símbol	Valor	Unitats	Descripció
Paràmetres cinètics			
k_{hLC}	$32 \cdot 10^{-4}$	h^{-1}	Constant d'hidròlisi de la matèria particular X_{LC}
k_{hCN}	$13 \cdot 10^{-4}$	h^{-1}	Constant d'hidròlisi de la matèria particular X_{CN}
k_{hRC}	$10 \cdot 10^{-4}$	h^{-1}	Constant d'hidròlisi de la matèria particular X_{RC}
$\hat{\mu}_{MB}$	0.36	h^{-1}	Creixement específic màxim dels bacteris mesòfils
$\hat{\mu}_{TB}$	0.32	h^{-1}	Creixement específic màxim dels bacteris termòfils
$\hat{\mu}_{MF}$	0.12	h^{-1}	Creixement específic màxim dels fongs mesòfils
K_{s1}	5	$kg_i \cdot m^{-3}$	Constant de saturació de Monod pels bacteris mesòfils
K_{s2}	5	$kg_i \cdot m^{-3}$	Constant de saturació de Monod pels bacteris termòfils
K_{s3}	5	$kg_i \cdot m^{-3}$	Constant de saturació de Monod pels fongs mesòfils
K_{O_2}	$0.2 \cdot 10^{-3}$	kg_{O_2}/m^3	Constant de saturació per l'oxigen dissolt
K_{NH_3}	$0.5 \cdot 10^{-1}$	kg_{NH_3}/m^3	Constant de saturació per l'amoniac dissolt
k_{dMB}	$11 \cdot 10^{-3}$	h^{-1}	Taxa de mort pels bacteris mesòfils
k_{dTB}	$25 \cdot 10^{-3}$	h^{-1}	Taxa de mort pels bacteris termòfils
k_{dMF}	$29 \cdot 10^{-3}$	h^{-1}	Taxa de mort pels fongs mesòfils
$T_{min,1}$	5.1	$^{\circ}C$	Temperatura cardinal mínima pels bacteris mesòfils
$T_{opt,1}$	35.4	$^{\circ}C$	Temperatura cardinal òptima pels bacteris mesòfils
$T_{m\acute{a}x,1}$	44.0	$^{\circ}C$	Temperatura cardinal màxima pels bacteris mesòfils
$T_{min,2}$	20.0	$^{\circ}C$	Temperatura cardinal mínima pels bacteris termòfils
$T_{opt,2}$	50.0	$^{\circ}C$	Temperatura cardinal òptima pels bacteris termòfils
$T_{m\acute{a}x,2}$	75.0	$^{\circ}C$	Temperatura cardinal màxima pels bacteris termòfils
$T_{min,3}$	5.1	$^{\circ}C$	Temperatura cardinal mínima pels fongs mesòfils
$T_{opt,3}$	35.4	$^{\circ}C$	Temperatura cardinal òptima pels fongs mesòfils
$T_{m\acute{a}x,3}$	60.0	$^{\circ}C$	Temperatura cardinal màxima pels fongs mesòfils
Paràmetres estequiomètrics			
Y_{MB}	0.35	$kg_{xi} \cdot kg_{sj}^{-1}$	Rendiment en la conversió substrat- bacteris mesòfils
Y_{TB}	0.35	$kg_{xi} \cdot kg_{sj}^{-1}$	Rendiment en la conversió substrat- bacteris termòfils
Y_{MF}	0.35	$kg_{xi} \cdot kg_{sj}^{-1}$	Rendiment en la conversió substrat- fongs mesòfils
Δh_{LC}	$44 \cdot 10^6$	J/kg_{LC}	Poder calorífic associat al consum de S_{LC}
Δh_{CN}	$14 \cdot 10^6$	J/kg_{CN}	Poder calorífic associat al consum de S_{CN}
Δh_{RC}	$17 \cdot 10^6$	J/kg_{RC}	Poder calorífic associat al consum de S_{RC}
Calors específiques			
c_{p0}	800	$J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$	Calor específica matèria mineral (cendres)
c_{ps}	2300	$J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$	Calor específica matèria orgànica
c_{pw}	4200	$J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$	Calor específica aigua i microorganismes

Taula C3-A2.3. Matriu de coeficients estequiomètrics i velocitats de reacció del model biològic simplificat adaptat de Solé-Mauri (2006). Les unitats de les variables d'estat s'indiquen a la Taula C3-A2.1, les variables i funcions intermèdies a la Taula C3-A2.1b, els valors dels paràmetres a la taula C3-A2.2.

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	Reaction rates
	X_{LC}	X_{CN}	X_{RC}	X_{MB}	X_{TB}	X_{MF}	X_{DB}	X_{DF}	S_{LC}	S_{CN}	S_{RC}	m_{O_2}	m_{CO_2}	m_{NH_3}	m_w	ρ_i [$kg_i \cdot h^{-1} \cdot kg_{TM}^{-1}$]
1. Hydrolysis of X_{LC}	-1								1							$k_{hLC} \frac{X_{LC}}{M_T}$
2. Hydrolysis of X_{CN}		-1								1						$k_{hCN} \frac{X_{CN}}{M_T}$
3. Hydrolysis of X_{RC}			-1								1					$k_{hRC} \frac{X_{RC}}{M_T}$
4. X_{MB} growth on S_{LC}				1					$\frac{-1}{Y_{MB}}$			-6.67	6.05	-0.15	2.63	$\frac{S_{LC}^*}{S_2} f_{T1} f_{O_2} f_{IW} f_{NH_4} \hat{\mu}_{MB} \frac{S_2}{K_{S1} + S_2} \frac{X_{MB}}{M_T}$
5. X_{MB} growth on S_{CN}				1			-1		$\frac{-1}{Y_{MB}}$			-2.87	3.77	0.40	0.56	$\frac{S_{CN}^*}{S_2} f_{T1} f_{O_2} f_{IW} \hat{\mu}_{MB} \frac{S_2}{K_{S1} + S_2} \frac{X_{MB}}{M_T}$
6. X_{TB} growth on S_{LC}					1				$\frac{-1}{Y_{TB}}$			-6.67	6.05	-0.15	2.63	$\frac{S_{LC}^*}{S_2} f_{T2} f_{O_2} f_{IW} f_{NH_4} \hat{\mu}_{TB} \frac{S_2}{K_{S2} + S_2} \frac{X_{TB}}{M_T}$
7. X_{TB} growth on S_{CN}					1				$\frac{-1}{Y_{TB}}$			-2.87	3.77	0.40	0.56	$\frac{S_{CN}^*}{S_2} f_{T2} f_{O_2} f_{IW} \hat{\mu}_{TB} \frac{S_2}{K_{S2} + S_2} \frac{X_{TB}}{M_T}$
8. X_{MF} growth on S_{LC}						1			$\frac{-1}{Y_{MF}}$			-6.72	6.22	-0.07	2.43	$\frac{S_{LC}^*}{S_3} f_{T3} f_{O_2} f_{IW} f_{NH_4} \hat{\mu}_{MF} \frac{S_3}{K_{S3} + S_3} \frac{X_{MF}}{M_T}$
9. X_{MF} growth on S_{CN}						1			$\frac{-1}{Y_{MF}}$			-2.93	3.93	0.48	0.37	$\frac{S_{CN}^*}{S_3} f_{T3} f_{O_2} f_{IW} \hat{\mu}_{MF} \frac{S_3}{K_{S3} + S_3} \frac{X_{MF}}{M_T}$
10. X_{MF} growth on S_{RC}						1			$\frac{-1}{Y_{MF}}$			-1.88	2.68	-0.07	1.13	$\frac{S_{RC}^*}{S_3} f_{T3} f_{O_2} f_{IW} f_{NH_4} \hat{\mu}_{MF} \frac{S_3}{K_{S3} + S_3} \frac{X_{MF}}{M_T}$
11. X_{MB} lysis				-1			1									$k_{dMB} \frac{X_{MB}}{M_T}$
12. X_{TB} lysis					-1		1									$k_{dTB} \frac{X_{TB}}{M_T}$
13. X_{MF} lysis						-1		1								$k_{dMF} \frac{X_{MF}}{M_T}$

CAPÍTOL 4

DESENVOLUPAMENT DEL MODEL 1-D

4.1 Introducció

A fi de modelitzar el comportament d'una columna de material en compostatge es fa una extensió a l'espai 1-D del model base desenvolupat al capítol 3. S'utilitzen les mateixes variables d'estat, però ara tenen una distribució en l'alçària del reactor, de manera que el seu valor depèn del temps i de la posició, $u=u(t,z)$. A més a més s'hi introdueixen les lleis bàsiques que quantifiquen el flux convectiu gasós i el flux conductiu d'escalfor. El present model no contempla el moviment de lixiviats ni la deformació de la matriu sòlida.

S'inicia el capítol amb un repàs de les equacions que governen el moviment d'un gas compressible en un medi porós degut a un gradient de pressió i a la convecció natural. Tot seguit es desenvolupen les equacions diferencials d'aquest moviment i es posen en funció de les variables d'estat. S'estableix el balanç de massa per cada component del sistema representat per una variable d'estat i el balanç d'energia per les fases sòlida-líquida i gasosa per obtenir el sistema d'equacions en derivades parcials que governa l'evolució del procés. S'adopta l'estratègia de discretitzar el domini en volums de control (VC) per transformar el sistema d'equacions en derivades parcials en un sistema d'equacions diferencials ordinàries que es resolen numèricament, prenent especial cura en partir d'un estat inicial proper a les condicions d'equilibri per facilitar l'arrencada del procés d'integració numèrica. S'adopta un esquema *upwind* per tots els fluxos màssecs i d'entalpies a les fronteres dels VC. Totes les rutines de còmput s'han desenvolupat en Matlab[®] i per la integració numèrica s'ha utilitzat la rutina *ode15s*.

Es presenten resultats de la simulació numèrica del procés de compostatge en un reactor vertical utilitzant el model biològic adaptat de Solé-Mauri. Les simulacions posen en evidència la importància del model biològic utilitzat i permeten explicar molts dels detalls observables en l'operació d'aquest tipus de reactors. Es fa una anàlisi detallada de quatre efectes físics que poden ser predits amb el present model: *a*) el refredament evaporatiu de la massa, *b*) la formació de condensacions al plenum superior, *c*) l'evolució de la sobrepressió al plenum inferior i, *d*) l'evolució del procés en condicions de tiratge natural.

Per últim es presenta una anàlisi de sensibilitat que mostra la influència dels principals paràmetres físics sobre l'evolució del procés. Els paràmetres que mostren una major

influència sobre el procés són el pH, que afecta la volatilització d'amoniac, el cabal d'aireig, el nivell d'aïllament del reactor i la permeabilitat del medi. La porositat del medi ocupada per fase gasosa (FAS, Free Air Space) i la conductivitat tèrmica mostren una influència gairebé nul·la.

4.2 Conceptes generals de flux gasós en medi porós

Un medi porós o matriu porosa és un medi continu que conté cavitats (pors) connectades entre sí i a través de les quals es pot moure un fluid. Exemples habituals són el sòl, que permet tant el flux de l'aigua de reg com de l'aire, o bé materials granulars d'ampli ús industrial tals com els cereals o pinsos granulats que permeten el pas de l'aire. Els materials en compostatge també són medis porosos que permeten tant el moviment dels gasos com de l'aigua amb components dissolts (lixiviats). En el present treball només es considera el moviment de gasos al sí del material porós.

Consideris una columna d'un medi porós on hi ha moviment d'un fluid que travessa perpendicularment la secció A en la direcció X (Fig. 4.1a). S'anomena velocitat del fluid en secció lliure, o senzillament velocitat del fluid en la secció A, al quocient entre el cabal de fluid (Q) que travessa la secció A i l'àrea S de la secció,

$$v = \frac{Q}{S} \quad (4.1)$$

Observis que la velocitat real del fluid ($v_{\text{real}}=Q/\epsilon S$) és superior a aquesta degut a que el fluid només circula per l'espai porós (ϵ). La velocitat del fluid definida per l'Eq. (4.1) coincideix amb la densitat de flux volumètric en la direcció X, ($J_x=v$).

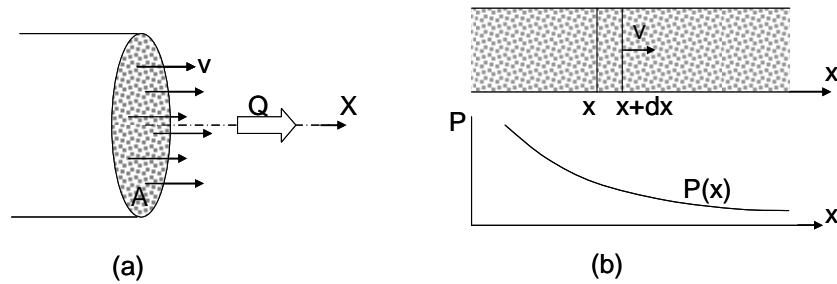


Figura 4.1. (a) Flux a través d'un medi porós, (b) El moviment d'un fluid en un medi porós és originat per un gradient de pressió.

4.2.1 Relació entre moviment i gradient de pressió. Llei de Darcy

Consideris un medi porós unidimensional en el que el fluid es mou en la direcció X i on no intervé la força de la gravetat. El moviment del fluid és originat per un gradient de pressió, de manera que el fluid es mou de les zones de pressió alta cap a les de pressió baixa. Hi ha diferents equacions que s'utilitzen per relacionar la velocitat del fluid amb el gradient de pressió en un medi porós. La més coneguda és l'equació de Darcy (Eq. 4.2), que estableix una proporcionalitat entre la velocitat i el gradient de pressió en la direcció del moviment per un fluid en un medi determinat,

$$v = -\frac{\kappa}{\mu} \frac{dP}{dx} \quad (4.2)$$

En l'Eq. (4.2) el tipus de fluid ve caracteritzat per la seva viscositat dinàmica (μ) i el medi porós per la seva permeabilitat (κ). L'equació de Darcy es considera vàlida en règim laminar i és la que s'utilitzarà en el present treball per descriure el moviment de la fase gasosa en la matriu del material en compostatge. Tanmateix, en règims laminars a turbulents en medis granulars, també s'usen les següents correlacions basades en dades experimentals (Higgins et al., 1982; Multon, 1988):

Equació d'Ergun (també coneguda com a equació de Dupuit-Forcheimer):

$$-\frac{\partial P}{\partial x} = a v + b v^2$$

Equació de Hukill i Shedd:

$$-\frac{\partial P}{\partial x} = \frac{A v^2}{\log(1 + B v)}$$

Equació de Matties i Peterson:

$$-\frac{\partial P}{\partial x} = \alpha v^n$$

Els dos paràmetres que hi ha en cadascuna d'elles s'obtenen a partir de dades experimentals per cada tipus de material porós.

4.2.2 Flux isoterm d'un gas en un medi porós

Un gas que es mogui en un medi porós degut a un gradient de pressió sofreix una expansió al desplaçar-se cap a zones de pressió més baixa i això, en un règim estacionari, provoca un augment de la seva velocitat. En efecte, consideris el flux d'un gas a través d'un rebliment porós horitzontal entre les seccions $x=0$ i $x=L$ on les pressions són P_o i P_l respectivament (Fig. 4.2). En el flux estacionari el cabal molar de gas (\dot{n}_T) que travessa una secció perpendicular a l'eix OX és constant per qualsevol posició x de la secció. La velocitat del gas al travessar la secció ve donada per la llei de Darcy (Eq. 4.2). S'admet que en qualsevol posició el gas verifica l'equació d'estat dels gasos perfectes i que sofreix una expansió isentàlpica i isoterma, i en conseqüència la seva densitat molar és només funció de la pressió (P) i de la temperatura (ϑ), (Eq. 4.3),

$$\bar{\rho} = \frac{P}{R\vartheta} \quad (4.3)$$

El cabal molar \dot{n}_T que en condicions de règim isoterm i estacionari s'estableix a través d'una secció S en la posició arbitrària x és,

$$\dot{n}_T = \bar{\rho} v S = -\frac{P}{R\vartheta} \frac{\kappa S}{\mu} \frac{dP}{dx} \quad (4.4)$$

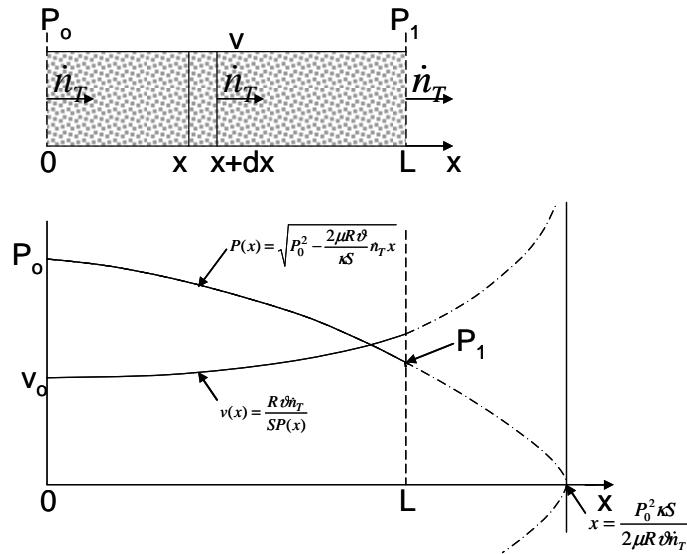


Figura 4.2. Distribució de pressió i velocitat en el flux isoterm d'un gas a través d'un medi porós.

En règim estacionari el cabal molar \dot{n}_T és constant en totes les seccions (Fig. 4.2) i l'Eq. (4.4) pot integrar-se entre la posició $x=0$ i la posició arbitrària x a les que corresponen les pressions P_0 i P respectivament,

$$\dot{n}_T \int_0^x dx = -\frac{\kappa S}{\mu R \vartheta} \int_{P_0}^P P dP,$$

d'on s'obté,

$$\dot{n}_T = \frac{\kappa S}{2\mu x R \vartheta} (P_0^2 - P^2). \quad (4.5)$$

Quan $x=L$ és $P=P_1$ i l'Eq. (4.5) es transforma en l'Eq. (4.6),

$$\dot{n}_T = \bar{\rho} v S = \bar{\rho} \frac{\kappa}{\mu} \frac{P_0 - P_1}{L} S, \quad (4.6)$$

on la densitat molar del gas $\bar{\rho}$ s'avalua segons l'Eq. (4.3) a la pressió mitjana de P_0 i P_1 i a la temperatura ϑ ,

$$\bar{\rho} = \frac{P_0 + P_1}{2R\vartheta}. \quad (4.6a)$$

Observis que l'Eq. (4.6) es pot interpretar com l'aplicació directa de l'equació de Darcy (Eq. 4.2) vàlida per un flux gasós isoterm amb expansió del gas.

Les distribucions de pressió i velocitat en funció de la posició x (Fig. 4.3) s'obtenen directament de les Eqs. (4.5) i (4.2) respectivament,

$$P(x) = \sqrt{P_0^2 - \frac{2\mu R \vartheta}{\kappa S} \dot{n}_T x} \quad (4.7)$$

$$v(x) = \frac{R \vartheta \dot{n}_T}{SP(x)} \quad (4.8)$$

Tal com s'aprecia a la Fig. 4.2 la caiguda de pressió dins el medi ve descrita per una paràbola i no per una recta com és habitual en els fluids incompressibles, mentre que la velocitat del gas creixeria indefinidament quan la pressió de sortida tendeix a zero. A la Fig 4.3 es representa la pressió de sortida del gas per a una pressió d'entrada (P_0) fixada en una columna de rebliment de longitud fixa (L) en funció del cabal màssic molar que s'hi fa circular.

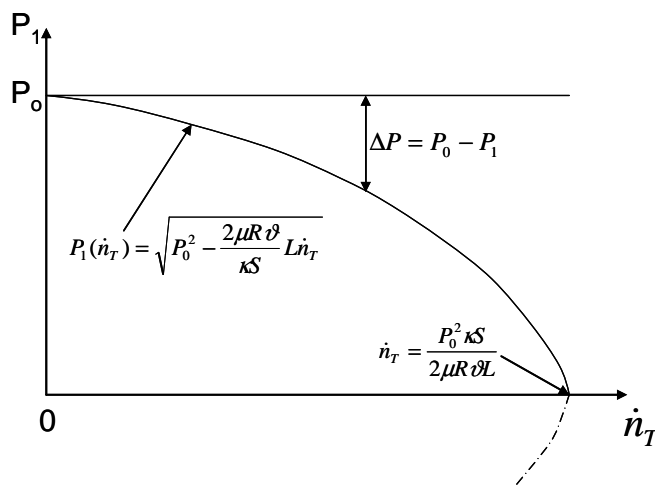


Figura 4.3. Davallada de la pressió a la sortida d'una columna porosa de longitud L en funció del cabal màssic molar de gas que hi circula.

4.2.3 Flux gasós en un medi porós vertical. Tiratge natural

El tiratge natural, ja sigui en una xemeneia o bé en un medi porós, és el moviment ascendent d'una massa d'aire amb llibertat de moviment vertical originat per la dilatació del gas i la conseqüent disminució de densitat. Aquest és el fenomen que s'utilitza com a mecanisme d'aireig en els compostadors domèstics. En grans piles de compostatge, a escala industrial, l'aireig per tiratge natural és insuficient per aportar tot l'oxigen necessari pel procés i cal forçar l'aireig o regirar les piles.

A la Fig. 4.4 es mostra la força impulsora del tiratge natural. En efecte, si es consideren dues columnes d'aire d'alçària L , la corresponent a l'aire extern (A) més freda que la d'aire intern de la matriu porosa (B) de manera que $\rho_A > \rho_B$, sotmeses a la mateixa pressió exterior per la part superior, llavors la diferència de pressió sobre les respectives bases és $\Delta P = (\rho_A - \rho_B)gL$. Si mitjançant connexió hidràulica es força també la igualtat de pressió a la base s'origina el corrent ascendent en la columna B. La força impulsora del flux (\dot{n}_T) és aquesta diferència de pressions ΔP , que en règim estacionari correspondrà a la caiguda de pressió per fricció (ΔP , Fig. 4.3).

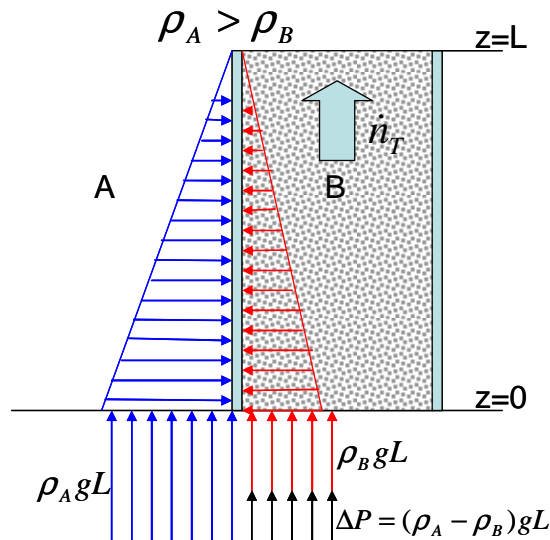


Figura 4.4 La diferència de densitat de dues columnes d'aire a temperatures diferents ($T_A < T_B$) crea un moviment ascendent en la columna més calenta (B).

Si la columna d'aire en medi porós (B, Fig. 4.4) fos estàtica la pressió augmentaria als nivells inferiors degut al pes de l'aire de les capes superiors. L'equació general de la hidrostàtica (Eq. 4.9) proporciona la distribució de pressió en aquesta situació, que es correspon amb les distribucions lineals de la Fig. 4.4,

$$\frac{dP}{dz} + \rho g = 0. \quad (4.9)$$

Al haver-hi moviment ascendent de l'aire en la columna la diferència de pressió entre dos nivells és superior a la diferència de pressió hidrostàtica, aleshores l'aplicació de la llei de Darcy al flux a través d'una secció de gruix dz és,

$$v = \frac{-\kappa}{\mu} \left(\frac{dP}{dz} + \rho g \right). \quad (4.10)$$

És a dir, a la diferència de pressió entre dos nivells separats un infinitèsim cal sostreure-li la part d'aquesta sobrepressió que és deguda al pes de la làmina d'aire. En el cas particular d'una columna horitzontal, o bé si no es considerés el pes de l'aire ($g=0$), l'Eq. (4.10) se simplifica i esdevé la (4.2). L'equació (4.10) ha estat utilitzada per diferents autors en l'estudi del moviment de gasos, tant en abocadors (Tinet and Oxarango, 2010) com en sistemes de compostatge (Pujol et al., 2011).

4.3 Equacions diferencials del model de compostatge 1-D

4.3.1 Geometria del sistema modelitzat. Variables d'estat

L'objecte de modelització és un reactor vertical estàtic de compostatge amb aireig forçat des de la base i que ocupa el volum tancat per les seccions $z=0$ i $z=L$ i la paret lateral vertical del reactor (Fig. 4.5). El material en compostatge forma així una columna vertical d'alçària L i secció S que es considera una matriu porosa les propietats de la

qual només varien en la direcció vertical z . El corrent d'aireig és insuflat des d'un plenum inferior i s'admet que la seva velocitat es manté sempre paral·lela a l'eix vertical i pren el mateix valor en tots els punts d'una secció, és a dir, $v=v(z,t)$. Sota aquestes assumpcions qualsevol volum de control dV contingut entre dues seccions separades un dz és homogeni i el medi es pot analitzar com un sistema unidimensional (1-D).

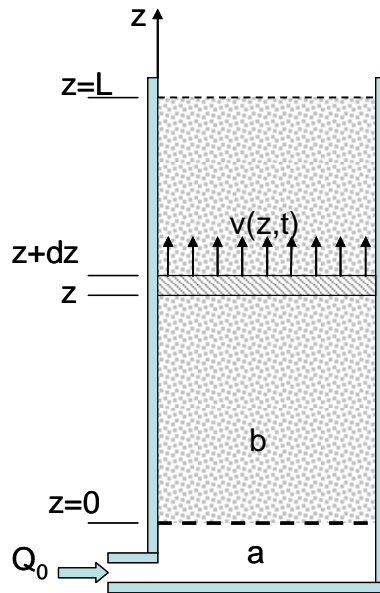


Figura 4.5. Esquema bàsic del reactor vertical de compostatge analitzat. El cabal d'aire insuflat (Q_0) entra al plenum inferior (a) on es reparteix uniformement i entra en la massa en compostatge (b) a través de la secció d'àrea transversal S , en $z=0$. Degut a les transferències de massa i energia el corrent d'aireig surt de la massa porosa per la secció $z=L$ amb composició i temperatura diferent.

L'estructura bàsica del medi porós, que ocupa un dV amb les fases sòlida, líquida i gasosa, és la descrita en l'apartat 3.3.1 (Fig. 3.5). La porositat és la fracció volumètrica del medi ocupada per la fase gasosa (ε_g). Les fases gasosa i sòlid-líquid tenen diferent temperatura (ϑ i T respectivament), en conseqüència, entre elles s'hi estableix un flux d'escalfor (q_c^T) que contribueix a l'escalfament del corrent d'aire insuflat. Les reaccions químic-biològiques es produeixen en la pel·lícula aquosa que recobreix les partícules sòlides i generen l'escalfor (q_G) que manté la temperatura de la fase sòlid-líquid i que es transfereix a la fase gasosa. El moviment del corrent gasós és degut a un gradient de pressió, governat per l'eq. (4.10), i es mou per l'espai lliure interparticular. A més a més, hi ha transferència dels seus components des de la corresponent fracció en solució aquosa.

Variables d'estat

El medi considerat és un sistema distribuït en la direcció z , en conseqüència cada variable d'estat u és funció de la posició i del temps, $u=u(z,t)$. Les variables d'estat són la massa de cada component continguda en la unitat de volum i les temperatures de les fases gasosa i sòlid-líquida. Es relacionen a la Taula 4.1.

Taula 4.1 Les variables d'estat del model 1-D. La naturalesa i nombre dels components màssics depèn del model biològic adoptat. Els índexs creixents is , iw i it defineixen el nombre de variables a cada categoria.

Símbol	Unitats	Descripció	Índexs
C_i	$kg \cdot m^{-3}$	Components sòlids i solubles no volàtils del sistema	$1, \dots, is$
C_j	$kg \cdot m^{-3}$	Components solubles i volàtils en solució ($j=O_2, CO_2, NH_3$)	$is+1, \dots, is+3$
C_w	$kg \cdot m^{-3}$	Aigua del sistema	iw
C_k	$kmol \cdot m^{-3}$	Massa molar components de la fase gasosa ($k=O_2, CO_2, NH_3, H_2O_g, N_2$)	$iw+1, \dots, iw+5$
ϑ	K	Temperatura de la fase gasosa	it
T	K	Temperatura de les fases sòlida i líquida	$it+1$

Cal remarcar que les variables d'estat són concentracions absolutes en l'espai, referides al volum de control. A les expressions de les velocitats de reacció i transferència s'hi utilitzen concentracions en medi aquós i en fase gasosa que es posen en funció d'aquestes tenint present el volum ocupat per la fase líquida i la porositat.

En els següents apartats s'estableixen les equacions que governen l'evolució del sistema a partir d'una distribució inicial coneguda de les variables d'estat i d'unes condicions de contorn a les fronteres del sistema.

4.3.2 Condicions de contorn

Un corrent d'aire Q_0 de composició i temperatura conegudes entra al medi a través de la frontera $z=0$ on s'hi manté una pressió total P_0 constant (Fig. 4.5). El corrent d'aire, modificat per la seva interacció amb la matriu porosa, surt del medi per la frontera $z=L$. Les parets laterals de la columna són impermeables però permeten el pas d'un flux d'escalfor que depèn del nivell d'aïllament i de la temperatura de l'ambient exterior. Les condicions de frontera són definides per:

En $z=0$:

$$\begin{aligned}
 P &= P_0 && \text{i composició del gas igual a la de l'aire atmosfèric.} \\
 \vartheta(0, t) &= \vartheta_0 && \text{Temperatura de l'aire a l'entrada del reactor constant.} \\
 \frac{\partial T}{\partial z}(0, t) &= 0 && \text{Flux conductiu nul en la secció d'entrada.}
 \end{aligned}$$

En $z=L$:

$$\begin{aligned}
 P &= P_a && \text{Sortida lliure a l'atmosfera.} \\
 \frac{\partial T}{\partial z}(L, t) &= 0 && \text{Flux conductiu nul en la secció de sortida.}
 \end{aligned}$$

S'admet una temperatura ambiental de l'entorn de la columna constant T_a i que el flux d'escalfor a través de la paret lateral és prou petit com per no generar gradients laterals de temperatura en el medi, altrament s'hauria de considerar un problema 2-D. Aquest flux d'escalfor correspon a un mecanisme de conducció convecció (Eq. 4.11),

$$q_{cw}'' = U(T(z, t) - T_a) \quad (4.11)$$

on U és el coeficient global de transferència d'escalfor del reactor.

4.3.3 Equacions de balanç de massa (BM) pels components sòlids i en solució

En el present model no es considera el transport de components de la fase sòlida ni de la líquida però sí la transferència de components volàtils entre la fase líquida i la gasosa. L'equació de BM per un component no volàtil és (Eq. 4.12),

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = \rho_T r_i, \quad i=1, \dots, is \quad (4.12)$$

i per a un component volàtil és (Eq. 4.13),

$$\frac{\partial C_j}{\partial t} = \rho_T r_j - \rho_T r_j^T, \quad j=is+1, \dots, is+3, iw \quad (4.13)$$

on r_j és el terme de generació per reacció químic-biològica i r_j^T el de transferència líquid-gas, tots dos referits a la unitat de massa del sistema (veure apartats 3.2.2.2 i 3.3.6, Capítol 3).

4.3.4 Equacions de balanç de massa pels components de la fase gasosa

4.3.4.1 La pressió total i la densitat del gas en funció de les variables d'estat

S'admet que la fase gasosa es comporta com una mescla ideal de gasos perfectes, en conseqüència, la seva pressió total (P) i densitat (ρ) poden expressar-se en funció de les variables d'estat:

$$P = \frac{R\vartheta}{\varepsilon_g} \sum_k C_k \quad (4.14)$$

$$\rho = \frac{1}{\varepsilon_g} \sum_k M_k C_k, \quad (4.15)$$

on els sumatoris s'estenen a tots els components de la fase gasosa ($k=iw+1, \dots, iw+5$). També les corresponents derivades parcials en la direcció z es poden expressar en funció de les variables d'estat i de les seves derivades:

$$\frac{\partial P}{\partial z} = \frac{R}{\varepsilon_g} \left(\frac{\partial \vartheta}{\partial z} \sum_k C_k + \vartheta \sum_k \frac{\partial C_k}{\partial z} \right) \quad (4.16)$$

$$\frac{\partial^2 P}{\partial z^2} = \frac{R}{\varepsilon_g} \left(\frac{\partial^2 \vartheta}{\partial z^2} \sum_k C_k + 2 \frac{\partial \vartheta}{\partial z} \sum_k \frac{\partial C_k}{\partial z} + \vartheta \sum_k \frac{\partial^2 C_k}{\partial z^2} \right) \quad (4.17)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial z} = \frac{1}{\varepsilon_g} \sum_k M_k \frac{\partial C_k}{\partial z} \quad (4.18)$$

Les expressions (4.16), (4.17) i (4.18) s'han obtingut sota la hipòtesi d'una porositat del medi (ε_g) uniforme.

4.3.4.2 Llei de Darcy. Densitat de flux molar en una secció

La densitat de flux molar total (J) en una secció transversal és,

$$J = \bar{\rho} v . \quad (4.19)$$

La densitat molar del gas ($\bar{\rho}$) pot expressar-se en funció de les variables d'estat

$$\bar{\rho} = \frac{1}{\varepsilon_g} \sum_k C_k , \quad (4.20)$$

mentre que la densitat de flux molar (J_k) d'un component gasós k és:

$$J_k = y_k J \quad (4.21)$$

essent y_k la fracció molar del component k en la fase gasosa, que pot expressar-se en funció de les variables d'estat,

$$y_k = \frac{C_k}{\sum_k C_k} . \quad (4.22)$$

La substitució de la velocitat del gas donada per la llei de Darcy generalitzada (eq. 4.10) en l'eq (4.19), i d'aquesta en l'eq (4.21), proporciona l'expressió (4.23) per la densitat del flux molar d'un component gasós k :

$$J_k = -\frac{\kappa}{\mu \varepsilon_g} C_k \left(\frac{\partial P}{\partial z} + \rho g \right) . \quad (4.23)$$

La derivada parcial d'aquest flux també pot expressar-se en funció de les variables i funcions d'estat i de les seves derivades parcials,

$$\frac{\partial J_k}{\partial z} = -\frac{\kappa}{\mu \varepsilon_g} \left(\frac{\partial C_k}{\partial z} \frac{\partial P}{\partial z} + C_k \frac{\partial^2 P}{\partial z^2} + g \frac{\partial \rho}{\partial z} C_k + g \rho \frac{\partial C_k}{\partial z} \right) . \quad (4.24)$$

4.3.4.3 Equació de conservació de la massa per un component gasós

El balanç de massa molar en un volum de control elemental proporciona la següent equació diferencial,

$$\frac{\partial C_k}{\partial t} = -\frac{\partial J_k}{\partial z} + \rho_T \bar{r}_k^T , \quad (4.25)$$

on \bar{r}_k^T és la transferència de component gasós k de la fase líquida a la gasosa. Observis que els termes del segon membre de l'equació (4.25) poden posar-se fàcilment en funció de les variables d'estat i de les seves derivades parcials utilitzant l'expressió (4.24) i les equacions (4.16), (4.17) i (4.18). El terme de transferència \bar{r}_k^T és funció només de les variables d'estat, (veure apartat 3.3.4, Capítol 3).

4.3.5 L'equació de balanç d'energia en la fase gasosa

Es considera el sistema termodinàmic format per la fase gasosa d'un volum de control ΔV contingut entre les posicions z i $z+\Delta z$, (Fig. 4.6).

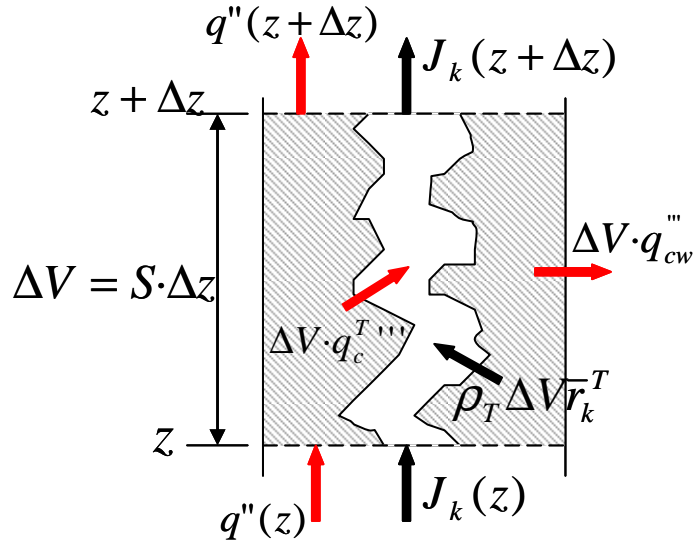


Figura 4.6. Fluxos de massa i energia que intervenen en els balanços energètics en un volum de control ΔV comprès entre dues seccions separades un Δz .

En aquesta fase gasosa s'hi consideren els fluxos molars d'entrada i sortida d'un component k en les seccions z i $z+\Delta z$, $J_k(z)$ i $J_k(z+\Delta z)$ respectivament, els fluxos molars d'entrada procedents de la fase líquida ($\rho_T \bar{r}_k^T \Delta V$) i el flux de calor sensible ($q_c^{T,m} \Delta V$) procedent de les fases sòlida i líquida. L'aplicació del primer principi de la termodinàmica a aquest sistema obert proporciona:

$$\frac{d(U^m \Delta V)}{dt} = q_c^{T,m} \Delta V + \sum_k \rho_T \Delta V \bar{r}_k^T \bar{h}_k^* - \sum_k S (J_k \bar{h}_k(z + \Delta z) - J_k \bar{h}_k(z)),$$

on el segon i tercer termes del segon membre representen els fluxos d'entalpia lligats als cabals màssecs molars de transferència des de la fase líquida i a través de les fronteres en z i $z+\Delta z$. Dividint els dos membres per $\Delta V = S \cdot \Delta z$ i trobant el límit quan $\Delta z \rightarrow 0$ s'arriba a l'equació (4.26):

$$\frac{\partial U^m}{\partial t} = q_c^{T,m} - \sum_k \frac{\partial}{\partial z} (J_k \bar{h}_k) + \sum_k \rho_T \bar{r}_k^T \bar{h}_k^*, \quad (4.26)$$

on \bar{h}_k^* representa l'entalpia molar del component k avaluada a la temperatura de la fase de procedència, tal com s'ha exposat a l'apartat 3.3.7.1, Capítol 3. Tenint present que l'entalpia molar d'un component gasós és funció només de la temperatura (eqs. 3.39 i 3.48a), l'equació (4.26) pot escriure's de la següent forma,

$$\frac{\partial U'''}{\partial t} = q_c^{T''''} + \sum_k \rho_T \bar{r}_k^T \bar{h}_k^* - \sum_k \bar{h}_k \frac{\partial J_k}{\partial z} - \frac{\partial \vartheta}{\partial z} \sum_k \bar{c}_{pk} J_k. \quad (4.27)$$

El primer membre l'eq. (4.27) correspon a l'acumulació d'energia en la fase gasosa i pot posar-se en funció de les masses dels components gasosos i de la seva temperatura, tal com s'ha desenvolupat a l'apartat 3.7.1 (capítol 3). L'adaptació de l'equació (3.48), canvi de les masses molars n_k per les masses molars per unitat de volum (concentracions C_k), proporciona la següent equació equivalent (eq. 4.28):

$$\frac{\partial U'''}{\partial t} = \sum_k \frac{\partial C_k}{\partial t} (\bar{h}_k - R\vartheta) + \frac{\partial \vartheta}{\partial t} \sum_k C_k (\bar{c}_{pk} - R). \quad (4.28)$$

De la igualtat entre les equacions (4.27) i (4.28) se'n pot separar la derivada temporal de la temperatura de la fase gasosa en funció de les variables d'estat i de les seves derivades parcials,

$$\frac{\partial \vartheta}{\partial t} = \frac{q_c^{T''''} + \sum_k \rho_T \bar{r}_k^T \bar{h}_k^* - \frac{\partial \vartheta}{\partial z} \sum_k \bar{c}_{pk} J_k - \sum_k \bar{h}_k \frac{\partial J_k}{\partial z} - \sum_k \frac{\partial C_k}{\partial t} (\bar{h}_k - R\vartheta)}{\sum_k C_k (\bar{c}_{pk} - R)}. \quad (4.29)$$

El terme de transferència de calor sensible entre fases ($q_c^{T''''}$) és proporcional a la diferència de temperatures entre fases en cada instant i posició,

$$q_c^{T''''} = \rho_T h_{cgv} (T - \vartheta). \quad (4.30)$$

L'equació (4.30) expressa la transferència d'escalfor per unitat de volum de matriu porosa, i és equivalent a l'equació (3.54).

4.3.6 L'equació de balanç d'energia en la fase sòlid líquid

4.3.6.1 Energia interna de la fase sòlid-líquid

S'admet que l'energia interna de cada component de la fase sòlid-líquid és en forma de calor sensible amb calors específiques (c_{pi}) constants, i que l'energia interna és nul·la per qualsevol component que estigui a la temperatura de referència de 0°C ($T_{ref}=273.15\text{ K}$). L'energia interna per unitat de volum (U_i'') continguda en el component i és,

$$U_i'' = c_{pi} C_i (T - T_{ref}). \quad (4.31)$$

L'energia interna total per unitat de volum (U'') de la fase sòlid-líquid és la suma de la de tots els seus components,

$$U'' = \sum_i c_{pi} C_i (T - T_{ref}), \quad (4.32)$$

i la seva derivada respecte al temps és,

$$\frac{dU'''}{dt} = \left(\sum_i c_{pi} C_i \right) \frac{\partial T}{\partial t} + (T - T_{ref}) \sum_i c_{pi} \frac{\partial C_i}{\partial t}. \quad (4.33)$$

4.3.6.2 Equació de conservació de l'energia en la fase sòlid-líquid

L'aplicació del principi de conservació de l'energia al sistema format per les fases sòlida i líquida contingudes en el volum de control ΔV amb els fluxos indicats a la Fig. 4.6 proporciona,

$$\frac{d(U''' \Delta V)}{dt} = (q_G''' - q_{cw}''' - q_c^{T''''}) \Delta V - S(q''(z + \Delta z) - q''(z)) - \rho_T \Delta V \sum_k \bar{R}_k^T \bar{h}_k^*,$$

on el primer terme del segon membre correspon a la transferència de calor sensible (generació per activitat biològica, dissipació a través de les parets del reactor i transferència convectiva cap a la fase gasosa), el segon terme correspon a la transferència conductiva a través de les seccions z i $z + \Delta z$, i el tercer és la transferència de calor latent cap a la fase gasosa. Dividint-la membre a membre per ΔV i trobant el límit quan $\Delta z \rightarrow 0$, resulta,

$$\frac{dU'''}{dt} = q_G''' - q_{cw}''' - q_c^{T''''} - \frac{\partial q''}{\partial z} - \rho_T \sum_k \bar{r}_k^T \bar{h}_k^*, \quad (4.34)$$

on la densitat de flux calorífic conductiu (q'') ve donada per la llei de Fourier (eq. 4.35),

$$q'' = -k \frac{\partial T}{\partial z}, \quad (4.35)$$

essent k la conductivitat tèrmica de la matriu porosa, q_G''' la generació de calor per unitat de volum deguda a les reaccions biològiques que es produeixen en la fase sòlida-líquida i q_{cw}''' l'escalfor dissipada a través de la paret del reactor referida a la unitat de volum. La substitució del primer membre de l'eq. (4.34) per l'expressió de la seva derivada temporal (eq. 4.33) en funció de les variables d'estat proporciona:

$$\left(\sum_i c_{pi} C_i \right) \frac{\partial T}{\partial t} + (T - T_{ref}) \sum_i c_{pi} \frac{\partial C_i}{\partial t} = q_G''' - q_{cw}''' - q_c^{T''''} + k \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} - \rho_T \sum_k \bar{r}_k^T \bar{h}_k^*,$$

on s'ha admès implícitament que la conductivitat tèrmica aparent (k) de la matriu sòlida és constant. D'aquí se'n pot separar la derivada temporal de T en funció de les variables d'estat i de les seves derivades parcials:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{q_G''' - q_{cw}''' - q_c^{T''''} - \rho_T \sum_k \bar{r}_k^T \bar{h}_k^* + k \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} - (T - T_{ref}) \sum_i c_{pi} \frac{\partial C_i}{\partial t}}{\sum_i c_{pi} C_i}. \quad (4.36)$$

4.3.7 Establiment del model

El model 1-D per a reactors verticals de compostatge, amb les variables d'estat definides a la Taula 4.1, funció de la posició z i del temps t , queda definit per les equacions (4.12), (4.13) i (4.25) de balanç de massa de les fases sòlida, líquida i gasosa, respectivament, i per les equacions de balanç d'energia de les fases gasosa (eq. 4.29) i sòlida-líquida (eq. 4.36):

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = \rho_T r_i, \quad i=1, \dots, is \quad (4.12)$$

$$\frac{\partial C_j}{\partial t} = \rho_T r_j - \rho_T r_j^T, \quad j=is+1, \dots, is+3, iw \quad (4.13)$$

$$\frac{\partial C_k}{\partial t} = -\frac{\partial J_k}{\partial z} + \rho_T \bar{r}_k^T, \quad k=iw+1, \dots, iw+5 \quad (4.25)$$

$$\frac{\partial \vartheta}{\partial t} = \frac{q_c^{T''''} + \sum_k \rho_T \bar{r}_k^T \bar{h}_k^* - \frac{\partial \vartheta}{\partial z} \sum_k \bar{c}_{pk} J_k - \sum_k \bar{h}_k \frac{\partial J_k}{\partial z} - \sum_k \frac{\partial C_k}{\partial t} (\bar{h}_k - R \vartheta)}{\sum_k C_k (\bar{c}_{pk} - R)} \quad (4.29)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{q_G''' - q_{cw}''' - q_c^{T''''} - \rho_T \sum_k \bar{r}_k^T \bar{h}_k^* + k \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} - (T - T_{ref}) \sum_i c_{pi} \frac{\partial C_i}{\partial t}}{\sum_i c_{pi} C_i}, \quad (4.36)$$

on l'índex k fa sempre referència als components de la fase gasosa ($k=iw+1, \dots, iw+5$) i l'índex i en la darrera equació fa referència als components de la fase sòlida i líquida ($i=1, \dots, iw$). La densitat total del medi és $\rho_T = \sum_{i=1}^{iw} C_i$, els termes de reacció específica r_i

venen definits pel model biològic adoptat (veure apartat 3.2.2.2, Capítol 3) i els de transferència líquid-gas estan definits per les equacions (3.17), (3.18), (3.19) i 3.20). La pressió total (P) i la densitat del gas (ρ) són funció de les variables d'estat segons les equacions (4.14) i (4.15), les seves derivades parcials en la direcció z també són funció de les variables d'estat i de les seves derivades parcials, segons mostren les equacions (4.16), (4.17) i (4.18). Els fluxos molars gasosos (J_k) responen a la llei generalitzada de Darcy (eq. 4.10) i també poden posar-se en funció de les variables d'estat i de les seves derivades parcials en z segons les equacions (4.23) i (4.24).

Totes aquestes equacions, juntament amb les condicions de contorn i d'estat inicial del sistema definides a l'apartat 4.3.2, defineixen l'evolució en el temps de la distribució de les variables d'estat del model.

4.4 Discretització de les equacions diferencials. El model numèric

Es considera el reactor vertical de compostatge descrit a l'apartat 3.1 (Fig. 4.5). S'assumeix que l'aire exterior al reactor està a la temperatura T_a i a la pressió atmosfèrica al nivell $z=0$. El bufador manté a la secció d'entrada de la columna ($z=0$) una pressió P_I superior a l'atmosfèrica,

$$P_I = P_a + \delta P, \quad (4.37)$$

on δP és la sobrepressió produïda pel bufador, que provoca el moviment de la fase gasosa a través del medi porós.

4.4.1 La discretització

Es discretitza la columna tal com mostra la figura 4.7 en $tv-1$ volums de control (VC) iguals d'alçària $\Delta z = L/(tv-1)$ al centre dels quals s'hi considera situat el node, punt al que s'atribueix un valor de les propietats representatiu de tot el VC.

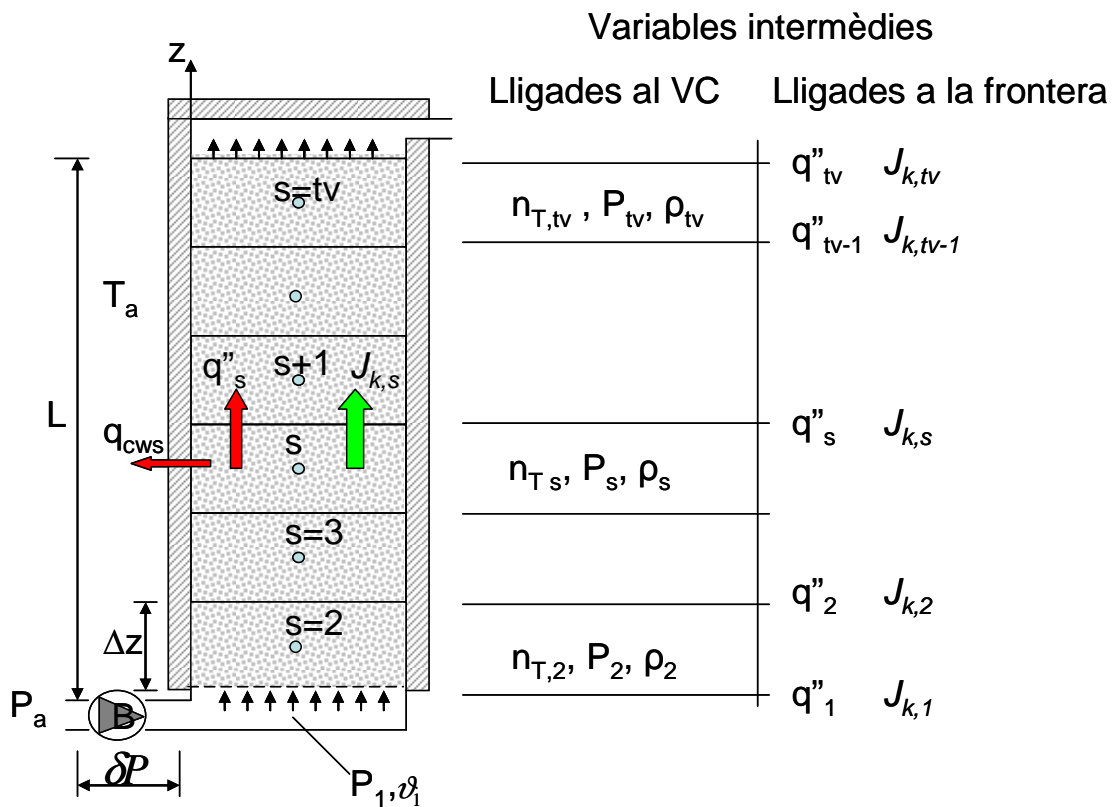


Figura 4.7. Esquema bàsic de la geometria 1D i de la seva discretització, mostrant les variables intermèdies que van lligades a un VC ($n_{T,s}, P_s, \rho_s$) o bé a la frontera entre dos VC ($q''_s, J_{k,s}$). El bufador (B) manté la pressió P_I a la secció d'entrada de la columna en $z=0$.

La numeració dels VC es fa en ordre ascendent, el VC inferior és el número 2, el superior és tv . Cada VC (s) té dues fronteres que també queden numerades, la inferior ($s-1$) i la superior (s). En total hi ha tv fronteres. La frontera s entre dos VC consecutius permet el pas de flux gasós ($J_{k,s}$) i d'escalfor per conducció (q''_s). Les parets laterals són impermeables però no totalment aïllades. Cada VC ocupa el volum $\Delta V = S \cdot \Delta z$, on S és l'àrea de la transversal, una part del qual és espai porós i està ocupat per la fase gasosa

($\Delta V_g = \varepsilon_g \Delta V$), la resta de volum està ocupat per les fases sòlida i líquida (veure Figs. 3.5 i 3.6).

Variables d'estat. En el model numèric es prenen com a variables d'estat en cada VC (veure Taula 4.2): *a*) la massa de cadascun dels components de la fase sòlida, de la líquida o en solució, *b*) la massa molar dels components de la fase gasosa, *c*) les temperatures de la fase gasosa i la temperatura de la fase sòlid-líquid, i *d*) altres variables d'estat. Totes ordenades amb el mateix criteri i amb els índexs de posició que s'han definit en la descripció del model base. L'estat en cada VC queda així definit per les ni variables d'estat de la Taula 4.2.

Taula 4.2. Les ni variables d'estat considerades en el volum de control s i la seva ubicació en el vector de variables d'estat global U . La relació entre la ubicació local i la global s'obté incrementant la posició local en $ir=ni(s-2)$. (Veure també Fig. 4.8).

Posició local	Posició global	Unitats	Descripció
1	U_{1+ir}	kg	Variables d'estat del model biològic representant una magnitud massica: substrats, microorganismes, inerts, etc.
is	U_{is+ir}	kg	
is+1	$U_{is+1+ir}$	kg	Massa d'oxigen dissolt
is+2	$U_{is+2+ir}$	kg	Massa de CO2 dissolt
is+3	$U_{is+3+ir}$	kg	Massa de NH3 dissolt
iw	U_{iw+ir}	kg	Massa d'aigua
iw+1	$U_{iw+1+ir}$	kmol	Massa molar de O ₂ en la fase gasosa
iw+2	$U_{iw+2+ir}$	kmol	“ CO ₂ “
iw+3	$U_{iw+3+ir}$	kmol	“ NH ₃ “
iw+4	$U_{iw+4+ir}$	kmol	“ vapor d'aigua “
iw+5	$U_{iw+5+ir}$	kmol	“ N ₂ “
it	U_{it+ir}	K	Temperatura de la fase gasosa
it+1	$U_{it+1+ir}$	K	Temperatura de la fase sòlid-líquid
ni^*	U_{ni+ir}		Altres variables d'estat

^(*)Quan no es consideren altres variables és $ni=it+1$.

Observis que aquesta ordenació permet introduir fàcilment altres variables al model que, tot i no ser variables d'estat, es calculen numèricament com les variables d'estat. Aquest és el cas de variables que representen un consum (o producció) acumulat durant el procés, (consum acumulat d'oxigen, volatilització neta d'amoniac) o que representen una integral tèrmica (veure Taula 3.8 on es defineixen els indicadors de procés utilitzats).

La columna de la Fig.4.7 s'ha discretitzat en $tv-1$ volums de control, per tant el sistema serà modelitzat amb $ni \cdot (tv - 1)$ variables d'estat. Aquestes variables es col·loquen dins el vector global U en blocs successius, cada bloc correspon a les ni variables d'estat d'un VC. Així, la variable local u_j ($j=1, \dots, ni$) corresponent al volum de control s ocuparà la posició $ir + j$ dins el vector U , essent $ir = ni \cdot (s - 2)$, tal com es mostra a la Fig.4.8.

Variables intermèdies. El moviment del gas al si de la matriu porosa ve determinat per la diferència de pressió i la densitat de la fase gasosa (eq. 4.10), totes dues propietats intensives que poden relacionar-se directament amb les variables d'estat (eqs. 4.14 i 4.15). En el model numèric s'assumeix la uniformitat de les propietats intensives dins d'un VC. Així, per a un volum de control s es verifica:

$$n_{T,s} = \sum_k n_{ks}, \quad (4.38)$$

$$P_s = \frac{n_{T_s} R \vartheta_s}{\varepsilon_{g,s} \Delta V}, \quad (4.39)$$

$$\bar{\rho}_s = \frac{n_{T_s}}{\varepsilon_{g,s} \Delta V}, \quad (4.40)$$

$$\rho_s = \frac{\sum_k M_k n_{ks}}{\varepsilon_{g,s} \Delta V}, \quad (4.41)$$

on $\varepsilon_{g,s}$ és la porositat ocupada per aire de la matriu continguda en el VC s . La densitat molar de la fase gasosa (eq. 4.40) és la utilitzada en la determinació del flux molar a través d'una secció (eq. 4.19), mentre que la densitat del gas (eq. 4.41) és la que apareix en el terme de convecció natural de l'equació (4.10).

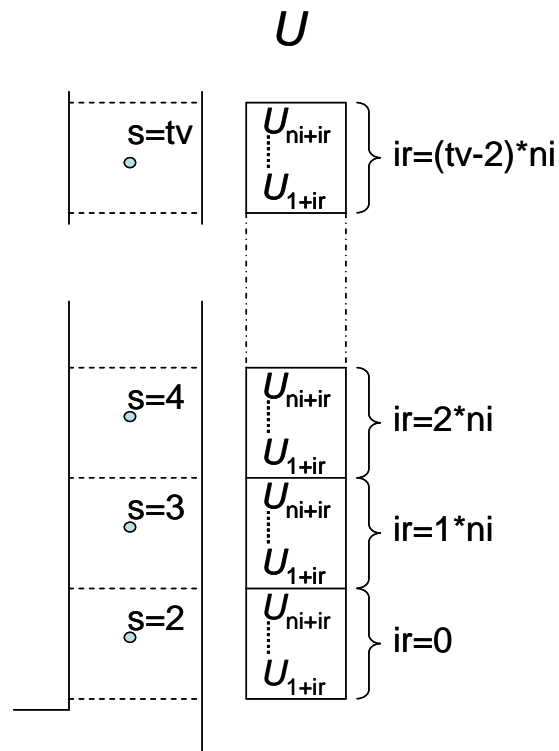


Figura 4.8. Col·locació de les variables d'estat de cada VC dins el vector global U .

4.4.2 Els fluxos de transferència en funció dels valors nodals de les variables d'estat

4.4.2.1 Transferència de massa líquid- gas

El flux instantani de transferència de massa entre la fase líquida i la gasosa de cadascun dels components volàtils ve determinat per les equacions (3.17), (3.18), (3.19) i (3.20), en les que només hi intervenen les variables d'estat lligades al VC s . La massa total continguda en el volum de control s és la suma de les masses de cadascun dels components (m_i) de les fases sòlida i líquida, i pot expressar-se en funció del vector de variables d'estat global U ,

$$M_{T_s} = \sum_{i=1}^{iw} m_i = \sum_{i=1}^{iw} U_{ir+i} , \quad (4.42)$$

essent $ir=ni \cdot (s-2)$ el factor additiu per passar de la indexació local a la global segons mostra la Fig. 4.8.

4.4.2.2 Fflux molar gasós a la frontera entre dos VC

Una de les regles que cal tenir en compte a l'aproximar els fluxos màssics (o energètics) a través de la frontera entre dos volums de control adjacents d'un domini discretitzat és comptabilitzar el mateix flux fronterer en el balanç de massa (i energia) en cadascun dels dos volums (Patankar 1980).

El flux molar gasós $\dot{n}_{T,s}$ a través de la frontera s entre els VC s i $s+1$ es determina aproximant el gradient de pressió de l'eq. (4.10) per un quocient d'increments. En tots els cassos es pren com a flux positiu el que té sentit ascendent (Fig. 4.9).

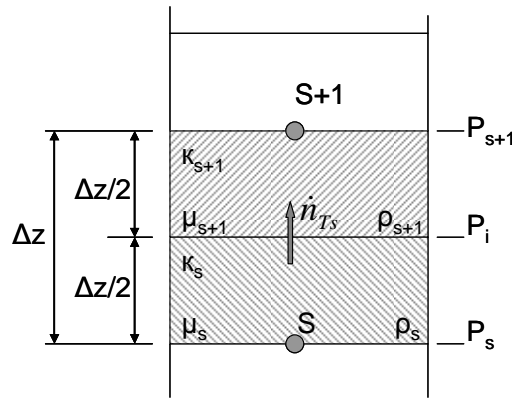


Figura 4.9. Les variables intermèdies i propietats que intervenen en la determinació del flux molar gasós en la frontera entre els VC s i $s+1$.

En la situació més general la permeabilitat de la matriu porosa i la densitat i viscositat dinàmica de la fase gasosa seran diferents en cada VC. Les pressions nodals són P_s i P_{s+1} , mentre que la pressió a la frontera es designa per P_i (Fig. 4.9). El flux molar $\dot{n}_{T,s}$ que s'estableix entre el pla nodal s i la frontera s depèn de les propietats del VC s i s'aproxima amb l'equació generalitzada de Darcy (eq. 4.10),

$$\dot{n}_{T,s} = \bar{\rho}_s \frac{\kappa_s}{\mu_s} \left(\frac{P_s - P_i}{\Delta z/2} - \rho_s g \right) S . \quad (4.43)$$

Aquest flux molar de sortida del VC s és el mateix que el d'entrada al VC $s+1$ i també pot aproximar-se aplicant l'eq. (4.10) entre la frontera s i el pla nodal $s+1$:

$$\dot{n}_{T,s} = \bar{\rho}_{s+1} \frac{\kappa_{s+1}}{\mu_{s+1}} \left(\frac{P_i - P_{s+1}}{\Delta z/2} - \rho_{s+1} g \right) S . \quad (4.44)$$

L'eliminació de la pressió intermèdia P_i entre les eqs. (4.43) i (4.44) proporciona l'expressió (4.45) pel flux molar que travessa la frontera en funció de les pressions nodals:

$$\dot{n}_{Ts} = B \cdot S \left(\frac{P_s - P_{s+1}}{\Delta z} - \frac{\rho_s + \rho_{s+1}}{2} g \right), \quad (4.45)$$

on B és una mitjana harmònica de les propietats als dos VC adjacents,

$$B = \frac{2 \bar{\rho}_s \bar{\rho}_{s+1} \frac{\kappa_s}{\mu_s} \frac{\kappa_{s+1}}{\mu_{s+1}}}{\bar{\rho}_s \frac{\kappa_s}{\mu_s} + \bar{\rho}_{s+1} \frac{\kappa_{s+1}}{\mu_{s+1}}}. \quad (4.46)$$

Les densitats molars mitjanes s'avaluen, en un flux isoterm, amb l'expressió (4.6a) en funció de les pressions dels extrems de la columna considerada. Atès que en les equacions (4.43) i (4.44) les densitats molars $\bar{\rho}_s$ i $\bar{\rho}_{s+1}$ corresponen a la zona compresa entre els plans nodals s i $s+1$, s'adopta per a totes dues el valor mitjà donat per

$$\bar{\rho}_s = \frac{P_s + P_{s+1}}{R(\vartheta_s + \vartheta_{s+1})}. \quad (4.47)$$

D'aquesta manera el flux molar a la frontera s donat per l'eq. (4.45) pot posar-se en la següent forma simplificada,

$$\dot{n}_{Ts} = \bar{\rho}_s S \left(\frac{\kappa}{\mu} \right)_s \left(\frac{P_s - P_{s+1}}{\Delta z} - \frac{\rho_s + \rho_{s+1}}{2} g \right), \quad (4.48)$$

on

$$\left(\frac{\kappa}{\mu} \right)_s = \frac{2 \frac{\kappa_s}{\mu_s} \frac{\kappa_{s+1}}{\mu_{s+1}}}{\frac{\kappa_s}{\mu_s} + \frac{\kappa_{s+1}}{\mu_{s+1}}}. \quad (4.49)$$

és la mitjana harmònica del quocient entre la permeabilitat del medi porós i la viscositat dinàmica de la fase gasosa. Les densitats ρ_s i ρ_{s+1} s'avaluen amb l'eq. (4.41) i les pressions nodals es determinen a partir de les variables d'estat segons l'eq. (4.39). L'ús de la mitjana harmònica en la determinació del flux és preferible al de la mitjana aritmètica degut a la millor representació de la realitat física (Patankar, 1980). Així, si una de les permeabilitats dels dos VC adjacents fos nul·la el flux a la frontera hauria de ser forçosament nul i així resultaria a l'aplicar l'eq. (4.48) ja que l'eq. (4.49) proporcionaria $\left(\frac{\kappa}{\mu} \right)_s = 0$. L'ús de la mitjana aritmètica no proporcionaria un flux nul a la frontera. L'eq. (4.48) és aplicable tant si el flux molar que en resulta és positiu (ascendent) com negatiu (descendent).

4.4.2.3 Fluxos molars gasosos a les fronteres externes

El flux molar gasós a la frontera inferior (\dot{n}_{T1}) s'obté adaptant les eqs. (4.10) i (4.6) a la columna d'alçària $\Delta z/2$ compresa entre la secció $z=0$ i el pla nodal $s=2$ (Fig. 4.10) resultant

$$\dot{n}_{T1} = \bar{\rho}_2 S \frac{\kappa_2}{\mu_2} \left(\frac{P_1 - P_2}{\Delta z/2} - \rho_2 g \right), \quad (4.50)$$

on la densitat molar s'avalua amb l'eq. (4.51) si el flux és positiu (ascendent) o amb l'eq. (4.40), ($s=2$), si el flux és negatiu,

$$\bar{\rho}_2 = \frac{P_1 + P_2}{R(\vartheta_1 + \vartheta_2)}. \quad (4.51)$$

La densitat s'avalua en tots dos casos amb l'eq. (4.41).

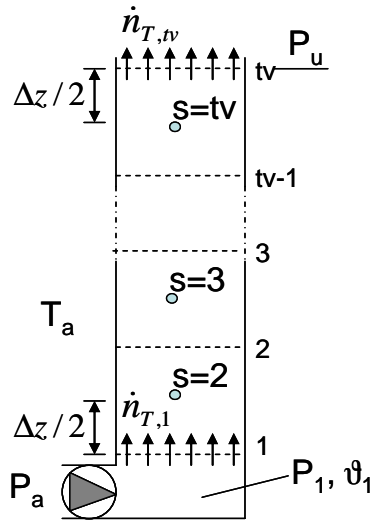


Figura 4.10. Els fluxos molars a les fronteres inferior i superior del sistema.

De manera similar es determina el flux molar de sortida del sistema per la frontera superior ($\dot{n}_{T,tv}$),

$$\dot{n}_{T,tv} = \bar{\rho}_{tv} S \frac{\kappa_{tv}}{\mu_{tv}} \left(\frac{P_{tv} - P_u}{\Delta z/2} - \rho_{tv} g \right), \quad (4.52)$$

amb la densitat molar avaluada per l'eq. (4.40), ($s=tv$), si el flux és positiu i amb l'eq. (4.53) si el flux és negatiu,

$$\bar{\rho}_{tv} = \frac{P_{tv} + P_u}{R(\vartheta_{tv} + \vartheta_a)}. \quad (4.53)$$

Observis que en aquesta darrera situació s'admet que hi ha una entrada d'aire ambient al sistema. La pressió del plenum superior P_u s'admet que és l'atmosfèrica al nivell $z=L$,

$$P_u = P_a - \rho_a gL, \quad (4.54)$$

situació que correspon a un reactor obert a l'atmosfera o amb un conducte de sortida del plenum superior que no ofereix cap resistència al flux gasós. Un conducte estret i llarg podria originar unes pèrdues de càrrega no negligibles, la pressió al plenum superior seria més gran que l'atmosfèrica i per modelitzar-ho caldria considerar les pèrdues de càrrega en el conducte.

La densitat de l'aire exterior (21% O₂, 79% N₂, M_a= 28.84 kg/kmol) es determina sempre a la temperatura i pressió ambientals,

$$\rho_a = \frac{P_a M_a}{RT_a}. \quad (4.55)$$

El flux molar d'un component gasós k a través d'una frontera s s'obté del producte del flux total ($\dot{n}_{T,s}$) per la fracció molar del gas en la fase gasosa del VC d'on procedeix, (veure també eqs. (3.30) i (3.32)):

$$\dot{n}_{k,s} = y_{k,s} \dot{n}_{T,s}, \quad (4.56)$$

on s^* designa al VC s si el flux és positiu i al VC $s+1$ si el flux és negatiu.

4.4.2.4 Flux d'escalfor conductiu a la frontera entre dos VC

S'admet que les propietats físiques de la matriu porosa prenen un valor constant dins d'un VC. Siguin T_s i T_{s+1} les temperatures nodals de la matriu sòlida en dos VC que tenen frontera comú i sigui T_i la temperatura a la frontera (Fig. 4.11).

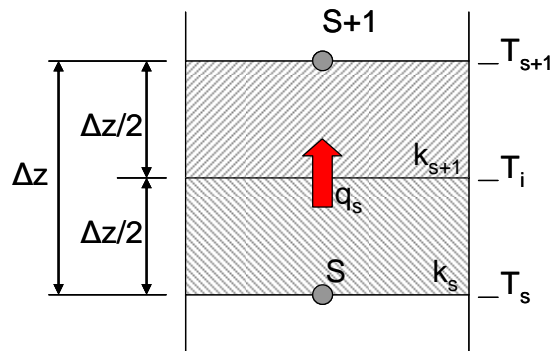


Figura 4.11. Flux d'escalfor conductiu a través de la matriu porosa en la frontera entre dos VC consecutius.

D'acord a la llei de Fourier els fluxos d'escalfor conductius q_{s-i} i q_{i-s+1} venen donats per:

$$q_{s-i} = k_s S \frac{T_s - T_i}{(\Delta z/2)},$$

$$q_{i-s+1} = k_{s+1} S \frac{T_i - T_{s+1}}{(\Delta z/2)},$$

i atès que el flux d'escalfor ha de ser el mateix a cada costat de la frontera, $q_{s-i} = q_{i-s+1} = q_s$, és senzill arribar a la següent expressió pel flux conductiu a través de la frontera s en funció de les temperatures nodals,

$$q_s = \bar{k}_{s,s+1} S \frac{T_s - T_{s+1}}{\Delta z}, \quad (4.57)$$

on S és la secció de la columna i $\bar{k}_{s,s+1} = \frac{2k_s k_{s+1}}{k_s + k_{s+1}}$ és la conductivitat tèrmica mitjana harmònica dels valors corresponents als volums s i $s+1$. No es consideren fluxos conductius a través de les fronteres inferior i superior del sistema.

4.4.2.5 Flux d'escalfor a través de les parets del reactor

En general els reactors estan recoberts d'un gruix de material aïllant i la dissipació d'escalfor a través de la paret s'admet que és poc important respecte als fluxos en direcció vertical. La dissipació d'escalfor a través de la paret d'un VC s ($q_{cw,s}$, Fig. 4.7) ve determinada per:

$$q_{cw,s} = U_s A_{Ls} (T_s - T_a) \quad (4.58)$$

on U_s és el coeficient global de transferència d'escalfor a través de la paret del volum de control s i A_{Ls} la corresponent àrea.

El volum de control superior (tv) està en contacte amb el plenum superior. Experimentalment es comprova que a les parets dels plenum superior hi ha molta condensació i es produeix un degoteig sobre la capa superior del material provocant que aquest sigui més humit. Aquesta condensació és deguda al refredament del gas calent que l'ocupa per dissipació d'escalfor cap a l'exterior a través de les parets del plenum superior. Així, el gas calent travessa la capa superior del material, arriba al plenum superior on es refreda i condensa el vapor a les parets, mentre els condensats degotegen a la capa superior i la refreden. Una manera aproximada de modelitzar aquest fenomen, sense haver de modelitzar el moviment dels condensats, és afegir, a la superfície de paret lateral del VC superior, la superfície corresponent al plenum superior. Així, en aquest model el gas calent condensa directament al travessar el VC degut a la major dissipació d'escalfor per la superfície augmentada.

4.4.2.6 Flux d'escalfor sensible entre les fase sòlida i gasosa

Per cada VC es determina el flux de calor sensible transferit cap a la fase gasosa mitjançant l'eq. (4.59), similar a les eqs. (3.54) i (4.30) però adaptada al VC s ,

$$q_{c,s}^T = M_{T,s} h_{csv} (T_s - \vartheta_s). \quad (4.59)$$

4.4.3 Les equacions de BM del model 1D discretitzat

El BM en cadascun dels tv - l volums de control en que s'ha discretitzat el domini (Fig. 4.7) proporciona una equació diferencial ordinària per cada variable d'estat que representa una magnitud massica ($I, \dots, iw+5$). Així, per al VC s es tenen les següents equacions diferencials:

$$\frac{dm_{i,s}}{dt} = M_{T,s} r_{is} \quad i=1,\dots, is \quad (4.60)$$

$$\frac{dm_{j,s}}{dt} = M_{T,s} (r_{js} - r_{j,s}^T) \quad j=is+1,\dots, is+3, iw \quad (4.61)$$

$$\frac{dn_{k,s}}{dt} = \dot{n}_{k,s-1} - \dot{n}_{k,s} + M_{T,s} \bar{r}_k^T \quad k=iw+1,\dots, iw+5 \quad (4.62)$$

on els fluxos $\dot{n}_{k,s-1}$ i $\dot{n}_{k,s}$ es determinen amb el criteri d'esquema *upwind* de l'eq. (4.56). Les equacions (4.60) a (4.62) són similars a les eqs. (3.36) a (3.38) que governen l'evolució del model base descrit al Capítol 3.

4.4.4 Les equacions de BE del model 1-D discretitzat

A l'apartat 4.2 del present capítol s'ha exposat la manera de determinar els fluxos màssics i energètics que intervenen en els BM i BE d'un VC s a partir dels valors nodals de les variables d'estat (Fig. 4.12).

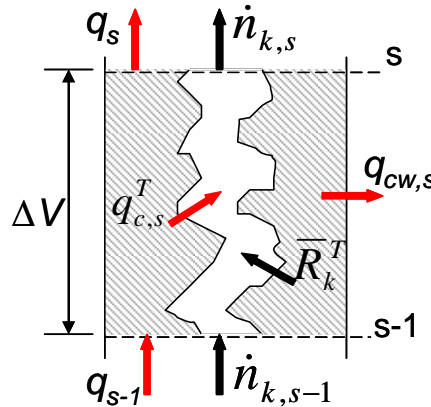


Figura 4.12. Fluxos de massa i energia considerats en les equacions de BM i BE d'un volum de control s .

L'adaptació per a un VC s de l'eq. (3.50) de BE de la fase gasosa permet obtenir la derivada temporal de la temperatura de la fase gasosa,

$$\frac{d\vartheta_s}{dt} = \frac{q_{c,s}^T + (\vartheta_0^* - \vartheta_1^*) \sum_k \bar{c}_{pk} \dot{n}_{k,s-1} + \sum_k \bar{R}_{k,s}^T \bar{c}_{pk} (\vartheta^* - \vartheta_1^*) + \sum_k (R\vartheta_s - \bar{c}_{pk} (\vartheta_s - \vartheta_1^*)) \frac{dn_{k,s}}{dt}}{\sum_k n_{k,s} (\bar{c}_{pk} - R)} \quad (4.63)$$

on el terme de transferència d'entalpia lligada als fluxos entre fases es computa amb l'eq. (4.63a),

$$\sum_k \bar{R}_{k,s}^T \bar{c}_{pk} (\vartheta^* - \vartheta_1^*) = (T_s - \vartheta_1^*) \sum_k \bar{c}_{pk} \cdot \max\{0, \bar{R}_{k,s}^T\} + (\vartheta_s - \vartheta_1^*) \sum_k \bar{c}_{pk} \cdot \min\{0, \bar{R}_{k,s}^T\} \quad (4.63a)$$

Les temperatures a les fronteres inferior ($s-1$) i superior (s) depenen de la direcció del flux molar i es determinen amb els següents criteris ($s=2, \dots, tv$):

$$\begin{aligned} \vartheta_0^* &= \vartheta_{s-1} & \text{si } \dot{n}_{T,s-1} &\geq 0 \\ \vartheta_0^* &= \vartheta_s & \text{si } \dot{n}_{T,s-1} &< 0 \\ \\ \vartheta_1^* &= \vartheta_s & \text{si } \dot{n}_{T,s} &\geq 0 \\ \vartheta_1^* &= \vartheta_{s+1} & \text{si } \dot{n}_{T,s} &< 0 \quad (\text{per } s=tv: \vartheta_1^* = \vartheta_a \quad \text{si } \dot{n}_{T,tv} < 0). \end{aligned}$$

De manera similar s'adapta l'eq. (3.60) de BE de les fases sòlida i líquida a un VC s ,

(4.64)

$$\frac{dT_s}{dt} = \frac{q_{G,s} + q_{s-1} - q_s - q_{cw,s} - q_{c,s}^T - \sum_k [\max\{0, \bar{R}_{k,s}^T\} \bar{h}_k(T_s) + \min\{0, \bar{R}_{k,s}^T\} \bar{h}_k(\vartheta_s^*)] - (T_s - T_{ref}) \left(c_{pw} \frac{dm_{w,s}}{dt} + \sum_i c_{pi} \frac{dm_{i,s}}{dt} \right)}{C_{con,s} + c_{pw} m_{w,s} + \sum_i c_{pi} m_{i,s}}$$

Les equacions (4.63) i (4.64) donen la derivada temporal de les temperatures nodals en funció de les variables d'estat nodals i de les seves derivades temporals i representen les formes discretitzades de les eqs. (4.29) i (4.36).

Per cada VC és possible doncs escriure una equació diferencial ordinària per la derivada temporal de cadascuna de les seves variables d'estat. Com es pot veure en les equacions (4.60) a (4.64) les variables d'estat en un VC poden classificar-se en dos tipus:

- Les variables d'estat u_i que només intervien en el terme de reacció local ($i=1, \dots, iw$) i que la seva derivada respecte al temps només depèn del valor de les variables d'estat d'aquest VC, és a dir, $\frac{\partial u_{i,s}}{\partial t} = f(u_{i,s})$, (eqs. 4.12 i 4.13).
- Les variables d'estat u_i que intervien en els processos de transferència ($i=iw+1, \dots, it+1$) i en les que la seva derivada respecte al temps és funció del valor de les variables d'estat en aquest VC i dels seus gradients en la direcció z . La seva equació de balanç màssic ò energètic és de la forma, $\frac{\partial u_{i,s}}{\partial t} = f(u_{i,s}, \frac{\partial u_{i,s}}{\partial z})$, (eqs. 4.25, 4.29 i 4.36). En la forma discretitzada d'aquestes equacions (eqs. 4.62, 4.63 i 4.64) hi intervien els valors de les variables d'estat en els volums de control adjacents.

El conjunt d'equacions diferencials ordinàries (4.60), (4.61), (4.62), (4.63) i (4.64) plantejades per cadascun dels $tv-1$ VC resultants de la discretització formen un sistema de $ni \cdot (tv-1)$ equacions diferencial ordinàries que defineixen el model i determinen l'evolució de les variables d'estat.

4.4.5 Distribució inicial de pressió i masses molars en la fase gasosa

A fi d'aconseguir una arrencada suau del procés numèric d'integració del sistema d'equacions diferencials ordinàries és convenient partir d'una distribució inicial de pressions que s'apropi el més possible a un estat estacionari. L'arrencada de la integració des de qualsevol distribució inicial és possible, però el ràpid transitori inicial d'equilibrat de les pressions sol presentar elevats valors de les derivades temporals de les variables d'estat i , en conseqüència, el mètode numèric d'integració ha d'escurçar molt el pas d'integració, redueix la velocitat d'avenç o fins i tot pot arribar a avortar.

Per això s'assumeix que en l'estat inicial ($t=0$) coincideixen les temperatures de la fase gasosa i de la sòlida ($T_s=\vartheta_s$) en cada VC i que la distribució inicial de pressions és tal que origina un flux molar total uniforme a través de les fronteres entre els VC ($s=1,\dots,tv$). A més a més s'assumeix que en cada VC la fase gasosa està saturada de vapor i que hi ha equilibri entre les pressions parcials en la fase gasosa i les corresponents concentracions en la fase líquida dels components volàtils (O_2 , CO_2 i NH_3). La concentració de NH_3 en la fase líquida, obtinguda a partir de la concentració de nitrogen amoniacal analític, determina la corresponent pressió parcial en la fase gasosa. Les pressions parcials de O_2 i CO_2 en la fase gasosa determinen la corresponent concentració en la fase líquida.

Determinació de la distribució inicial de pressions. Tal com es mostra a les Figs. 4.7 i 4.10, al plenum inferior hi ha una pressió P_1 superior a l'atmosfèrica degut a l'acció del bufador (eq. 4.37) i al plenum superior s'admet que hi ha una pressió igual a l'atmosfèrica a aquell nivell (eq. 4.54).

Per cada frontera entre dos VC consecutius ($s=2,\dots, tv-1$) l'eq. (4.48) relaciona el cabal molar total \dot{n}_T amb les dues pressions nodals totals, mentre que les eqs. (4.50) i (4.52) relacionen el flux molar total a les fronteres inferior i superior amb les pressions nodals. Les equacions (4.50), (4.48) i (4.52) poden escriure's, respectivament, en la següent forma simplificada:

$$-a_1 \dot{n}_T + P_1 - P_2 = b_1 \quad (4.65)$$

$$-a_s \dot{n}_T + P_s - P_{s+1} = b_s \quad s=2,\dots,tv-1 \quad (4.66)$$

$$-a_{tv} \dot{n}_T + P_{tv} = b_{tv} + P_u \quad (4.67)$$

on a i b són termes aproximadament constants que prenen els següents valors:

$$a_1 = \frac{\Delta z}{2S\bar{\rho}_2 \frac{\kappa_2}{\mu_2}} \quad (4.68a) \quad b_1 = \rho_2 g \frac{\Delta z}{2} \quad (4.68b)$$

$$a_s = \frac{\Delta z}{S\bar{\rho}_s \left(\frac{\kappa}{\mu}\right)_s} \quad (4.69a) \quad b_s = \frac{\rho_s + \rho_{s+1}}{2} g \Delta z \quad (4.69b)$$

$$a_{tv} = \frac{\Delta z}{2S\bar{\rho}_{tv} \frac{\kappa_{tv}}{\mu_{tv}}} \quad (4.70a)$$

$$b_{tv} = \rho_{tv} g \frac{\Delta z}{2} \quad (4.70b)$$

En aquestes equacions les densitats molars es determinen en funció de les pressions i temperatures nodals amb les equacions (4.51), (4.47) i (4.53) respectivament, i la relació permeabilitat-viscositat de l'eq. (4.69a) es determina amb l'eq. (4.49).

El plantejament de les equacions (4.65), (4.66) i (4.67) a les corresponents fronteres $s=1, \dots, tv$ (Fig. 4.10) genera un sistema de tv equacions amb $tv+1$ incògnites, \dot{n}_T , P_1, \dots, P_{tv} , la matriu de coeficients del qual, juntament amb el vector de termes independents, pot representar-se de la següent manera (eq. 4.71):

equació nº	\dot{n}_T	P_1	P_2	P_3		P_{tv}	
1	$-a_1$	1	-1				b_1
2	$-a_2$		1	-1			b_2
3	$-a_3$			1	-1		b_3
...			
tv-1	$-a_{tv-1}$					1	b_{tv-1}
tv	$-a_{tv}$					1	$b_{tv} + P_u$

A la columna de l'esquerra s'hi indica el número de cada equació, a la fila superior la corresponent variable. Els coeficients del sistema d'equacions formen així una matriu de tv files i $tv+1$ columnes. La columna addicional de la dreta conté els corresponents termes independents.

Hi ha dues maneres d'operar l'aireig del reactor:

- En mode cabal (mode 0), en el que es fixa el cabal d'aire insuflat (Q_a).
- En mode sobrepressió (mode 1), en el que es fixa la sobrepressió proporcionada pel bufador (δP).

En el mode sobrepressió la pressió al plenum inferior (P_1) queda determinada (eq. 4.37) i llavors el sistema (4.71) pot resoldre's amb les tv incògnites \dot{n}_T , P_2, \dots, P_{tv} , és a dir, el cabal molar total i la distribució de pressió inicial als nodes $s=2, \dots, tv$.

En el mode cabal es fixa el cabal volumètric d'entrada al reactor (Q_a) mesurat a pressió i temperatura atmosfèrica (P_a , T_a), de manera que el cabal màssic molar queda determinat per l'eq. (4.72)

$$\dot{n}_T = Q_a \frac{P_a}{RT_a} \quad (4.72)$$

i llavors el sistema (4.71) pot resoldre's amb les pressions nodals P_1, \dots, P_{tv} , com a incògnites.

El sistema (4.71) no és lineal degut a que els termes a_s i b_s depenen de les densitats de la fase gasosa (eqs. 4.68 a 4.70) i aquestes depenen alhora de les pressions nodals (eqs.

4.47, 4.51 i 4.53) i de la composició de la fase gasosa (eq. 4.41). La solució es troba per ajustos iteratius de les pressions nodals totals a partir d'una distribució inicial aproximada (\mathbf{PT}_0) de pressions que permet calcular els coeficients a_s i b_s . La solució que llavors s'obté de (4.71) permet calcular els nous valors de a_s i b_s . El procés s'atura quan la diferència entre dues solucions successives de la distribució de pressió és inferior a un llindar ϵ_{err} preestablert. A la Fig. 4.13 es mostra l'organigrama d'aquest procés de còmput iteratiu. \mathbf{PT}_0 és un vector de tv components al que s'assigna una distribució inicial aproximada de pressions.

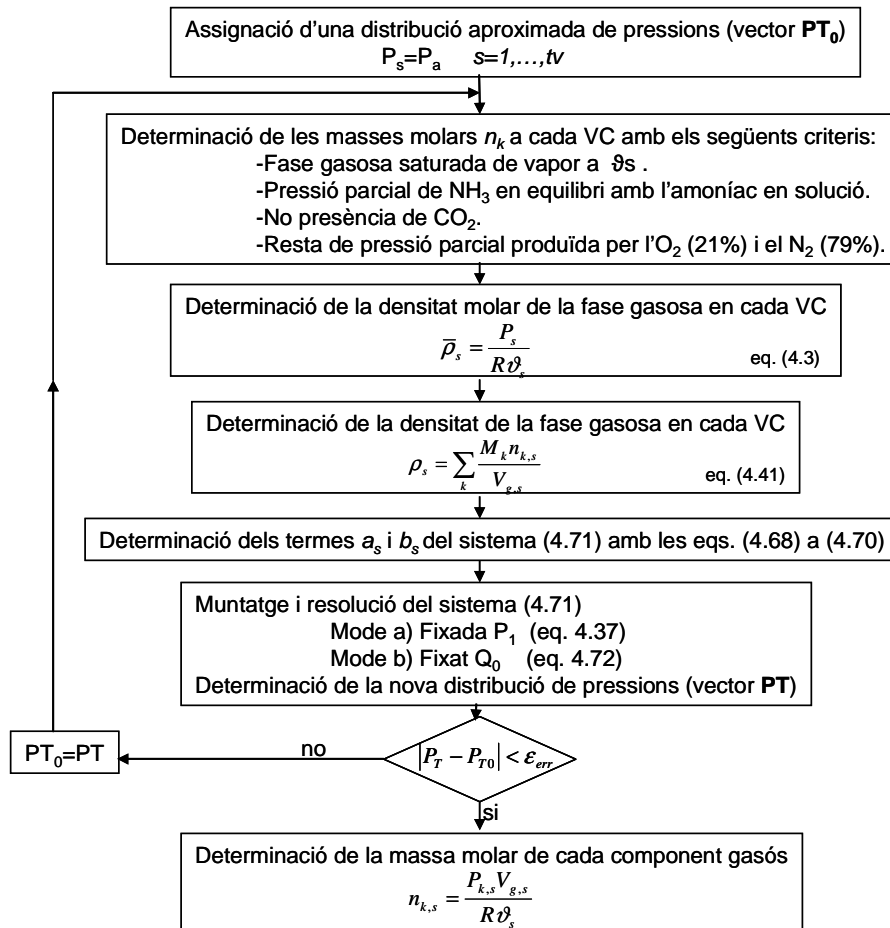


Figura 4.13. Organigrama del procés de càlcul de la distribució inicial de masses molars en la fase gasosa. \mathbf{PT}_0 i \mathbf{PT} són dos vectors de tv components on cada component és la pressió total de la fase gasosa en el corresponent VC.

4.4.6 Implementació informàtica del model

El model numèric descrit als apartats 4.4.3 i 4.4.4 i consistent en el sistema d'equacions diferencials ordinàries (4.60), (4.61), (4.62), (4.63) i (4.64) plantejades per cada VC de la discretització es resol amb la rutina *compSaID*, l'estructura de la qual es mostra al diagrama de flux de la Fig. 4.14. Totes les rutines i subrutines s'han implementat en *Matlab*[®] i per resoldre el sistema d'equacions diferencials ordinàries s'ha utilitzat el procediment *ode15s* de *Matlab*[®] (veure llistat de totes les rutines a l'Annex 1).

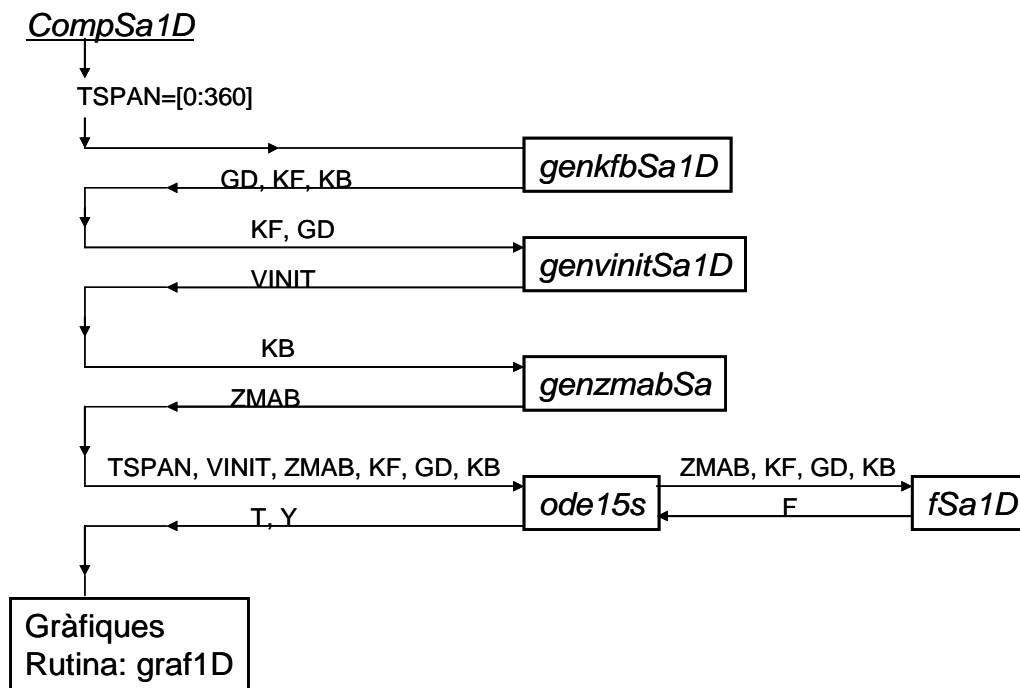


Figura 4.14. Estructura del programa principal *compSa1D* desenvolupat per fer les simulacions amb el model 1-D. Les rutines que es criden des del *main* apareixen dins els rectangles. Sobre les línies s'indiquen les variables d'entrada i de sortida de cada subrutina.

El programa principal *compSa1D* crida successivament a les següents subrutines:

genkfbSa1D Aquesta subrutina assigna valor a tots els paràmetres del model, classificant-los en tres categories, que originen els tres vectors següents:
 GD: Vector de paràmetres de geometria i discretització
 KF: Vector de paràmetre del model físic
 KB: Vector de paràmetres del model biològic

genvinitSa1D Subrutina que genera el vector d'estat inicial (VINIT). A partir del valor dels paràmetres analítics de composició del material en compostatge i de la massa total de la càrrega fa una distribució de masses als diferents VC i assigna una temperatura inicial tant a la fase gasosa com a la sòlida. La determinació de la massa molar dels components gasosos i de la massa dels components volàtils en solució es fa amb la metodologia descrita a l'apartat 4.4.5.

genzmatSa Subrutina per generar la matriu de coeficients estequiomètrics (ZMAB) del model biològic a partir dels paràmetres del model (KB). L'estructura de ZMAB és la definida a la Fig. 3.4 i a la Taula C3-A2.3, els paràmetres del model biològic i els seus valors són els definits a la Taula C3-A2.2.

fSa1D Subrutina que genera el vector de derivades temporals del vector de variables d'estat ($F=dU/dt$) a partir del vector de variables d'estat (U), de la matriu de coeficients estequiomètrics (ZMAB) i dels vectors de paràmetres físics (KF), geomètrics i de discretització (GD) i biològics (KB). L'estructura del vector U és la definida a la Fig. 4.8.

Les variables de sortida del procediment d'integració *ode15s* són el vector columna de punts en el temps (T), que ha estat predefinit al inici del programa principal en el vector TSPAN, i la matriu Y, de tantes files com punts en el temps conté T. Cada fila de Y conté els valors que les variables d'estat prenen en el corresponent instant (punt de T). Observis que cada columna de Y conté l'evolució temporal, en els punts de T, d'una variable d'estat. A partir de T i Y diferents rutines (*graf1D*) determinen l'evolució de les funcions de variables d'estat, inclosos els indicadors del procés, i fan les gràfiques desitjades.

4.5 Resultats de simulacions del model 1D

Dels dos models biològics analitzats al Capítol 3, el de J. Kaiser (1996) i el de Solé-Mauri (2006) adaptat, s'escull aquest darrer per dues raons: *a)* Contempla la dinàmica del nitrogen, i *b)* L'evolució de temperatures que proporciona reproduïx millor la segona etapa termòfila observada en les dades experimentals. Tot seguit es presenten resultats de simulacions del model físic 1D acoblat amb el model biològic adaptat de Solé-Mauri (veure annex C3-A2). Els valors utilitzats pels paràmetres del model biològic són els de la Taula C3-A2.2. Els valors de referència de pH, coeficients de transferència de massa i coeficient de transferència d'escalfor entre fases són els donats a la Taula 3.7. Els valors de referència pels paràmetres d'operació, geometria i discretització es donen a la Taula 4.3.

Taula 4.3. Valors de referència dels paràmetres del model físic utilitzats en les simulacions del model 1D acoblat al model biològic adaptat de Solé-Mauri.

Paràmetr	Valor refer.	Unitats	Descripció
<i>D'operació</i>			
Q_a	0.24 ⁽¹⁾	$m^3 \cdot h^{-1}$	Cabal d'aire d'alimentació del reactor
δP	60 ⁽¹⁾	Pa	Sobrepresió al plenum inferior
P_a	$1.013 \cdot 10^5$	Pa	Pressió atmosfèrica
T_a	20	°C	Temperatura aire ambient exterior
e_a	0.70	--	Humitat relativa aire ambient exterior
T_o	20	°C	Temperatura uniforme inicial de la massa
<i>Propietats físiques del material</i>			
ϵ_g	0.50	--	Fració de volum ocupat per aire (Free Air Space)
κ	$2.86 \cdot 10^{-10}$	m^2	Permeabilitat a l'aire del medi porós
k	540	$J \cdot h^{-1} \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$	Conductivitat tèrmica del medi porós
$\mu^{(2)}$	$5.067 \cdot 10^{-9}$	Pa·h	Viscositat dinàmica fase gasosa a 20°C
<i>Geometria del reactor</i>			
L	1.0	m	Alçària de la columna de material
D	0.30	m	Diàmetre intern del reactor
Δz_{ps}	0.20	m	Alçària del plenum superior
tv-1	5	--	Nombre de VC utilitzats en la discretització
<i>Característiques tèrmiques del reactor</i>			
U	3900	$J \cdot h^{-1} \cdot m^{-2} \cdot K^{-1}$	Coefficient global de transferència d'escalfor de la paret del reactor referit a la superfície interna.
C_{con}	$3.3 \cdot 10^4$	$J \cdot K^{-1} \cdot m^{-2}$	Capacitat calorífica del reactor per unitat de superfície paret interna

(1) Q_a , per operació en mode 0: cabal d'aire insuflat fixat; δP per operació en mode 1: sobrepresió al plenum inferior fixada.

(2) En el model 1D s'assumeix que la viscositat dinàmica de la fase gasosa μ (Pa·h) creix linealment amb la temperatura de la fase gasosa ϑ (K) seguint l'expressió $\mu(\vartheta) = (5.067 + 0.012168 \cdot (\vartheta - 293)) \cdot 10^{-9}$, obtinguda per interpolació lineal en el interval 20-80°C de la viscositat dinàmica de l'aire sec, segons dades donades per Reklaitis (1989).

El model físic 1D es pot operar en dos modes. En el mode 0 es fixa el cabal d'aire Q_a d'entrada al plenum inferior mesurat a pressió i temperatura de l'ambient, llavors la pressió P_I requerida al plenum inferior varia en funció de la resistència que el rebliment porós ofereix al flux gasós. En l'operació en mode 1 es fixa la sobrepressió, respecte a l'atmosfèrica al nivell inferior de la columna, del plenum inferior (δP , eq. 4.37) i llavors el cabal d'aire insuflat varia segons la resistència.

4.5.1 Distribució de variables i indicadors

L'evolució de la temperatura al punt nodal de cada VC que resulta de la simulació en mode 0 amb els valors de referència dels paràmetres del model es mostra a la Fig. 4.15A. L'operació en mode 1 no presenta diferències importants en les corbes d'evolució de les temperatures. Les tendències generals en l'evolució de la temperatura venen determinades pel model biològic utilitzat, tal com es desprèn de la similitud entre l'evolució de temperatura als diferents nivells del reactor (Fig. 4.15A) i l'evolució de la temperatura en el model base (mescla completa) utilitzant el model biològic adaptat de Solé-Mauri (Fig.3.15A). El patró de temperatura utilitzant el model biològic de J. Kaiser (Fig. 3.13A) és clarament diferent.

Les diferències en l'evolució de la temperatura a cada nivell (Fig. 4.15A) són degudes als fenòmens físics considerats. Així, al nivell inferior (N1, Fig. 4.18) l'etapa termòfila no arriba a temperatures tan elevades i és més curta que als nivells superiors, mentre que la segona pujada de temperatures s'avança i es manté durant un període inferior. Això és degut a la incidència directa del cabal d'aire insuflat que en dificulta l'escalfament tant per l'eliminació de calor sensible com de calor latent. El nivell superior (N5) segueix una tendència similar als altres però la davallada de temperatura de l'etapa mesòfila és més ràpida degut a que la major superfície de paret comptabilitzada al VC superior n'augmenta les pèrdues d'escalfor.

La Fig. 4-15B mostra com la concentració d'oxigen en la fase gasosa segueix un patró similar a tots els nivells però, tal com era d'esperar, els valors de concentració més baixos són als nivells superiors als que arriba ja un corrent gasós empobrit en oxigen pel consum que n'han fet les capes inferiors. Les concentracions de CO₂ presenten un patró invers (Fig. 4.15C) amb les concentracions més elevades als nivells superiors degut a l'adició dels fluxos emesos a les capes inferiors. Quelcom similar s'observa amb les concentracions d'amoníac (Fig. 4-15D), on la principal emissió es produeix en l'etapa termòfila.

Els indicadors de procés definits a la Taula 3.8 s'han avaluat a cadascuna de les cinc capes o nivells (Fig. 4.18) en que s'ha discretitzat la columna de material i els seus valors es presenten a la Taula 4.4.

Taula 4.4 El valor dels indicadors a cada nivell. Simulació amb els valors de referència dels paràmetres operant en mode 0.

	I₁	I₂	I₃	I₄	I₅	I₆	I₇	I₈	I₉
N5	0.0752	0.0976	0.0009	-0.1124	36.4	266.1	73.1	0.66	309
N4	0.0732	0.0948	0.0026	0.1952	73.8	394.9	62.4	0.89	306
N3	0.0710	0.0916	0.0027	0.2370	35.6	315.2	60.1	1.23	277
N2	0.0704	0.0908	0.0027	0.2822	27.6	216.3	57.4	1.64	258
N1	0.0709	0.0915	0.0027	0.3383	18.1	108.2	53.7	2.22	211

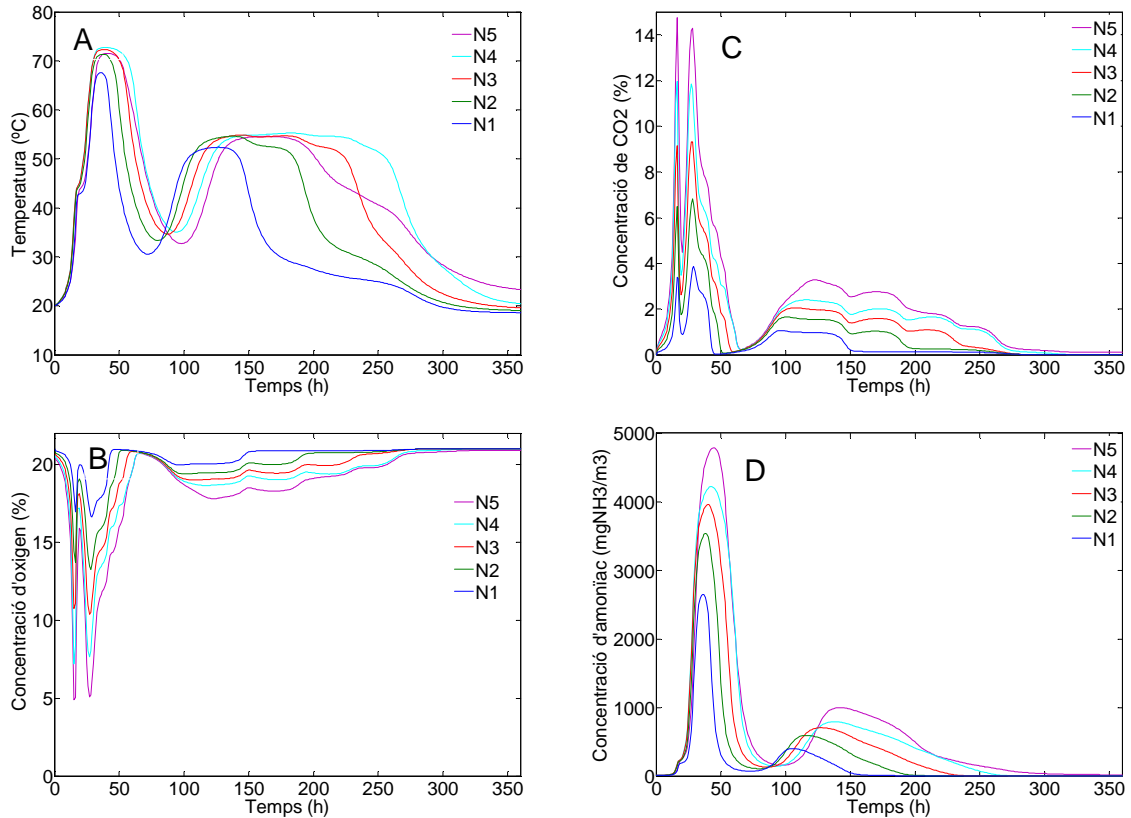


Figura 4.15. Prediccions del model operant en mode 0 i amb els valors de referència dels paràmetres de l'evolució a cada capa del reactor de: A) temperatura; concentració en la fase gasosa de: B) oxigen; C) anhídrid carbònic; D) amoníac. N1: capa inferior; N5: capa superior, segons s'indica a la Fig. 4.18.

Malgrat que l'oxidació assolida de la matèria orgànica és similar a totes les capes (indicadors I_1 i I_2) les capes superiors desprenen menys amoníac (indicador I_3) degut a que hi ha menor assecatge de la massa (indicadors I_4 i I_7) i a la concentració més elevada d'amoniac en la fase gasosa. Al nivell superior (N5) hi ha una entrada neta positiva d'aigua en forma de vapor (valor negatiu de l'indicador I_4) degut a les condensacions que es produeixen al plenum superior, mentre que el nivell inferior (N1) és el que més s'asseca degut a la incidència directa de l'aire exterior (Fig. 4.16B). Els indicadors I_5 i I_6 mostren clarament la no uniformitat en les diferents capes respecte al nivell de tractament tèrmic a efectes de predir la destrucció d'elements patògens o eliminació de males llavors. Tots els indicadors mostren que la penúltima capa (N4) és la que ha sofert un estrès tèrmic més fort. L'indicador I_8 mostra que als nivells superiors hi ha alentiment del creixement biològic per escassetat d'oxigen. La Fig. 4.16 i l'indicador I_4 mostren la importància del moviment d'aigua en forma de vapor arrossegat pel corrent gasós de les capes inferiors cap a les superiors.

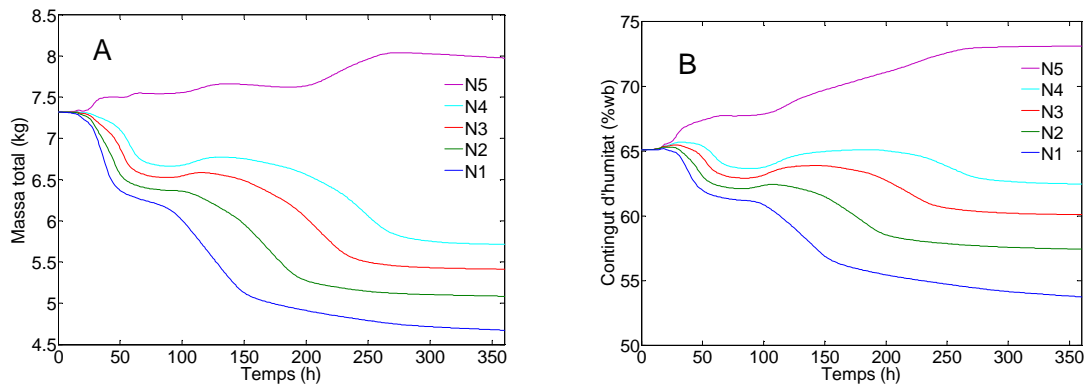


Figura 4.16. Evolució de la massa total (A) i del contingut d'humitat (B) en cadascuna de les capes del reactor. N1: capa inferior, N5 capa superior. A la capa superior hi ha acumulació neta de massa d'aigua degut a les condensacions formades al plenum superior.

4.5.2 Efectes especials predits pel model 1D

El model físic 1D, independentment del model biològic acoblat, descriu els següents fenòmens físics observables fàcilment en els reactors de compostatge: 1) el refredament evaporatiu de la massa, 2) la formació de condensacions al plenum superior, 3) la variació de pressió al plenum inferior durant el procés i, 4) el tiratge natural.

4.5.2.1 Refredament evaporatiu de la massa

Tal i com s'ha descrit a l'apartat 3.3.4.2 (Capítol 3), l'aigua continguda en la matriu porosa s'evapora si la fase gasosa no està saturada. L'evaporació de l'aigua requereix una energia que és presa de l'entorn provocant un refredament del medi. Aquest refredament evaporatiu és la causa que la temperatura del reactor baixi per sota de la de l'ambient en les primeres hores del procés quan encara no ha arrencat l'activitat microbiana, i que ho torni a fer a final del procés quan, segons el model biològic, s'atura l'activitat microbiana per esgotament de la reserva de substrats biodegradables (Fig. 4.15A). A la Fig. 4.17 es mostra el refredament evaporatiu predit de la massa del reactor si aquest fos un reblliment inert, sense activitat biològica. La capa inferior (N1) és la que més refreda degut a la incidència directa de l'aire exterior, i el refredament és més gran si l'aire entra al reactor amb una humitat relativa baixa. És evident que no hi hauria refredament si l'aire entrés saturat a la temperatura de la matriu porosa.

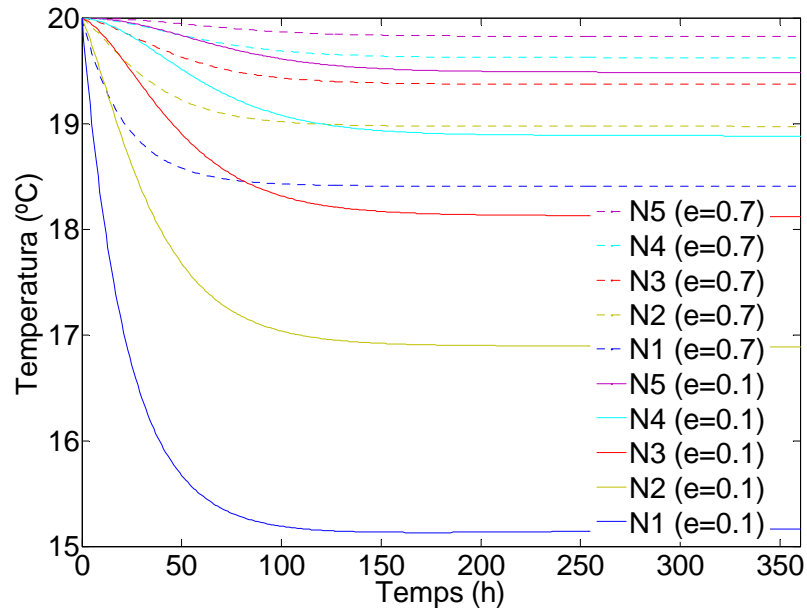


Figura 4.17. Evolució predita pel model (en mode 0 i valors de referència) de la temperatura als diferents nivells del reactor si no hi hagués activitat biològica. El descens de temperatures és degut al refredament evaporatiu de la massa i és més accentuat quan l'aire entra amb baixa humitat relativa ($e_0=10\%$) que quan aquesta és del 70 %.

4.5.2.2 Condensacions al plenum superior

És un fenomen ben conegut l'aparició de fortes condensacions al plenum superior dels reactors experimentals de compostatge. L'aire calent i carregat d'humitat que surt a través de la frontera superior del medi porós entra en contacte amb les parets del plenum on condensa el vapor degut a la dissipació d'escalfor cap a l'exterior. Aquests condensats regalen per la paret lateral o degotegen directament de la tapa i es tornen a incorporar, com a aigua líquida, a la capa o VC superior de la columna, augmentant-ne el seu contingut en humitat i refredant-la. En la present anàlisi aquest fenomen es modelitza de manera simplificada considerant que la superfície del plenum superior, la corresponent a la tapa (A_T) i la de la paret lateral (A_L), (Fig. 4.18), incrementa la superfície lateral del VC superior.

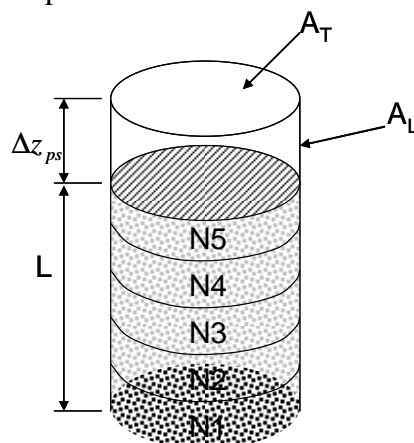


Figura 4.18. En les simulacions s'ha discretitzat la columna en 5 capes o volums de control iguals (N1, ..., N5). La superfície del plenum superior d'alçada Δz_{ps} on es produeixen condensacions és la suma de l'àrea de la tapa superior (A_T) i de la paret lateral (A_L).

La major superfície dissipadora d'escalfor del plenum superior provoca així dos efectes. Per un costat la davallada de temperatura i per l'altra la incorporació de l'aigua de condensació al material de la capa superior. A la Fig. 4.19 s'analitza aquest fenomen considerant quatre situacions de superfície creixent del plenum superior (*i*,...,*iv*), a la Fig. 4.19A es mostra com es redueix la temperatura del nivell superior (N5) a valors creixents de la superfície del plenum superior. La temperatura de la capa N5 es manté per damunt de la de la capa N4 només quan no hi ha superfície de dissipació d'escalfor (situació *i*). A la Fig. 4.19B es mostra l'evolució del contingut d'humitat a cada nivell del reactor. Als nivells inferiors (N1, N2 i N3) l'àrea de la paret del plenum no té cap efecte sobre l'evolució del contingut d'humitat, mentre que al nivell superior hi ha una forta acumulació de condensats. Al nivell N4 hi ha només un lleuger increment en el contingut d'humitat degut a la més baixa temperatura d'aquesta capa pel contacte conductiu amb la capa superior més freda. El present model no contempla el moviment d'aigua en forma líquida entre les diferents capes.

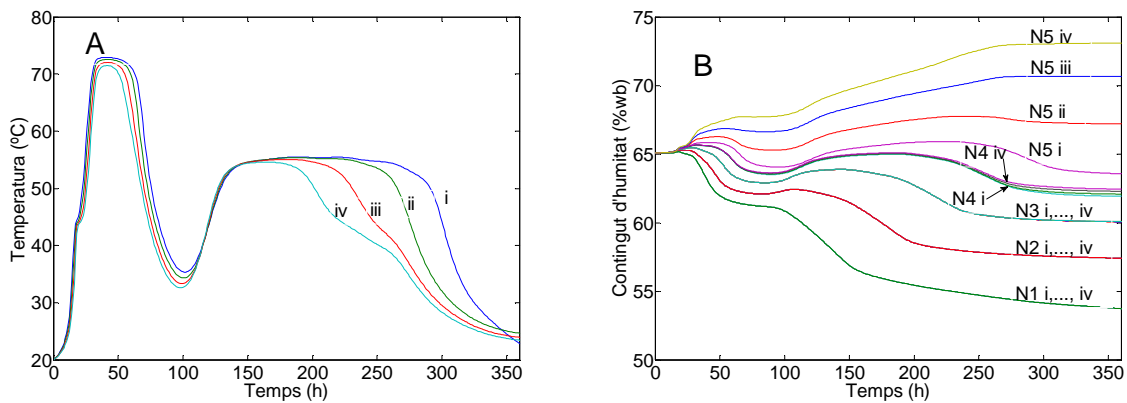


Figura 4.19. (A) Evolució de la temperatura al nivell superior del reactor (N5) i (B) evolució del contingut d'humitat a cada nivell del reactor (N1, ...,N5) segons el valor de la superfície del plenum superior: i) superfície nul·la; ii) només superfície de la tapa circular; iii) superfície de la tapa circular i paret lateral amb $\Delta z_{ps}=0.1$ m; iv) superfície de la tapa circular i paret lateral amb $\Delta z_{ps}=0.2$ m.

4.5.2.3 Evolució de la sobrepressió al plenum inferior

La resistència al pas del corrent gasós a través de la columna de material porós varia durant el procés degut a dos efectes diferents. D'un costat la viscositat dinàmica de la fase gasosa augmenta amb la temperatura, de l'altre el flux gasós total a través d'una secció del reactor augmenta a nivells superiors degut a l'emissió neta de gas al si de la matriu porosa (termes de transferència líquid-gas, inclòs el vapor). Aquests dos efectes actuen en el mateix sentit i són els responsables de que en l'operació a cabal constant (mode 0) la sobrepressió δP requerida a la frontera inferior ($s=1$) augmenti en les etapes d'elevada temperatura i activitat microbiana. A la Fig. 4.20A es mostra aquest efecte. Evidentment, la màxima sobrepressió és la requerida a la frontera inferior, mentre que les sobrepressions als punts nodals superiors ($s=2, \dots, 6$) són inferiors però guarden un cert paral·lelisme. Les línies de punts (Fig. 4.20A) mostren la sobrepressió que hi hauria si la viscositat dinàmica de la fase gasosa fos constant, llavors tot l'efecte seria degut a l'augment del cabal a cada secció causat per la transferència líquid-gas. La Fig. 4.20B mostra l'evolució del flux molar total a cadascuna de les fronteres entre els VC. A la

frontera inferior ($s=1$) aquest és constant (operació en mode 0) i augmenta gradualment a través de les fronteres superiors.

En l'operació del reactor fixant la sobrepressió del plenum inferior (mode 1) varia el cabal d'aire d'entrada al reactor durant el procés. Així, en les etapes d'elevada temperatura i activitat biològica la major resistència al flux gasós provoca una davallada del cabal d'entrada, que seria menys accentuada si no hi hagués l'augment de la viscositat dinàmica amb la temperatura (Fig. 4.20D). Les sobrepressions als punts intermedis presenten també increments en les etapes de més temperatura que són més accentuades als nodes centrals (Fig. 4.20C).

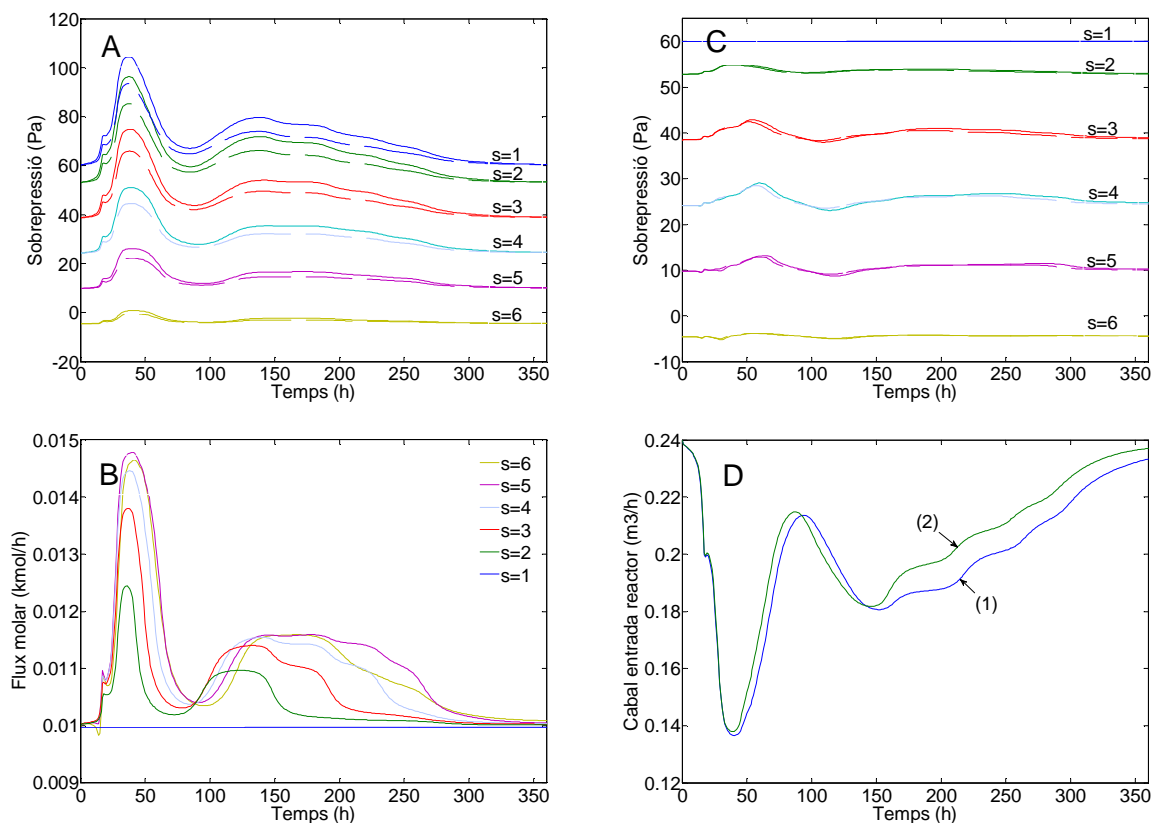


Figura 4.20. A) Evolució de la sobrepressió a la frontera inferior ($s=1$) i als punts nodals ($s=2; \dots; 6$) en l'operació del reactor en mode 0. Les línies de punts indiquen l'evolució quan la viscositat dinàmica de la fase gasosa no depèn de la temperatura i pren el valor $\mu_{20^\circ\text{C}}=5.067 \cdot 10^{-9}$ Pa·h. B) El flux molar total que travessa les fronteres dels VC ($s=1, \dots, 6$) augmenta a nivells superiors (operació en mode 0). C) Evolució de la sobrepressió als punts nodals en l'operació en mode 1. Les línies de punts indiquen l'evolució a viscositat dinàmica constant de la fase gasosa. D) Evolució del cabal d'entrada al reactor en operació en mode 1, (1): Viscositat depèn de la temperatura, (2) viscositat constant.

4.5.2.4 Evolució del procés en condicions de tiratge natural

L'aire calent i humit de la columna té menys densitat que l'aire de l'ambient i s'origina un corrent ascendent de tiratge natural. Permeabilitats baixes del medi frenen aquest corrent. Sota condicions adequades de permeabilitat del medi i nivell d'aïllament del reactor aquest corrent de convecció natural pot ser suficient per aportar l'oxigen necessari pel procés. A la Fig. 4.21 es dona el cabal d'aire del corrent de convecció natural, mesurat a condicions ambientals ($T_a=20^\circ\text{C}$, $P_a=1.013$ bar), que es produiria a

diferents permeabilitats del medi suposant una temperatura uniforme a tot el reactor. A la realitat hi ha una distribució transitòria de temperatura a la fase gasosa que determina el corrent convectiu a cada instant. A la Fig. 4.22 es presenten els resultats de simulació de l'evolució de la temperatura a cada nivell del reactor (N1,...,N5) per a diferents permeabilitats del medi, i a la Fig. 4.23 els corresponents cabals d'aire originats.

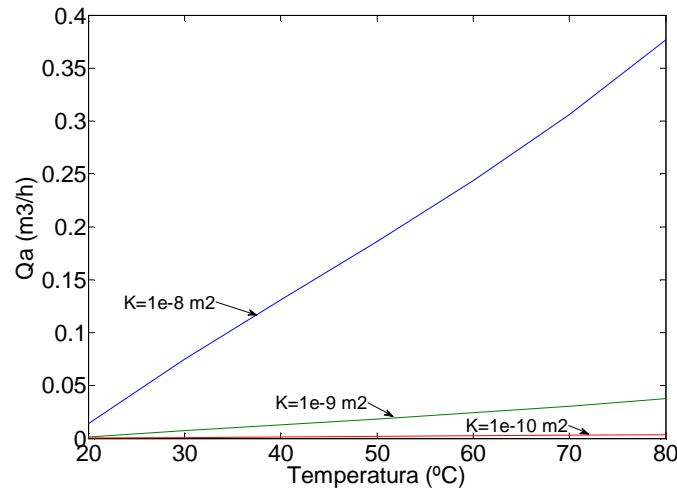


Figura 4.21. Cabal d'aire que s'estableix per convecció natural en un reactor vertical (diàmetre 0.3 m, alçària de material 1 m) en funció de la temperatura del rebliment i de diferents valors de la permeabilitat del medi.

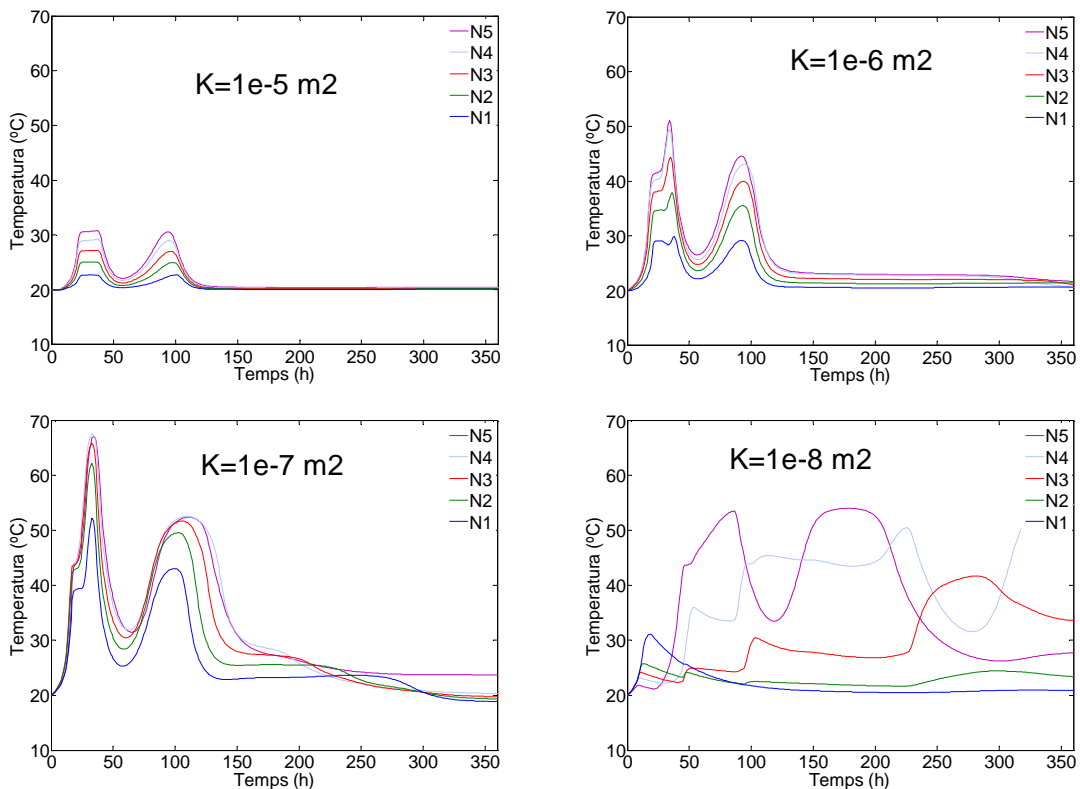


Figura 4.22. Evolució simulada del procés de compostatge sense impulsió forçada d'aire des del plenum inferior (mode 1, $\delta P=0 Pa$) per a permeabilitats decreixents del medi ($\kappa=10^{-5}$, 10^{-6} , 10^{-7} i $10^{-8} m^2$). Permeabilitats molt baixes no permeten l'entrada de suficient oxigen per arrencar el procés.

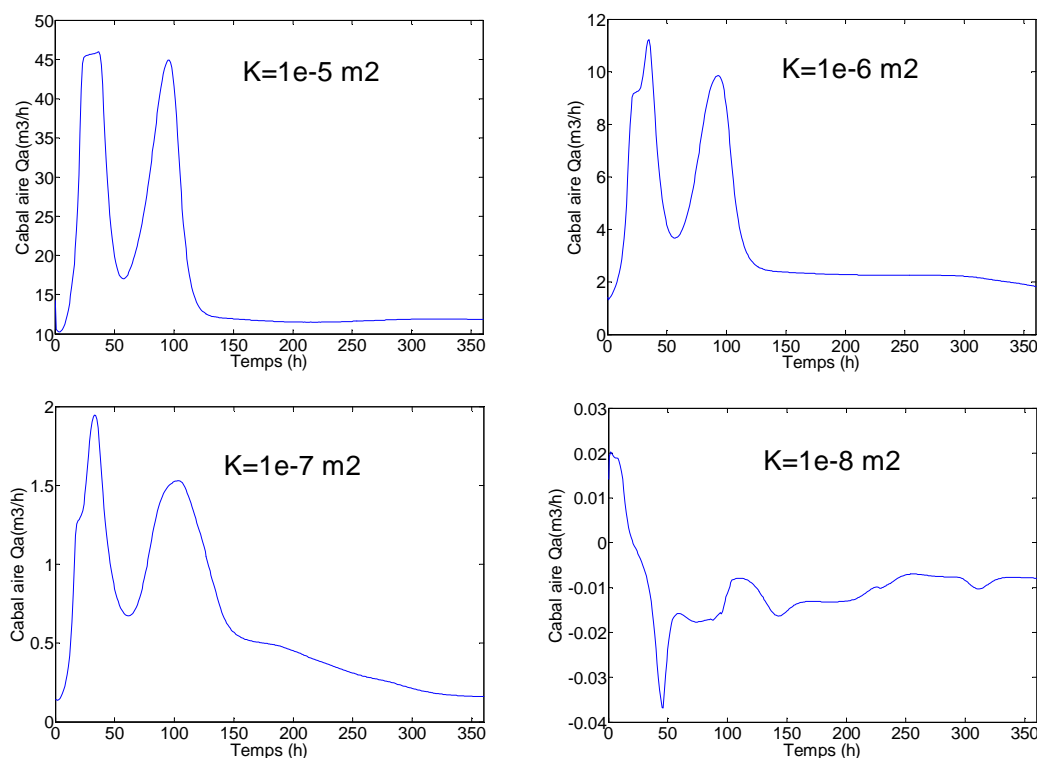


Figura 4.23. Evolució simulada del cabdal d'aire, mesurat a les condicions de pressió i temperatura ambientals P_a i ϑ_a , que entra per tiratge natural al plenum inferior del reactor per diferents permeabilitats del medi.

Segons les simulacions el procés de compostatge per tiratge natural no seria possible a permeabilitats elevades ($\kappa \geq 10^{-5} \text{ m}^2$) degut a que la baixa resistència del medi genera corrents d'aire elevats que impedeixen l'assoliment de temperatures termòfiles. A permeabilitats molt baixes ($\kappa \leq 10^{-8} \text{ m}^2$) tampoc resultaria viable degut a que el corrent d'aire generat no arriba a aportar l'oxigen suficient pel procés biològic (veure indicador I_8 per $\kappa = 10^{-8} \text{ m}^2$, Taula 4.5) i no s'arriba a oxidar tota la matèria biodegradable (indicador I_1). Per contra, permeabilitats entre 10^{-6} i 10^{-7} m^2 farien possible el procés. S'observa que el cabdal d'aire que entra al reactor augmenta en les etapes de forta activitat microbiana degut a l'augment de la temperatura (Fig. 4.23). Cal remarcar que la simulació de l'evolució de temperatures i cabdal a baixa permeabilitat ($\kappa = 10^{-8} \text{ m}^2$, Figs. 4.22 i 4.23) mostra inestabilitats degut a la possible inversió del flux gasós causat per l'augment de la densitat de la fase gasosa a l'haver-hi acumulació de CO_2 . Aquests resultats de simulació són poc realistes ja que en condicions de molt baix nivell d'oxigen poden iniciar-se processos de fermentació anaeròbia no contemplats en el model biològic utilitzat.

Taula 4.5 Valors assolits dels indicadors a cada nivell en el compostatge amb aireig per tiratge natural d'un medi amb permeabilitat decreixent. Els valors corresponen a les situacions de les Figs. 4.22 i 4.23.

	I_1	I_2	I_3	I_4	I_5	I_6	I_7	I_8	I_9
$\kappa=10^{-5}m^2$									
N5	0.0753	0.0979	0.0021	0.2247	0.0	0.0	61.2	5.15	109
N4	0.0754	0.0979	0.0021	0.2331	0.0	0.0	60.7	5.14	107
N3	0.0754	0.0979	0.0022	0.2430	0.0	0.0	60.2	5.11	107
N2	0.0754	0.0980	0.0022	0.2538	0.0	0.0	59.6	4.85	107
N1	0.0755	0.0980	0.0021	0.2606	0.0	0.0	59.2	5.13	106
$\kappa=10^{-6}m^2$									
N5	0.0757	0.0984	0.0023	0.3415	0.0	0.0	54.1	3.89	113
N4	0.0731	0.0947	0.0026	0.3539	4.9	0.8	52.9	3.53	116
N3	0.0748	0.0970	0.0026	0.3306	3.9	0.0	54.8	3.73	113
N2	0.0755	0.0981	0.0024	0.2951	0.6	0.0	57.2	4.04	109
N1	0.0755	0.0980	0.0023	0.2534	0.0	0.0	59.7	4.75	106
$\kappa=10^{-7}m^2$									
N5	0.0754	0.0980	0.0024	0.2083	12.7	47.3	62.0	2.33	185
N4	0.0667	0.0856	0.0029	0.3320	14.3	68.5	53.7	2.41	193
N3	0.0676	0.0868	0.0028	0.3487	12.0	48.0	52.5	2.60	197
N2	0.0690	0.0888	0.0028	0.3543	9.5	28.2	52.3	2.86	135
N1	0.0713	0.0922	0.0027	0.3210	6.7	9.4	55.0	3.28	122
$\kappa=10^{-8}m^2$									
N5	0.0755	0.0976	0.0003	0.0312	0.0	0.0	69.0	0	361*
N4	0.0527	0.0641	-0.0001	-0.0031	0.0	0.0	67.9	0	361
N3	0.0229	0.0238	-0.0002	-0.0173	0.0	0.0	66.4	0	361
N2	0.0029	-0.0001	0.0000	-0.0063	0.0	0.0	65.2	0	1
N1	0.0041	0.0013	0.0000	-0.0003	0.0	0.0	65.1	0	38

* El procés no acaba en el temps simulat.

4.5.3 Efectes de la discretització del domini 1-D sobre els resultats numèrics

El procés de compostatge en un reactor vertical es modelitza, tal com s'ha descrit a l'apartat 3 del present capítol, amb un sistema d'equacions en derivades parcials. Davant la dificultat de resoldre-les numèricament s'ha adoptat l'estratègia de discretitzar la geometria del reactor en un nombre finit de volums de control admetent que dins de cadascun d'ells cada variable d'estat pren un valor uniforme i adoptant un esquema *upwind* pels fluxos gasosos a les fronteres, i així obtenir un sistema d'equacions diferencials ordinàries que poden resoldre's numèricament amb la subrutina *ode15s* de Matlab, tal i com s'ha exposat a l'apartat 4. Els resultats numèrics obtinguts poden dependre doncs de la discretització adoptada. A fi d'esbrinar quina és aquesta influència s'han fet simulacions amb discretitzacions de 5, 10 i 20 volums de control. Els resultats obtinguts amb una discretització de 5 VC es presenten als apartats 4.5.1 i 4.5.2. Cal esperar que les simulacions fetes amb discretitzacions més fines donin resultats més acurats. A la Fig. 4.24 es presenten les diferències en els valors simulats de les temperatures a les cinc posicions nodals (N1, ..., N5, Fig. 4.18) amb una discretització de 5 VC (línies contínues) i de 10 VC (línies de punts) respecte als valors obtinguts amb una discretització de 20 VC. Els valors de temperatura a les posicions nodals en les discretitzacions de 10 i 20 VC són el promig entre les dues posicions més properes en cada discretització.

Les posicions on hi ha més diferència de temperatura (superior a 5°C) corresponen als punts nodals de la capa inferior i superior del reactor (N1 i N5). Aquest fet cal atribuir-lo a la manera en com es modelitzen les condicions de frontera en el reactor i no pas a una divergència numèrica originada per la discretització. En efecte, la menor

temperatura que resulta en la posició nodal N5 amb la discretització en 5 VC és deguda a que el model assigna tota la superfície del plenum superior al VC superior i no contempla el moviment de lixiviats en la matriu porosa. En les discretitzacions en 10 i 20 VC totes les condensacions es computen al VC superior ($tv=11$ i $tv=21$, respectivament) provocant-li una davallada de temperatura que, degut a la baixa conductivitat tèrmica del material, quasi no es transmet al VC situat just al dessota. Cal notar que en aquestes discretitzacions la posició nodal del nivell N5 està entre els nodes 10 i 11 (discretització en 10 VC) o els nodes 18 i 19 (discretització en 20 VC), i en aquests ja no hi afecten les condensacions del plenum superior.

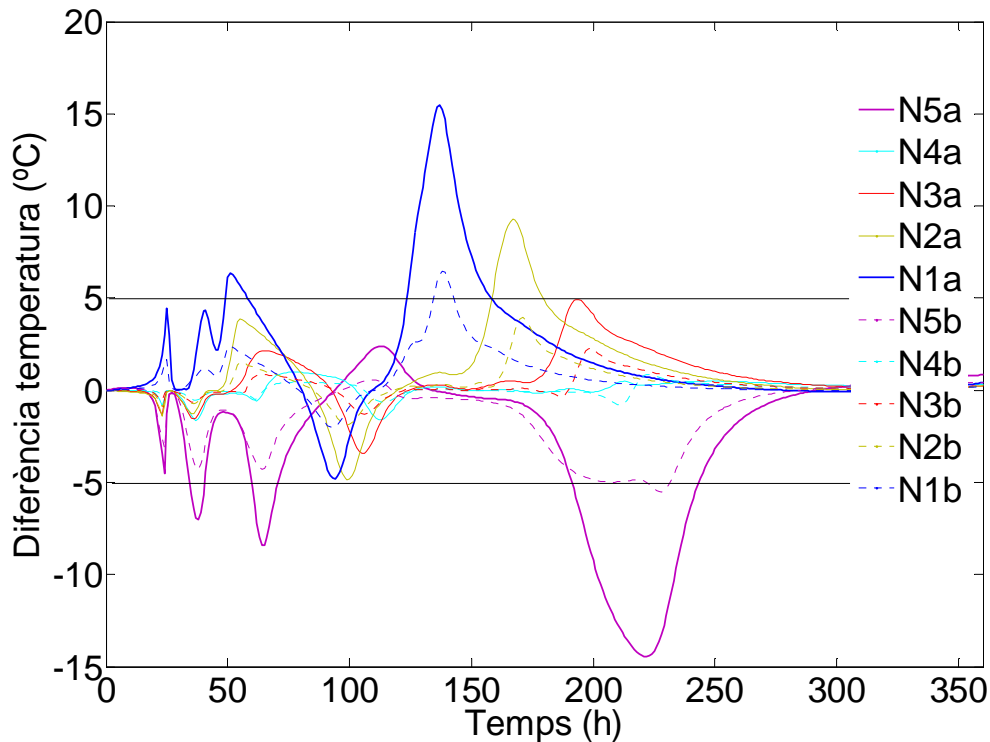


Figura 4.24 Error absolut en la predicció de la temperatura al punt central de cada nivell (N1,...,N5, Fig. 4.17) utilitzant una discretització en 5 volums de control (a) i una en 10 (b) respecte a una discretització en 20 volums de control.

4.6 Anàlisi de sensibilitat

S'analitzen els efectes de les modificacions del valor dels paràmetres físics sobre l'evolució del procés seguint un patró similar al de l'apartat 3.4.2, Capítol 3, però utilitzant només el model biològic adaptat de Solé-Mauri. En totes les simulacions realitzades s'ha fet una discretització en 5 capes (N1,...,N5, Fig. 4.18) del reactor i s'han utilitzat els valors de referència del model biològic (Taula C3-A2.2) i del model físic (Taulas 3.7 i 4.3). En cada simulació només s'ha modificat el valor del paràmetre analitzat. El fet que en el model 1D s'obtingui l'evolució de les variables d'estat i el valor dels indicadors per cada nivell proporciona una gran quantitat d'informació que en fa difícil una presentació senzilla. Per això s'ha limitat el nombre de valors analitzats de cada paràmetre als punts extrems que defineixen un interval dins el que s'obtenen resultats realistes. En general, s'observen tendències similars a les obtingudes en l'anàlisi del model base (apartat 3.4.2.2, Capítol 3).

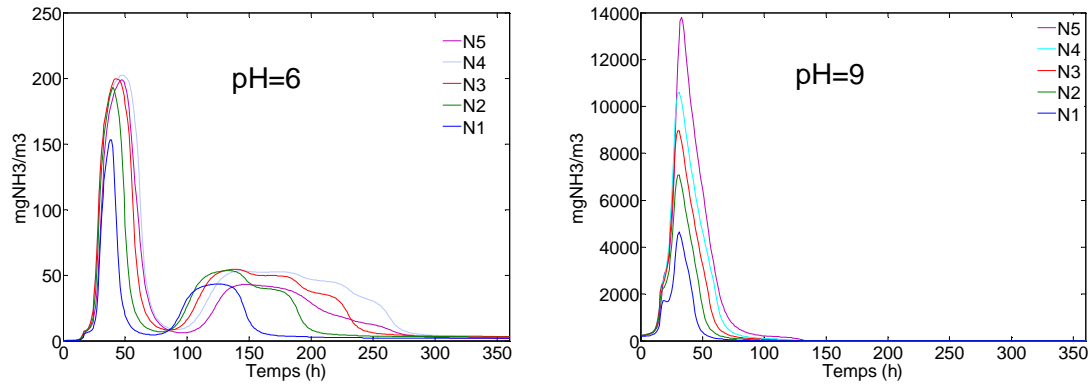


Figura 4.25. Efecte del pH sobre la concentració d'amoniac en la fase gasosa a cada nivell.

El pH té una influència decisiva en la pèrdua d'amoniac del sistema per volatilització. L'amoniac es volatilitza en les etapes d'elevada temperatura, però mentre que mantenint el sistema a pH=6 les concentracions en la fase gasosa no superarien els 200 mgNH₃/m³ sense cap altre efecte, a pH=9 aquestes arribarien quasi als 14000 mgNH₃/m³ (Fig. 4.25), (comparar-los amb els valors de referència a pH=7.5 de la Fig. 4.15D), provocant una forta pèrdua de nitrogen amoniacal del sistema que alenteix el creixement i frena la segona pujada de temperatures (Fig. 4.26), comparar-la amb l'evolució de temperatures de referència, (Fig. 4.15A). En aquesta situació el procés de compostatge quedaria incomplet (veure Taula 4.6, indicadors I₁, I₅ i I₆).

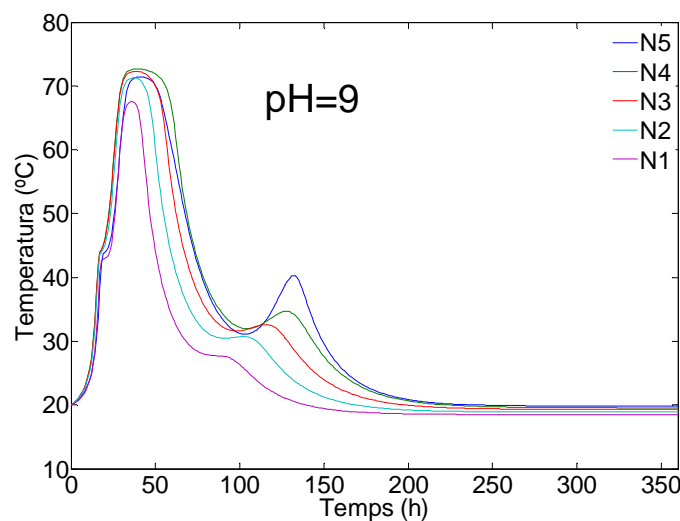


Figura 4.26. Un pH elevat del medi afecta l'evolució de temperatura degut a l'alentiment del creixement microbià per manca d'amoniac com a nutrient.

Taula 4.6. Predicció dels valors dels indicadors a cada nivell en un compostatge a pH=9. La forta pèrdua de nitrogen per volatilització d'amoniac (I₃) impedeix finalitzar l'oxidació del substrat (I₁) i abaixa els nivells de temperatura assolits (I₅ i I₆).

	I ₁	I ₂	I ₃	I ₄	I ₅	I ₆	I ₇	I ₈	I ₉
N5	0.0457	0.0557	0.0036	-0.0212	35.9	258.7	68.2	0.68	157
N4	0.0403	0.0480	0.0038	0.0995	41.5	387.5	63.4	0.89	153
N3	0.0399	0.0474	0.0038	0.1200	35.3	310.1	62.5	1.23	138
N2	0.0397	0.0472	0.0038	0.1435	27.4	213.2	61.4	1.63	121
N1	0.0396	0.0470	0.0038	0.1794	18.0	106.6	59.7	2.20	99

El coeficient de transferència d'oxigen k_{lO_2} té una influència relativament baixa sobre el procés en el interval 10^{-7} - 10^{-5} $\text{kgO}_2 \cdot \text{h}^{-1} \cdot \text{Pa}^{-1} \cdot \text{kgMT}^{-1}$. Un valor de 10^{-5} millora la transferència d'oxigen cap a la fase líquida i augmenta la concentració d'oxigen dissolt ($I_8=2.53-0.22$ mgO_2/L) mentre que un valor de 10^{-7} provoca la davallada de la concentració d'oxigen dissolt en les etapes de forta demanda biològica ($I_8=0.27-0.08$ mgO_2/L) i alenteix el creixement microbià degut a que la concentració d'oxigen dissolt arriba a valors propers a la constant de saturació d'oxigen utilitzada en el model biològic ($K_{O_2}=0.2$ mgO_2/L , Taula C3-A2.2). Evidentment, les concentracions més baixes d'oxigen dissolt es produeixen sempre a les capes superiors, tal com mostra l'indicador I_8 (Taulas 4.4 i 4.5).

Seguint la tendència observada en l'anàlisi de sensibilitat del model base (Taula 3.10) el coeficient de transferència de CO_2 no presenta gairebé cap efecte sobre el procés degut a que l'acumulació de CO_2 dissolt no té efectes sobre el pH en el present model.

Alteracions en el valor del coeficient de transferència d'amoniac repercuteixen sobre la quantitat de nitrogen volatilitzat del sistema. Així, per un valor de $k_{lNH_3}=10^{-5}$ $\text{kgNH}_3 \cdot \text{h}^{-1} \cdot \text{Pa}^{-1} \cdot \text{kgMT}^{-1}$ s'assoleixen concentracions en la fase gasosa de fins a 5000 mgNH_3/m^3 i l'indicador I_3 per les diferents capes pren valors entre 0.0026 (N1) i 0.0006 (N5) $\text{kgNH}_3/\text{kg TM}_o$, sense que hi hagi alentiment del creixement microbià per manca de nitrogen. Valors baixos ($k_{lNH_3}=10^{-8}$ $\text{kgNH}_3 \cdot \text{h}^{-1} \cdot \text{Pa}^{-1} \cdot \text{kgMT}^{-1}$) redueixen les concentracions màximes en la fase gasosa fins a 600 mgNH_3/m^3 i no presenten cap altre efecte significatiu sobre l'evolució del procés.

El coeficient de transferència d'aigua en forma de vapor afecta essencialment al perfil d'humitats final de la columna de compostatge. Així, per un valor $k_{lw}=10^{-5}$ $\text{kg}_{\text{vap}} \cdot \text{h}^{-1} \cdot \text{Pa}^{-1} \cdot \text{kgMT}^{-1}$ hi ha més evaporació a les capes inferiors i també més condensació a la capa superior (N5) respecte a la situació de referència, el que es reflecteix en els valors de l'indicador I_4 ($I_4(\text{N1})=0.280$ i $I_4(\text{N5})=-0.043$ $\text{kg}_{\text{vap}}/\text{kgMT}_o$). Per $k_{lw}=10^{-7}$ $\text{kg}_{\text{vap}} \cdot \text{h}^{-1} \cdot \text{Pa}^{-1} \cdot \text{kgMT}^{-1}$ hi ha menys moviment d'aigua en forma de vapor, menys evaporació a les capes inferiors ($I_4(\text{N1})=0.126$ $\text{kg}_{\text{vap}}/\text{kgMT}_o$) i desapareix la condensació al nivell superior ($I_4(\text{N5})=0.027$ $\text{kg}_{\text{vap}}/\text{kgMT}_o$). La disminució de l'evaporació provoca un lleuger augment de les temperatures (indicadors I_5 i i_6).

El cabal d'aire insuflat al reactor és un dels paràmetres d'operació que més influeix en el desenvolupament del procés (Fig. 4.27). Així, mentre que un cabal elevat ($Q_a=2$ m^3/h)

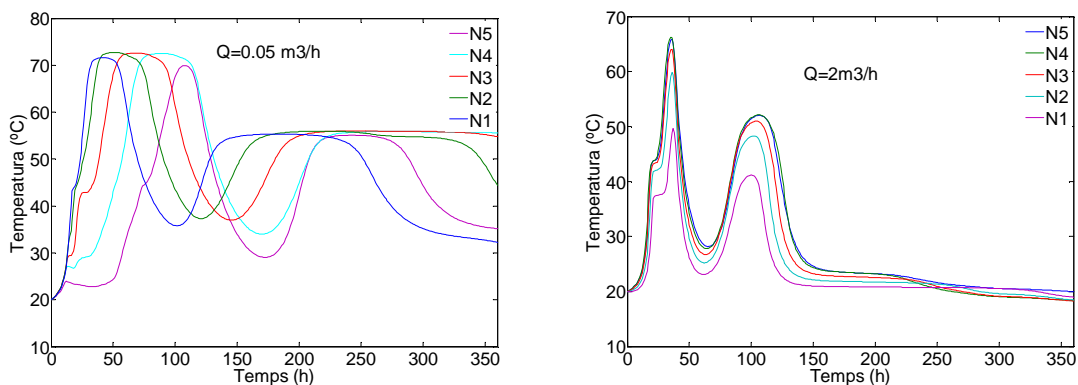


Figura 4.27. Efectes del cabal d'aireig en la distribució de temperatures al reactor. A un cabal baix ($Q_a=0.05$ m^3/h) hi ha un desplaçament progressiu cap amunt del focus de màxima activitat biològica.

Taula 4.7 Efectes del cabal d'aireig forçat sobre el valor dels indicadors a cada nivell.

	I ₁	I ₂	I ₃	I ₄	I ₅	I ₆	I ₇	I ₈	I ₉
<i>Q_a</i> =0.05 m ³ /h									
N5	0.0759	0.0977	-0.0020	-0.1192	55.2	193.8	73.1	0.00	361
N4	0.0640	0.0813	0.0004	-0.0151	201.7	608.3	69.4	0.00	361
N3	0.0683	0.0875	0.0010	0.0147	219.8	571.7	68.9	0.01	361
N2	0.0760	0.0987	0.0017	0.0935	157.9	506.6	67.0	0.08	361
N1	0.0758	0.0985	0.0022	0.2145	116.5	333.2	61.8	0.76	361
<i>Q_a</i> =2 m ³ /h									
N5	0.0754	0.0980	0.0024	0.2985	10.3	28.2	57.0	2.40	140
N4	0.0685	0.0881	0.0028	0.3805	11.9	45.7	50.1	2.51	141
N3	0.0693	0.0893	0.0028	0.3915	9.9	29.1	49.3	2.74	134
N2	0.0708	0.0913	0.0027	0.3868	7.6	13.5	49.9	3.04	127
N1	0.0739	0.0958	0.0026	0.3390	4.8	0.2	54.1	3.54	119

provoca una forta volatilització d'amoníac i l'eliminació d'aigua del medi (indicadors I₃ i I₄, Taula 4.7) que alhora produeix un major refredament evaporatiu de la massa (indicadors I₅ i I₆) amb el resultat d'una menor humitat del producte final (indicador I₇), un cabal d'aireig baix (*Q_a*=0.05 m³/h) provoca el consum biològic d'oxigen a les capes inferiors fins a exhaurir-se el substrat biodegradable. El desenvolupament microbià amb la corresponent pujada de temperatures es produeix successivament a les capes superiors a mesura que l'esgotament del substrat a les capes del dalt hi permet l'arribada d'oxigen (Fig. 4.27).

La humitat relativa del corrent d'aireig afecta directament a la velocitat d'evaporació d'aigua del medi i indirectament a l'evolució de temperatures pel refredament evaporatiu. Així (Taula 4.8) una humitat relativa baixa (*e_o*=0.4) provoca més assecatge del material per evaporació d'aigua (indicadors I₄ i I₇) i una temperatura més baixa (indicadors I₅ i I₆), especialment visible cap a final de procés. La influència sobre els altres indicadors és poc rellevant.

Taula 4.8. Efectes de la humitat relativa de l'aire al corrent d'aireig sobre els indicadors a cada nivell.

	I ₁	I ₂	I ₃	I ₄	I ₅	I ₆	I ₇	I ₈	I ₉
<i>e_o</i> =0.4									
N5	0.0752	0.0976	0.0009	-0.1068	36.0	263.0	73.0	0.67	309
N4	0.0734	0.0951	0.0026	0.1999	69.6	388.5	62.2	0.93	307
N3	0.0714	0.0923	0.0027	0.2440	35.0	307.9	59.7	1.25	282
N2	0.0711	0.0918	0.0027	0.2939	27.0	208.2	56.8	1.63	259
N1	0.0718	0.0928	0.0027	0.3677	17.4	101.0	51.6	2.23	195
<i>e_o</i> =1									
N5	0.0752	0.0976	0.0008	-0.1179	36.7	269.1	73.2	0.70	311
N4	0.0730	0.0946	0.0026	0.1903	78.9	401.3	62.7	0.86	305
N3	0.0706	0.0911	0.0027	0.2298	36.2	322.4	60.4	1.24	274
N2	0.0697	0.0899	0.0027	0.2705	28.2	224.1	58.0	1.66	254
N1	0.0700	0.0903	0.0027	0.3088	18.8	115.4	55.7	2.21	234

Segons els resultats de les simulacions el nivell d'aïllament del reactor té una forta influència sobre el desenvolupament del procés. A la Fig. 4.28 es mostra l'evolució de temperatures amb un aïllament perfecte (*U*=0) i amb un aïllament més baix que el de referència. Un bon aïllament del reactor manté la temperatura de la massa durant més temps (indicadors I₅, I₆ i I₉, Taula 4.9) el que comporta més volatilització d'amoníac (indicador I₃), més eliminació d'aigua (indicador I₄) i humitat més baixa del producte final (indicador I₇).

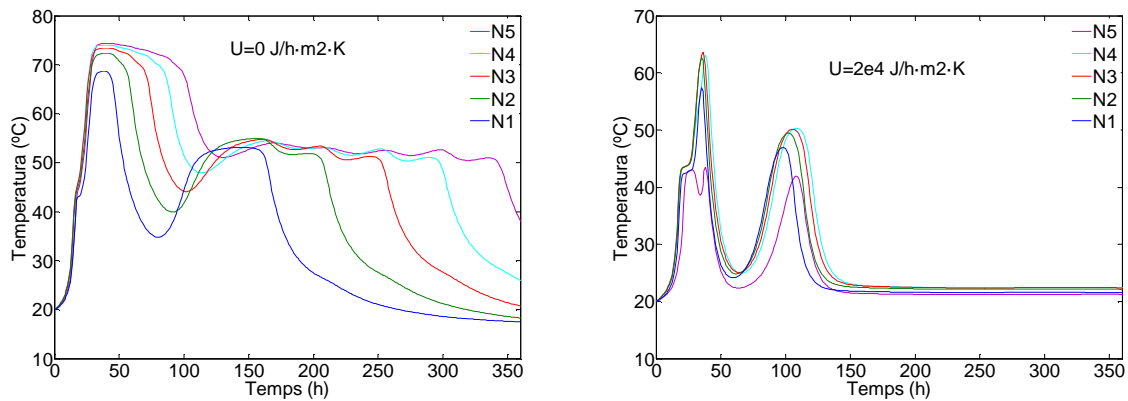


Figura 4.28. Simulació dels efectes del nivell d'aïllament del reactor sobre l'evolució de les temperatures a les diferents capes.

Taula 4.9 Efectes del coeficient global de transferència d'escalfor del reactor sobre els valors dels indicadors. Un aïllament perfecte correspon a $U=0 \text{ J}\cdot\text{h}^{-1}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$.

	I_1	I_2	I_3	I_4	I_5	I_6	I_7	I_8	I_9
$U=0 \text{ J}\cdot\text{h}^{-1}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$									
N5	0.0490	0.0604	0.0035	0.2835	90.3	969.3	54.8	1.03	361
N4	0.0493	0.0608	0.0035	0.3139	73.7	790.1	52.8	1.22	356
N3	0.0505	0.0625	0.0034	0.3311	57.5	582.3	51.7	1.49	307
N2	0.0532	0.0664	0.0033	0.3595	51.5	375.3	49.9	1.82	257
N1	0.0592	0.0748	0.0031	0.4060	39.3	183.1	46.6	2.28	207
$U=20000 \text{ J}\cdot\text{h}^{-1}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$									
N5	0.0749	0.0971	-0.0012	-0.0957	0.0	0.0	72.5	0.03	122
N4	0.0752	0.0976	0.0002	0.0110	7.9	9.1	69.6	0.19	132
N3	0.0753	0.0977	0.0004	0.0341	8.8	13.1	68.9	0.54	129
N2	0.0753	0.0978	0.0007	0.0730	7.4	8.4	67.6	1.24	124
N1	0.0754	0.0979	0.0012	0.1514	4.2	0.0	64.6	2.38	115

Observis (Fig. 4.28) que en un reactor ben aïllat el model prediu un fort descens de la temperatura per refredament evaporatiu al final del procés. Evidentment, el resultat de simulació de la Fig. 4.28 pot ser no realista degut a que el model no contempla la reducció del coeficient de transferència d'aigua en forma de vapor a mesura que baixa la humitat del material i a que el model biològic utilitzat cessa l'activitat microbiana sobtadament al començar a exhaurir-se el substrat. La dissipació d'escalfor per la paret lateral del reactor a un valor elevat del coeficient global de transferència d'escalfor ($U=2\cdot 10^4 \text{ J}\cdot\text{h}^{-1}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$) gairebé impedeix assolir l'etapa termòfila (indicadors I_5 i I_6 , Taula 4.9), i d'on en resulta una baixa pèrdua d'aigua (indicador I_4) i molta més humitat al producte final (indicador (I_7)).

La influència de la porositat del medi (FAS) sobre el procés és gairebé insignificant en el interval analitzat ($\varepsilon_g=0.2 - 0.7$). Resultats similars es van obtenir en l'anàlisi de sensibilitat del model base (Taula 3.10). Per contra, la permeabilitat a l'aire del medi porós sí que presenta més influència en el desenvolupament del procés. A més a més és important la manera d'operar el reactor. Així, en l'operació en mode 0 (cabal d'aireig fixat) una baixa permeabilitat implica una sobrepressió superior al plenum inferior que es fa màxima en les etapes de més activitat biològica degut a l'augment de la viscositat

de la fase gasosa amb la temperatura i a l'augment del cabal gasós per emissió de CO₂ i vapor (Fig. 4.29), però sense més efectes sobre els indicadors.

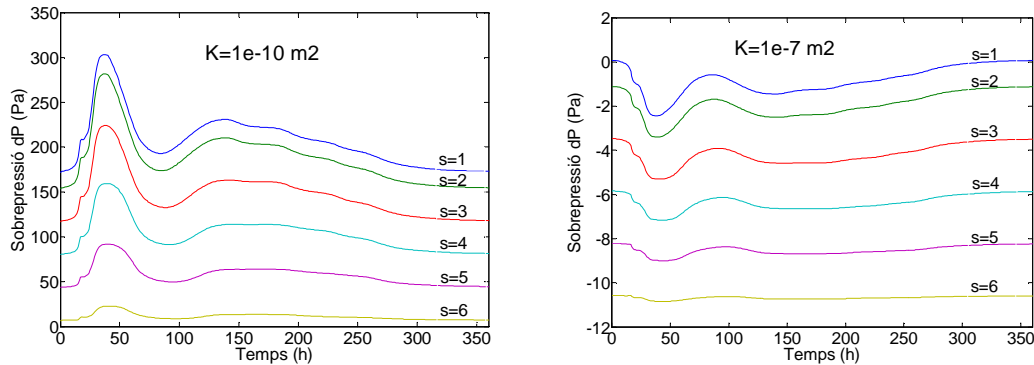


Figura 4.29. Evolució de la sobrepressió requerida al plenum inferior (s=1) i als punts nodals (s=2,...,6) en l'operació en mode 0 (cabal d'aireig fixat a 0.24 m³/h) per dues permeabilitats del medi $\kappa=10^{-10}$ i 10^{-7} m².

En l'operació en mode 1, sobrepressió fixada al plenum inferior, la permeabilitat afecta principalment al cabal d'aire d'entrada al reactor (Fig. 4.30). En totes les situacions el cabal es redueix en les etapes d'elevada temperatura degut a l'augment de la viscositat dinàmica de la fase gasosa i a l'augment del cabal molar a través de les capes superiors de la columna per emissió de gasos i vapor. Els patrons que s'obtenen en l'evolució de temperatura durant el procés són similars als obtinguts en l'anàlisi de sensibilitat respecte al cabal (Fig. 4.27), apareixent-hi, a permeabilitat baixa ($\kappa=10^{-10}$ m²), el desplaçament gradual cap amunt del focus calent del reactor (Fig. 4.27, Q=0.05 m³/h).

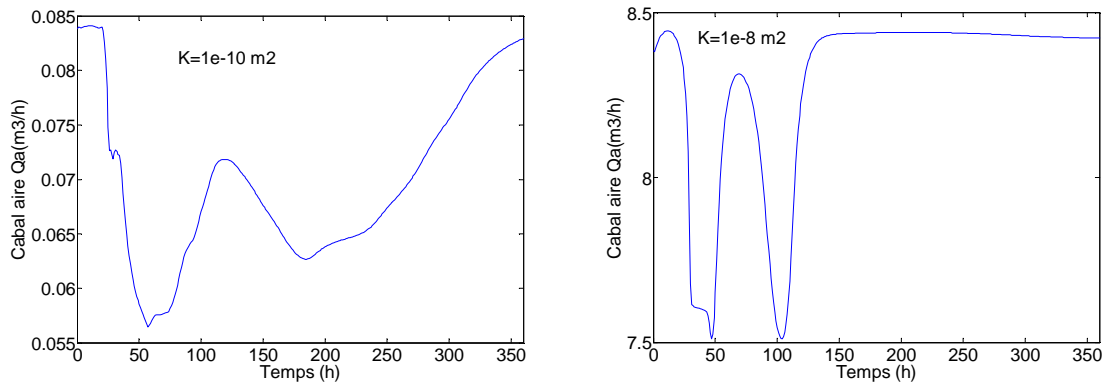


Figura 4.30. Efectes de la permeabilitat del medi sobre el cabal d'aire d'entrada al reactor en l'operació en mode 1, sobrepressió al plenum inferior fixada $\delta P=60$ Pa.

La conductivitat tèrmica de la matriu porosa presenta molt poca influència en l'evolució del procés en el interval analitzat ($k = 1 - 2347 \text{ J}\cdot\text{h}^{-1}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$, l'extrem superior d'aquest interval correspon a la conductivitat tèrmica de l'aigua a 57 °C). Conductivitats tèrmiques creixents provoquen una lleugera uniformització de les temperatures de les diferents capes que es reflecteixen en lleugeres modificacions dels indicadors I₅ i I₆. Caldrien conductivitats tèrmiques molt elevades ($k > 2 \cdot 10^5 \text{ J}\cdot\text{h}^{-1}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$) per aconseguir una superposició de les evolucions de les temperatures amb els valors de referència de la Fig. 4.15A. Aquest fet posa de manifest que el mecanisme principal de transferència d'escalfor dins la matriu porosa és l'arrossegament convectiu, tant en forma de calor sensible com latent.

CAPÍTOL 5

DISSENY I OPERACIÓ DE REACTORS DE COMPOSTATGE 1D

5.1 Introducció

És ben conegut que el compostatge és un procés complex en el que hi intervenen diversos factors, tant físics com químic-biològics. Molts dels experiments descrits en la bibliografia fan un seguiment parcial dels paràmetres del procés. Així, és freqüent trobar experiments que proporcionen informació fragmentada del procés, tal com podria ser, a tall d'exemple, un seguiment de l'evolució de la temperatura o de la concentració d'oxigen sense haver enregistrat el cabal d'aire insuflat o les condicions d'aïllament tèrmic del contenidor. Quan es pretén arribar a modelitzar el procés i ajustar els paràmetres del model a les dades experimentals es fa necessari disposar de dades del seguiment simultani de diferents variables del procés, com més millor, ja que així es poden contrastar diferents models que les relacionin.

En aquest capítol es descriu l'equip experimental construït i la manera com es va operar per obtenir les dades que s'exposen als Capítols 6 i 7. El muntatge experimental es va fer entre febrer i setembre del 2007 al que llavors era el Laboratori d'Enginyeria Ambiental del Departament de Medi Ambient i Ciències del Sòl de l'ETSEA de Lleida.

L'equip consisteix essencialment en tres reactors estàtics verticals iguals amb aireig forçat des del plenum inferior, cadascun d'ells col·locats sobre una bàscula pel seguiment en continu del pes total. Una canya vertical situada a l'eix del reactor sostenia les sondes de temperatura a posicions fixes. Els gasos del plenum superior eren expulsats a través d'un tub amb pendent uniforme per que permetia recollir els condensats. Del plenum superior se'n succionava, a intervals regulars, gas cap a un analitzador que en mesurava la concentració d'oxigen i CO₂. Cada reactor tenia una cabuda útil de 70 L i estava aïllat tèrmicament amb un gruix de llana mineral. El nivell d'aïllament va determinar-se en assaigs previs a partir de les corbes d'escalfament i refredament amb els reactors plens d'aigua. En part dels assaigs de compostatge es va poder determinar també l'assentament del material a diferents nivells.

Els assaigs de compostatge es realitzaren utilitzant diferents mescles a base de fems de vedell, fracció orgànica de residus municipals (FORM) i fangs de depuradora urbana no digerits. Com a element estructurant s'utilitzà sempre estella menuda de fusta. Es realitzaren dos experiments complerts (1 i 2) operant simultàniament els tres reactors. En cada experiment es carregava cadascun dels reactors amb una determinada proporció

de residus. En una primera càrrega (A) es mantienien els reactors tancats fins a final de procés, quan la temperatura davallava fins a valors propers a l'ambiental, i s'enregistraven els paràmetres físics del procés. En cada experiment es va fer una segona càrrega (B) amb la mateixa composició de mescla a cada reactor que a la primera. En aquesta càrrega es feia també el seguiment dels paràmetres físics, excepte l'assentament, però els reactors s'obrien puntualment tres cops en estadis intermedis del procés per extreure'n les mostres que se'n farien les anàlisis químiques.

5.2 Descripció general de l'equip

La figura 5.1 és una fotografia del muntatge dels tres reactors al laboratori tal i com es van utilitzar. La figura 5.2 és el corresponent esquema general.



Figura 5.1. Visió general dels tres reactors i equipaments de mesura.

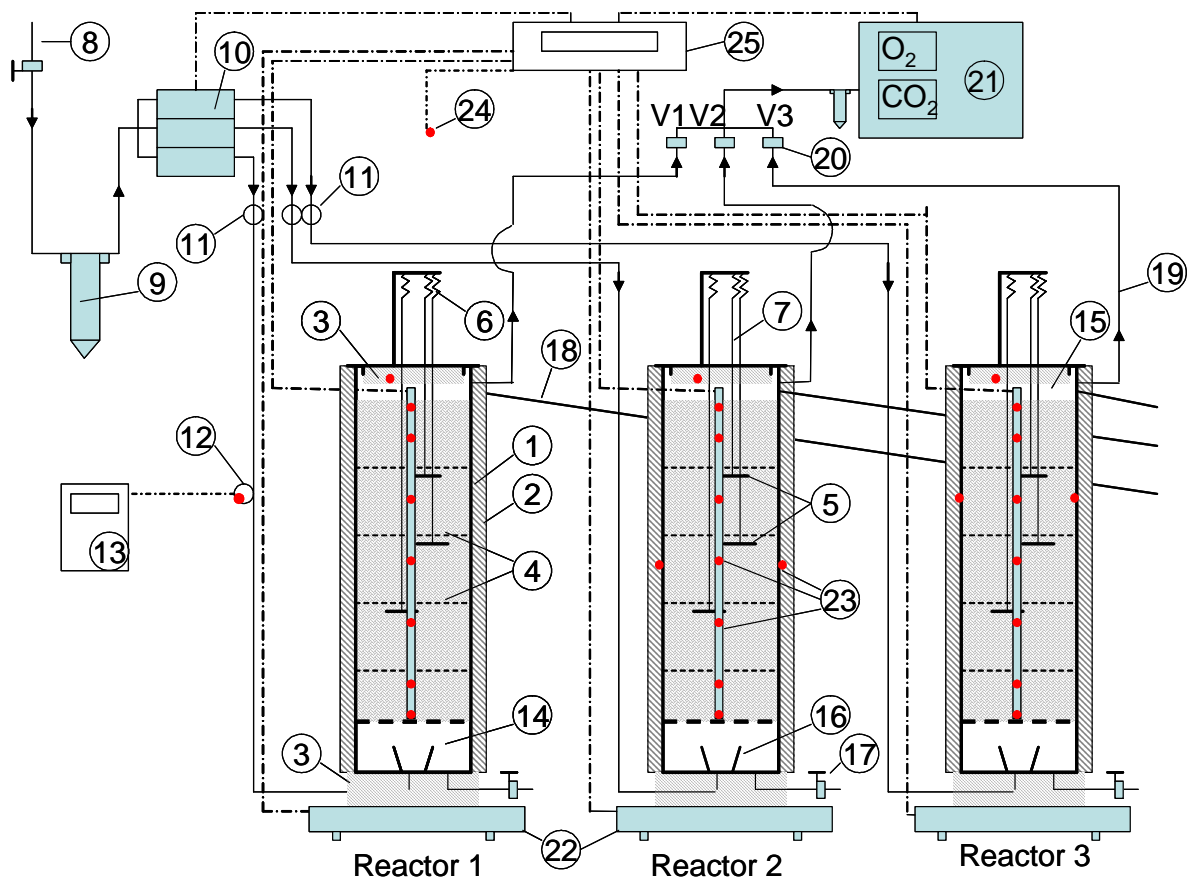


Figura 5.2 Esquema del muntatge experimental dels reactors verticals. 1) Paret de PVC del reactor. 2) Recobriments aïllants de llana mineral. 3) Planxes d'aïllament rígid. 4) Trames de plàstic. 5) Llistons de fusta. 6) Gometes elàstiques. 7) Cable tensat. 8) Subministrament d'aire comprimit. 9) Filtre d'aire. 10) Cabalímetres. 11) Presa de pressió. 12) Sondes de temperatura i humitat relativa. 13) Datalogger AL. 14) Plenum inferior. 15) Plenum superior. 16) Protecció per evitar l'entrada de líquids al conducte d'aire. 17) Evacuació de líquids. 18) Tub de sortida de gasos. 19) Tub d'aspiració de gasos cap a l'analitzador. 20) Electrovàlvules (V1, V2, V3). 21) Analitzador d'oxigen i CO₂. 22) Bàscula. 23) Sondes de temperatura. 24) Sonda de temperatura ambiental. 25) Datalogger HP.

Carcassa i aïllament dels reactors

Els reactors verticals foren construïts amb elements de canonada de PVC de 300 mm de diàmetre interior recoberts lateralment per un gruix d'uns 35 mm de llana mineral. Cada reactor recolzava sobre unes plaques d'aïllament rígid (Roofmate™) de 50 mm de gruix. També tenia un gruix d'aquest aïllament pel costat intern de la tapa superior. Tot el conjunt estava col·locat sobre una bàscula per mesurar el pes en continu. La tara de cada reactor era de 23 kg. La figura 5.3 mostra els detalls d'un reactor.

Plenums

Tres trames de filat soldat sobreposades amb encreuament, dues de malla 15 X 25 mm i una de 6 x 6 mm, foren col·locades a uns 90 mm de la base per crear un plenum inferior de 6.36 L. Aquests filats recolzaven en una pestanya de la paret del reactor i en un cilindre vertical centrat, d'uns 11 cm de diàmetre, fet de la mateixa malla soldada. En aquest plenum hi havia una sortida, amb tub i aixeta al final, per recollir els líquids i una entrada d'aire. Un vas de plàstic de 70 mm d'alt impedia que la possible acumulació de líquids obturés l'entrada de l'aire. El plenum superior quedava format entre el nivell

del material en compostatge i la placa d'aïllament adherida a la tapa. Inicialment, a l'instant de la càrrega, aquest plenum tenia una alçària d'uns 7-8 cm, però a mesura que avançava el procés augmentava fins a 25-30 cm degut a l'assentament del material. El volum útil de càrrega del reactor ($h=1\text{ m}$) era d'uns 70 L.

Circulació de l'aire

L'aire comprimit de la instal·lació del laboratori (6-7 bar) passava per un filtre (9) i alimentava els cabalímetres (10), d'on era conduït al plenum

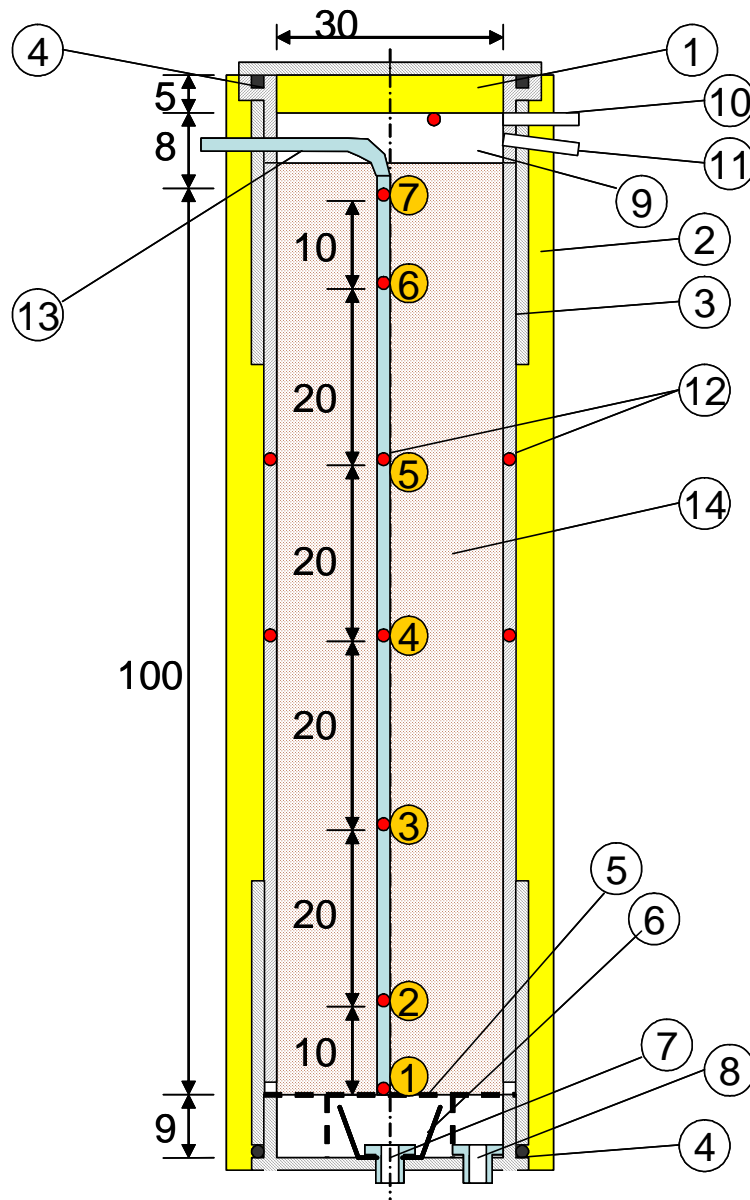


Figura 5.3. Esquema de detall de l'estructura d'un dels reactors. Tots els amidaments en cm. 1)Aïllament rígid adherit a la tapa, 2)Aïllament de llana mineral, 3)Components de tub de PVC de diàmetre 300mm, 4)Juntes de goma, 5)Malla de filat soldat, 6)Vas protector d'entrada de lixiviats al conducte d'aire, 7)Entrada de l'aire, 8) Sortida de lixiviats, 9)Plenum superior, 10) Aspiració de gasos cap a l'analitzador, 11)Sortida de gasos, 12)Sondes de temperatura. La numeració i posició de les sondes centrals és igual per tots els reactors. Les laterals només són al reactor 2 (al nivell de la sonda 4) i al reactor 3 (només al nivell de la sonda 5), 13)Sortida cablejat sondes de temperatura, 14)Material en compostatge.

inferior de cada reactor. En un d'aquests trams s'hi va col·locar un sensor de temperatura i humitat relativa (12). Una vàlvula manual (11) permetia la connexió d'un manòmetre per mesurar la sobrepressió. L'aire insuflat al plenum inferior travessava la massa de material en compostatge fins al plenum superior d'on sortia per un orifici lateral i un tub tràquea de 14 mm de diàmetre el conduïa cap a la campana d'extracció de gasos del laboratori. Un pendent descendent uniforme del traçat del tub (18) permetia recollir en el punt més baix les abundants condensacions que s'hi produïen. Del plenum superior en sortia un altre tub de plàstic de 8mm de diàmetre interior (10 mm exterior), amb pendent ascendent (19) per on era aspirat el gas, a través de les electrovàlvules (20), cap a l'analitzador.

Localització dels sensors de temperatura

Un tub de PVC rígid de 16 mm de diàmetre exterior col·locat verticalment a l'eix del reactor sostenia les sondes de temperatura centrals (termoparells tipus J). Els cables de les sondes, que tenien 1.8 m de llarg i venien recoberts d'un aïllament de fibra de vidre, es van fer passar per l'interior del tub de PVC i després es va omplir d'escuma de PU per evitar l'entrada de vapor i formació de condensats. L'extrem del termoparell sortia uns 4 mm del tub per un orifici i era subjectat a la seva superfície exterior amb cinta adhesiva tèrmica i aquesta protegida amb un embolcall de cinta americana. La posició i numeració de les sondes pot veure's a les figures 5.3 i 5.4. Un termoparell addicional col·locat al sostre del plenum superior permetia mesurar la temperatura del gas. En els reactors 2 i 3, a més a més, es van inserir pel costat extern de la paret de PVC del reactor, fins a situar-se a 1-2 mm de la superfície interna del reactor, dos termoparells en oposició diametral, (Figs. 5.3 i 5.4B). En el reactor 2 se situaren a nivell de la sonda 4 i en el reactor 3 a nivell de la sonda 5. Aquests termoparells haurien de permetre comprovar l'existència de simetria radial en la distribució de temperatura. En tots els experiments es col·locava un termoparell per mesurar la temperatura de l'aire ambient del laboratori (punt 24, Fig. 5.2).

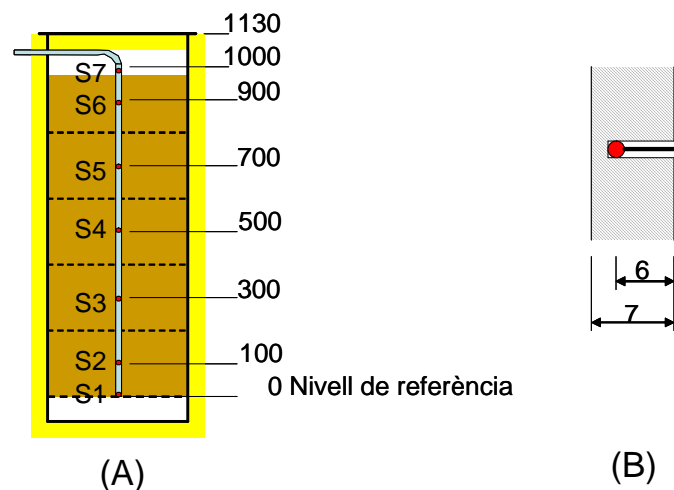


Figura 5.4 (A) Posició de les sondes de temperatura dins un reactor respecte a la base de la càrrega (nivell 0), la cota superior correspon a la vora del reactor destapat. (B) Detall de la posició de les sondes dins les parets de PVC dels reactors R2 i R3. Tots els amidaments en mm.

Elements de mesura i auxiliars

Els equips que es van utilitzar poden classificar-se en:

- a) Equips de mesura en continu: Sensors de temperatura (termoparells), sensors d'humitat relativa, bàscules, cabalímetres, analitzador d'oxigen i analitzador de CO₂. Tots ells donaven un senyal elèctric de sortida que era transmès al datalogger on s'enregistrava periòdicament.
- b) Equips de mesura manuals: Manòmetre i rotàmetres. Les mesures es prenen i anotaven manualment.
- c) Elements de control i auxiliars. Dataloggers, temporitzadors, transformador, font d'alimentació i electrovàlvules.

La posició dels sensors de mesura es reflecteix a les figures 5.2, 5.3 i 5.4. Les seves característiques tècniques es resumeixen a les taules 5.1 i 5.2.

Taula 5.1 Característiques dels equips de mesura utilitzats

Equip de mesura	Fabricant	Model	Rang de mesura	Precisió	Observacions
Termoparells tipus J	RHS (United Kingdom)	219-4719	-40 a 700 °C	0.3 °C	Connectable directament al mòdul del datalogger HP.
Sensor de temperatura i humitat relativa	Ahlborn (Germany)	FHA646-E1C	-25 a 100°C 5 a 98 % HR	±0.1 °C ±2%	Connectable directament al datalogger ALMEMO.
Bàscules	Fidens (Spain)	IP-2	0 a 150 kg	± 50 g	Proporcionen un senyal de sortida de 4-20 mA. Alimentació a 220 V.
Cabalímetres tèrmics	M+W Instruments (Germany)	MFC: D-6231	0 a 30 L/min	± 3%	Incorporen un regulador de cabal. Senyal de sortida: 4-20 mA. Alimentació: 24Vdc.
Sensor d'oxigen	Sensotran S.L. (Spain)	---	0 a 21%	±1%	Sensor electroquímic integrat dins l'equip Sensocomp. Senyal de sortida: 4-20 mA.
Sensor de CO ₂	Sensotran S.L. (Spain)	---	0 a 25%	±1%	Sensor IR integrat dins l'equip Sensocomp. Senyal de sortida: 4-20 mA.
Manòmetre diferencial	Delta OHM (Italy)	HD8804	0 a 200 Pa	±0.5 %	Sensor acoblat per cable d'1.5 m de llarg a terminal de lectura manual.
Rotàmetres	Tecfluid (Spain)	2150	0 a 350 L/h	±2.5 %	Incorpora vàlvula manual reguladora de cabal. Lectura manual.

Taula 5.2 Característiques dels equips de control i auxiliars

Equip	Fabricant	Model	Observacions
Datalogger HP	Hewlett-Packard Agilent (USA)	HP-34970 A	Utilitzats mòduls d'ús general HP 34901A preparat per entrades de tensió, intensitat i termoparells.
Datalogger AL	Ahlborn (Germany)	ALMEMO 2590-9 V5	Datalogger acoblable només a sensors específics.
Temporitzadors	Automatismos Control y Programación S.L. (Spain)	XTD 303	Alimentació: 220-240 Vac
Transformador	Siemens (Czech Republic)	4AM3842-8MB40-0FA0	Input: 230 Vac Output: 24 Vac; 8.3 A
Font d'alimentació	Carlo Gavazzi (China)	SPD 2460	Input: 100-240 Vac; 47-63 Hz Output: 24 Vdc; 60 W
Electrovàlvules	m & m	D263DVG	Alimentació: 24 Vac.

Equip d'anàlisi de gasos

L'equip d'anàlisi de gasos (Sesotran, S.L.) duia tres sensors, per l'oxigen, pel CO₂ i per l'amoníac. En aquest treball no es van poder fer mesures amb el sensor d'amoníac degut a que la concentració habitual en els gasos de sortida dels reactors superava amb escreix el nivell màxim admissible pel sensor (1000 ppm). La figura 5.5 mostra esquemàticament el circuit de l'aire en l'equip. L'aire a analitzar és xuclat per la bomba d'aspiració (0.5-1 L/min) i impulsat a través d'un sistema de filtres que n'eliminen les possibles partícules en suspensió i l'aigua de condensació. Llavors l'aire passa pels sensors i és expulsat a l'exterior.

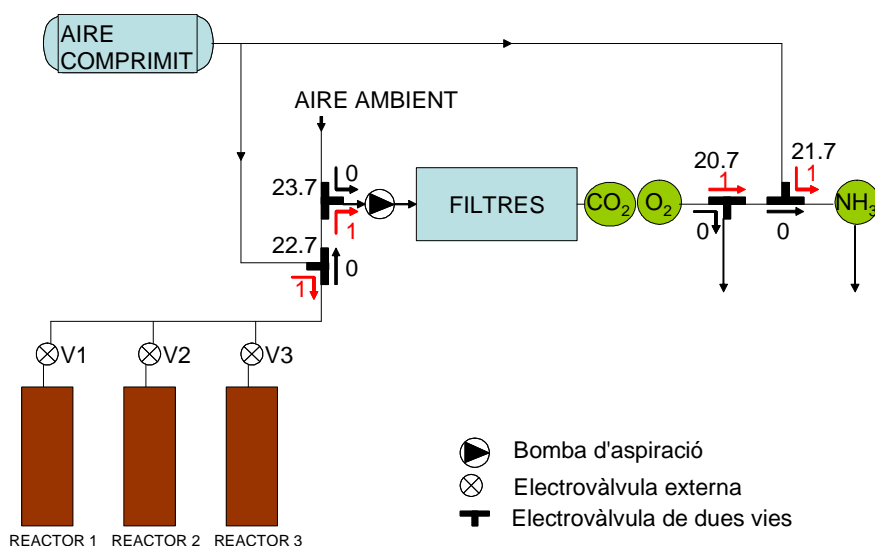


Figura 5.5. Esquema del circuit d'anàlisi de gasos. La bomba d'aspiració de gasos funciona contínuament aspirant aire de l'atmosfera. L'aspiració de gas dels reactors s'activava només 2 minuts durant l'enregistrament de la mesura.

A fi d'evitar la inundació dels filtres per la formació de condensats en l'aire provinent dels reactors es feia circular aire atmosfèric en el interval de temps entre mesura i mesura. L'activació de les electrovàlvules de dues vies permetia establir diferents recorreguts de l'aire. La taula 5.3 mostra les funcions de l'equip segons l'estat de les electrovàlvules.

Taula 5.3. Modes d'operació de l'equip analitzador de gasos. L'estat de les electrovàlvules (0 ò 1) i la seva denominació s'identifica a la figura 5.5.

Estat de la vàlvula				Aspiració de	Sortida de	Anàlisi de		Funció
20.7	21.7	22.7	23.7			CO ₂ i O ₂	NH ₃	
0	0	0	0	Ambient	Sensor O ₂	Ambient	No	Sense anàlisi
0	0	1	0	Ambient	Sensor O ₂	Ambient	No	Neteja de línia amb aire comprimit
0	0	0	1	Línia	Sensor O ₂	De línia	No	Anàlisi O ₂ i CO ₂
1	0	0	1	Línia	Sensor NH ₃	De línia	De línia	Anàlisi O ₂ , CO ₂ i NH ₃
0	1	0	0	Ambient	Sensor O ₂	Ambient	Aire comprimit	Neteja sensor NH ₃

5.3 Operació de l'equip

Mesures contínues. Control i sincronització del sistema

El datalogger HP es va programar per fer una lectura de tots els sensors connectats cada 15 minuts. Això es feia per tots els sensors de temperatura, les bàscules i els cabalímetres tèrmics. Pels sensors de O₂ i CO₂ també es feia una lectura cada 15 minuts, però es permutava la connexió al reactor del que provenia el gas aspirat mitjançant les electrovàlvules externes (V1, V2, i V3, Figs. 5.2 i 5.5), de manera que la lectura corresponia successivament als tres reactors. Així, si en l'instant $t=0$ el gas fou aspirat del reactor 1 llavors la lectura en l'instant $t=15 \text{ min}$ corresponia al reactor 2 i la lectura en $t=30 \text{ min}$ al reactor 3. D'aquesta manera s'aconseguia una mesura de la composició del gas d'un reactor cada 45 minuts. El cronograma de la figura 5.6 mostra la seqüència d'actuació de les electrovàlvules externes i de l'electrovàlvula interna n° 23.7 de l'equip analitzador de gasos.

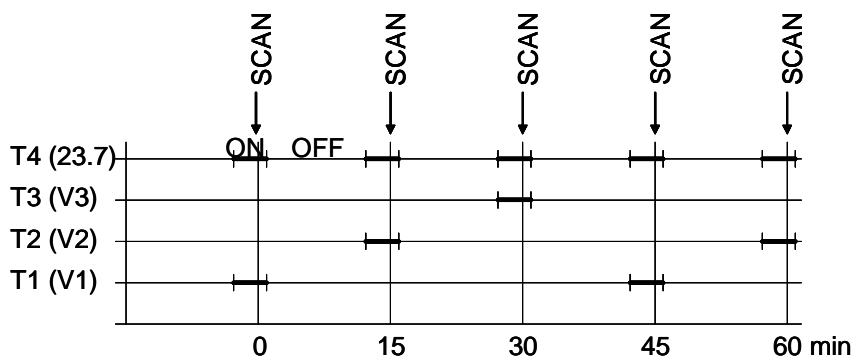


Figura 5.6 Activació sincronitzada de les electrovàlvules (V1, V2, V3 i 23.7) amb els corresponents temporitzadors (T1, T2, T3 i T4). El datalogger HP feia una mesura dels sensors (SCAN) cada 15 minuts. El gas a analitzar d'un reactor circulava durant 3 minuts per l'analitzador de gasos. La circulació s'iniciava 2 min 40 s abans de l'escaneig. El gas de cada reactor s'analitzava cada 45 minuts. Els intervals del cronograma corresponen a 2 min ON, no són fets a escala per facilitar-ne la visualització.

L'activació de les electrovàlvules es realitzava amb quatre temporitzadors independents (T1, T2, T3 i T4) perfectament sincronitzats (Fig. 5.6). Cada temporitzador era alimentat a 220 Vac i tenia dos temporitzadors, l'un per programar el interval de temps que mantenia tancat el circuit d'alimentació de l'electrovàlvula (període ON) i l'altre per programar el interval que el mantenia obert (període OFF).

Mesura de l'assentament del material

Es van fer dos tipus de mesures de l'assentament del material. En unes es mesurava l'assentament total produït entre el moment de la càrrega i el de descàrrega en diferents punts, en les altres es feia un seguiment de l'assentament durant tot el procés.

Per l'assentament total es mesurava, durant l'ompliment del reactor, la posició on es col·locava cada malla (distància a la vora superior del reactor). També al final del procés, al descarregar el reactor, es mesurava la posició en què havia quedat cada malla i el nivell superior del material. La diferència d'aquestes mesures amb l'alçària del reactor és la posició respecte a la base de la càrrega (nivell 0, Fig. 5.4).

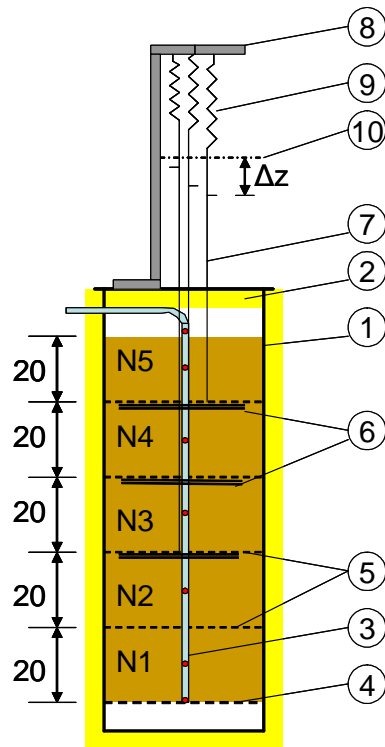


Figura 5.7 Esquema del dispositiu experimental per la mesura manual de l'assentament del material en els reactors. Quatre malles de plàstic delimiten 5 capes de material de 20 cm de gruix cadascuna. 1) Cos de PVC del reactor, 2)Tapa del reactor, 3)Canya que sosté les sondes de temperatura, 4)Malla de filat metàl·lic que sosté la massa de material en compostatge i la separa del plenum inferior (nivell 0), 5)Malles de plàstic col·locades durant l'ompliment del reactor, 6)Llistons de fusta col·locats horitzontalment sota les malles de plàstic, 7)Cables lligats als llistons, 8)Suport fix, 9)Gomes elàstiques, 10)Nivell de referència o posició inicial. Δz) Mesura de l'assentament.

Per mesurar l'assentament progressiu del material durant el procés es col·locaren, durant la càrrega del reactor, quatre malles circulars de plàstic semirígides que delimitaven 5 capes de material denominades N1, N2, N3, N4 i N5, segons es veu a la figura 5.7. Al centre de cada malla s'hi havia fet un orifici per on passava la canya que

sostenia les sondes de temperatura, així podien moure's verticalment a mesura que s'assentava el material. Sota cadascuna de les tres malles superiors s'hi col·locà, en posició diametral, un llistó de fusta al que hi anava lligat, al seu punt central, un cable vertical prim i inelàstic que passant a través d'un petit orifici ($\Phi 1\text{ mm}$) practicat a la tapa del reactor era mantingut tens per una goma elàstica unida a un suport fix respecte al reactor. El desplaçament cap avall de les malles plàstiques era així igual que el desplaçament de l'extrem del cable lligat a la goma elàstica respecte a la seva posició inicial (Fig. 5.7). Durant la càrrega del reactor s'assegurava que cada cable es mantingués estirat i vertical introduint-lo dins un tub metàl·lic rígid ($\Phi 4\text{ mm}$) que feia de beina i era retirat quan s'acabava la càrrega. L'assentament del material dins d'un reactor (Δz , Fig. 5.7) es podia així mesurar a diari durant el període en que es mantenia en funcionament.

Aireig i mesura de la resistència al pas de l'aire

En tots els experiments es va mantenir un cabal d'aireig constant a cada reactor de $0.24\text{ m}^3/\text{h}$. La sobrepressió requerida per fer circular l'aire a través del reactor es mesurava manualment connectant un dels brocs del manòmetre diferencial al tub d'insuflar l'aire (punt 11, Fig. 5.2) mentre l'altre es mantenia obert a l'ambient. S'han fet dos tipus de mesura durant el procés. L'una consistia en mesurar el cabal d'aire insuflat a cada reactor a diferents instants del procés, l'altra en fer assaigs, durant el procés, per determinar les corbes $\Delta P-Q$.

5.4 Determinació del nivell d'aïllament tèrmic dels reactors

Introducció i objectius

Un dels paràmetres clau per tancar el balanç energètic en un reactor és el seu coeficient global de transferència d'escalfor amb l'exterior U . Aquest permet determinar el flux calorífic que es perd del reactor per conducció a través de les seves parets en funció de la diferència de temperatura entre l'interior del reactor i l'ambient exterior. El flux d'escalfor q que s'estableix a través de la paret del reactor ve quantificat per (Mills, 1995),

$$q = UA(T - T_a) \quad (5.3.1)$$

on T és la temperatura interna del reactor, T_a la temperatura de l'ambient exterior i A és l'àrea de la superfície de referència.

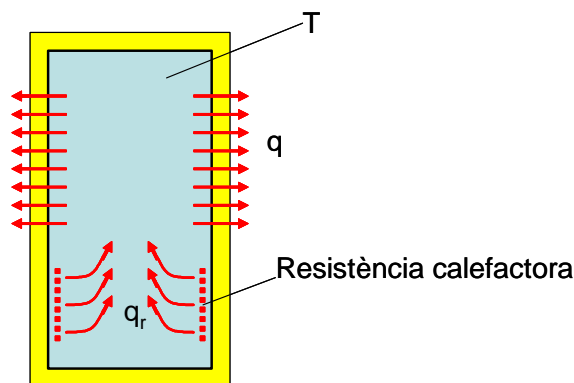


Figura 5.8. Pèrdua d'escalfor a través de la paret d'un reactor. La dissipació de calor per la resistència calefactora provoca corrents convectives que eviten l'estratificació tèrmica.

L'extrapolació de resultats obtinguts en compostatge en planta pilot o de laboratori a escala industrial ve sovint limitada per la dificultat d'aconseguir bons nivells d'aïllament en reactors de laboratori (Mason and Milke 2005). En reactors petits l'elevada relació superfície-volum (S:V) provoca pèrdues d'escalfor desproporcionades en comparació amb reactors industrials. L'única manera d'atenuar aquest efecte és un bon aïllament (valors de U baixos). El valor del coeficient global U d'un reactor pot determinar-se experimentalment omplint-lo d'una massa d'aigua coneguda i analitzant les corbes d'escalfament o refredament.

Muntatge experimental

L'assaig per determinar el coeficient U en un reactor va fer-se de la següent manera. S'omplí el reactor amb 70 kg d'aigua i, mantenint-lo tapat, es va escalfar l'aigua amb una resistència elèctrica fins a 70-75 °C, llavors s'aturà la resistència i es deixà refredar progressivament mentre s'enregistrava l'evolució de la temperatura de l'aigua (sondes S1 a S7, Fig. 5.4) i de l'aire ambient. La figura 5.9 mostra la resistència elèctrica utilitzada: un cable autocalefactor d'uns 20 m de llargada amb recobriment de silicona cabdellat entorn un cilindre vertical de filat metàl·lic que li feia de suport. El conjunt va ser col·locat al fons del reactor abans d'omplir-lo d'aigua.

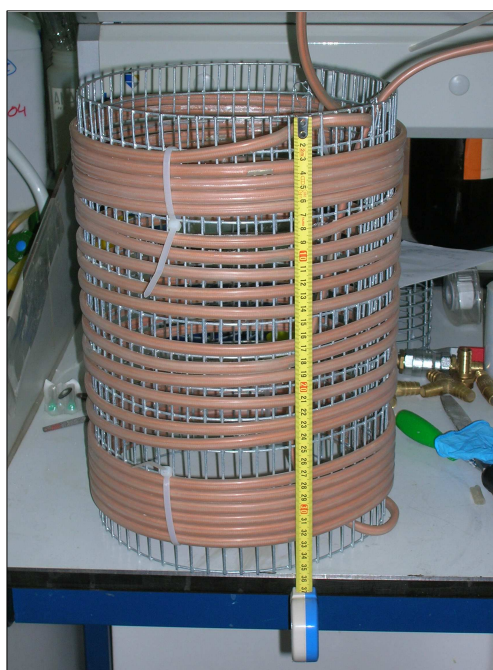


Figura 5.9. La resistència elèctrica utilitzada per escalfar l'aigua en els reactors.

Model d'escalfament i refredament

Es considera un reactor (Fig. 5.8) ple d'aigua a la temperatura homogènia T situat en un ambient a temperatura constant T_a . En el procés d'escalfament l'aigua està, a l'instant d'encendre la resistència calefactora, a la temperatura T_o . L'escalfor que aquesta dissipa provoca l'escalfament de l'aigua i el flux q a través de la paret del reactor. El procés de refredament s'inicia amb l'aigua a la temperatura $T_o > T_a$ i amb la resistència apagada.

La dissipació d'escalfor a través de la paret provoca el refredament gradual de la massa. L'equació que governa la temperatura d'aquest transitori és,

$$(m_w + m_{eq})c_{pw} \frac{dT}{dt} = q_r - UA(T - T_a) \quad (5.3.2)$$

essent,

T	$^{\circ}C$	Temperatura mitjana de l'aigua dins el reactor
T_a	$^{\circ}C$	Temperatura de l'ambient exterior
m_w	kg	Massa d'aigua dins el reactor
m_{eq}	kg	Massa equivalent en aigua del reactor
c_{pw}	$J \cdot kg^{-1} \cdot ^{\circ}C^{-1}$	Calor específica mitjana de l'aigua
q_r	$J \cdot h^{-1}$	Flux d'escalfor dissipat per la resistència calefactora
U	$J \cdot h^{-1} \cdot m^{-2} \cdot K^{-1}$	Coefficient global de transferència d'escalfor
A	m^2	Àrea de la superfície interna del reactor

La integració de l'equació 5.3.2 proporciona l'evolució temporal en la fase d'escalfament,

$$T = T_a + \frac{q_r}{UA} - \left(\frac{q_r}{UA} - (T_o - T_a) \right) \cdot e^{-\alpha t} \quad (5.3.3)$$

i en la de refredament, on és $q_r=0$,

$$T = T_a + (T_o - T_a) \cdot e^{-\alpha t} \quad (5.3.4)$$

essent $\alpha = \frac{UA}{(m_w + m_{eq})c_{pw}}$.

L'aplicació de la 5.3.3 i de la 5.3.4 requereix un valor pels dos paràmetres U i m_{eq} .

Estimació dels paràmetres U i m_{eq}

Si es disposa d'una sèrie de punts experimentals de la corba d'escalfament $\{t_i, Te_i^*\}$ i d'una sèrie de la corba de refredament $\{t_i, Tr_i^*\}$ d'un reactor, els valors de U i m_{eq} es determinen com aquells que minimitzen la següent funció objectiu,

$$fobj = \frac{\sum_{ie} (Te_i - Te_i^*)^2}{n_e (Te_{\max}^* - Te_{\min}^*)^2} + \frac{\sum_{ir} (Tr_i - Tr_i^*)^2}{n_r (Tr_{\max}^* - Tr_{\min}^*)^2} \quad (5.3.5)$$

on,

Te_i, Tr_i Temperatures donades pel model (equacions 5.3.3 i 5.3.4) per les corbes d'escalfament (e) i de refredament (r)

Te_i^*, Tr_i^* Les corresponents temperatures mesurades experimentalment

n_e, n_r Nombre de punts experimentals de cada corba

$Te_{\max}^*, Tr_{\max}^*, (Te_{\min}^*, Tr_{\min}^*)$ Valors màxims (mínims) registrats en les corbes d'escalfament (e) i de refredament (r).

Per la cerca del mínim de la funció objectiu es va utilitzar l'algorisme down-hill simplex (Nelder, J.A. and Mead, R., 1965) tal com ve implementat en Matlab®.

5.5 Substrats utilitzats

En els experiments de compostatge realitzats s'utilitzaren mescles d'estructurant amb diferents proporcions dels següents residus:

- Fems frescos de vedell
- Fracció orgànica de residus municipals (FORM)
- Fangs no digerits d'estació depuradora d'aigües residuals (EDAR)

Com a estructurant s'utilitzà sempre estella de fusta de 4-8 cm de llarg, amb una densitat aparent de 210 kg/m³, un contingut en humitat del 14%, un contingut total en carboni del 51.08 % s.m.s. i una relació C/N de 500. Les principals característiques dels residus són:

a) *Fems frescos de vedell*, recollits directament de la cort d'explotacions de Juncosa (Les Garrigues). Les dades que es presenten a la taula 5.4 corresponen a dues mostres de fems procedents de la mateixa explotació preses en dos mesos de diferència durant el període en que es realitzaren els experiments amb els reactors. No es realitzaren analítiques per cada càrrega de reactor.

Taula 5.4. Característiques mitjanes dels fems utilitzats. Segons J.Heras, 2007, "Anàlisi i optimització del procés de compostatge de fem de boví a Juncosa en funció de la quantitat d'estructurant", PFC d'Enginyer Agrònom. Escola Tècnica Superior d'Enginyeria Agrària, Lleida.

Paràmetre	unitats	Mostra 1 (n=2)		Mostra 2 (n=2)	
		\bar{x}	σ_n	\bar{x}	σ_n
Contingut humitat	% s.m.f.	77.7	2.8	78.1	2.5
Sòlids totals	% s.m.f.	22.3	2.8	21.9	2.5
Sòlids volàtils	% s.m.s.	80.7	2.1	79.8	1.3
Carboni total	% s.m.s.	42.5	1.6	42.8	1.4
Nitrogen Kjeldhal	g N/kg ms	25.3	0.5	28.0	0.7
Nitrogen amoniacal	g N/kg ms	4.3	0.1	7.1	0.2
N orgànic	g N/kg ms	21.0	0.1	20.9	0.1
C/N	---	16.8		15.3	
DQO	gO ₂ /g ms	1.18	0.03	1.15	0.03
pH (1:5)	---	7.9	0.0	7.9	0.0
CE (1:5)	mS/cm	5.2	0.2	6.4	0.1
FAS	%	56.9	5.2	46.0	6.1
Densitat aparent	kg/m ³	850	18.5	763	15.1

b) *Fracció orgànica de residus municipals (FORM)*, recollits a la planta de compostatge d'Alguaire i procedents de la mescla de FORM de diferents orígens. La fracció que es recollí a la planta d'Agrosca contenia residus inerts (vidres, plàstics, llaunes i runa en general). Se'n prengué una mostra de 230 kg de la que se'n feren una partició en quatre quarts i se'n triaren dos d'oposats diagonalment. Es va fer una tria manual separant tots els inerts que es detectaven. La fracció de materials inerts era del 22.03 % (pes s.m.f.). La fracció que quedava un cop separats els inerts, la pròpiament anomenada FORM presentava la composició mostrada a la taula 5.5. En la FORM utilitzada en les mescles per carregar els reactors es prenia especial cura en retirar tots els materials inerts que s'hi detectaven.

Taula 5.5. Característiques mitjanes (n=2) de la FORM triada de la planta d'Agrosca (Alguaire).

Paràmetre	Unitats	\bar{x}	σ_n
Contingut humitat	% s.m.f.	37.4	6.2
Sòlids totals	% s.m.f.	62.6	6.2
Sòlids volàtils	% s.m.s.	75.6	4.1
Carboni total	% s.m.s.	32.3	2.1
Nitrogen Kjeldhal	g N/kg ms	15.0	2.0
Nitrogen amoniacal	g N/kg ms	1.2	0.1
C/N	---	21.5	
Densitat aparent	kg/m ³	380	17.5

c) Fangs no digerits, procedents de l'EDAR de Lleida. A la taula 5.6 es donen els seus valors mitjans i desviació estàndard.

Taula 5.6. Característiques mitjanes (n=2) dels fangs de l'EDAR de Lleida, segons informació de la pròpia EDAR.

Paràmetre	Unitats	\bar{x}	σ_n
Contingut humitat	% s.m.f.	87.7	2.3
Sòlids totals	% s.m.f.	12.3	2.3
Sòlids volàtils	% s.m.s.	84.6	8.4
Carboni total	% s.m.s.	40.5	2.7
Nitrogen Kjeldhal	g N/kg ms	86.2	9.0
Nitrogen amoniacal	g N/kg ms	10.6	1.0
C/N	---	4.7	
pH aigua extracte 1:5	---	6.37	0.9
CE extracte 1:5	mS/cm	1.44	0.5

Preparació de les mescles

La preparació de les mescles es va fer en base volumètrica. S'utilitzà una safata rectangular de 75 x 50 cm i 10 cm de fons on s'hi delimitaven dos compartiments (tres en la càrrega del reactor R2) amb plaques de plàstic rígid que guardaven la relació volumètrica desitjada (veure taula 5.7). Tot seguit s'omplia cada compartiment amb un dels residus sòlids (estructurant, fems o FORM) i s'enrasava amb un llistó de fusta, es retiraven les plaques separadores i es mesclava manualment fins que s'apreciava una mescla homogènia. Llavors s'abocava el contingut de la safata al reactor i es tornava a preparar més mescla fins a omplir-lo.

En el reactor R3 es feia la mescla a parts iguals en volum d'estructurant i fems (Taula 5.7) i llavors s'hi afegia un determinat volum de fang d'EDAR. El fang era líquid i a l'afegir-lo a la mescla de sòlids no se n'alterava el volum, per això a la taula 5.7 el volum de fang afegit s'expressa com a percentatge respecte al volum total de la mescla de sòlids.

Es van fer dos experiments (Exp 1 i Exp 2). En cada experiment es van carregar els reactors amb diferents proporcions dels substrats a fi de poder observar la influència de la composició de la mescla en l'evolució del procés. Per evitar les pertorbacions originades per l'extracció de mostres dels reactors es decidí fer una repetició de cada experiment. En una primera càrrega (A) els reactors es mantenien tancats durant tot el

procés. Això permetia l'enregistrament de les variables físiques sense cap pertorbació. En una segona càrrega dels reactors (B), omplerts amb les mateixes proporcions de substrats, i mantenint, en la mesura que era possible, les mateixes condicions que en la primera, s'obrien periòdicament els reactors per extreure'n mostres i poder-ne analitzar les variables químiques. Les variables físiques també s'enregistraven. En total es realitzaren dos experiments (1 i 2) amb els corresponents duplicats (A i B) amb els tres reactors. A la taula 5.7 es mostren les relacions volumètriques de les mescles de substrats utilitzades, i a la taula 5.8 les corresponents característiques analítiques.

Taula 5.7. Composició (% volum) de les mescles utilitzades en els experiments 1 i 2 per cadascun dels tres reactors (R1, R2 i R3).

	Experiments 1A i 1B			Experiments 2A i 2B		
	R1	R2	R3	R1	R2	R3
Estructurant	50	25	50	25	12.5	50
Fems	50	50	50	75	12.5	50
FORM	---	25	---	---	75	---
Fang d'EDAR	---	---	14.3*	---	---	14.3*

(*) Volum de fangs d'EDAR afegit a la mescla de sòlids expressat com a percentatge del volum ocupat pels components sòlids (estructurant i fems).

Taula 5.8. Composició de les mescles de càrrega dels reactors obtingudes a partir de la composició del substrat (Taules 5.4, 5.5 i 5.6) i de les proporcions volumètriques de les mescles (Taula 5.7). Només s'hi ha considerat l'aportació en humitat, ST i SV de l'estructurant. L'aportació en carboni de l'estructurant no s'hi inclou per considerar-se no biodegradable i la de nitrogen és negligible.

		Experiments 1A i 1B			Experiments 2A i 2B		
		R1	R2	R3	R1	R2	R3
1.Humitat	kg _w /kg _{m.f.}	0.651	0.652	0.699	0.729	0.462	0.699
2.Sòlids totals	kg _{ST} /kg _{m.f.}	0.349	0.348	0.301	0.271	0.538	0.301
3.Sòlids volàtils	g _{SV} /kg _{m.s.}	852.4	812.8	851.8	829.4	775.8	851.8
4.Carboni total	g _C /kg _{m.s.}	217.6	298.3	233.9	322.6	301.3	233.9
5.Nitrogen Kjeldhal	g _N /kg _{m.s.}	13.0	16.5	19.3	19.2	14.6	19.3
6.Nitrogen NH ₄ ⁺	g _N /kg _{m.s.}	2.2	2.4	2.9	3.3	1.4	2.9
7.Nitrogen orgànic	g _N /kg _{m.s.}	10.8	14.1	16.4	15.9	13.2	16.4
8.C/N	---	16.8	18.1	12.1	16.8	20.7	12.1
9.Greixos ¹	g/kg _{m.s.}	16.0	47.0	18.0	23.0	90.0	17.0
10.Proteïna ²	g/kg _{m.s.}	67.2	88.1	102.4	99.6	82.3	102.4
11.Fibra ¹	g/kg _{m.s.}	390	500	380	580	440	380
12.Densitat aparent ³	kg/m ³	502.7	578.9	553.3	466.0	492.7	627.0
13.Massa de càrrega ³	kg	36.60	42.15	30.90	34.26	36.05	45.65

⁽¹⁾ Dades analítiques de la mescla; ⁽²⁾ Correspon a N_{org}*6.25; ⁽³⁾ Aquestes dades foren mesurades en els experiments 1A i 2A.

5.6 Descripció global dels experiments de compostatge realitzats

Tal i com ja s'ha mencionat s'utilitzà un muntatge experimental de tres reactors estàtics verticals d'aireig forçat amb una cabuda útil de 70 L cadascun que operaven simultàniament. Amb el seguiment de l'evolució dels reactors es pretenia aconseguir sèries de dades per poder contrastar les prediccions dels models matemàtics. Es va fer el seguiment de dos tipus de variables, físiques i químiques. Com a variables físiques s'hi van considerar la temperatura, el pes total, el cabal d'aire insuflat, les concentracions en el plenum superior d'oxigen i CO₂, i l'assentament del material. Com a variables químiques es van considerar els continguts en sòlids totals, en sòlids volàtils, pH i

conductivitat elèctrica de l'extracte 1:5, la DQO, el contingut en carboni, nitrogen, fibres i greixos.

Les variables físiques es mesuraven en continu i sense necessitat de pertorbar el reactor. La mesura de les variables químiques requeria l'obertura dels reactors, l'extracció de mostres, la conservació i la preparació per a les analítiques posteriors. L'extracció i anàlisi de moltes mostres, si bé desitjable des del punt de vista d'obtenir sèries de dades fidedignes, no és possible a causa de la forta pertorbació que es provoca al reactor i de l'elevat cost de les analítiques. Davant d'això s'elegí una solució de compromís que va consistir en extreure cinc mostres durant el procés, una a l'inici del procés (I), una altra al final del procés (V), quan es descarregava el reactor, i tres mostres (II, III, i IV) durant el procés.

La taula 5.9 mostra els paràmetres físics enregistrats en els diferents experiments. Inicialment (experiment 1) el cabal d'aire als reactors es mesurava manualment amb els rotàmetres. El fet que la línia de subministrament d'aire comprimit al laboratori no mantingués la pressió constant provocava oscil·lacions en el cabal d'aire. En l'experiment 2 se solucionà aquesta incidència substituint els rotàmetres per cabalímetres tèrmics que mantenen constant el cabal d'aire insuflat i igual a un valor predeterminat (4 L/min a cada reactor).

Taula 5.9. Paràmetres físics enregistrats en els experiments 1 i 2.

Paràmetre	Equip de mesura	Tipus de mesura		Periodicitat (min)
		Continua	Manual	
Massa del reactor	Bàscula	X		15
Concentració d'O ₂	Sensor d'O ₂	X		45
Concentració de CO ₂	Sensor de CO ₂	X		45
Temperatura	Termoparells J	X		15
Cabal d'aire	Cabalímetre tèrmic	X ⁽¹⁾		15
Cabal d'aire	Rotàmetre		X ⁽¹⁾	diària
Sobrepessió aire	Manòmetre		X	diària
Assentament	Sistema cables		X ⁽²⁾	diària

(1) Experiment 1: Rotàmetres; experiment 2: cabalímetres tèrmics.

(2) Només en els experiments 1A i 2A.

L'evolució enregistrada de les variables físiques de la primera càrrega (A) serví d'informació per definir el moment de presa de mostres de la segona càrrega (B). La taula 5.10 dona els dies de presa de les 5 mostres en els experiments 1B i 2B. Les mostres intermèdies del procés (II, III i IV) es prengueren sempre del nivell superior del material. Només en les mostres I i V (inici i fi de procés) es prengueren, a més a més, mostres d'altres nivells. Durant el procés de càrrega i descàrrega dels reactors es mesurava també la massa de material que hi havia a cadascuna de les 5 capes (Fig. 5.7) i la posició de les seves cares superior i inferior.

Taula 5.10. Dies d'obertura i presa de mostres dels reactors. La mostra I correspon a l'instant de càrrega del reactor (dia 0 del procés).

Mostra	Experiment 1B			Experiment 2B		
	R1	R2	R3	R1	R2	R3
I	0	0	0	0	0	0
II	1	1	1	1	2	2
III	3.5	3.5	3.5	10	6.5	6.5
IV	7.5	7.5	7.5	13	13	13
V	15	15	15	17	17	17

A la taula 5.11 es presenta la relació d'analítiques que es feren en les mostres extretes. El volum de la mostra destinada a liofilitzar era de 750 mL i les altres de 20 mL.

Taula 5.11. Relació de les analítiques fetes en cada instant de presa de mostres (I a V) amb indicació del nivell (N1 a N5) d'on s'extragueren. ST: Sòlids totals; SV: Sòlids volàtils; G: Greixos; F: Fibra; C: Carboni total; N: Nitrogen total.

Periodicitat	Analítica	Nivell
I, II, III, IV, V	DQO*, G*, F*, NH ₄ ⁺ , pH, CE	N5
I, V	ST, SV	N1, N2, N3, N4, N5
I, V	C*, N*	N1, N5

(*) Analítiques fetes després de liofilitzar. pH i CE s'analitzaren immediatament en l'extracte 1:5 de la mostra fresca.

5.7 Mètodes analítics

En general tots els mètodes analítics utilitzats són els descrits a l'Standard Methods amb alguna adaptació. Les mesures de pH, conductivitat elèctrica (CE) i nitrogen amoniacal (N-NH₄) es van realitzar a partir de l'extracte 1:5 (mostra:extractant, pes) amb aigua desionitzada. Les determinacions de DQO, continguts de carboni (C) i nitrogen (N), contingut de fibra i contingut de greix es van fer a partir del liofilitzat de la mostra guardada congelada.

pH

El pH és la forma comú d'expressar la concentració del ió hidrogen en les solucions aquoses,

$$pH = -\log[H^+]$$

Es va mesurar sobre l'extracte 1:5 de la mostra amb un elèctrode Crison 52-11, especial per a líquids viscosos i amb alt contingut en proteïna, connectat a un mesurador de pH/mV Crison GLP 22. El calibratge es realitzà amb dissolucions tampó estàndard CRISON de pH 7.02 i 4.00 a 20 °C. La resolució de la lectura era de 0.01 unitats de pH i la precisió de ±0.01.

Conductivitat elèctrica (CE)

La conductivitat elèctrica és un indicador de la quantitat de sals dissoltes. La conductivitat elèctrica d'una solució és la inversa de la seva resistivitat ρ [Ohm·cm],

$$R = \rho \frac{L}{S}$$

on R[Ohm] és la resistència elèctrica d'una columna de secció S[cm²] i alçària L [cm]. S'ha mesurat amb un conductímetre Crison GLP 21. Essencialment és un pont de Wheatstone on la resistència a determinar correspon a la solució considerada. La CE es va mesurar directament en l'extracte 1:5 (mostra: aigua) després de calibrar diàriament l'aparell utilitzant dues solucions de KCl 0.1M amb conductivitats de 12.88 mS/cm i 1.413 mS/cm a 25°C.

Sòlids totals i volàtils

El contingut en sòlids totals (ST) i sòlids volàtils (SV) es va determinar seguint el mètode 2540E de l'Estandard Methods for Examination of Water and Wastewater (APHA, 1995). El ST es determinaren mitjançant el pes del residu sec, assecat a 105°C amb estufa (Selecta 202) durant 24 hores i referit al pes de la mostra inicial,

$$ST(\%) = \frac{Pes_{105^{\circ}C} - Tara}{Pes_{mostra}} \cdot 100$$

Els sòlids volàtils (SV) es determinaren sobre la mateixa mostra, per calcinació en una mufla (Heron 12-PR/300) a 550 °C durant 6 hores. El contingut en SV es determina per diferència entre el residu sec i les cendres,

$$SV(\%) = \frac{Pes_{105^{\circ}C} - Pes_{550^{\circ}C}}{Pes_{mostra}} \cdot 100$$

Es verifica, $Cendres(\%) = ST(\%) - SV(\%)$.

Demanda Química d'Oxigen (DQO)

La DQO es defineix com la quantitat d'oxigen necessària per oxidar completament la matèria orgànica i els compostos oxidables d'una mostra. Es va utilitzar el mètode 5220B de l'Standard Methods for Examination of Water and Wastewater (APHA, 1995), conegut també com a mètode de reflux obert.

Es realitza una digestió de la mostra, prèviament liofilitzada i triturada, amb excés de dicromat potàssic en un medi fortament àcid (H_2SO_4), durant dues hores a 150°C. S'utilitza un bloc de digestió amb capacitat per 20 tubs amb reflux obert (Selecta). La reacció es catalitza amb sulfat de plata (Ag_2SO_4), i s'utilitza $HgSO_4$ per eliminar problemes d'interferències amb els halurs presents. L'excés de dicromat es valora amb sal de Mohr, sulfat ferrós amònic ($Fe(NH_4)_2(SO_4)_2 \cdot 6H_2O$), utilitzant ortofenantrolina com a indicador.

En cada grup de mostres es realitzà un blanc, seguint el mateix procediment que amb la resta de les mostres, però substituint la mostra per aigua desionitzada. Diàriament es comprovava la molaritat de la sal de Mohr utilitzada.

La DQO es determinava segons l'expressió,

$$DQO(mgO_2 / kg) = \frac{(V_B - V_M) \cdot 8000 \cdot N}{Pes_{mostra} (kg)}$$

V_B (L) Volum de la sal de Mohr utilitzada en la valoració en blanc

V_M (L) Volum de la sal de Mohr utilitzada en la valoració de la mostra

N Normalitat de la sal de Mohr,

$$N = \frac{V_{Cr_2O_7} \cdot N_{Cr_2O_7}}{V_{SalMohr}}$$

$V_{Cr_2O_7}$ Volum de Cr_2O_7 utilitzat en la determinació de la normalitat

$N_{Cr_2O_7}$ Normalitat del Cr_2O_7 utilitzat

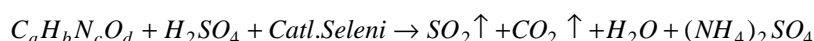
$V_{SalMohr}$ Volum de sal de Mohr utilitzada en la valoració

El factor de conversió 8000 mgO_2/eq correspon al fet que un mol de sal de Mohr és un equivalent, mentre que un mol d' O_2 (32 g) són 4 equivalents ($4e^-$), llavors $1e^- d'O_2 \equiv 8 g O_2 \equiv 8000 mgO_2$. S'utilitzà dicromat potàssic 1N, mantenint-se la relació volumètrica entre el dicromat i l'àcid sulfúric 1:3. Per a la majoria de determinacions de mostres orgàniques el volum de dicromat va ser de 15 ml, i el de sulfúric de 45 ml, per una mostra de 0.5 g. En algunes mostres amb menys matèria orgànica se'n van utilitzar només 10 ml.

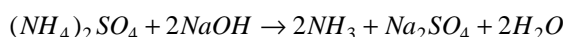
Nitrogen Kjeldal (N_K)

El mètode Kjeldal determina el nitrogen en estat trinegatiu. No té en compte el nitrogen en forma d'azida, azina, azo, hidrazona, nitrat, nitrit, nitril, nitrós, oxamina i semicarbazona. Tot i això, normalment s'associa al nitrogen total, ja que considera les fraccions més importants de formes nitrogenades en els residus orgànics: el nitrogen orgànic i l'amoniacal.

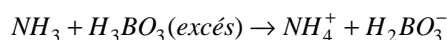
El mètode fou adaptat del mètode 4500 de l'Standard Methods for examination of Water and Wastewater (APHA, 1995). Es basa en digerir la mostra a temperatura, en medi àcid amb un catalitzador de Seleni, de manera que els compostos orgànics nitrogenats prenen formes amoniacals, sulfat amònic. La reacció es pot resumir en,



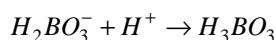
Posteriorment s'analitza el contingut total en sals amoniacals mitjançant la destil·lació de la mostra digerida amb un destil·lador marca Tecator (Kjeltec System 1026 Distilling unit). S'hi afegeix una base forta (NaOH, 46%) per pujar el pH i desplaçar l'equilibri cap a la formació d'amoniac lliure, segons la reacció,



El destil·lat es recull en àcid bòric amb indicador (vermell de metil). Al recollir-se el vapor en un medi àcid l'amoniac passarà a la forma iònica no volàtil,



Finalment es fa la valoració del borat que ha reaccionat amb l'amoniac mitjançant titració amb un àcid fort (HCl) de normalitat coneguda,



El nitrogen total s'estima utilitzant l'expressió,

$$N_K (\text{mg} / \text{kg}) = \frac{14000 \cdot (V_M - V_B) \cdot N_{HCl}}{P_{es,mostra(g)}}$$

V_M Volum de HCl consumit en la valoració de la mostra (ml)

V_B Volum de HCl consumit en la valoració del blanc (ml)

N_{HCl} Normalitat de l'àcid clorhídric utilitzat

Nitrogen amoniacal ($N-NH_4$)

El nitrogen amoniacal s'analitza pel mètode de destil·lació, amb un destil·lador marca Tecator (Kjeltec System 1026 Distilling unit), seguint el mètode 4500-NH₃ B de l'Standard Methods for examination of Water and Wastewater (APHA, 1995).

El mètode és exactament el mateix que el utilitzat per destil·lar i valorar el nitrogen Kjeldal, sense digestió prèvia i utilitzant com a base MgO. La determinació es realitza

sobre la fracció de sobrenedant de centrifugar a 3000 rpm, prenent 1ml de mostra. El càlcul de la concentració de nitrogen amoniacal és,

$$N - NH_4(mg / L) = \frac{14000 \cdot (V_M - V_B) \cdot N_{HCl}}{V_{mostra}}$$

on V_{mostra} és el volum de la mostra utilitzada.

Nitrogen orgànic

El contingut de nitrogen orgànic d'una mostra es determina per diferència entre el nitrogen Kjeldal i el nitrogen amoniacal,

$$[N_{org}] = [N_K] - [N - NH_4]$$

El contingut total de proteïnes es pot obtenir, de forma aproximada, multiplicant la concentració de nitrogen orgànic per un factor de 6.25 (MAPA, 1994).

$$[Pr\ oteïnes] = 6.25 \cdot [N_{org}]$$

Contingut en greixos. Mètode Soxlet

El contingut en greixos es va determinar al Departament de Producció Animal de l'Escola Tècnica Superior d'Enginyeria Agrària, seguint el mètode oficial (MAPA,1994). El contingut en greix brut d'un producte es defineix convencionalment com aquella part del mateix que pot ser extreta amb èter etílic sota determinades condicions. Inclou, a més a més dels greixos, altres substàncies solubles en èter com ceres, pigments, vitamines, etc. Es pesa una quantitat de mostra liofilitzada i molta (500µm) i s'introdueix a un recipient tapat amb cotó. Es tara un matràs (assecat en estufa i refredat en assecador) i s'introdueix el recipient a l'extractor, afegint-hi èter etílic un cop connectat al matràs. Es procedeix a l'extracció, continuant fins que l'èter sigui incolor, durant aproximadament 6 hores. Es treu el recipient de l'extractor i es recupera l'èter. El matràs amb la resta de l'extracte i del dissolvent s'asseca durant mitja hora en una estufa d'assecat a 100°C. Es deixa refredar en assecador i es pesa quan estigui a temperatura ambient. El contingut en greix es determina amb la següent expressió,

$$GreixBrut(\%MS) = \frac{(P_1 - P_2) \cdot 100}{P}$$

On P_1 és el pes del matràs amb l'extracte eteri, P_2 és el pes del matràs buit i P és el pes de la mostra seca utilitzada.

Contingut en fibra. Mètode de fibra àcid detergent i neutre detergent

El contingut en hemicel·lulosa i lignocel·lulosa va determinar-se per diferència dels resultats obtinguts a l'aplicar la tècnica de fibra àcid detergent, FAD (cel·lulosa + lignina) i la fibra neutre detergent, FND (hemicel·lulosa + cel·lulosa + lignina), sobre matèria seca. Les determinacions van fer-se al Departament de Producció Animal de l'ETSEA seguint el mètode oficial (Métodos oficiales de análisis de alimentos, MAPA, 1994).

Carboni i nitrogen

El contingut total de carboni i nitrogen es determinà per anàlisi elemental. Aquesta tècnica, que segueix la metodologia analítica o sistema DUMAS, es basa en la completa

i instantània oxidació de la mostra mitjançant una combustió amb oxigen pur a una temperatura de 1000°C. els diferents productes de combustió (CO_2 , H_2O , N_2) són arrossegats amb el gas portador (He) a través d'un tub de reducció i separats en columnes específiques. Finalment els gasos passen de forma separada per un detector de conductivitat tèrmica que proporciona un senyal proporcional a la concentració de cadascun dels components individuals de la mescla.

CAPÍTOL 6

CONTRAST DEL MODEL 1D AMB RESULTATS EXPERIMENTALS

6.1 Introducció

L'objectiu d'aquest capítol és l'exposició dels resultats obtinguts amb el muntatge experimental descrit al Capítol 5 i que permeten determinar paràmetres físics i aspectes essencials del model global de compostatge descrit als capítols 3 i 4.

L'assentament del material en piles de compostatge i reactors estàtics és un fenomen ben conegut a la literatura (McCartney and Chen, 2001; Van Lier et al., 1994), però només en escassos estudis recents es quantifica (Yue et al., 2008; Elagroudy et al., 2008). L'assentament és un fenomen que només ha estat introduït fins ara i de manera parcial per van Lier (1994) en el seu model del procés de compostatge. Les dades referents a l'assentament del material dins dels reactors, així com les equacions proposades per quantificar-lo, es presenten al Capítol 7 amb l'estructura de l'article que ha estat publicat a la revista *Bioresource Technology* (Illa et al., 2012).

El nivell d'aïllament de cada reactor és un dels paràmetres requerits en tot model. Un nivell baix pot provocar que el sistema no assoleixi la temperatura desitjada, degut a l'excessiva pèrdua d'escalfor a través de les parets del reactor, i que dugui a conclusions errònies a l'hora d'extrapolar resultats obtinguts en reactors de laboratori a l'escala industrial. De les poques referències bibliogràfiques que en donen valors (Kaiser 1996; Stombaugh and Nokes, 1996) cap en fa una determinació experimental directa. A l'apartat 6.2 s'analitzen les corbes d'escalfament i refredament de cada reactor omplert d'aigua i se'n determina el valor del coeficient global de transferència d'escalfor.

La simetria radial en la distribució de temperatures en un reactor vertical és una hipòtesi que, implícitament o explícita, s'assumeix en tots els models 1-D. Tanmateix no es té constància de treballs on s'hagi intentat verificar experimentalment. L'apartat 6.3.1 mostra que els resultats experimentals no sempre la confirmen.

És ben conegut que a les parets del plenum superior de reactors tancats de compostatge s'hi formen condensacions que degoten sobre la capa superior de material, i que per aquesta raó té una humitat superior a la de les altres capes. Els models 1-D analitzats (Bari and Koenig, 2005) assumeixen que els gasos surten saturats de vapor a la temperatura de la darrera capa i no consideren les condensacions al plenum superior,

tanmateix no es té constància de cap comprovació experimentalment d'aquesta hipòtesi. A l'apartat 6.3.2 es presenta l'evolució de temperatures registrades per les sondes superiors (S6 i S7) i per la sonda de la tapa. La interpretació més plausible és que el gas del plenum superior té una temperatura més baixa que al sortir de la massa degut a la dissipació d'escalfor per les parets del plenum amb la conseqüent formació de condensacions. Les simulacions amb el model desenvolupat expliquen aquest fenomen.

El coneixement de la distribució de temperatures a l'interior d'un reactor vertical és important per descriure els fenòmens de transferència de massa i energia que hi intervenen. Diferents autors ho han intentat descriure amb models (Bari and Koenig, 2005; Stombaugh and Nokes, 1996; Van Lier et al., 1994), però cap d'ells fa una comparació entre les mesures experimentals i els resultats de simulació. A l'apartat 6.3.3 es presenten les evolucions registrades als diferents nivells de cada reactor en els experiments realitzats i es mostren els corresponents resultats de simulació amb els valors de referència dels paràmetres. El model prediu les tendències generals de les evolucions.

L'evolució de la concentració d'oxigen i CO₂ al gas de sortida dels reactors està relacionada amb la de les temperatures. A l'apartat 6.4 es mostren les concentracions registrades experimentalment a cada reactor i les corresponents prediccions fetes pel model. Les tendències generals són reproduïdes pel model, però, igual que en l'evolució de les temperatures, alguns detalls no, possiblement degut a la mancança del model biològic en predir acuradament els canvis de poblacions microbianes en funció del substrat i de les condicions ambientals. Els canvis que prediuen les simulacions són més bruscs del que s'observa experimentalment. L'ordre de magnitud dels coeficients de transferència de massa d'oxigen i CO₂ s'estima en $10^{-7} \text{ kg}\cdot\text{h}^{-1}\cdot\text{Pa}^{-1}\cdot\text{kg}_{\text{TM}}^{-1}$.

El quocient repiromètric (RQ) depèn de l'estequiometria dels processos de degradació però no de la seva velocitat i per tant reflecteix els canvis en la composició general del substrat que majoritàriament s'està degradant. Alguns trets característics de la seva evolució han estat mencionats per diferents autors (de Guardia, 2010; Gea T., 2005). A l'apartat 6.5 es presenten els resultats experimentals i les corresponents simulacions. El model prediu els principals trets característics observats experimentalment: els elevats valors durant les primeres hores del procés, la repuntada després del primer mínim i la tendència a l'alça cap a final de procés.

L'evolució de la massa total de cada reactor fou registrada en continu en tots els experiments. A l'apartat 6.6 es mostren les evolucions experimentals i les simulades. La tendència general és ben reproduïda pel model, tot i que en un reactor la discrepància entre mesures i simulació arriba fins als 15 punts percentuals. Aquesta divergència coincideix amb el reactor (R2 Exp2) que té unes característiques de la càrrega inicial (contingut en greixos i humitat) més allunyades dels altres.

La distribució del contingut d'humitat als diferents nivells del reactor a final de procés dona idea de la importància dels mecanismes de transport presents, tanmateix no es té constància que aquesta informació hagi estat publicada per cap autor. A l'apartat 6.7 es mostren les distribucions inicials i finals mesurades juntament amb les prediccions del model. Malgrat la dispersió de les dades experimentals, s'aprecia que el model només arriba a predir la tendència general i que, possiblement, caldria introduir-hi el mecanisme de moviment de la fase líquida per poder millorar les prediccions.

En molts dels reports consultats sobre reactors d'aireig forçat es considera un flux d'aire constant. La resistència al pas de l'aire a través de la massa porosa en compostatge és vital a l'hora de dimensionar el sistema d'aireig en instal·lacions industrials degut a la despesa energètica que comporta (Higgins et al., 1982; Keener, 1993). La permeabilitat del medi a l'aire és el paràmetre que permet quantificar-la. A l'apartat 6.8 es determina el interval en què s'estima la permeabilitat i s'analitza l'evolució de la sobrepressió requerida al plenum inferior durant el procés. Els resultats de simulació expliquen en part les evolucions mesurades experimentalment.

6.2 Nivell d'aïllament tèrmic dels reactors

L'objectiu d'aquest apartat és determinar el coeficient global de transferència d'escalfor dels reactors utilitzats de manera que pugui ser utilitzat en el model. En tots els experiments als que es fa referència en aquest apartat s'operà de la mateixa manera. S'omplí el reactor d'aigua i s'escalfà amb la resistència elèctrica (Figs. 5.8 i 5.9) fins assolir una temperatura de 70-75 °C, llavors es desconnectava la resistència i es deixava refredar l'aigua. Les temperatures mesurades per les sondes de la canya central (S1 a S7, Fig. 5.4) i de l'ambient exterior (Fig. 5.2) eren enregistrades periòdicament pel datalogger a intervals de 5 minuts. Es va fer una prova d'escalfament i refredament amb cadascun dels tres reactors. Els reactors R1 i R2 estaven ja revestits amb l'aïllament definitiu de llana mineral mentre que el reactor R3 encara no el tenia col·locat. L'aigua a l'interior dels reactors no estava agitada mecànicament. Les característiques del reactor i de mesura de la potència de la resistència es donen a la Taula 6.1.

Taula 6.1 Característiques del reactor i de la resistència calefactora

Superfície interna del reactor	1.244 m ²
Relació superfície/volum	15.01 m ⁻¹
Volum d'aigua dins el reactor	70 L
Intensitat del corrent	3.23 A
Tensió	231 V
Potència dissipada per la resistència	740 W

Les figures 6.1 i 6.2 són una mostra de les dades registrades. Dins els reactors s'hi produïa una estratificació de temperatures en la fase de refredament. En la fase d'escalfament només la capa d'aigua inferior (sonda S1) presentava estratificació. Això era degut a que la resistència calefactora estava situada per damunt del nivell on s'ubicava aquesta sonda (Fig. 5.4 A), mentre que els corrents convectius provocats (Fig. 5.8) impedièren l'estratificació de les capes superiors. La davallada de temperatures en els reactors R1 i R2 fou molt similar, mentre que la del reactor R3 sense aïllar (Fig. 6.2) fou molt més ràpida.

Els ajusts (Fig. 6.3) es realitzaren seguint la metodologia descrita a l'apartat 5.4 i en tots els cassos s'utilitzà com a temperatura de l'aigua (T_{exp}) la mitjana de les 7 sondes, S1 a S7, i com a temperatura ambient la mitjana de l'aire ($T_{mitjana}$). S'observa (Fig. 6.3 i Taula 6.2) que els ajusts de les corbes d'escalfament són millors que els de les de refredament. Això pot atribuir-se a l'estratificació tèrmica de l'aigua i a les oscil·lacions de la temperatura ambiental. En efecte, en l'escalfament gairebé no hi ha estratificació i l'oscil·lació de temperatura ambiental és baixa degut a que l'escalfament es produeix en un període de temps relativament curt (6 hores). En canvi el refredament s'estén en un període molt més llarg i, a més a més de l'estratificació, hi ha els canvis diürns en la

temperatura ambiental. Aquesta explicació ve recolzada pel fet que de les tres corbes de refredament la del reactor R3 és la que té el millor ajust i alhora és en la que la temperatura ambiental oscil·la menys.

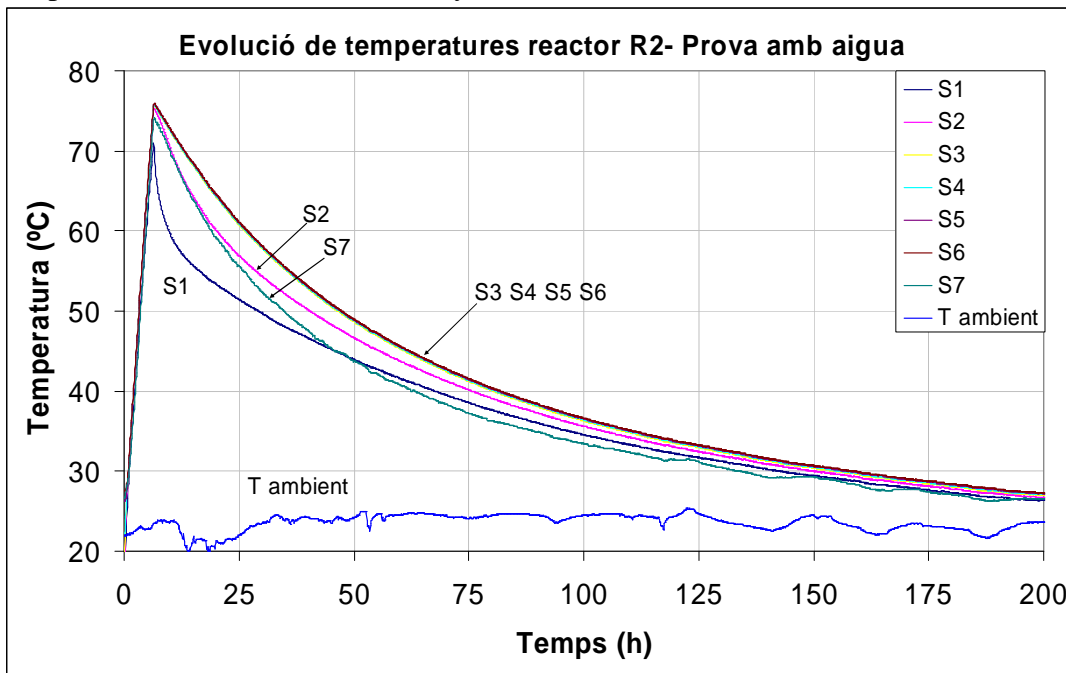


Figura 6.1 Evolució de les temperatures en el reactor R2 aïllat i sense agitació. La sonda superior (S7) possiblement va quedar descoberta i per això té un comportament anòmal. La temperatura de l'aire presenta una clara oscil·lació diürna. Nomenclatura de les sondes segons la figura 5.4.

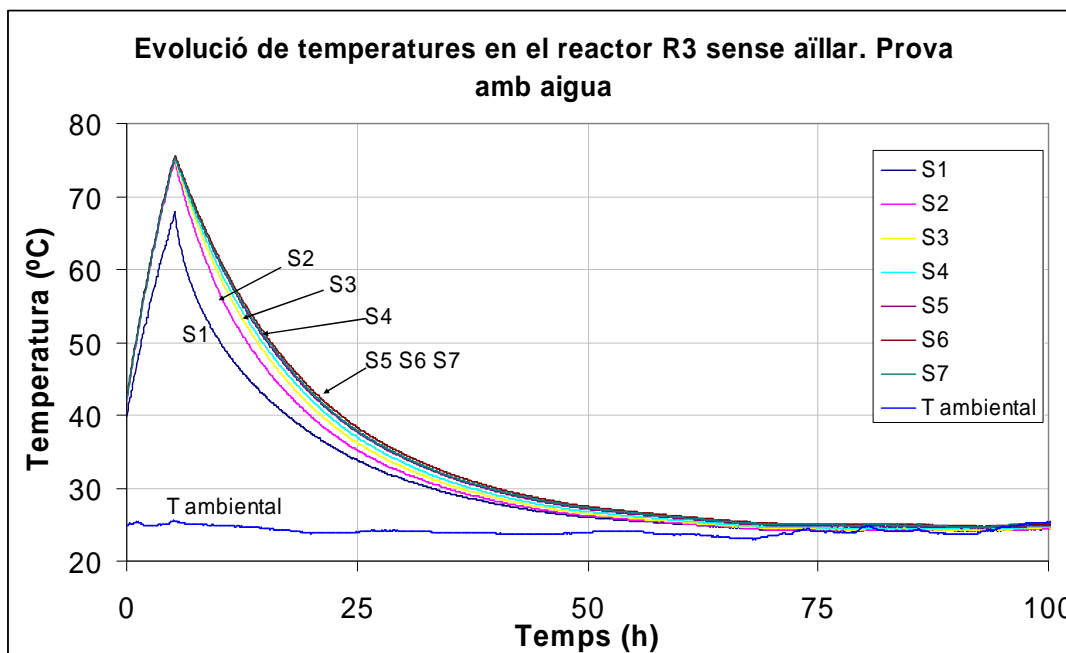


Figura 6.2 Evolució de les temperatures en el reactor R3 sense aïllar. La temperatura de l'ambient es manté gairebé constant durant les primeres 72 hores i la lleugera pujada que s'aprecia al final provoca que l'aigua del reactor deixi de refredar-se. Nomenclatura de les sondes segons la figura 5.4.

Els valors del coeficient global de transferència d'escalfor U referit a l'àrea interna del reactor se situen en el interval $3700 - 4000 \text{ J}\cdot\text{h}^{-1}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$ ($1.03 - 1.11 \text{ W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$), unes

4.5 vegades inferiors al valor de $17300 \text{ J}\cdot\text{h}^{-1}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$ ($4.8 \text{ W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$) que tindrien si els reactors no haguessin estat aïllats (Taula 6.2).

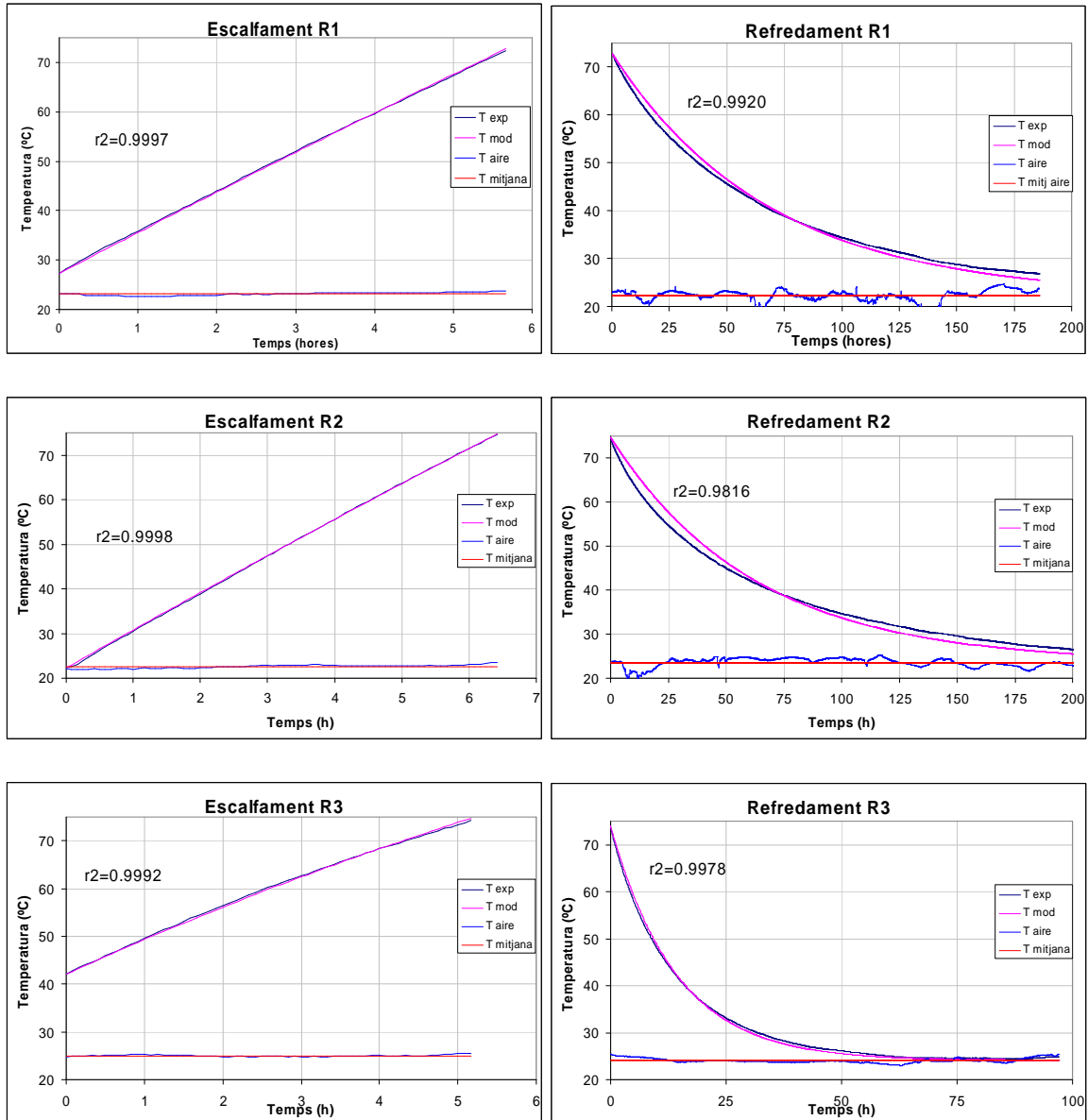


Figura 6.3. Resultats dels ajusts de les corbes d'escalfament i refredament de cada reactor amb indicació dels valors del coeficient de determinació r^2 de cada corba. T_{exp} , temperatura registrada de l'aigua (mitjana de les sondes S1 a S7); T_{mod} , temperatura predita pel model; T_{aire} , temperatura registrada de l'aire ambient; $T_{mitjana}$, temperatura mitjana de l'aire ambient.

Taula 6.2. Valors de U i m_{eq} obtinguts per cada reactor amb els corresponents valors dels coeficients de determinació r^2 de cada ajust. S'hi mostren també els valors de les temperatures mitjanes de l'aire (T_a) i d'inici de procés (T_o) utilitzats en les corbes d'escalfament (e) i de refredament (r).

	U ($\text{J}\cdot\text{h}^{-1}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$)	m_{eq} (kg)	r^2_e	r^2_r	T_{a_e} (°C)	T_{a_r} (°C)	T_{o_e} (°C)	T_{o_r} (°C)
R1	3737	5.772	0.9997	0.9920	23.09	22.22	27.27	72.85
R2	4026	4.158	0.9998	0.9816	22.61	23.55	22.24	74.72
R3	17305	3.056	0.9992	0.9978	25.05	24.09	42.07	74.07

Amb les dades disponibles no és possible discernir si la diferència (del 8%) entre els valors estimats de U pels reactors R1 i R2 és deguda a les mancances experimentals

mencionades (estratificació tèrmica a l'aigua, oscil·lacions en la temperatura ambient) o bé és deguda a diferències en la construcció dels reactors. El mateix pot dir-se dels valors de la massa equivalent. La m_{eq} del reactor R3, encara sense la capa d'aïllament al moment de fer l'assaig, pren, tal com era d'esperar, un valor inferior al dels altres dos reactors.

6.3 Anàlisi de l'evolució de les temperatures

6.3.1 Simetria en la distribució de temperatures

Tal i com s'ha mencionat al capítol 5 (Figs. 5.3 i 5.4B), els reactors R2 i R3 duïen inserides dues sondes de temperatura dins la paret de PVC del reactor col·locades en oposició diametral. Al reactor R2 estaven situades a nivell de la sonda S4 i al reactor R3 a nivell de la sonda S5 de l'eix dels reactors. El registre d'aquestes sondes permet quantificar el nivell de simetria radial en la distribució de temperatures i percebre l'existència de fluxos calorífics radials.

Diferents treballs que analitzen el compostatge en reactors verticals amb aireig forçat (Bari and Koenig, 2005; Stombaugh and Nokes, 1996; Van Lier et al., 1994) assumeixen sempre una distribució unidimensional de temperatures de manera que les superfícies isotermes són plans horitzontals. Aquesta és, evidentment, una hipòtesi clau per la simplificació dels models matemàtics i té dues conseqüències: 1) en qualsevol secció perpendicular a l'eix del reactor la distribució de temperatures és radial, és a dir, $T=T(r)$, i 2) la distribució radial és una distribució uniforme, és a dir, $T(r)=ctn$.

La primera és plenament assumible en la mesura en que no sol tenir-se informació de la presència de cap element que trenqui la simetria radial. La segona entra en contradicció amb el fet, àmpliament acceptat, que hi ha unes pèrdues laterals d'escalfor per conducció a través de la paret del reactor quantificades per l'equació 5.3.1. S'argumenta que si el reactor està ben aïllat aquest flux d'escalfor radial serà prou feble com per no distorsionar significativament el flux principal en la direcció axial. Malgrat la gran utilització en tots els models d'aquestes hipòtesis no es té constància de mesures experimentals per contrastar-les.

A la figura 6.4 es representen, per cadascun dels experiments realitzats amb els reactors R2 i R3, les corbes d'evolució de la temperatura a l'eix del reactor i a les dues sondes laterals situades al mateix nivell juntament amb la temperatura del punt central inferior (S3 pel reactor R2 i S4 pel reactor R3) i del punt central superior (S5 pel reactor R2 i S6 pel reactor R3). En totes les situacions (excepte al reactor R2 en l'experiment 1A) la temperatura registrada per la sonda central és superior a la de les sondes laterals, el que es pot interpretar com el gradient radial que provoca el flux lateral a través de l'aïllament. Tanmateix la suposada simetria radial està fortament distorsionada en alguns casos. Així, en l'experiment 1A, al reactor R2 la temperatura del centre estava entre els valors de les dues laterals, i aquestes arribaren a diferir en gairebé 8°C. A l'experiment 2B, al reactor R2, hi torna a aparèixer una forta asimetria amb la temperatura central més elevada que les laterals però la diferència entre aquestes arriba a ser de 18°C. Al reactor R2 tant la temperatura del centre (S4) com les dues laterals estan sempre entre la temperatura del nivell inferior (S3) i la del nivell superior (S5), és a dir, el gradient radial és inferior al gradient vertical de temperatures, el que concorda amb la hipòtesi feta. Al reactor R3 la temperatura central (S5) és sempre superior a les laterals i la diferència entre aquestes és relativament baixa (<5°C), tal com caldria esperar en una

simetria radial. Tanmateix els gradients verticals en el reactor R3 també són més baixos. En la distribució vertical de temperatures hi ha un màxim que se situa a nivell de la sonda S5, això fa que en tots els casos (excepte a l'experiment 1A) tant la temperatura del nivell inferior (S4) com la del superior (S6) siguin inferiors a la temperatura de l'eix (S5) i que els gradients verticals i radials, tot i tenir un valor baix, siguin del mateix ordre.

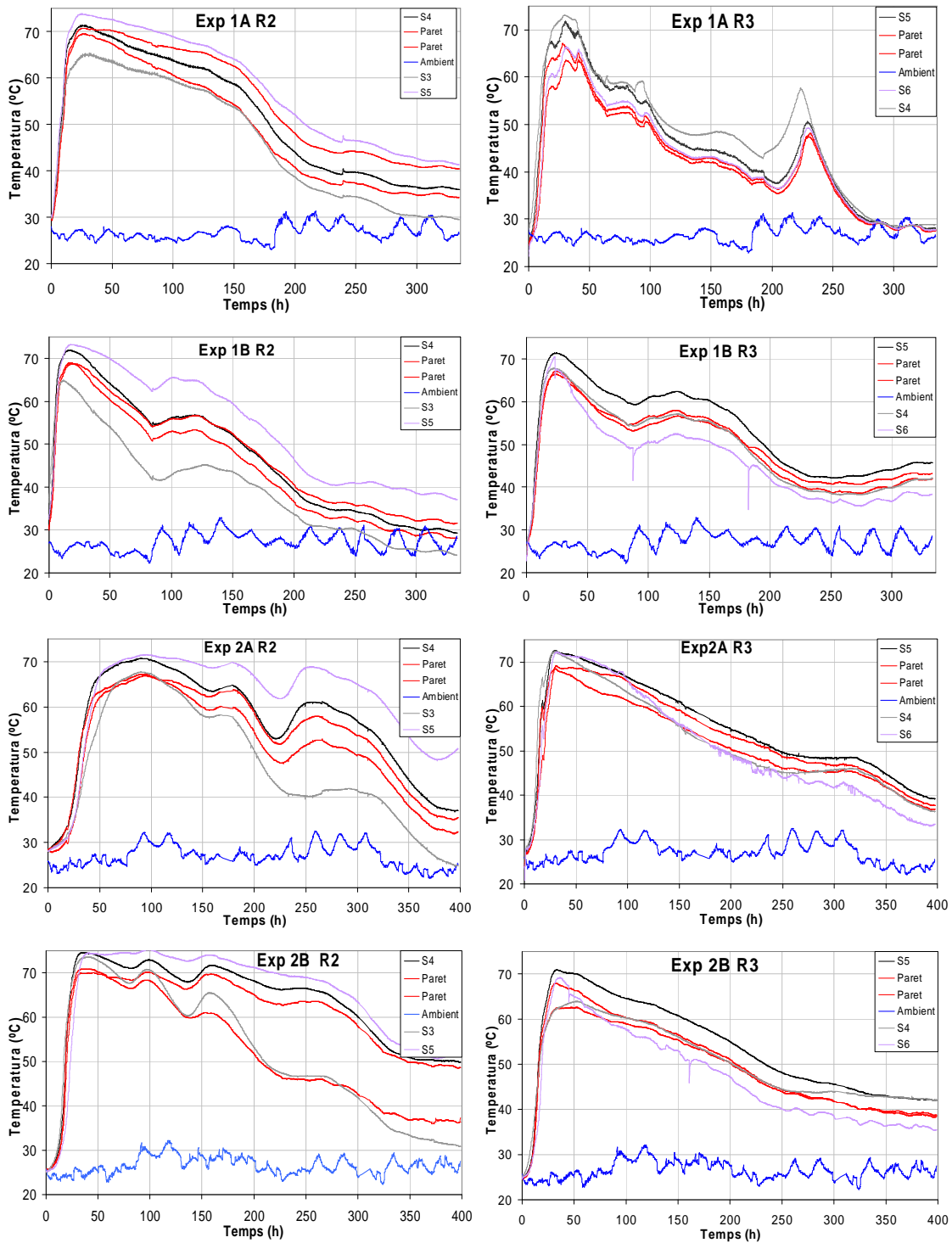


Figura 6.4 Evolució de temperatures al punt central dels reactors (línia negra) i a dos punts de la paret de PVC del reactor situats al mateix nivell i oposats diametralment (línies vermelles). Al reactor R2 les sondes laterals estaven situades a nivell de la sonda S4 i al reactor R3 a nivell de la sonda S5 (veure Fig. 5.3). Es mostra també l'evolució de temperatura del punt central de sota (línia grisa) i del damunt (línia morada).

En tots els experiments s'observa un mateix patró caracteritzat per un paral·lelisme en l'evolució de les tres temperatures, mantenint-se la temperatura central entre 5 i 8 °C superior a les laterals i podent-hi haver entre aquestes diferències de fins a 5°C. Les diferències amb les temperatures centrals inferior i superior es mantenen entre 5 i 15°C. Davant aquestes dades no es pot concloure que els gradients radials siguin sempre negligibles respecte al gradient axial, però el fet que els materials en compostatge siguin en general mal conductors tèrmics i que el principal mecanisme de transport energètic dins el reactor sigui el transport convectiu de calor latent, deixa en una importància secundària el transport conductiu i la influència dels gradients tèrmics. La poca rellevància del transport conductiu ja s'ha detectat en l'anàlisi de sensibilitat respecte a la conductivitat tèrmica (veure apartat 4.6).

Algunes de les possibles causes de la forta asimetria radial observada al reactor R2 en els experiments 1A i 2B són:

- Heterogeneïtat en el material utilitzat.
- Degoteig asimètric de les condensacions formades a la tapa del reactor.
- Formació asimètrica de vies d'aireig entre el material i la paret del reactor.

Es pot concloure que la hipòtesi de simetria radial és admissible sempre i quant es tingui especial cura en mantenir un material distribuït homogèniament i que el nivell d'aïllament dels reactors sigui com a mínim el dels reactors utilitzats ($U=1\text{W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$). En qualsevol cas, però, és necessari comprovar experimentalment que les condicions de simetria es verifiquen.

6.3.2 Uniformitat de temperatura al plenum superior

Durant l'operació dels reactors en l'experiment 1B s'observà, cada cop que s'obrien per extreure'n mostres, que tant la superfície interna de la tapa com la paret lateral del plenum superior estaven recoberts d'una làmina d'aigua de condensació que ocasionava un fort degoteig sobre la capa superior del material, de manera que els 2-3 cm superiors de la massa presentaven sempre una humitat molt superior a la resta. No estava clar si la condensació es produïa només sobre la paret lateral i sostre, i llavors degotava sobre el material en compostatge, o bé la condensació ja es produïa també quan l'aire travessava la capa superior del material. La qüestió pren rellevància quan es vol modelitzar el fenomen. En el primer cas s'hauria de considerar una temperatura de l'aire del plenum superior diferent a la de sortida de l'aire del material, indicant que les pèrdues d'escalfor per les parets del plenum no són negligibles. En el segon cas seria suficient una sola temperatura per l'aire del plenum superior i de l'aire al travessar la darrera capa de material.

En els experiments 2A i 2B s'introduí un sensor addicional de temperatura a la cara interna de la tapa (veure Fig. 5.3), separat uns 3 mm de la superfície, a fi de mesurar la temperatura de l'aire. A les figures 6.5 i 6.6 es mostra l'evolució de les temperatures registrades.

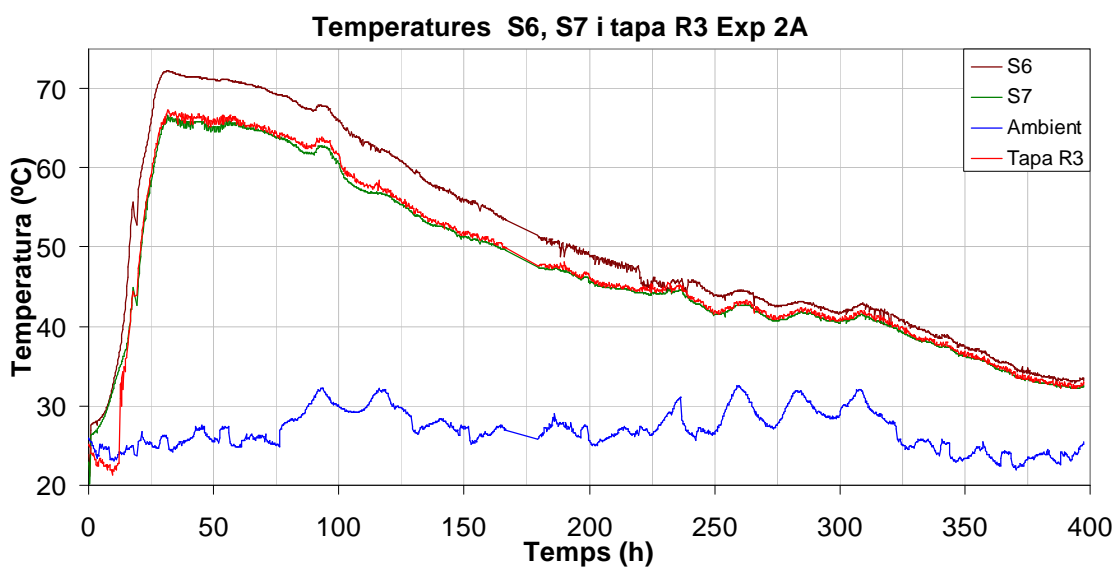
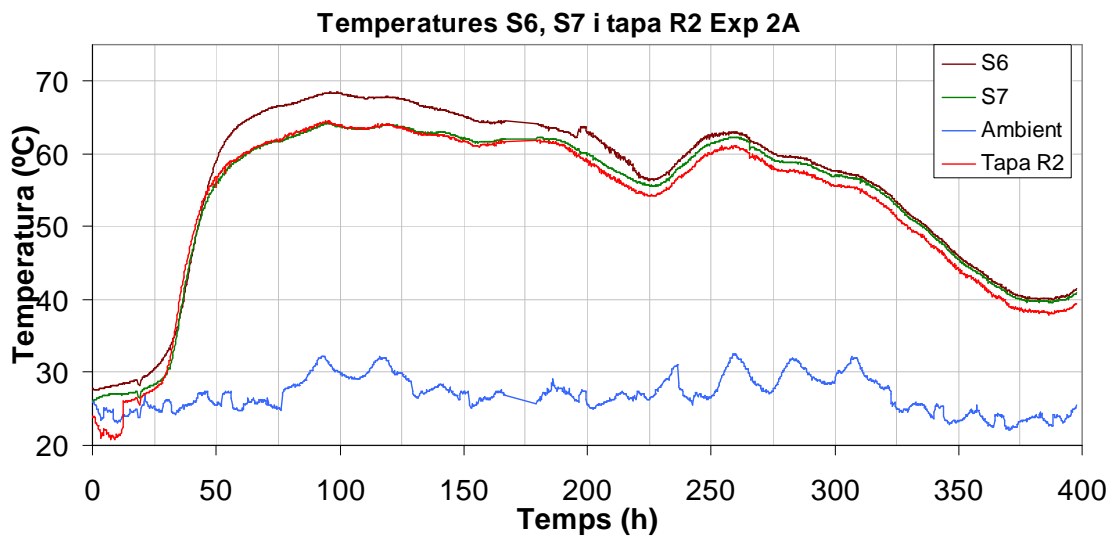
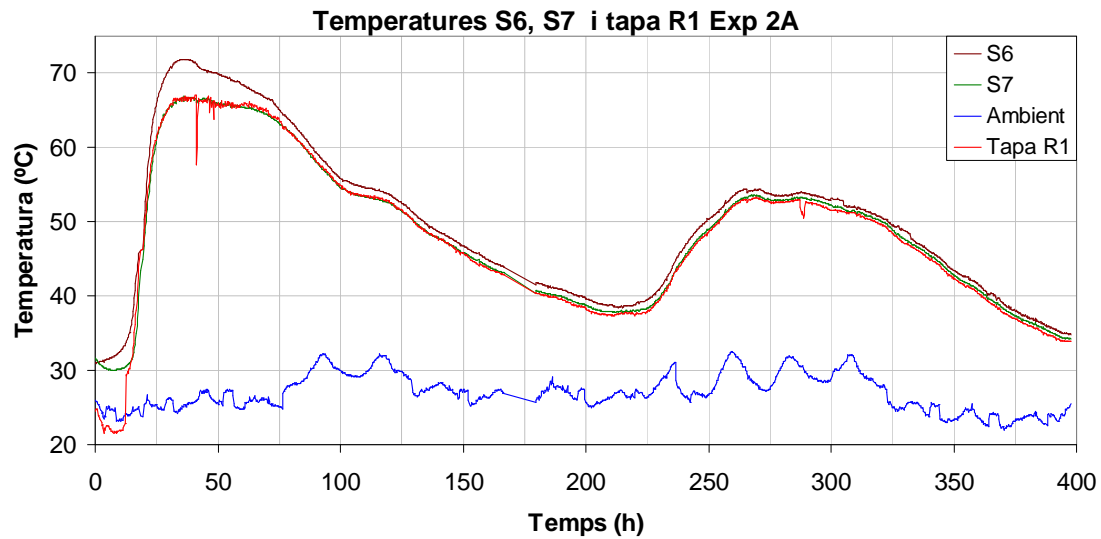


Figura 6.5. Evolució de les temperatures de les sondes superiors (S6 i S7) i de la sonda de la tapa en els tres reactors de l'experiment 2A. Tal i com s'aprecia a les gràfiques, les sondes de les tapes s'introduïren a $t=12$ h, abans registraven la temperatura ambient.

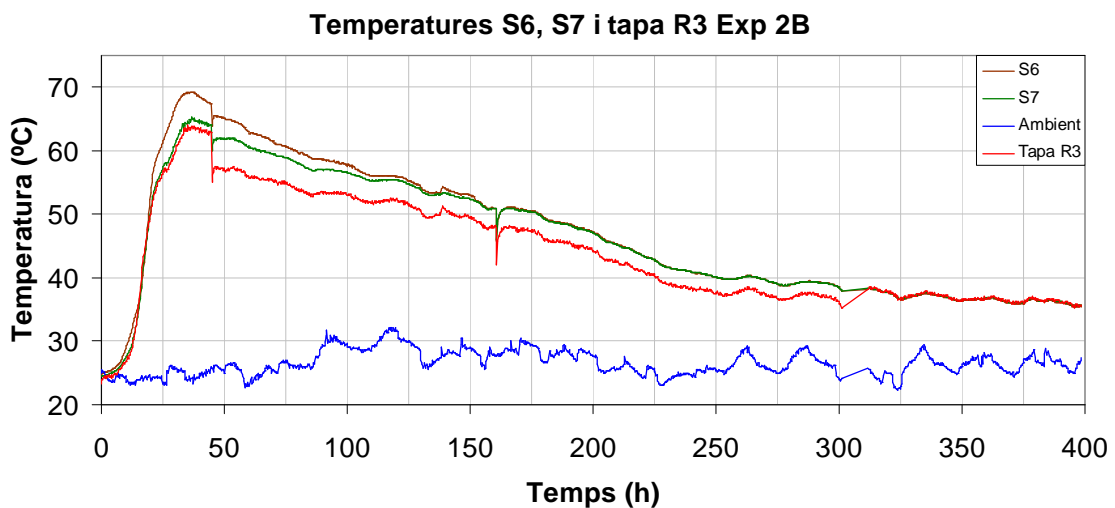
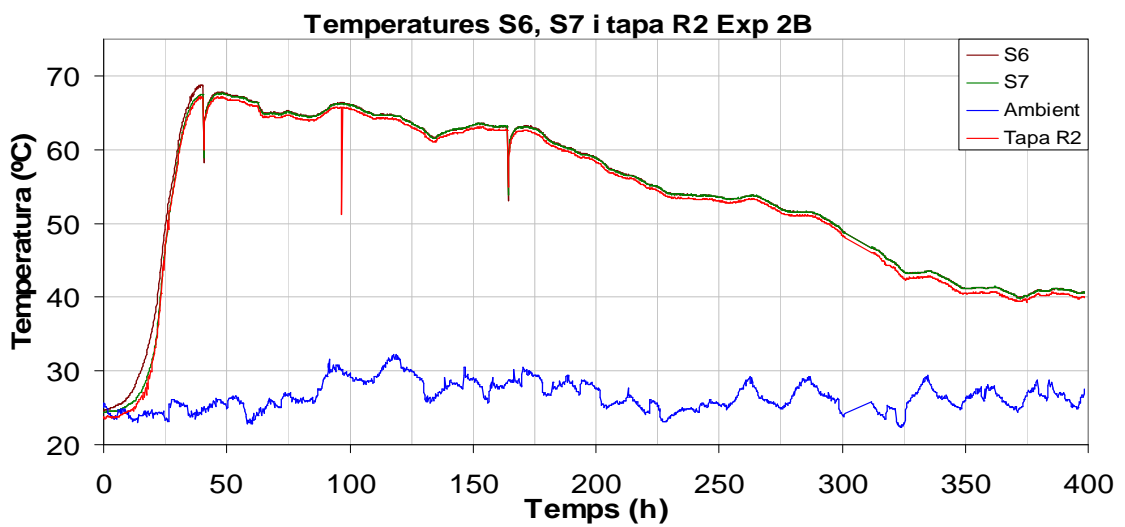
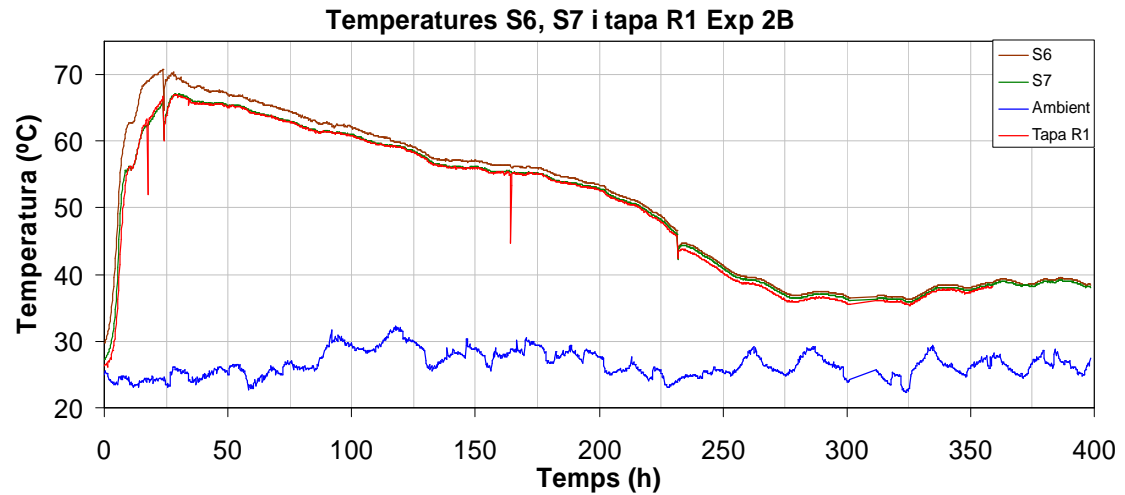


Figura 6.6 Evolució de les temperatures de les sondes superiors (S6 i S7) i de la sonda de la tapa en els tres reactors de l'experiment 2B. Les davallades puntuals de temperatura de la sonda de la tapa corresponen als instants d'obertura dels reactors per extreure'n mostres. Al reactor R3 la temperatura registrada per la sonda de la tapa és clarament inferior a la de la sonda S7 a partir de l'obertura del reactor a $t=45 h$, possiblement a causa d'una estirada accidental del cable de la sonda que la va endinsar al material aïllant de la tapa fins que en $t=312 h$ es va tornar a col·locar a lloc.

S'observa la plena coincidència de les temperatures de la sonda de la tapa i de la sonda superior S7. Durant les primeres 24 hores la temperatura de la sonda S7 és en alguns casos lleugerament superior a la del sensor de la tapa. Això és degut a que la sonda S7 va quedar fora de la massa del material transcorregut aquest temps per l'assentament progressiu del material. En tots els casos es verifica $T_{S6} > T_{S7}$, és a dir, el nucli calent del reactor queda dins la massa, i és d'esperar que el flux d'aire que travessa la capa superior del material hi condensi parcialment. A efectes de modelització cal doncs admetre que l'aire humit travessa la darrera capa de material i en el plenum superior, que es pot considerar com un volum de mescla completa, es refreda per dissipació d'escalfor a través de la paret condensant l'excés d'humitat. Els condensats cauen sobre el material i refreden la capa superior.

6.3.3 Evolució de la distribució de temperatures

Consideracions generals respecte a l'evolució de temperatures mesurades. A les figures 6.7 i 6.8 es mostren les temperatures registrades en els tres reactors en totes les càrregues efectuades. En tots els casos s'observa un patró similar, caracteritzat per una ràpida pujada de temperatures fins a 70-75°C en les primeres 24 h de procés i tot seguit inici d'una davallada més o menys accentuada, en algunes ocasions amb una clara repuntada, fins a tornar progressivament a temperatures lleugerament superiors a l'ambiental. La temperatura més elevada és, en tots els experiments, la registrada per la sonda S5 (Figs. 5.3 i 5.4), la més baixa la registrada per la sonda S1, que gairebé mai supera els 40°C. Les evolucions de les sondes S1, S2, S3, S4 i S5 mantenen un ordre de temperatura creixent ($T_{S1} < T_{S2} < T_{S3} < T_{S4} < T_{S5}$) i mostren un cert paral·lelisme i equidistància entre elles. Per contra, les temperatures registrades per les sondes S6 i S7, que es mantenen entre les registrades per les sondes S3 i S5, al principi difereixen ($T_{S6} > T_{S7}$), però transcorregut un cert temps de procés ($t=50 - 150 h$) tendeixen a igualar-se. Aquest fet s'explica tenint present que, degut a l'assentament del material, la sonda S7 queda al descobert i mesura la temperatura del gas del plenum superior, mentre que la sonda S6 no queda fora del material fins transcorregut molt més temps.

Malgrat aquests trets generals comuns hi ha marcades diferències en l'evolució de cada reactor. Aquestes diferències es mostren fins i tot entre la càrrega A i la B en cada reactor. Tal com s'ha exposat a l'apartat 5.6 (Capítol 5), a les càrregues A i B d'un reactor en un experiment se'ls suposa la mateixa composició del material en compostatge (Taules 5.7 i 5.8). Tanmateix, les diferències en l'evolució de les temperatures són evidents. Així, en l'experiment 1 el reactor R1 (Fig. 6.7) presenta un segon màxim de temperatures en $t=100 h$ en la càrrega A, mentre que en la càrrega B el màxim s'ha retardat fins a $t=124 h$ i en $t=100 h$ s'estava just al mínim. El reactor R2 no presenta el segon màxim de temperatures en la càrrega A, però sí que el presenta en la B en $t=100 h$. El reactor R3 presenta el segon màxim en les dues càrregues (A i B), però mentre en la càrrega A apareix en $t=225 h$ i de manera molt pronunciada, en la càrrega B apareix en $t=125 h$ i té una forma molt poc pronunciada. Diferències similars s'aprecien entre les càrregues A i B de l'experiment 2 (Fig. 6.8). Així, mentre que al reactor R1 el segon màxim apareix entorn $t=275 h$ després d'un mínim a $t=225 h$ en la càrrega A, a la càrrega B el segon màxim és gairebé inapreciable i apareix tot just en $t=375 h$. El reactor R2 presenta el segon màxim en $t=250 h$, després d'una evolució molt plana en l'etapa termòfila, i s'inicia una nova repuntada de temperatura en $t=375 h$, mentre que en la càrrega B no hi ha segon màxim però sí la repuntada final. Per contra, les evolucions del reactor R3, clarament sense segon màxim, són relativament similars.

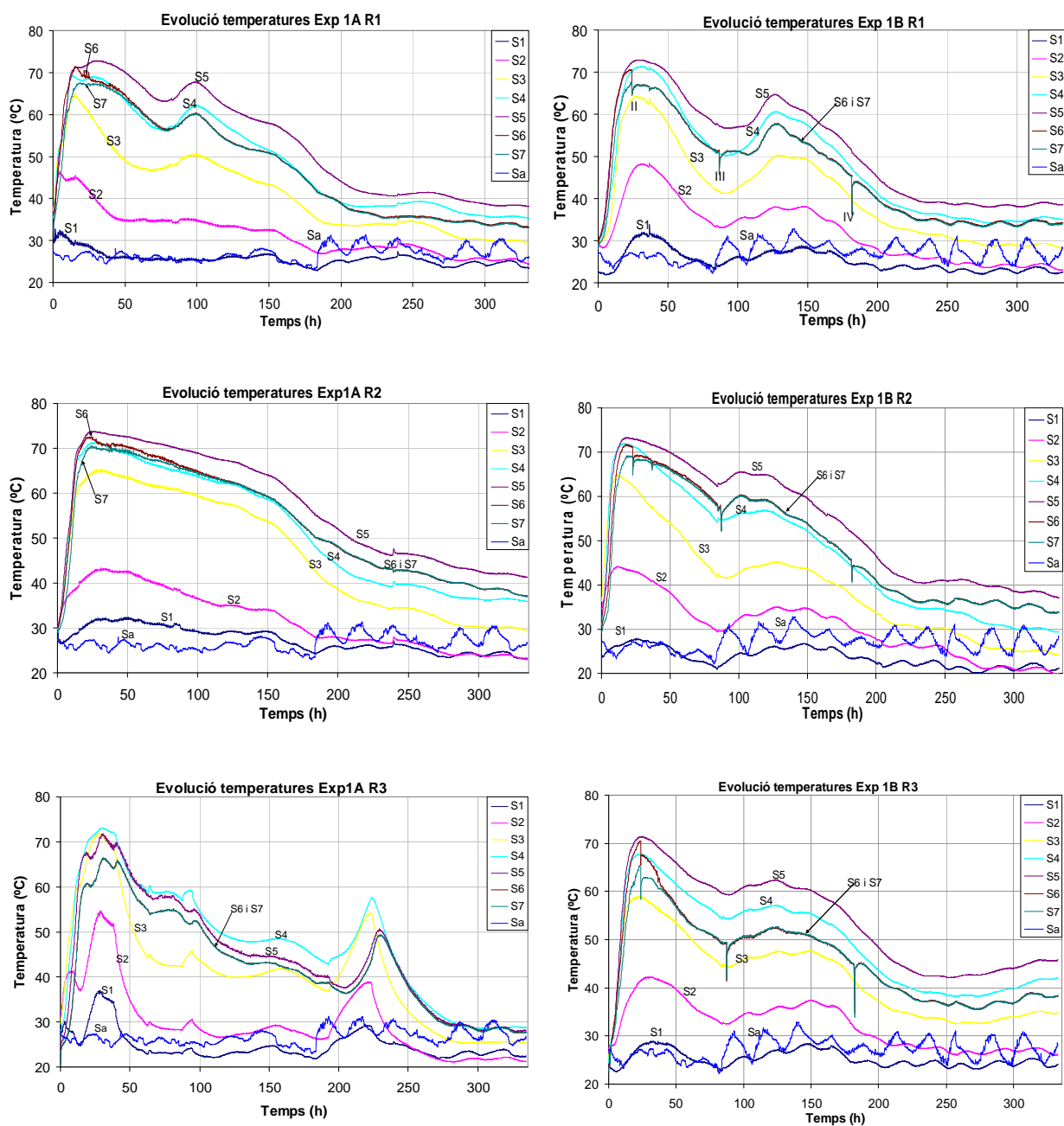


Figura 6.7. Evolució de la temperatura als reactors R1, R2 i R3 dels experiments 1A i 1B. La posició de les sondes de temperatura a l'eix dels reactors és la definida a les Figs. 5.3 i 5.4A. La posició de la sonda que mesurava la temperatura de l'ambient (Sa) s'indica a la Fig. 5.2. Les davallades puntuals de temperatura que s'observen a les sondes S6 i S7 en els reactors de la càrrega B corresponen als instants d'obertura del reactor per presa de mostres (mostres II, III i IV, Taula 5.10).

La no superposició dels perfils de temperatura de cada reactor en les càrregues A i B cal atribuir-la a defectes en la fase experimental, entre els que es poden mencionar:

a) La composició del material en compostatge pot diferir entre la càrrega A i B. Tot i que segons les dades donades a les Taules 5.7 i 5.8 la composició de les dues càrregues és la mateixa, aquesta informació no reproduïx acuradament la realitat. En efecte, les

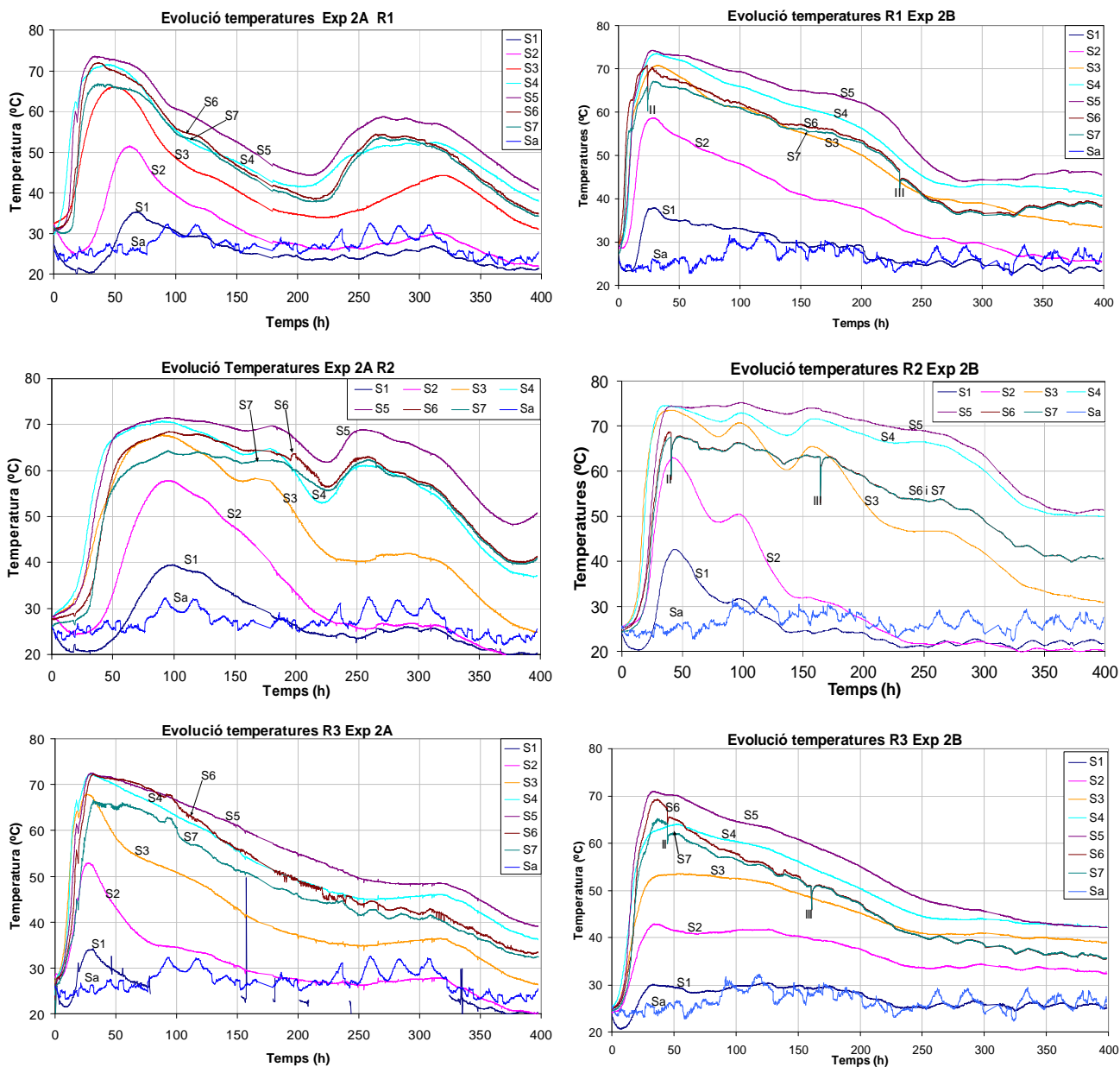


Figura 6.8. Evolució de la temperatura als reactors R1, R2 i R3 dels experiments 2A i 2B. La posició de les sondes de temperatura a l'eix dels reactors és la definida a les Figs. 5.3 i 5.4A. La posició de la sonda que mesurava la temperatura de l'ambient (Sa) s'indica a la Fig. 5.2. Les davallades puntuals de temperatura que s'observen a les sondes S6 i S7 en els reactors de la càrrega B corresponen als instants d'obertura del reactor per presa de mostres (mostres II i III, Taula 5.10).

mesclades es realitzaren acuradament en les proporcions d'estructurant, fems, FORM i fangs d'EDAR reflectides a la Taula 5.7, però tant els fems com la FORM i els fangs d'EDAR s'anaven a recollir a la granja, planta de compostatge i EDAR, respectivament, el mateix dia en que es carregaven els reactors, i la composició del material recollit podia variar d'una càrrega a la següent. La manera adient d'operar per evitar aquesta incertesa hauria estat preparar un sol cop les tres mesclades (corresponents als reactors R1, R2 i R3) i conservar en congelador tot el material necessari per fer la càrrega B dels reactors.

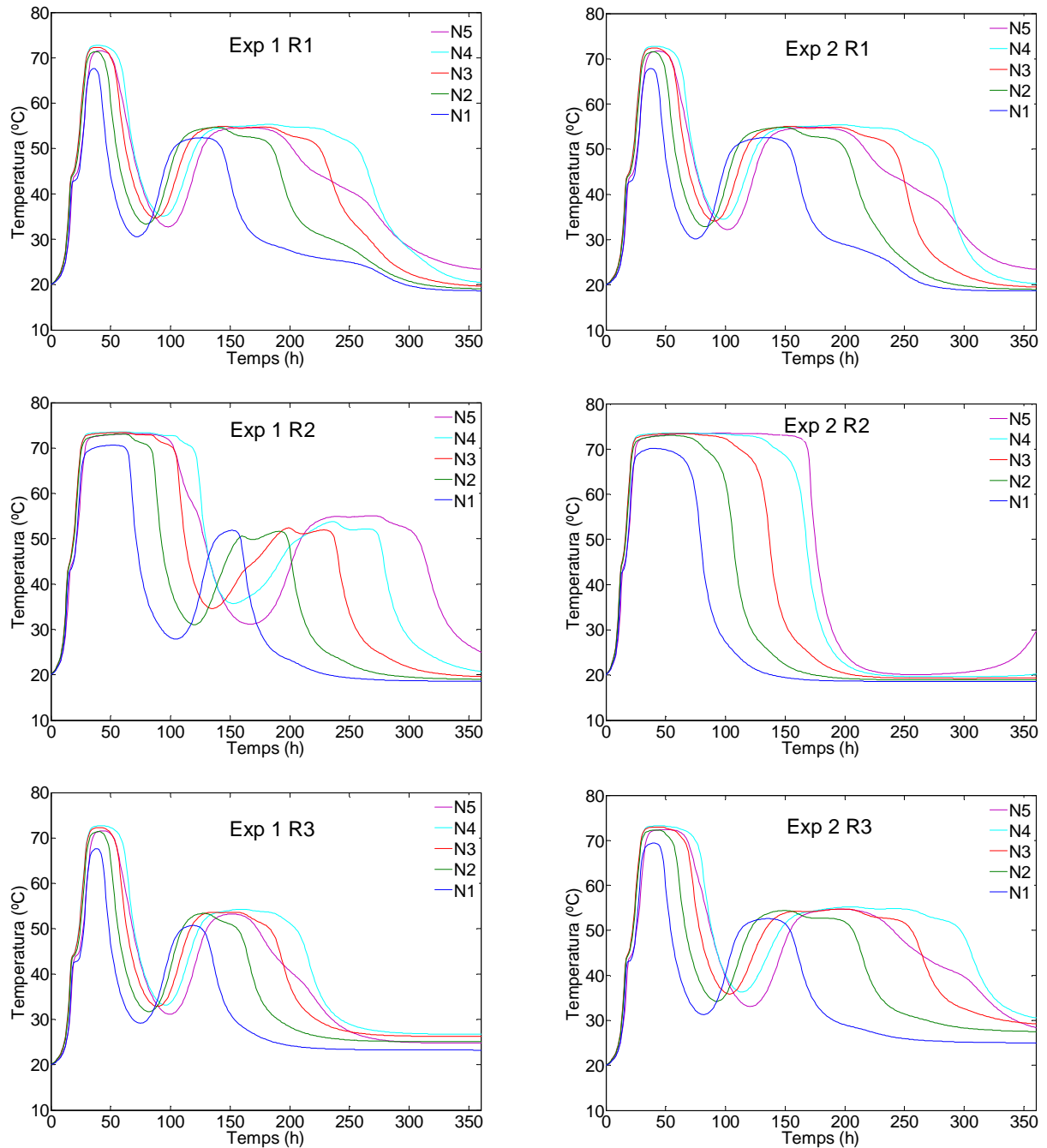


Figura 6.9. Simulació de l'evolució de les temperatures als diferents reactors utilitzant el model físic 1D acoblat al model biològic adaptat de Solé-Mauri (2006). El vector d'estat inicial es determina, en cada cas, a partir de les composicions de la mescla i massa total donats a la Taula 5.8. Simulacions fetes amb els valors de referència dels paràmetres.

b) La humitat relativa de l'aire insuflat als reactors no era constant degut a la purga cíclica de condensats del calderí d'acumulació d'aire pressuritzat que subministrava l'aire al laboratori. En l'experiment 2 es muntà un sensor d'humitat relativa al tub d'insuflar l'aire als reactors (Fig. 5.2). Les mesures registrades mostraren una forta oscil·lació de la humitat entre el 40 i el 80%. Un disseny acurat del dispositiu experimental hauria d'haver incorporat un sistema humectant per garantir la uniformitat en el contingut d'humitat de l'aire d'entrada als reactors.

Consideracions sobre els resultats de simulació de l'evolució de la temperatura. A l'apartat 3.4 es mostren els patrons de l'evolució de temperatura acoblant el model base de BME a dos models biològics diferents, el de J. Kaiser (1996) i el adaptat de Solé-Mauri (2006). Els dos patrons difereixen considerablement (Figs. 3.13A i 3.14A), a més a més els patrons obtinguts d'evolució de temperatura del model 1D guarden una forta semblança amb el model base (comparar Figs. 3.14A i 6.9). Aquests fets posen en evidència que el model biològic determina la forma global de l'evolució de temperatures, mentre que el model físic permet explicar alguns detalls.

Una de les diferències que s'observa al comparar l'evolució simulada de temperatures (Fig. 6.9) amb les mesures experimentalment (Figs. 6.7 i 6.8, experiment 1A, 1B i 2A), reactor R1) és que les pujades i baixades de temperatura simulades són molt més ràpides que les mesures. Així, en la simulació, la davallada de temperatures després d'haver assolit un màxim arriba a valors propers a la temperatura ambient en només 50-60 h, mentre que la davallada mesurada després del segon màxim és més suau i amb la durada del seguiment experimental només s'arriba a refredar fins a 10-20 °C per sobre de la temperatura ambient. Aquest fet cal atribuir-lo a que el model biològic només contempla tres categories de substrat assimilables directament pels microorganismes (S_{LC} , S_{CN} i S_{RC} , veure Taules C3-A2.1 i C3-A2.3) i això provoca que, a l'esgotar-se, hi hagi un cessament abrupte de l'activitat biològica. A la realitat (Figs. 6.7 i 6.8) l'activitat biològica s'atura gradualment a mesura que els substrats que queden són més difícils de degradar. A la mateixa conclusió s'arriba al comparar les corbes de concentració d'oxigen i CO_2 simulades (Fig. 6.12) amb les mesures (Figs. 6.10 i 6.11).

Un altre dels trets no reproduïts pel model és el refredament que s'observa durant les primeres hores a la capa inferior del material. Aquest fenomen s'aprecia molt poc als reactors dels experiments 1A i 1B (sonda S1, Fig. 6.7) però apareix amb claredat als reactors dels experiments 2A i 2B (sondes S1 i S2, Fig 6.8). No està clara la raó d'això, però és possible que estigui relacionat amb la velocitat de desenvolupament inicial de l'activitat microbiana. En efecte, a tots els reactors dels experiments 1A i 1B hi ha un ascens ràpid de la temperatura, sense fase *lag* inicial, mentre que en els dels experiments 2A i 2B hi ha una petita fase *lag*, observable clarament als reactors R1 i R2, Exp 2A, que alhora són els que registren una davallada més pronunciada de temperatura en les sondes S1 i S2. El retard en el creixement microbià i la conseqüent producció d'escalfor permet així el inici del refredament evaporatiu al nivell inferior. Amb la informació experimental disponible no és possible discernir la causa del retard en el creixement microbià, avalat també pel retard observat en el consum d'oxigen (Fig. 6.11, Exp2A, R1 i R2), però és possible que la diferència en el sistema de control de l'aireig hi estigui relacionat. Un aireig irregular, amb pujades i baixades del cabal, podria reduir la fase *lag* respecte a un aireig a cabal constant proporcionat pels cabalímetres tèrmics. Cal recordar (Fig. 4.17) que el model preveu, en absència de creixement microbià, una davallada de temperatura al nivell inferior del reactor (N1) entre 1.5 i 5 °C segons la humitat relativa de l'aire insuflat sigui del 70% o del 40%, respectivament, i que aquest és el rang de la davallada registrada per les sondes S1 i S2 (Fig. 6.8).

Aspectes qualitius de l'evolució de temperatures que reproduceix el model. Malgrat les diferències entre valors experimentals i la predicció de l'evolució de temperatures als diferents nivells, hi ha alguns detalls que sí són predits pel model:

a) *Esglaonament de les temperatures a diferents nivells del reactor.* L'augment de temperatures que s'observa als reactors entre les sondes S1 i S5 és reproduït pel model, excepte durant l'etapa de reescalfament. En aquesta etapa el model biològic provoca un creixement precipitat de la població de fongs mesòfils a les capes inferiors que en fan pujar prematurament la temperatura.

b) *Temperatures més baixes als nivells superiors.* Les sondes S6 i S7 registraren temperatures inferiors a la de la sonda S5. Això és degut a que la dissipació d'escalfor a través de les parets del plenum superior provoca la condensació del vapor, que degoteja sobre la capa superior de material i la refreda. En els reactors la sonda S7 emergia de la massa degut al seu assentament i mesurava la temperatura del gas del plenum superior (veure apartat 6.4) mentre que la temperatura registrada per la sonda S6, representativa de la de la capa superior, estava sempre més freda que la de la sonda del dessota (S5). Tot i les simplificacions assumides en el model (apartat 6.4), les simulacions reproduïxen la temperatura més freda a la capa superior. Tanmateix el model no pot predir el refredament de la sonda S6, tal i com es va registrar experimentalment degut a no incorporar ni el moviment de lixiviats ni el moviment de la frontera superior del material. A la realitat la sonda S6 es refreda tant per l'arribada de condensats del plenum superior com per la disminució progressiva de la capa de material que té al damunt a mesura que s'assenta la columna.

c) *Influència de la composició del material en l'evolució de temperatura.* Totes les simulacions que es presenten a la Fig. 6.9 s'han fet utilitzant els valor de referència dels paràmetres físics i biològics i en cadascuna s'ha utilitzat la composició inicial del material i la massa total de la càrrega donats a la Taula 5.8. Els patrons d'evolució de temperatura obtinguts són similars, amb l'única diferència rellevant al reactor R2, tant de l'experiment 1 com del 2. És interessant observar que el reactor R2, tant en l'experiment 2A com en el 2B, manté les temperatures termòfiles durant més temps que els altres reactors, fet atribuïble al seu contingut més elevat en greixos (Taula 5.8). Els resultats de les simulacions del reactor R2 (Fig. 6.9), malgrat els defectes ja mencionats, també prediuen una etapa termòfila més llarga i l'absència del segon reescalfament.

6.4 Evolució de les concentracions d'oxigen i CO₂

Consideracions generals sobre els resultats experimentals. A les Figs. 6.10 i 6.11 es mostren les corbes d'evolució de la concentració d'oxigen i CO₂ al gas del plenum superior de cadascun dels reactors dels experiments 1 i 2, mesurades a intervals de 45 min tal com s'ha descrit a l'apartat 5.3. Les corbes dels experiments 1A i 1B presenten un fort dentelat en comparació amb les dels experiments 2A i 2B degut al sistema d'aireig diferent utilitzat en els dos experiments. En els experiments 1A i 1B l'aireig als reactor es mesurava amb rotàmetres i es regulava amb una vàlvula manual que es deixava a una posició fixa, però les oscil·lacions cícliques de pressió en la línia de subministrament d'aire comprimit al laboratori provocaven les corresponents oscil·lacions al cabal d'aireig, tal com es comprovava amb els rotàmetres, i d'aquí el dentelat en les corbes mesurades. A l'experiment 2 es va corregir aquest inconvenient instal·lant cabalímetres tèrmics autoreguladors que subministraven un cabal d'aireig constant. En les corbes de l'experiment 2 (Fig. 6.11) ja gairebé no hi ha dentelat.

A grans trets totes les corbes presenten un patró comú caracteritzat per una davallada inicial de la concentració d'oxigen, que arriba al mínim dins les primeres 24 h, seguit d'una remuntada progressiva fins a final del procés que en alguns casos presenta un segon mínim menys pronunciat. A final de procés la concentració d'oxigen es mantenia sempre lleugerament per dessota de la concentració ambient (21%), indicant l'existència d'una activitat biològica romanent. En tots els casos la concentració de CO₂ segueix un patró gairebé simètric al de la d'oxigen.

De la comparació de l'evolució de la concentració d'oxigen amb la corresponent de temperatura, (Figs. 6.10 i 6.11 amb les Figs. 6.7 i 6.8) s'observa que els mínims en la concentració d'oxigen (màxims en la de CO₂) es corresponen sempre amb les etapes de màxima velocitat d'ascens de la temperatura. Així, el primer mínim en la concentració d'oxigen es correspon amb la fase de pujada exponencial de la temperatura, i el segon mínim s'identifica amb la remuntada de temperatura observat en la majoria de reactors. En el reactor R2 dels experiments 2A i 2B, que manté l'etapa termòfila durant més temps que els altres reactors (Fig. 6.8), també es manté la concentració d'oxigen a nivells baixos durant més temps (Fig. 6.11). Això és degut a que l'activitat microbiana té un consum d'oxigen i genera l'escalfor que fa pujar la temperatura del medi. En tots els casos l'evolució de les corbes de concentració d'oxigen i CO₂ segueix una tendència suau, a excepció del mínim inicial que marca una aturada abrupta de l'activitat microbiana quan s'assoleixen els 70°C.

Comparació entre les corbes experimentals i les simulades. A la Fig 6.12 es presenten els resultats de simulació, segons el model 1D, de les concentracions d'oxigen i CO₂ al plenum superior utilitzant els valors de referència dels paràmetres i les dades de composició de la mescla de la Taula 5.8. Els resultats obtinguts pels reactors R1 i R3 no mostraven diferències substancials entre els experiments 1 i 2 i per aquesta raó a la Fig. 6.12 no s'hi presenten les simulacions corresponents a als reactors R1 i R3 de l'experiment 2. Al seu lloc s'hi mostren les simulacions dels reactors R1 i R3 de l'experiment 1 fetes amb uns valors més baixos que els de referència dels coeficients de transferència de massa per l'oxigen i el CO₂ (valor utilitzat pels dos coeficients és de $10^{-7} \text{ kg}\cdot\text{h}^{-1}\cdot\text{Pa}^{-1}\cdot\text{kg}_{\text{TM}}^{-1}$, mentre que el valor de referència és $10^{-6} \text{ kg}\cdot\text{h}^{-1}\cdot\text{Pa}^{-1}\cdot\text{kg}_{\text{TM}}^{-1}$). Les simulacions amb aquests valors reproduïen millor les corbes registrades en la mesura en que el mínim de la concentració d'oxigen se situa entorn el 10%, similar als valors mesurats. En general les simulacions reproduïen, en termes qualitius, les tendències observades experimentalment. Així, la davallada inicial en $t=24 \text{ h}$ de la concentració d'oxigen és reproduïda en tots els casos, però, mentre que el model, amb els valors de referència de x_{klo2} i x_{klo2} , preveu una davallada fins al 3%, la davallada mesurada arriba només al 10% en la majoria de situacions. Només en els reactors R3 de l'experiment 1A i R1 de l'experiment 2B es mesuraren concentracions d'oxigen inferiors al 5%. El segon mínim, que apareix en totes les simulacions excepte a l'Exp2 R2, se situa entorn el 15% i coincideix aproximadament amb els valors experimentals quan aquests el presenten, doncs el reactor R3 dels experiments 2A i 2B no presenten segon mínim. La simetria entre les evolucions de la concentració d'oxigen i CO₂ és també reproduïda pel model.

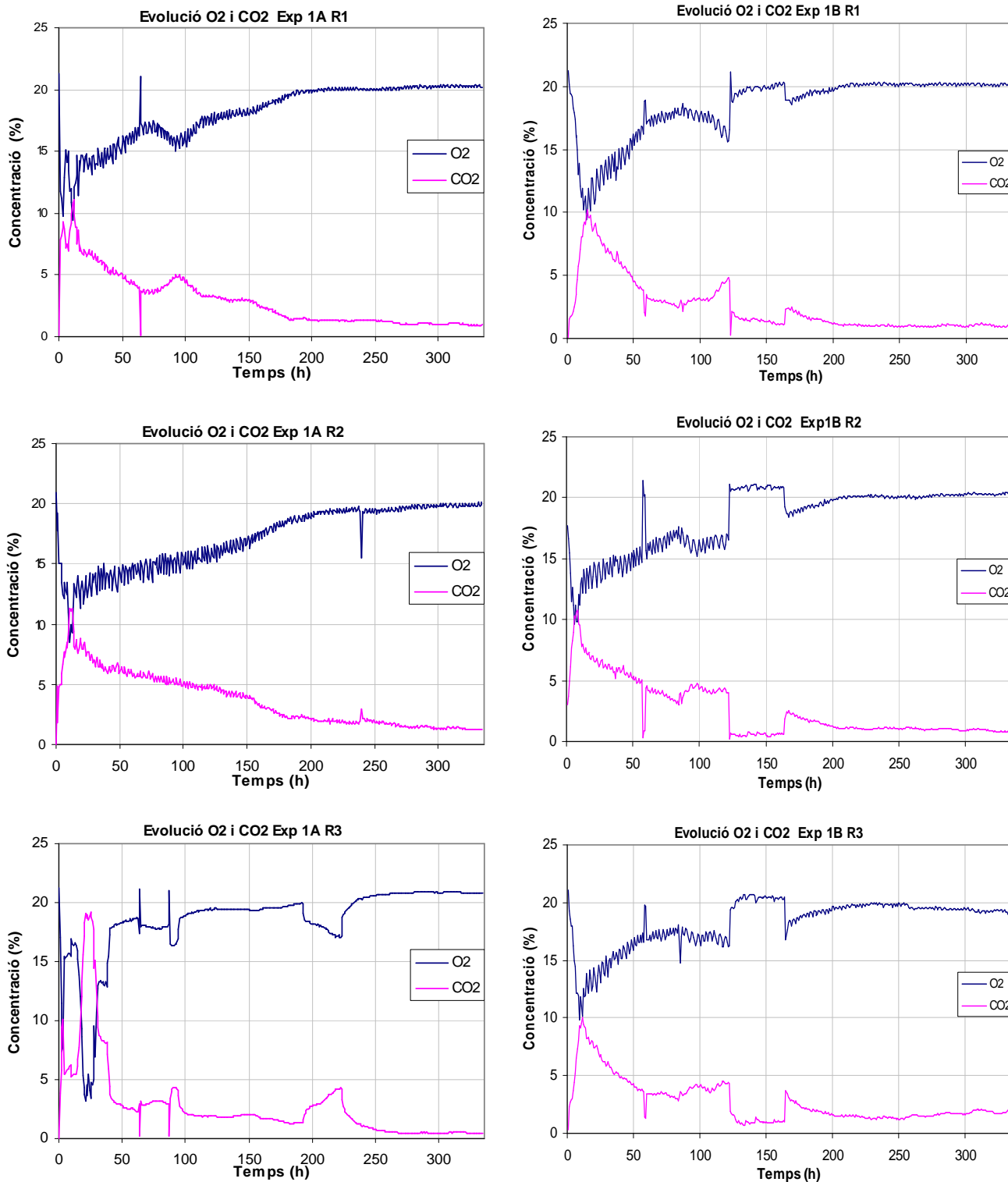


Figura 6.10. Evolució de les concentracions d'oxigen i CO₂ al plenum superior en els reactors dels experiments 1A i 1B. Les puntes en $t=62.25$ h, Exp 1A R1, foren causades per l'assaig de resistència al pas de l'aire. En $t=239.75$ h, Exp 1A R2, es produí una aturada de l'aireig per manteniment del sistema. Les dues puntes que apareixen al reactor R3, Exp 1A, són degudes a la realització de l'assaig de resistència al pas de l'aire en l'instant que els sensors registraren les lectures. Als tres reactors de l'experiment 1B un mal funcionament provocà l'entrada d'aire exterior pel tub d'eliminació de condensats del filtre de condensació entre $t=123$ h i $t=164$ h, raó per la que la concentració d'oxigen és anormalment alta i la de CO₂ baixa en aquesta període.

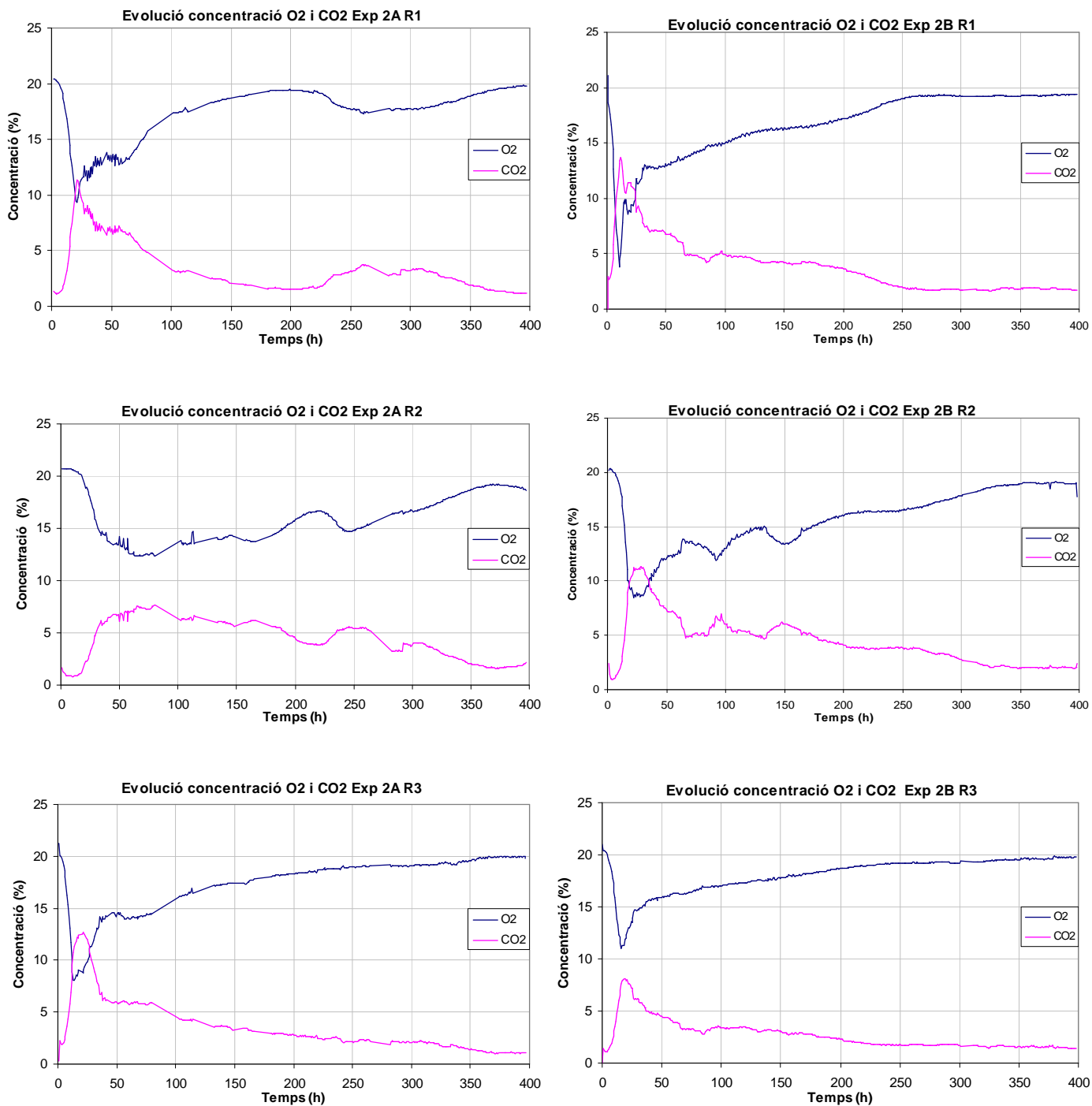


Figura 6.11. Evolució de les concentracions d'oxigen i CO₂ al plenum superior en els reactors dels experiments 2A i 2B. En els tres reactors de l'experiment 2A hi hagué els següents intervals en els que una desincronització dels temporitzadors que governaven les electrovàlvules d'aspiració dels reactors i de direcció a l'analitzador (23.7, Fig. 5.5) provocaven la mescla d'aire atmosfèric amb el gas dels reactors que aspirava l'analitzador: [42.48-46.00], [81-102], [115.25-132.75], [148.75-156.97] i [265.77-281.77].

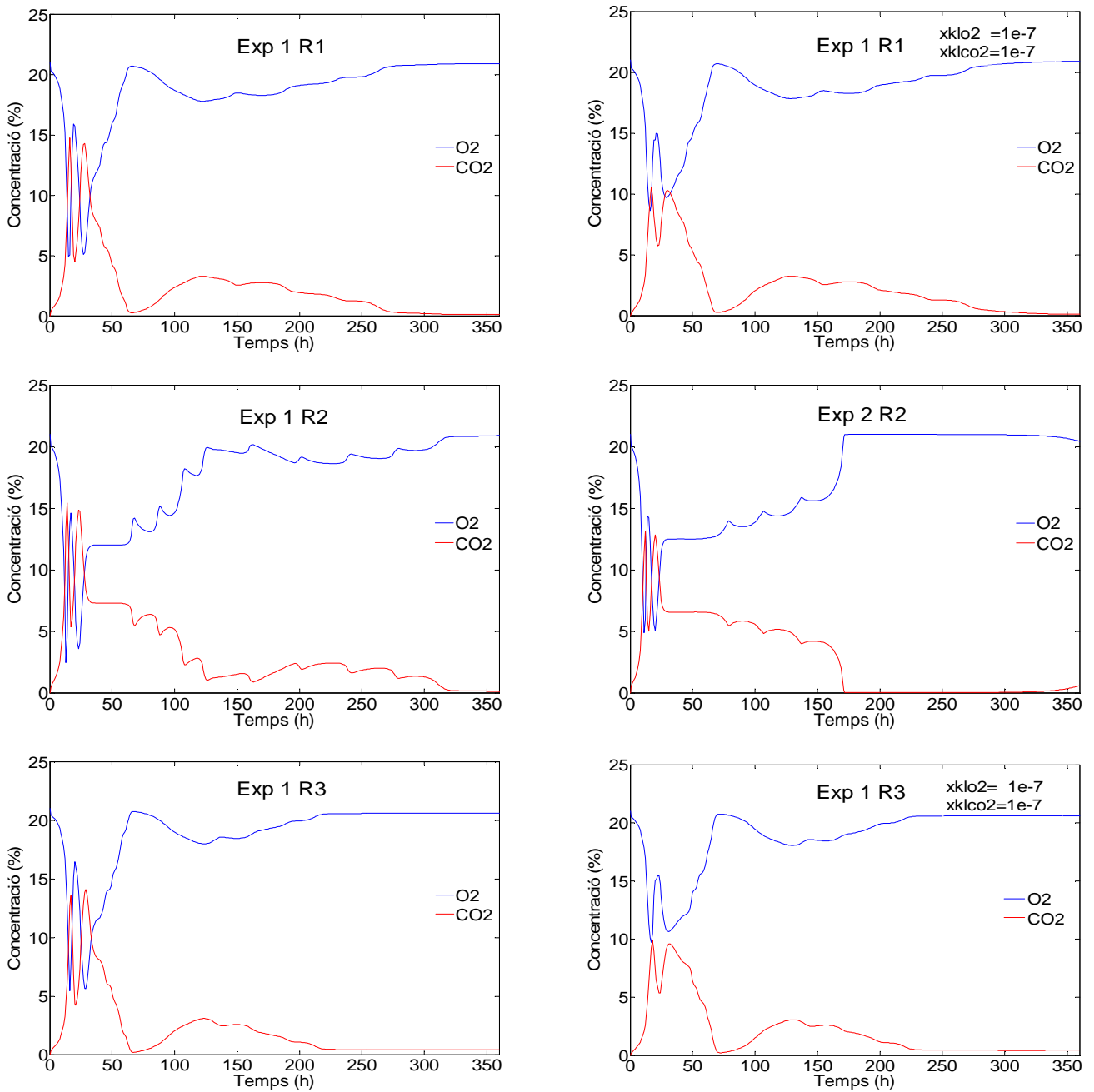


Figura 6.12. Simulacions de l'evolució de les concentracions d'oxigen i CO₂ al plenum superior dels reactors de l'experiment 1 (gràfiques de l'esquerra) i del reactor R2 de l'experiment 2 (gràfica central dreta) utilitzant els valors de referència dels paràmetres. Les simulacions usant uns valors inferiors als de referència pels coeficients de transferència de massa de l'oxigen i el CO₂ ($x_{klo2}=10^{-7}$, $x_{klco2}=10^{-7}$ kg·Pa⁻¹·h⁻¹·kg_{TM}⁻¹) proporcionen uns mínims en la concentració d'oxigen (màxims en la de CO₂) més propers als valors mesurats (Figs. 6.10 i 6.11) en els tres reactors. A la figura només es mostren les simulacions de l'experiment 1, reactors R1 i R3. En cada simulació s'han utilitzat els valors de composició de la càrrega d'acord a la Taula 5.8.

És interessant observar que, en totes les simulacions de la Fig. 6.12, el primer mínim en la concentració d'oxigen presenta una punta al centre que pot assolir valors de fins al 15% durant més de 12h. Aquesta breu remuntada és deguda a la transició de les poblacions mesòfiles cap a les termòfiles quan la pujada de temperatura atura l'activitat mesòfila. Aquesta transició s'observa en totes les simulacions de l'evolució de

temperatura (Fig. 6.9), però experimentalment només es va registrar amb claredat en el reactor R1 de l'experiment 2B. Així, en la corresponent evolució de la temperatura (R1, Exp 2B, Fig. 6.8) s'hi observa un esglaió a les temperatures registrades per les sondes S6 i S7 exactament a inici de la pujada puntual de la concentració d'oxigen en $t=10.25$ h. Es desconeix la raó per la que aquesta transició no s'observa als altres reactors i en el reactor R1 de l'experiment 2B només va ser registrat al nivell superior (S6 i S7).

6.5 Evolució del quocient respiromètric

El quocient respiromètric és la relació instantània entre els cabls molars de CO_2 produït i d'oxigen consumit. A la Fig. 6.13 es presenten les evolucions del quocient respiromètric (RQ), determinat a partir de les concentracions d'oxigen i CO_2 mesurades, als reactors de l'experiment 2. Les corresponents evolucions pels reactors de l'experiment 1 no es mostren perquè les oscil·lacions registrades en les corbes de concentració d'oxigen i CO_2 provoquen un dentelat d'una amplitud que impossibilita observar-ne els detalls, tot i que deixen entreveure una tendència general similar.

Les corbes de la Fig. 6.13 mostren trets característics comuns. Així, durant les primeres hores es registren valors elevats (fins a $RQ=4$) que cauen ràpidament fins a valors entre 0.7 i 0.8 en $t=12$ h, aproximadament. Tot seguit una repuntada fins a valors propers a $RQ=1$ en $t=24$ h seguit d'un mínim, no tan fort com l'inicial, entorn $t=75$ h. A partir d'aquest instant s'observa una tendència general a l'alça fins a situar-se per sobre la unitat a partir de $t=200$ h. Només en el reactor R2 dels experiments 2A i 2B el valor de RQ es manté a nivells inferiors al dels altres reactors i clarament inferiors a la unitat, fet explicable pel major contingut en greixos de la mescla del reactor R2 (veure taula 5.8).

En general l'evolució de RQ no és influenciada directament pel nivell d'activitat microbiana del sistema, però sí per la composició del substrat que es degrada a cada instant. El model biològic contempla tres categories de substrat que poden ser degradats directament pels microorganismes: greixos (S_{LC}), proteïnes (S_{CN}) i fibra (S_{RC}), la composició estequiomètrica dels quals s'indica a la Taula C3-A2.1. Els corresponents valors del quocient respiromètric, determinats a partir de l'estequiometria de la reacció d'oxidació, són: $RQ_{SLC}=0.72$, $RQ_{SCN}=0.97$ i $RQ_{SRC}=1.00$, respectivament. La tendència a l'alça en l'evolució de RQ a partir de $t=75$ h es pot interpretar com una seqüència en la degradació dels substrats. Així, els greixos es degradarien primer, seguit de les proteïnes i quedant pel final la degradació de la fibra, sempre i quan les poblacions capaces de la degradació hi siguin presents.

Comparació de les mesures experimentals amb resultats de simulació. A la Fig. 6.14 es presenten les simulacions de l'evolució de RQ en els reactors de l'experiment 2. Les simulacions reproduïxen els elevats valors inicials de RQ. Això s'ha aconseguit admetent que en l'instant inicial la composició de la fase gasosa del reactor s'havia enrarit i contenia un 9% d'oxigen, un 12% de CO_2 i un 79% de N_2 . Aquest fet és perfectament assumible tenint present que mentre durava l'operació de càrrega dels reactors, 1.5 a 2 h per cadascun, no hi havia aireig, el procés s'iniciava consumint l'oxigen i substituint-lo per CO_2 . En aquestes condicions augmentava la quantitat de CO_2 dissolt fins que la pujada de temperatures el desabsorbia, provocant un cabal molar de CO_2 superior al que s'estava produint per reacció biològica i que quedava reflectit en els elevats valors de RQ inicials.

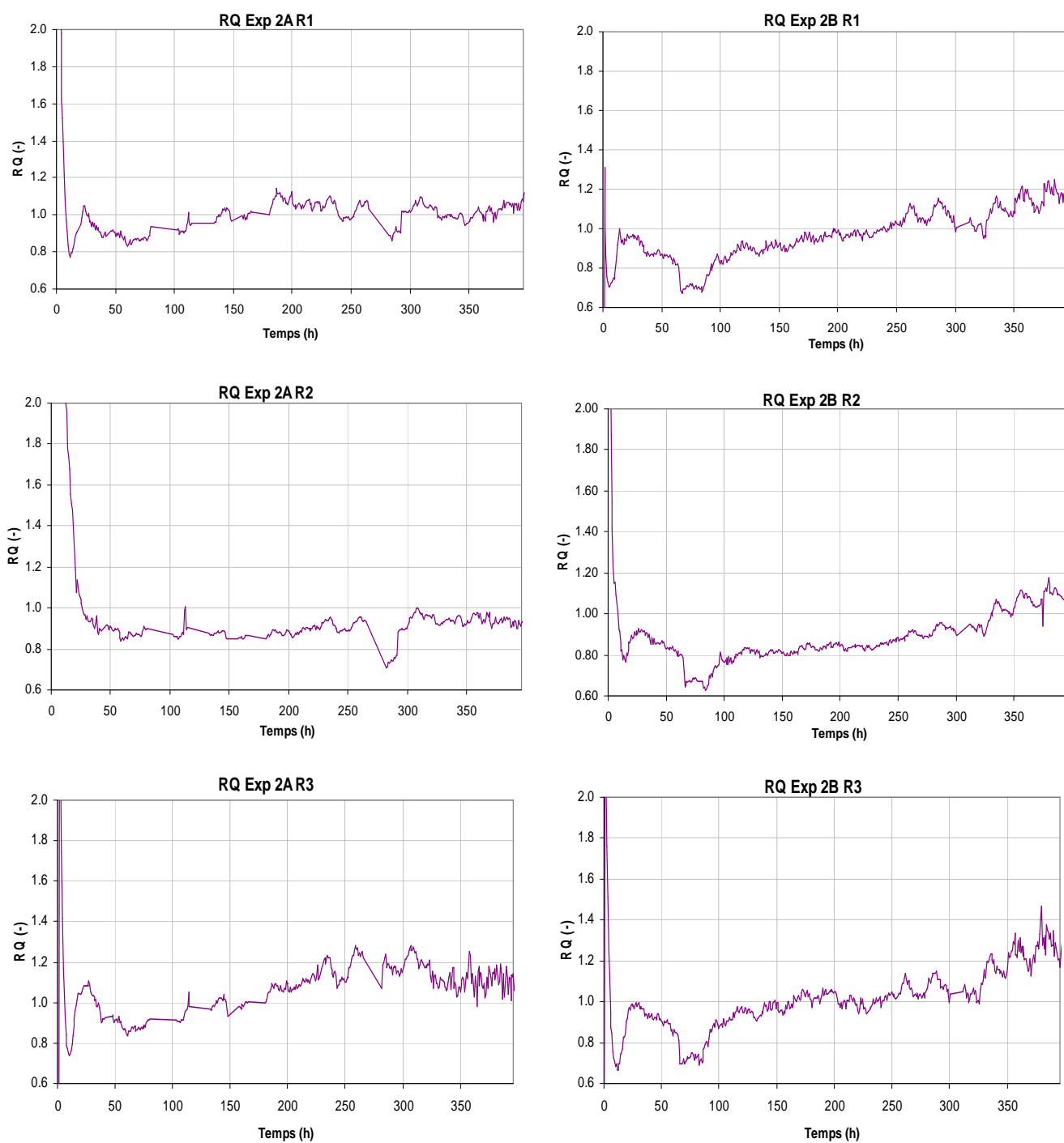


Figura 6.13. Evolució del quocient respiromètric en els reactors dels experiments 2A i 2B. Els valors de RQ en els intervals de mesura defectuosa de les concentracions d'oxigen i CO_2 , mencionats a la llegenda de la Fig. 6.11, són representats per una línia recta i no tenen sentit físic.

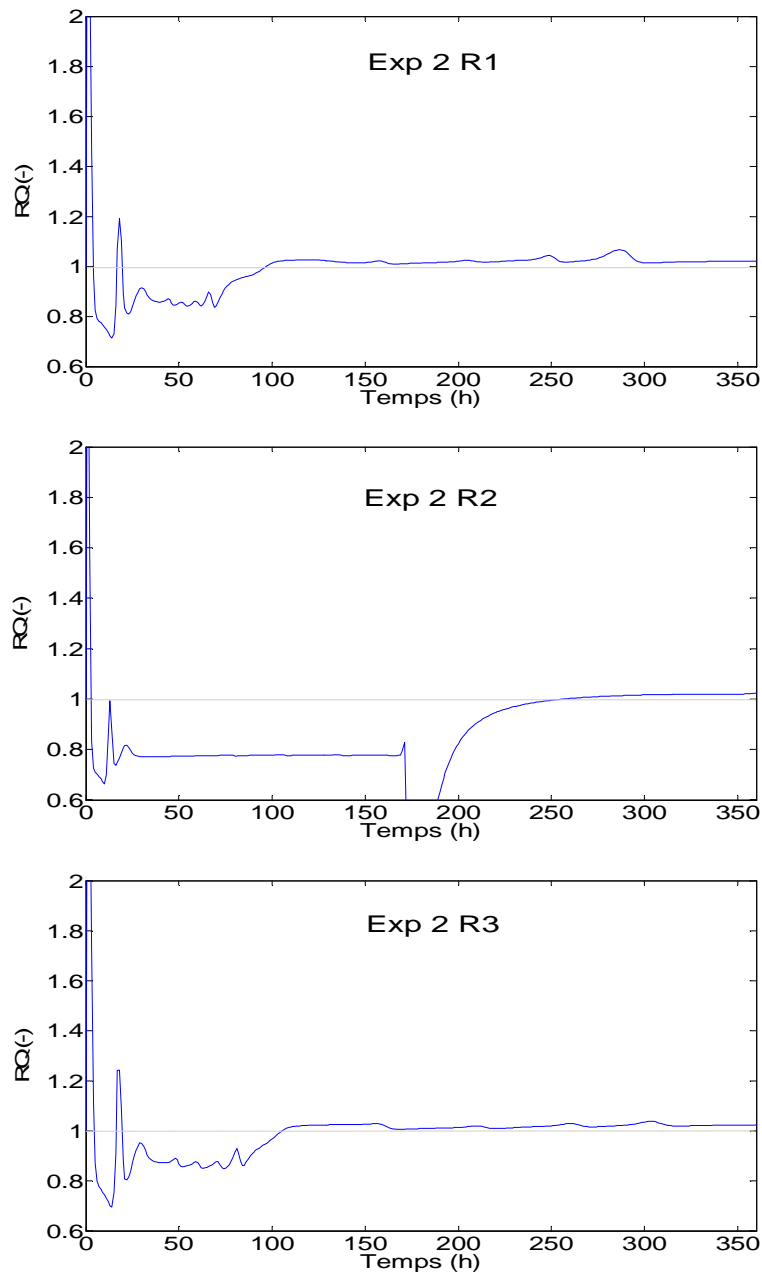


Figura 6.14. Simulació de l'evolució del valor del quocient RQ en els reactors de l'experiment 2. En totes les simulacions s'han utilitzat els valors de referència dels paràmetres, adaptant en cada simulació només els valors de composició de la càrrega d'acord a la Taula 5.8 i admetent que en l'estat inicial la fase gasosa s'havia enrariat en oxigen i tenia una composició (v/v) del 9% O₂, 12% CO₂ i 79% N₂.

Observis, a títol il·lustratiu, que el valor de RQ pel reactor R2 de l'experiment 2A no decau a valors inferiors a la unitat fins a $t=24$ h, instant que coincideix amb el inici de la pujada de temperatures. En els altres reactors la pujada de temperatura començava abans, i també la caiguda de RQ es produïa abans. Valors inicials elevats de RQ ja han estat mencionats per altres autors (de Guardia et al., 2010) apuntant que una possible explicació seria la desabsorció del CO₂ acumulat, però no van demostrar-ho numèricament.

Les simulacions també reproduïen la repuntada en el valor de RQ després de la davallada inicial, aproximadament en $t=24$ h, la posterior tendència a l'alça fins a final de procés i els valors de RQ més baixos quan la càrrega té un elevat contingut en greixos. Així, en el reactor R2 (Fig. 6.14), de més contingut en greixos que els altres, el quocient respiromètric pren un valor baix mentre hi ha degradació conjunta de greix i proteïna (entre $t=25$ i $t=175$ h). La baixada sobtada que apareix entre $t=175$ i $t=200$ h és deguda a l'absorció del CO_2 en la fase líquida al refredar-se la massa per esgotament del substrat (comparar-la amb l'evolució simulada de temperatura, Fig. 6.9, Exp 2 R2). Valors de RQ baixos en el compostatge de mescles que contenen greixos també han estat descrits per altres autors (Gea et al., 2004). Cal remarcar que, igual que en les evolucions de temperatura i concentracions d'oxigen i CO_2 , les dades registrades experimentalment presenten tendències més suaus que les obtingudes en simulació.

6.6 Evolució de la massa total en compostatge

En tots els experiments realitzats els reactors estaven col·locats damunt bàscules que permetien el registre en continu (cada 15 min) del pes de cadascun dels reactors (Fig.5.2). En la càrrega A no hi havia obertura dels reactors durant el procés, però en la càrrega B cada reactor s'obria periòdicament per extreure'n una mostra de 0.3-0.4 kg del nivell superior (veure Taula 5.10). A la Fig- 6.15 es mostren les evolucions registrades de la massa total de cada reactor expressades en percentatge respecte a la massa total a inici del procés. En la càrrega B de cada reactor l'extracció de mostres proporcionava una corba esglaonada, essent l'alçària de cada esgraó la massa de material extret. A fi de poder comparar l'evolució de la massa en les càrregues A i B de cada reactor s'han corregit les corbes de la càrrega B eliminant els esgraons. A totes les mesures posteriors a la registrada immediatament després d'haver extret la mostra s'hi ha addicionat una quantitat igual a la massa de la mostra extreta. Així, a les corbes de la càrrega B (Fig. 6.15) s'hi pot identificar l'instant d'extracció i la quantitat extreta en cada mostra.

Trets característics en l'evolució de la massa. En totes les evolucions hi ha una fase inicial de 12-24 h de durada en la que la massa inicial es manté (Fig. 6.15), i només comença a baixar quan s'inicia l'ascens de les temperatures. En els reactors de l'experiment 1, a excepció del reactor R3, la massa a final de procés és inferior al 75% de la massa inicial, i en tots els casos la reducció és superior en la càrrega A que en la B. Per contra, les diferències entre càrrega A i càrrega B són més baixes en els reactors de l'experiment 2, però a final de procés en cap cas s'assoleix una massa inferior al 75% de la inicial. Amb la informació registrada en els experiments realitzats no és possible discernir si la causa d'aquestes diferències és la composició inicial de la mescla o pot influir-hi també la diferència en el sistema d'aireig entre els experiments 1 i 2, regulació manual i fluctuacions en el cabal d'aireig en l'experiment 2, cabal perfectament uniforme en l'experiment 2.

Contrast entre dades experimentals i resultats de simulació. Els resultats de simulació presentats a la Fig. 6.15 han estat obtinguts utilitzant les dades de composició de les mescles donades a la Taula 5.8 i els valors de referència en tots els paràmetres, a excepció de la humitat relativa a la que se li assignà el valor $e_0=20\%$ (el valor de referència era $e_0=70\%$). Aquesta modificació es va fer al constatar que la humitat relativa del corrent d'aireig mesurada en l'experiment 2 estava sempre entre el 15 i el 20%, valors més baixos que a l'aire ambient causats possiblement per la condensació

parcial en el calderí d'acumulació d'aire pressuritzat del compressor que alimentava la instal·lació del laboratori.

Les corbes de simulació reproduïen bé la fase d'estancament inicial i el descens accentuat de la massa durant l'etapa termòfila. Aquest es frena quan hi ha el descens de les temperatures a les capes inferiors. En general, aquests canvis de tendència són més pronunciats en les simulacions que en les dades registrades, de la mateixa manera que ja es va observar en l'evolució de les temperatures i de les concentracions d'oxigen i CO₂ (veure apartats 6.5 i 6.6).

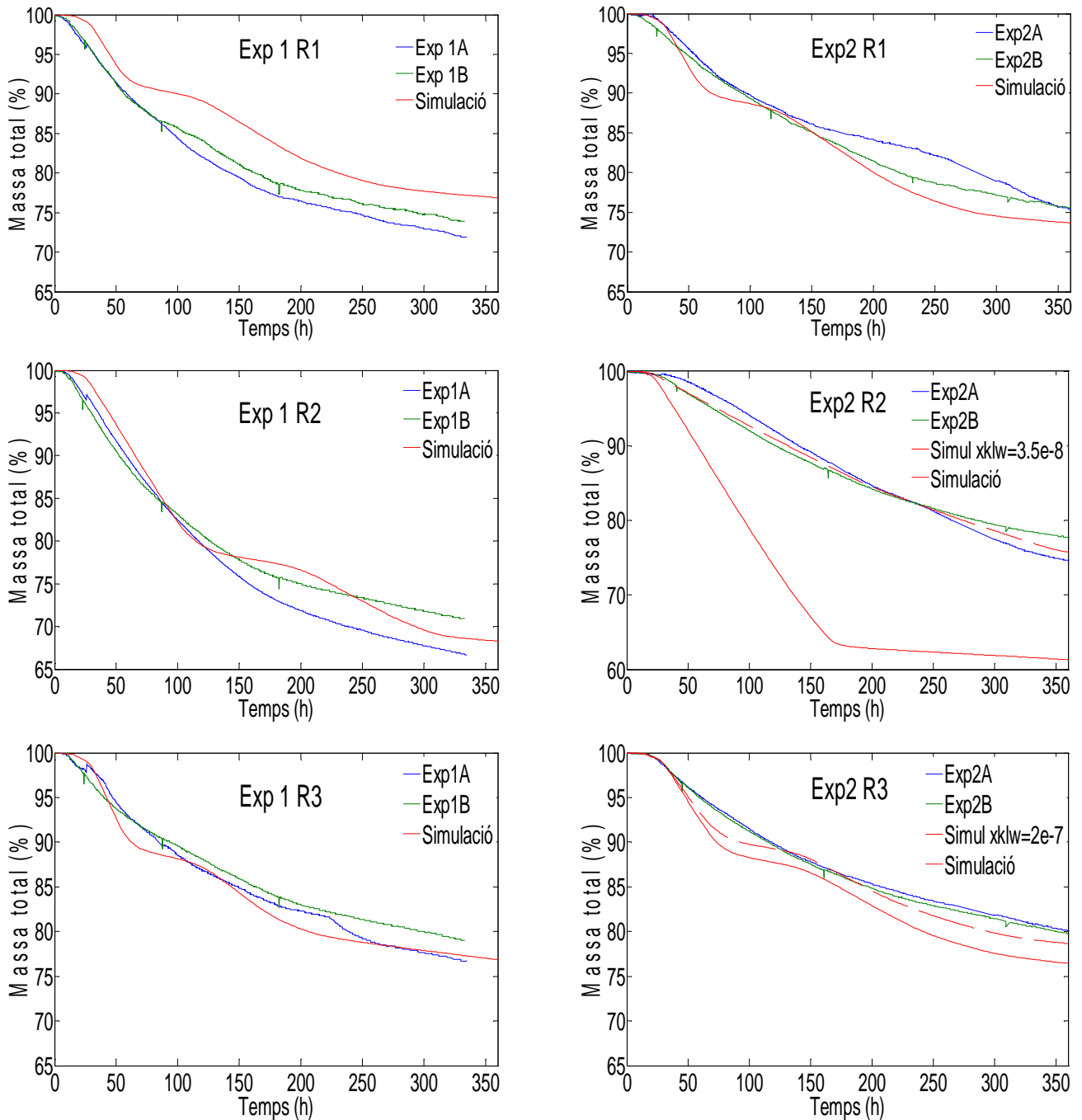


Figura 6.15. Comparació de l'evolució de la massa total dels tres reactors (R1, R2 i R3) en les càrregues A i B dels experiments 1 i 2 amb els resultats de simulació. En cada simulació s'han pres les dades de composició de la Taula 5.8, una humitat relativa de l'aire d'entrada als reactors del 20% i els valors de referència per tots els altres paràmetres. A les corbes dels reactors R2 i R3 (Exp 2) s'hi indica la predicció del model modificant el valor del coeficient de transferència de massa de vapor.

En els tres reactors de l'experiment 1 la diferència entre les corbes registrades és similar a la diferència d'aquestes amb la corba simulada, i sempre es manté inferior a 4 punts percentuals. Als reactors de l'experiment 2 la diferència entre les corbes registrades és més petita, però la diferència amb la simulada també es manté inferior als 4 punts, excepte en el reactor R2. La simulació pel reactor R2 Exp2 es desvia molt per sota de les dades registrades cap a final de procés (entorn 15 punts). La forta davallada de massa predita pel model està relacionada amb les temperatures més elevades predites (Fig. 6.9, Exp2 R2) i causades pel major contingut en greixos d'aquest reactor (Taula 5.8) i el menor contingut inicial d'humitat respecte als altres. Tot això apunta a possibles deficiències en el model biològic per predir acuradament la degradació de substrats amb elevat contingut en greixos. La possibilitat d'ajustar la pèrdua de massa simulada modificant el coeficient de transferència de massa de vapor ($xklw$) es mostra a les corbes dels reactors R2 i R3 de l'experiment 2. Així, un valor de $xklw=3.5 \cdot 10^{-8} \text{ kg}_{\text{vap}} \cdot \text{h}^{-1} \cdot \text{Pa}^{-1} \cdot \text{kg}_{\text{TM}}^{-1}$ redueix la pèrdua de massa total del sistema per evaporació i proporciona un bon ajust a les corbes experimentals (Fig. 6.15, Exp2 R2), tanmateix no es té evidència de cap raó que justifiqui l'ús d'aquest valor diferent en aquest reactor.

6.7 Distribució del contingut d'humitat

En la càrrega B dels reactors es mesurà el contingut d'humitat del material a cadascun dels 5 nivells en què se seccionava la columna (N1,...,N5, Fig.5.7). A la descàrrega, al final de procés, es tornava a mesurar el contingut d'humitat a cada nivell. Els resultats d'aquestes mesures es presenten a la Fig. 6.16.

Trets característics de les mesures experimentals. La no uniformitat en les mesures del contingut d'humitat inicial als diferents nivells és observable en tots els reactors i poden arribar a ser de 15 punts percentuals (Exp1 R3). Aquesta dispersió pot ser atribuïble a l'heterogeneïtat dels materials de la mescla (fems i FORM) i a la dificultat d'extreure'n una mostra representativa.

En tots els cassos, el contingut d'humitat final del nivell superior (N5) és més gran que a inici del procés, fet que també es reproduïx al nivell N4 en tots els reactors de l'experiment 1 i el reactor R2 de l'experiment 2. El major contingut final d'humitat del nivell N5 és conseqüència del degoteig de les condensacions formades a la paret del plenum superior. El moviment de líquids del nivell N5 cap al nivell N4 provoca, en alguns cassos, l'augment del contingut d'humitat d'aquest.

En tots els reactors, a excepció del reactor R2 Exp2, el contingut d'humitat final als nivells N1 i N2 és inferior al contingut inicial. En alguns cassos (R1 i R2 Exp1, R2 Exp2) aquesta baixa humitat als nivells inferiors arriba a ser del 30%, llindar a partir del qual l'activitat biològica pot veure's reduïda. Als reactors R1 i R2, Exp2, les capes inferiors no s'eixuguen tant, possiblement perquè el contingut d'humitat inicial a tots els nivells ja era més elevat que als altres reactors i això permetia el moviment descendent de líquids.

Comparació dels resultats de simulació amb les mesures experimentals. Totes les simulacions s'han realitzat amb els valors de referència dels paràmetres (excepte $e_0=20\%$) i les dades de composició de les mescles de la Taula 5.8. Els continguts d'humitat de la Taula 5.8, calculats a partir de la composició dels components i de les corresponents proporcions de mescla a la càrrega dels reactors, s'indiquen amb una línia

vermella vertical als gràfics de la Fig. 6.16 i no coincideixen exactament amb els valors mesurats a cada nivell.

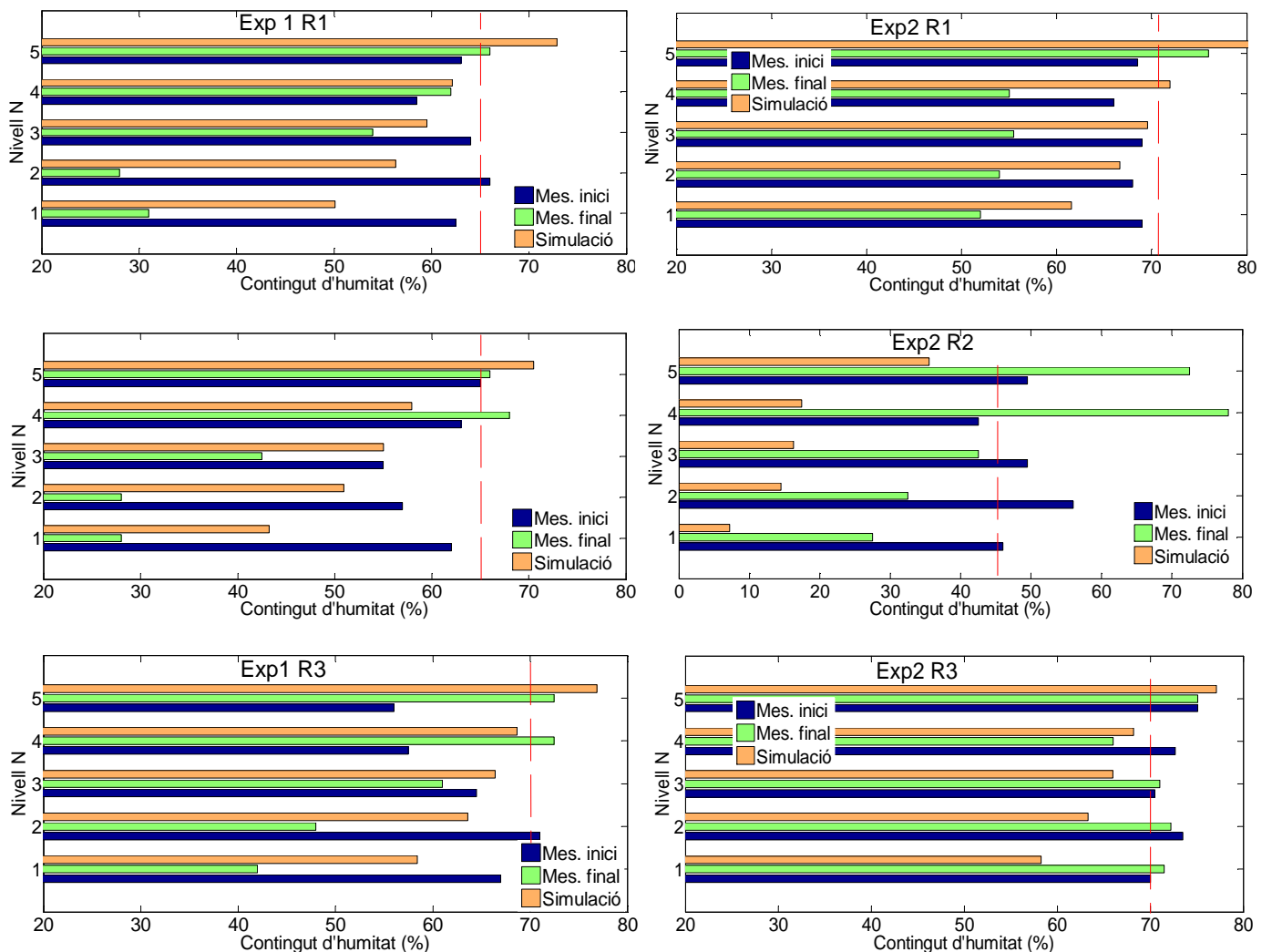


Figura 6.16. Contingut d'humitat mesurat a cadascun dels nivells (N1, ..., N5) dels reactors dels experiments 1B i 2B a inici (instant de la càrrega) i a final de procés (instant de la descàrrega). El contingut d'humitat final predit pel model a cada nivell s'ha obtingut utilitzant els valors de referència de tots els paràmetres, a excepció de la humitat relativa del corrent d'aireig on s'ha utilitzat el valor del 20%. La composició de les mesclades és la donada a la Taula 5.8, i el corresponent contingut d'humitat inicial s'ha indicat a les figures amb la línia vermella discontinua vertical.

Els resultats de simulació reproduïen un patró comú caracteritzat per uns continguts d'humitat menors als inicials al nivell inferior (N1) i un augment progressiu fins a superar al valor inicial al nivell superior (N5). La diferència d'humitat entre els dos nivells superiors (N4 i N5) és sempre més gran que la diferència entre els altres nivells. En general, excepte pel reactor R2 Exp2, el model prediu un contingut d'humitat al nivell superior més gran que el mesurat. Això és explicable pel fet que el model concentra totes les condensacions a la capa superior i no contempla el possible moviment de lixiviats cap a les capes del dalt.

La simulació dels baixos continguts d'humitat als nivells inferiors és factible utilitzant un coeficient de transferència de massa d'aigua ($xklw$) més gran que el valor de referència. Això comportaria una pèrdua d'humitat més accentuada als nivells N3 i N4 i

més condensacions al nivell N5. Un mecanisme de transport de lixiviat del nivell N5 cap als nivells N4 i N3 permetria compensar aquesta pèrdua excessiva per evaporació i ajustar més acuradament les simulacions a les dades mesurades. Tanmateix amb la informació registrada en els experiments realitzats no és possible verificar l'existència d'aquest mecanisme. En general, però, i malgrat la inexactitud de les dades utilitzades en les simulacions, el model arriba a descriure les tendències en la distribució final d'humitats, però no a predir els valors acuradament.

6.8 Mesura de la permeabilitat i evolució de la resistència al flux gasós

Tal i com ja s'ha mencionat, el cabal d'aireig en els reactors de l'experiment 1 no era mantingut constant per la vàlvula mano reductora, en canvi els cabalímetres tèrmics instal·lats a l'experiment 2 permetien un cabal d'aireig constant de 0.24 m³/h (equivalent a una densitat de flux de 0.943 L·s⁻¹·m⁻²). Per aquesta raó l'estimació de la permeabilitat del material es realitzà amb les dades dels reactors de l'experiment 2A.

Determinació de la permeabilitat de la matriu porosa. La permeabilitat d'un medi porós ve definida per l'equació de Darcy generalitzada, (equació 4.2). En tots els experiments realitzats la velocitat en secció lliure de l'aire dins els reactors (0.3 m de diàmetre) fou de 0.943 mm/s (corresponent a un cabal d'aireig de 4L/min). La viscositat dinàmica de l'aire sec a 50°C i 1 atm és 19.5·10⁻⁶ Pa·s, l'alçària de càrrega inicial dels reactors fou aproximadament d'1 m, i les caigudes de pressió mesurades (Fig. 6.17) estaven en el rang 40 - 110 Pa. En aquestes condicions la permeabilitat del material, calculada a partir de l'equació 4.2, pren valors entre 1.6·10⁻¹⁰ i 4.6·10⁻¹⁰ m².

En contraposició a les mesures de porositat i FAS, que són complexes i sovint es fan sobre una mostra amb estructura alterada, la resistència al pas de l'aire d'un medi porós és una mesura senzilla i no destructiva directament aplicable en piles d'aireig forçat. Diferents autors han fet determinacions de la resistència al pas de l'aire (Das and Keener, 1997; Keener et al., 1993; Mu and Leonard, 1999). En tots els casos s'utilitzà un aparell en el que l'aire era forçat a través d'una àrea de secció coneguda i es mesurava el cabal d'aire i la caiguda de pressió a través del medi. Sovint el gradient de pressió ($\Delta P/\Delta x$) es relaciona amb la velocitat (v) amb una expressió del tipus, $\Delta P/\Delta x = av^n$, on a i n són dos paràmetres determinats experimentalment. Experiments realitzats per Snell (1957) mostraren que a densitats de flux inferiors a 15 L·s⁻¹·m⁻² el flux era laminar i el gradient de pressió proporcional a la velocitat, mentre que a densitats de flux superiors el flux esdevé turbulent i el gradient de pressió augmentava de manera exponencial amb la velocitat. Mesures de la permeabilitat fetes per Mu i Leonard (1999) en compost de RSU i biosòlids amb un 55% *wb* d'humitat, interpretades amb l'equació 4.2, proporcionaren valors entre 3.5·10⁻¹⁰ i 7.8·10⁻¹⁰ m², plenament coincidents amb el rang de valors determinats en els reactors. Diferents autors han intentat correlacionar la permeabilitat amb el contingut d'humitat, la FAS i l'esforç compressiu. Singley et al. (1979) determinaren la caiguda de pressió a través d'una capa de 200 mm de material incrementant la FAS del 12% al 65% i observaren que les permeabilitats calculades segons l'equació 4.2 davallaven de 14.1·10⁻⁹ fins a 1.41·10⁻⁹ m².

Evolució de la sobrepressió d'entrada als reactors. Les sobrepressions registrades durant el procés a la canonada d'aireig dels reactors de l'experiment 2A es mostren a la Fig. 6.17.

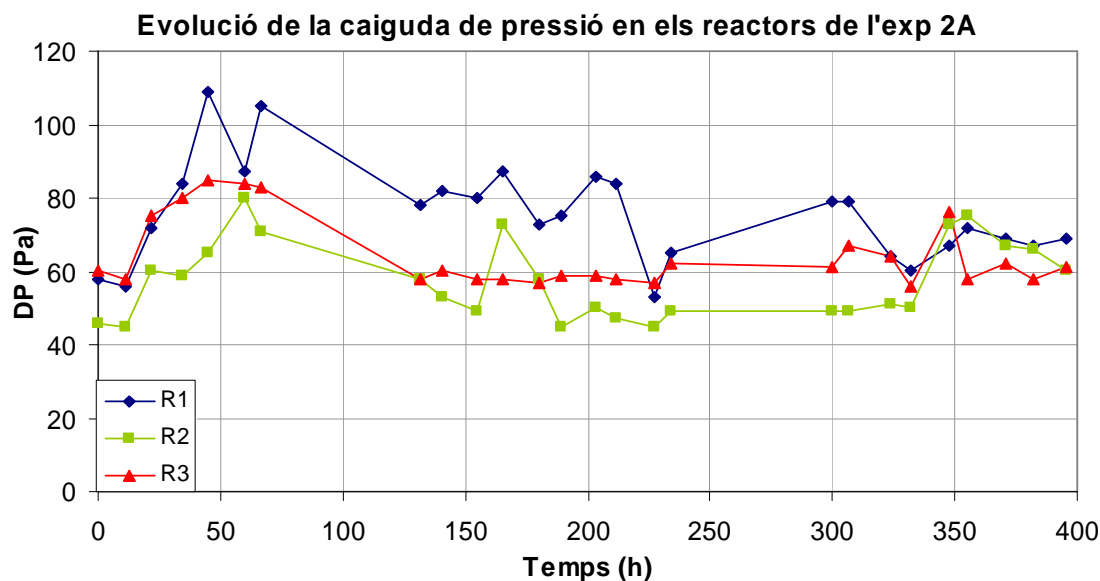


Figura 6.17 Evolució de la sobrepressió (DP) mesurada a l'entrada dels tres reactors de l'experiment 2A amb un cabal d'aire insufolat constant de 4 L/min, equivalent a una densitat de flux de $0.943 \text{ L} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{m}^{-2}$.

Malgrat les irregularitats a les tres corbes s'hi aprecia una tendència general comuna, caracteritzada per un màxim entorn $t=50 \text{ h}$, que coincideix amb la pujada inicial de temperatures, i seguit d'un descens irregular. És evident que diversos factors intervenen en la resistència al flux gasós. Alguns d'ells, com l'augment de la viscositat de la fase gasosa amb la temperatura o el increment del flux molar gasós als nivells superiors del reactor, són descrits pel model. Altres, com l'evolució de la permeabilitat als diferents nivells de la matriu porosa, lligada a l'estructura del material i a la seva deformació, no s'han pogut mesurar amb els experiments realitzats. La comparació de la Fig. 6.17 amb la simulació de l'evolució de la sobrepressió requerida al plenum inferior en un funcionament en aireig a cabal constant (Fig. 6.18) mostra fins a quin punt el model és capaç de reproduir les dades mesurades.

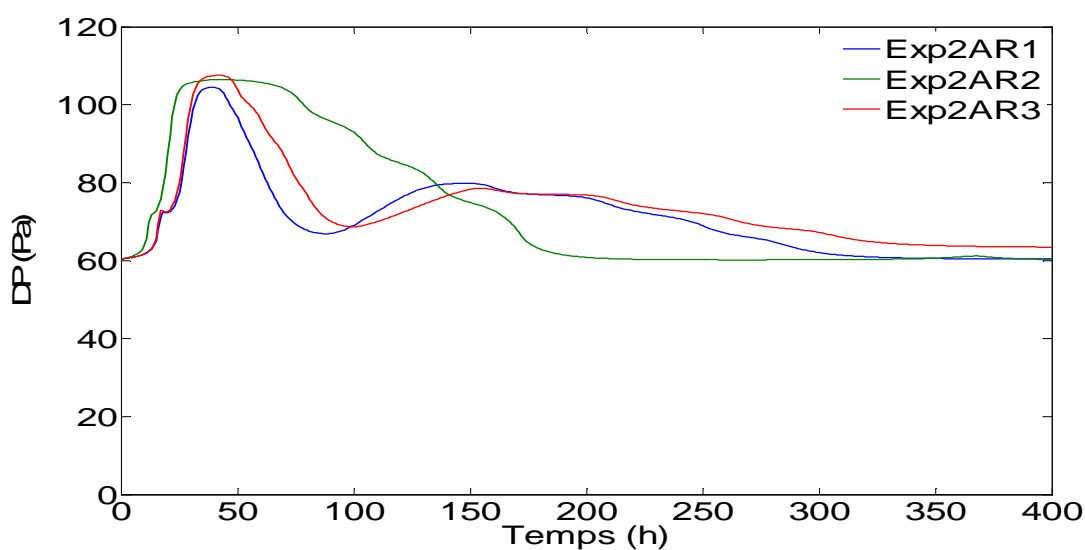


Figura 6.18. Simulació de la sobrepressió requerida al plenum inferior de cadascun dels reactors de l'experiment 2A. Les simulacions han estat realitzades amb els valors de referència dels paràmetres i les dades de composició de les mesclures de la Taula 5.8.

CHAPTER 7

EMPIRICAL CHARACTERISATION AND MATHEMATICAL MODELLING OF SETTLEMENT IN COMPOSTING BATCH REACTORS¹

Abstract

The settlement of organic matter during composting was measured at different levels during the active biodegradation phase in forced-aerated static reactors loaded with different mixtures of organic wastes. The temperature evolution and the concentration of oxygen and carbon dioxide were also recorded in the exhaust gases. Two two-parameter equations and their generalized three-parameter form were fitted to the experimental data and their capability to predict settlement as a function of time was discussed. The settlement field inside the reactors was successfully described with a linear profile. At any given time and vertical position, mass settlement was proportional to the initial height after reactor loading. Furthermore, a relationship linking settlement to biological activity was also proposed. Under all tested experimental conditions, settlement showed a clear correlation with the cumulative oxygen consumption that was modelled with a three parameter equation.

Keywords: Composting; numerical modelling; pile settlement; respiratory quotient

¹ Capítol publicat com:

Illa J, Prenafeta-Boldú FX, Bonmatí A, Flotats X. 2012. Empirical characterisation and mathematical modelling of settlement in composting batch reactors. *Bioresource Technology* 104:451-458.

7.1 Introduction

An important mass and volume reduction of the organic matter occurs during the composting process. In composting windrow piles and aerated batch reactors this phenomenon can be directly observed as a progressive settlement of the whole mass, but quantitative data on this phenomenon has seldom been reported. A few studies have described pile height reductions from 15% to 30% (Trémier et al., 2009; Van Lier et al., 1994; Yue et al., 2008). Conversely, there is abundant information in the literature about settlement in landfills (Chia-Nan Liu et al., 2006; Gourc et al., 2010; Hettiarachchi et al., 2007; Hettiarachchi et al., 2009; Wall and Zeiss, 1995), and some numerical models have been proposed for its description. Landfill settlement is a long term phenomenon, and its accurate prediction is needed for the design of covers and piping systems used to recover the produced biogas. Landfill settlement models distinguish between immediate settlement due to the mechanical compression caused by the overlying material column, primary settlement originated by the dissipation of gas and leachates from the porous matrix, which would be accomplished within months or years, and secondary settlement caused by the particles reorientation and biodegradation (Wall and Zeiss, 1995; Gourc et al., 2010). A simplified two-parameter model adopted from the conceptual model of Hettiarachchi et al. (2005) was proposed by Elagroudy et al. (2008) in order to describe the biodegradation induced settlement in landfills. This model, based on a first order degradation kinetics, is represented by Eq. (7.5), and satisfactorily described the measured settlement (δ) as a function of time (t) in lab-scale bioreactors loaded with different mixtures of municipal solid waste and incubated under anaerobic conditions.

The use of landfill settlement models in compost piles is compromised by the fact that there are fundamental differences between the two processes. In relation to the temporal and spatial scales, settlement in landfills extends over a period of years or decades, in contrast to weeks or months for the composting process, and the depths of piled material in landfills can reach 30–40 m (Gourc et al., 2010) while composting piles height rarely exceeds 3–4 m (McCartney and Chen, 2001). On the other hand, concerning physical and biochemical phenomena, composting is an aerobic process in contrast to the anaerobic conditions that prevail in landfills. Also, the interstitial pressure of gas and lixiviates in landfills are important factors determining settlement because of the low permeability of the material, while in composting a bulking agent is added in order to keep a high permeability and facilitate the air flow through the material. Air permeability values in the range $10^{-14} - 10^{-10} \text{ m}^2$ are common in landfill studies (Stoltz et al., 2010; Tinet and Oxarango, 2010) while permeability measurements in compost lays in the range $10^{-10} - 10^{-7} \text{ m}^2$ (Das and Keener, 1997; Richard et al., 2004).

To our knowledge, only few authors have attempted to quantify the settlement phenomenon in the composting process (Van Lier et al., 1994; Yue et al., 2008). Van Lier et al. (1994) used Eq. (7.5) to describe the height reduction in a composting container and adjusted parameter a as a function of the initial moisture content of the mixture. Yue et al. (2008) measured the settlement at different depths in lab-scale compost reactors filled with various mixtures of organic substrates, and described the process as being composed by two main stages: a physical compressive settlement that occurred in the first two days of composting, and the mass loss settlement that was attributed to the organic matter degradation and moisture evaporation. The measured settlement velocity was used to fit a three-parameter equation (Eq. 7.1). Relatively good fits were obtained during the measured period ($r^2 > 0.98$, $t = 23$ days). However, Eq. (7.1)

lacks physical sense as it predicts a constant settlement velocity (parameter b) in the long term.

$$\frac{d\delta}{dt} = ae^{-\frac{t}{c}} + b \quad (7.1)$$

Settlement induces changes in the mass physical properties that have an important role in the development of the process, such as free air space, air permeability, thermal conductivity, specific heat capacity, and bulk density. Those changes might affect the pressure loss of air through the pile and, consequently, the required aeration pressure (McCartney and Chen, 2001; Schaub-Szabo and Leonard, 1999).

Deterministic composting models are based on the principles of heat and mass transfer and on the biochemical and microbiological kinetics, and can be formulated as a set of ordinary differential equations in which time is the independent variable (Kaiser, 1996; Sole-Mauri et al., 2007; Tremier et al., 2005). Upon a set of initial values for the model state variables, the evolution of the system can be obtained by numerical integration. In order to introduce the settlement phenomenon in such models, a relation linking settlement to the independent variable (time) or to some of the state variables (i.e. temperature, or oxygen consumption) is required.

In the present study, settlement was measured at different levels of the composting mass in lab-scale composting reactors operated under continuous aeration and static conditions. The experimental data were used to explore the goodness of fit of a number of equations designed to predict settlement as a function of time. Moreover, correlations between settlement and biological activity were also explored with the aim of enabling the integration of the mass settlement phenomenon into general composting models.

7.2 Methods

7.2.1 Experimental setup

Three identical vertical reactors (R1, R2 and R3) of 70 L volume each were simultaneously operated with forced aeration and static conditions (Fig. 7.1). The reactors were constructed with PVC pipe elements of 300 mm diameter, insulated with a 35 mm thick layer of mineral wool. The top and bottom surfaces were closed with 50 mm of rigid insulation plate (Roofmate, Spain). The thermal insulation of each reactor, determined by the analysis of the heating-cooling curves of the water filled reactor, correspond to a global heat transfer coefficient between 1.03 and 1.13 $\text{W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$. A rigid metallic grid (6 x 6 mm) placed 90 mm above the bottom separated the composting mass from the bottom plenum, which contained the air inlet and a valve to manually remove the leachate. Air from a pressurized pipe was flowed through a pressure reduction valve and a thermal flow meter (M+W Instruments, Germany) to the bottom plenum at a rate of 0.24 $\text{m}^3\cdot\text{h}^{-1}$ (at 298 K, 10^5 Pa). Two consecutive experimental runs (r1 and r2) were performed on the three reactors which, for each run, were operated in parallel and loaded with different mixtures of organic matter.

7.2.2 Organic substrates

Fresh cow manure, organic fraction of municipal solid waste, and non-digested sludge from a municipal wastewater treatment plant were used as composting substrates, and wood chips of 30×10×5 mm maximum size were added as bulking agent. Different mixtures of these basic components were used in the composting experiments (Table 7.1). The non-digested sludge had a liquid texture and was added once the solids had

been mixed. Moisture, dry matter content and fats were determined according to the Standard Methods for the examination of Water and Wastewater (APHA, AWWA, WEF, 1995).

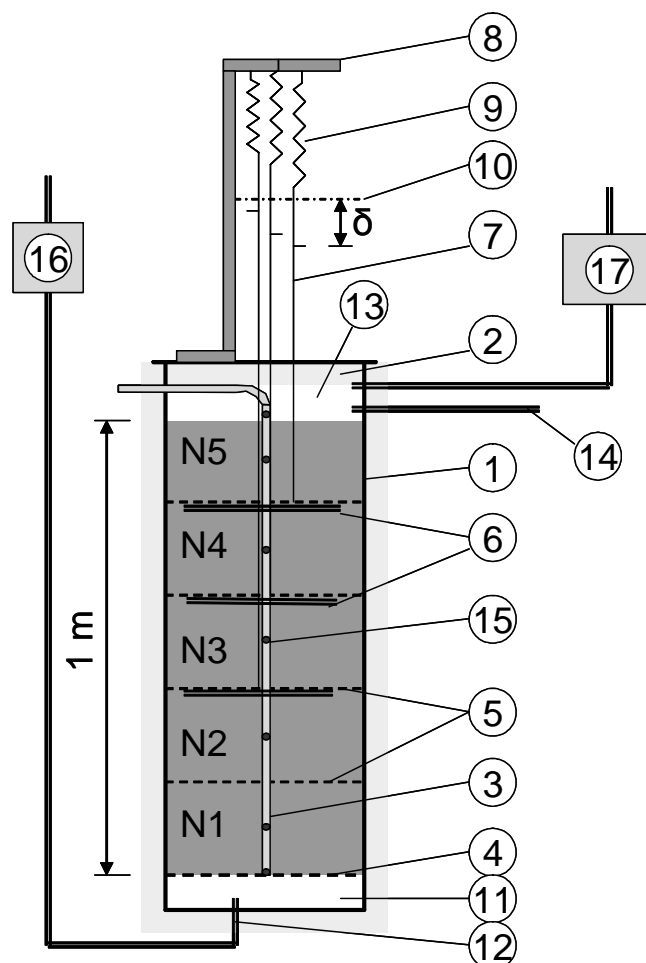


Figure 7.1 Experimental reactor setup with settlement (δ) monitoring device: 1) PVC reactor vessel, 2) reactor lid, 3) temperature sensor rods, 4) metallic rigid grid, 5) semi rigid plastic movable grids, 6) wood rods, 7) straight wires, 8) static support, 9) springs, 10) reference position, 11) bottom plenum, 12) air inlet, 13) top plenum, 14) gases outlet, 15) thermocouples, 16) flow meter, and 17) off gas analyzer.

Table 7.1 Total mass, bulk density, and initial composition of the mixtures used in the different composting experiments.

Run	Reactor	Total mass (kg)	Bulk density (kg/m^3)	Moisture content (% wb ^a)	Volatile solids (% db ^a)	Fat content (% db ^a)	Volumetric mixture (WS:CM:OF:NS) ^b
r1	R1	36.60	502.7	64.7	85.9	1.6	1:1:0:0
	R2	42.15	578.9	64.8	81.5	4.7	1:2:1:0
	R3	30.90	553.3	70.6	85.8	1.8	1:1:0:0.37
r2	R1	34.26	466.0	72.4	83.1	2.3	1:3:0:0
	R2	36.05	492.7	46.1	77.7	9.0	1:1:6:0
	R3	45.65	627.0	69.7	85.8	1.7	1:1:0:0.30

^a wb: wet basis; db: dry basis

^b WS: Wood ships; CM: Cow manure; OF: Organic fraction of municipal solid waste; NS: Non digested sludge.

7.2.3 Process monitoring

Temperature was monitored with seven J type thermocouples (RHS, United Kingdom) distributed along each reactor, held by a rigid vertical PVC central rod (Fig. 7.1). A scan of all temperature sensors was programmed each 15 min by means of a HP-34970A data logger system (Agilent, USA). Samples of the outflow gases were automatically

pumped out of the top plenum for 3 min to a multisensor gas analyzer system (Sensotrans, S.L., Spain) equipped with an electrochemical sensor and an IR sensor for measuring the concentration of oxygen and CO₂, respectively, which were then registered in the data logger. This operation was repeated every 45 min. The instantaneous oxygen uptake at time $t_i(h)$ $m_{O_2,i}$ (g O₂·h⁻¹), and the cumulative oxygen consumption, $c_{O_2,i+1}$ (g O₂), up to time $t_{i+1}(h)$, were calculated with Eqs. (7.2) and (7.3), respectively,

$$m_{O_2,i} = \frac{P_a \cdot M_{O_2}}{R \cdot T_a} Q_o (\theta_{O_2o} - \theta_{O_2i}) \quad (7.2)$$

$$c_{O_2,i+1} = c_{O_2,i} + \frac{P_a \cdot M_{O_2} \cdot Q_o}{R \cdot T_a} \left(\theta_{O_2o} - \frac{\theta_{O_2i} + \theta_{O_2i+1}}{2} \right) (t_{i+1} - t_i) \quad (7.3)$$

were P_a is the atmospheric pressure (10⁵ Pa), M_{O_2} the molecular mass of oxygen (32 g·mol⁻¹), R the ideal gas constant (8.314 J·mol⁻¹·K⁻¹), T_a the absolute room temperature (298 K), Q_o the total air inflow (0.24 m³·h⁻¹), θ_{O_2o} the dimensionless in air oxygen concentration (0.209 v/v) and θ_{O_2i} the measured oxygen concentration (v/v) at time t_i . The respiratory quotient RQ_i at time t_i , representing the instantaneous molar relation between CO₂ produced and O₂ consumed, was computed according to Eq. (7.4), being θ_{CO_2i} (v/v) the measured CO₂ concentration in exhaust gas at time t_i .

$$RQ_i = \frac{\theta_{CO_2i}}{\theta_{O_2o} - \theta_{O_2i}} \quad (7.4)$$

Settlement was monitored by placing four semi-rigid circular plastic grids during the reactor mass loading, which delimited five layers of 20 cm thick (N1, N2, ... N5 in Fig. 7.1). A hole was perforated at the centre of each grid in order to allow free downwards movement when the material settled. The distance from the reactor top edge to each grid was measured during the reactor loading and unloading, at the start and the end of experiments, respectively. Settlement was also measured continuously by placing a wire attached to a wood rod placed diametrically underneath the grids that transferred the settlement movement to an external spring, through a small hole in the lid, where the downward displacement (δ) could be regularly measured. In order to keep the wires straight during the reactors loading, a thin iron pipe was used as a sheath and was pulled out when the reactor was filled.

7.2.4 Numerical settlement description

Goodness of fit from different equations establishing a relationship between settlement (δ) and time (t) was checked against experimental data generated from different settlement processes. In Eqs. (7.5) and (7.6), $\delta(t)$ is predicted by adjusting two parameters, a and b , where a represents the time when settlement reaches 63.2% and 50%, respectively, of the maximum attainable settlement, which is represented by parameter b . Eqs. (7.7) and (7.8) are generalized forms of Eqs. (7.5) and (7.6), where parameter c introduces an inflexion point in the settlement curve when $c > 1$.

$$\delta(t) = b(1 - e^{-\frac{t}{a}}) \quad (7.5)$$

$$\delta(t) = b \frac{\left(\frac{t}{a}\right)}{1 + \left(\frac{t}{a}\right)} \quad (7.6)$$

$$\delta(t) = b(1 - e^{-\left(\frac{t}{a}\right)^c}) \quad (7.7)$$

$$\delta(t) = b \frac{\left(\frac{t}{a}\right)^c}{1 + \left(\frac{t}{a}\right)^c} \quad (7.8)$$

The hypothesis of proportionality between settlement curves measured at different levels within one reactor and run was tested. This premise implies parameters a and c must have a constant value in all settlement series from one reactor experiment.

7.2.5 Parameter estimation

The least square sum of errors criterion was used in the fitting of the selected equations to the single series of experimental settlement data. Eq. (7.9) represents the objective function used in the simultaneous fitting of the settlement series of one reactor, where the i index refers to settlement points in one series, n_{ij} represents the number of measurements i contained in series j , n_j is the number of settlement series in one reactor, each series corresponding to an initially different level, δ_{ij}^* is the measured settlement at time i and level j , and δ_{ij} is the predicted settlement at time i level j .

$$f_{obj}(a, b_1, \dots, b_{n_j}, c) = \sum_{j=1}^{n_j} \left[\frac{\sum_{i=1}^{n_{ij}} (\delta_{ij} - \delta_{ij}^*)^2}{n_{ij} (\max_i \{\delta_{ij}^*\} - \min_i \{\delta_{ij}^*\})^2} \right] \quad (7.9)$$

The Monte Carlo method was used to establish the 95% confidence intervals on the estimated parameter values (Hauser, 2009). In summary, the method consists in generating additional synthetic data sets, each one being then processed with the same optimisation routine as the experimental data set and, thus, obtaining a new set of parameters. From the generation and analysis of the synthetic data sets, the distribution of parameter values is then used to generate confidence intervals. The method is based on the assumption that the synthetic data sets deviate from the data predicted by the model in the same way as the measured data does. This was accomplished by generating synthetic data (1000 iterations) with the same standard deviation as the original data set. All routines for parameter estimation and Monte Carlo analysis were run in MatLab (The Mathworks, USA).

7.3 Results and discussion

The temperature evolution measured inside the reactor and the corresponding oxygen concentration in the exhaust gases presented a similar profile in all experiments, as exemplified in Fig. 7.2 for run r2. Temperature reached its maximum within 1–2 days upon the experiment start and then slowly decreased, sometimes with the occurrence of

secondary temperature peaks. Interestingly, stages of rapid temperature increase (maximal temperature slope) coincided with local minimum values in the oxygen concentration curves. This indicates a high biological activity, manifested both by the generation of metabolic heat and by a high respiration rate. Yet, differences on the length of the thermophilic phase were observed among the different experiments. The high temperature plateau lasted for a longer in reactor R2, compared to the R1 and R3 (Fig. 7.2), possibly due to the higher fatty content in the organic fraction of municipal solid waste (Table 7.1). The respiratory quotient (RQ) remained in the range 0.7–1.3, with the lowest values observed during the period 50–100 h (Fig. 7.2). In agreement with the reaction stoichiometrics, the aerobic biodegradation of lipids and proteins resulted in lower RQ values (0.7–0.9) than the degradation of the more recalcitrant celluloses and lignins ($RQ=1$). De Guardia et al. (2010) compared the RQ evolution in the composting of different wastes and pointed out that, besides the biological activity, the high values observed during the first hours of the process ($RQ>2$) could also be caused by factors governing CO_2 accumulation, such as temperature, pH and moisture. Other authors (Gea et al., 2004) have reported a RQ decrease from 0.95 to 0.87 when fats and other low oxygen containing material were mixed with OFMSW. Hence, the higher fatty content in R2 might also explain the lower RQ values observed in this reactor (Table 7.1).

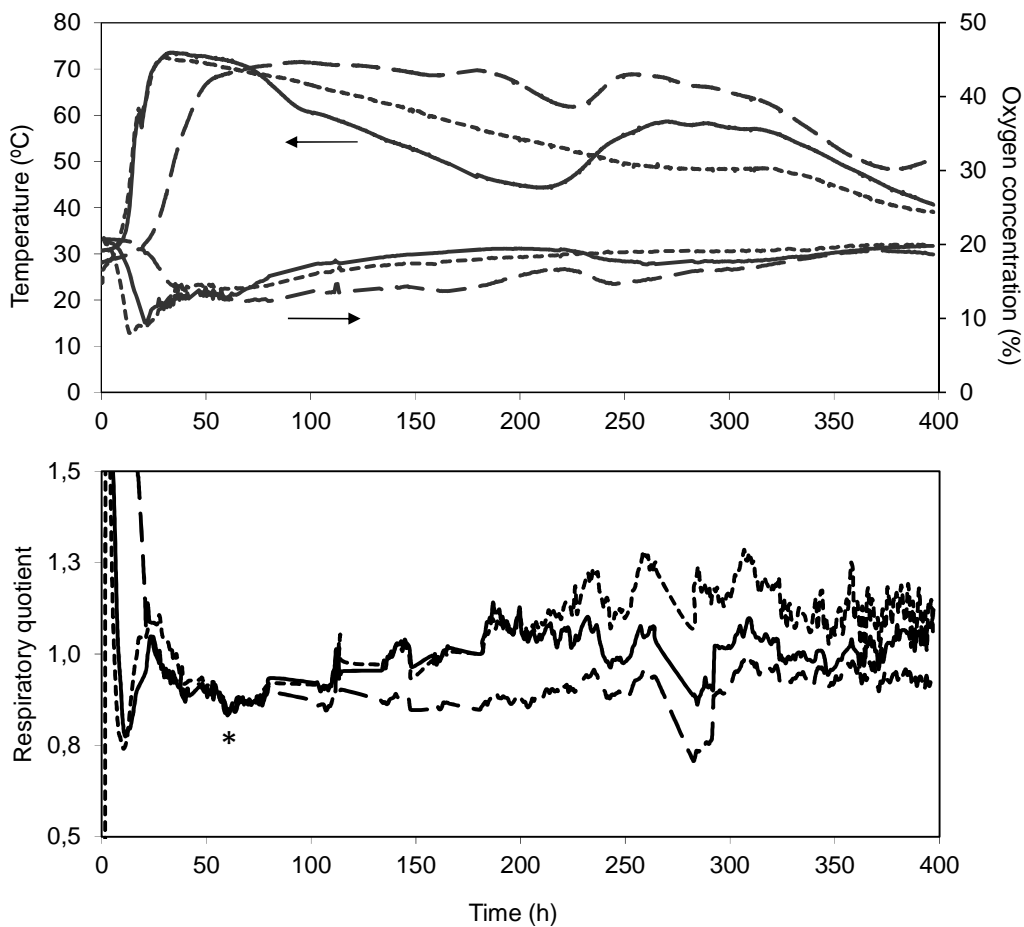


Figure 7.2 Evolution of temperature and oxygen concentration during run r2 in reactors R1 (solid line), R2 (dashed line), and R3 (dotted line). The depicted temperature was registered by sensor S5 located at the centre of layer N4 (Fig. 7.1), and the oxygen concentration was monitored in the exhaust gas in the reactor top plenum. The respiratory quotient (RQ) is depicted in the second graph; the asterisk marks the beginning of the increasing RQ trend.

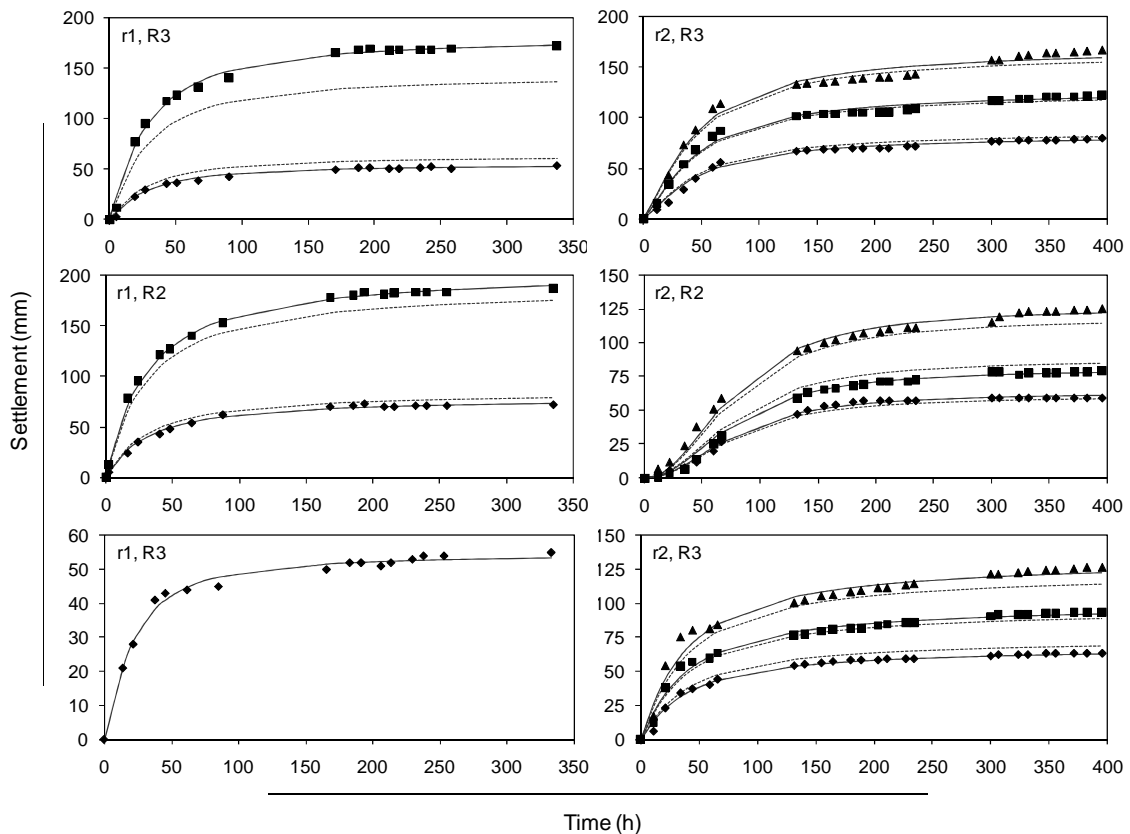


Figure 7.3. Time-course settlement measured curves (points) in relation to the fitted values predicted by equation (10) using the initial positions measured during the reactor loading (Z_o ; dashed lines) and the corrected initial positions (Z_{oc} ; solid lines) accounting for the preliminary mass settlement during reactor loading.

The settlement time-course evolution followed a similar general trend in all experiments (Fig. 7.3). A fast settlement phase was observed during the first days, followed by a gradual deceleration of the process that progressed towards the stagnation. In certain cases (reactors R2 and R3 in run r2), an inflexion point was clearly observed during the first hours. Equations (7.5) to (7.8) were fitted to experimental settlement data and the obtained parameter estimates, within a 95% confidence interval, and the determination coefficient (r^2) are summarized in Table 7.2. The two parameter equations (Eqs. 7.5 and 7.6) produced relatively good fits in most of the cases ($r^2 > 0.98$), being the poorest fits ($r^2 = 0.94\text{--}0.97$) obtained in run r2 for reactors R2 and R3. Eq. (7.6) generally resulted in better fits than Eq. (7.5). However, the inflexion on the settlement curves observed in experiment r2 could only be simulated with three-parameter equations, thus resulting in better fits to the experimental data. Eq. (7.8) produced slightly higher r^2 values than Eq. (7.7) and, thus, was selected for further studies. It is important to notice that Eqs. (7.5) to (7.8) are just simple models that adjust the measured data as a function of time, and that they overlook the physical nature of the composting and settlement phenomena. Yet, other authors used similar approaches to model different composting processes. Ponsà et al. (2011) used exponential (Eq. 7.5) and linear-exponential (Eq. 7.11) models when describing the kinetics of CO_2 production in the aerobic degradation of different wastes. Gil et al. (2011) also used these models, together with the hyperbolic model (Eq. 7.6), to fit data on N mineralization in soils amended with different types of compost. It is interesting to mention that the method they used to estimate the parameter confidence intervals resulted, in some cases, in negative lower limits which implied the

rejection of equations providing high r^2 fit values. Here, such inconvenience was avoided by using the Monte Carlo randomization method, which provides meaningful estimates for the confidence intervals.

Table 7.2. Estimated parameter values a , b and c and their corresponding 95% confidence intervals (*c.i.*) when fitting Eqs. (7.5–7.8) to the measured individual settlement curves from Fig.7.3; r^2 : determination coefficient.

Eq.	Run	Reactor	Level	a (h)	<i>c.i.</i>	b (mm)	<i>c.i.</i>	c (-)	<i>c.i.</i>	r^2
(5)	r1	R1	2	37.26	33.45-41.33	167.55	163.64-171.82	–	–	0.989
			1	38.29	33.56-43.20	51.59	50.16-53.17	–	–	0.984
		R2	2	36.85	33.22-40.63	181.51	177.78-185.58	–	–	0.990
			1	41.37	38.90-43.72	71.29	70.26-72.22	–	–	0.997
		R3	1	28.14	25.10-31.25	52.18	50.93-53.41	–	–	0.984
		r2	R1	3	62.69	54.15-73.09	156.33	151.44-161.52	–	–
	2			57.40	50.67-64.97	116.00	113.19-118.83	–	–	0.976
	1			65.85	59.27-72.68	77.11	75.44-78.96	–	–	0.984
	R2		3	113.75	104.35-123.65	129.33	125.72-133.10	–	–	0.991
			2	129.29	104.54-157.70	85.22	79.86-91.60	–	–	0.967
			1	109.55	89.64-132.93	63.63	60.15-68.01	–	–	0.963
	R3		3	47.22	40.16-55.56	117.52	114.08-121.43	–	–	0.950
			2	50.09	43.56-57.10	89.10	86.68-91.36	–	–	0.966
			1	53.33	48.33-58.55	61.21	60.12-62.30	–	–	0.985
	(6)	r1	R1	2	29.18	25.65-33.21	190.27	185.07-195.81	–	–
1				30.41	26.11-35.51	58.83	56.98-60.87	–	–	0.990
R2			2	27.98	26.56-29.45	205.02	202.86-207.23	–	–	0.999
			1	33.59	30.13-37.48	81.98	80.01-84.10	–	–	0.995
R3			1	20.28	17.34-23.42	57.69	56.24-59.43	–	–	0.988
r2			R1	3	55.37	46.77-65.54	185.80	178.50-193.84	–	–
		2		49.74	43.78-57.66	136.40	132.35-141.08	–	–	0.985
		1		59.44	50.31-70.18	92.31	88.44-96.41	–	–	0.981
		R2	3	126.92	103.57-155.59	170.53	158.86-183.78	–	–	0.983
			2	159.53	112.32-235.68	117.47	103.19-139.41	–	–	0.953
			1	126.68	88.05-190.88	84.62	74.78-100.43	–	–	0.942
		R3	3	38.27	32.50-44.98	134.75	130.96-139.77	–	–	0.979
			2	40.71	35.79-46.15	102.59	100.11-105.25	–	–	0.988
			1	44.11	38.48-50.31	70.95	69.05-72.95	–	–	0.988
(7)		r1	R1	2	38.44	34.39–43.48	169.65	165.57–175.41	0.87	0.75–1.01
	1			40.02	34.79–47.28	52.43	50.75–54.92	0.85	0.70–1.02	0.987
	R2		2	39.87	37.54–42.81	187.66	184.88–191.06	0.74	0.69–0.80	0.998
			1	42.55	40.26–45.26	72.16	71.11–73.30	0.88	0.82–0.95	0.998
	R3		1	28.64	25.31–32.98	52.83	51.44–54.57	0.82	0.66–0.98	0.987
	r2		R1	3	76.07	62.31–102.2	166.93	157.62–183.45	0.76	0.62–0.91
		2		63.74	55.78–75.56	119.98	115.54–125.98	0.83	0.71–0.97	0.980
		1		66.20	59.13–74.28	77.25	75.13–79.69	0.99	0.86–1.15	0.984
		R2	3	103.88	98.49–109.48	123.30	121.25–125.82	1.21	1.13–1.29	0.996
			2	108.42	103.84–113.05	76.94	75.82–78.20	1.63	1.51–1.75	0.996
			1	96.67	93.74–99.92	58.84	58.23–59.48	1.70	1.61–1.79	0.998
		R3	3	64.65	50.63–101.67	129.45	121.75–146.06	0.63	0.51–0.78	0.974
			2	61.66	53.24–78.99	95.35	91.62–102.34	0.70	0.59–0.81	0.982
			1	56.12	50.90–63.32	62.28	60.89–64.22	0.88	0.78–0.99	0.987
	(8)	r1	R1	2	26.53	24.21–29.34	179.82	174.46–187.35	1.23	1.06–1.40
1				27.59	24.38–32.10	55.76	53.33–59.48	1.20	0.99–1.45	0.992
R2			2	28.48	26.68–30.68	206.97	201.77–212.72	0.97	0.90–1.05	0.999
			1	30.94	28.38–34.69	78.16	75.25–81.87	1.17	1.02–1.35	0.996
R3			1	19.65	17.62–21.85	54.76	53.10–57.23	1.31	1.05–1.60	0.991
r2			R1	3	49.12	42.32–61.06	175.83	165.30–191.34	1.15	0.94–1.41
		2		42.32	38.37–48.07	125.54	120.81–132.48	1.28	1.10–1.50	0.989
		1		46.20	42.74–50.64	80.45	78.24–83.18	1.54	1.35–1.74	0.992
		R2	3	79.35	76.41–82.70	132.58	130.09–135.43	1.65	1.55–1.73	0.998
			2	84.05	81.98–86.61	80.11	79.07–81.24	2.33	2.21–2.45	0.999
			1	74.76	71.77–77.87	60.55	59.53–61.65	2.54	2.33–2.77	0.997
		R3	3	40.37	32.60–56.56	138.05	128.20–154.68	0.94	0.75–1.17	0.979
			2	40.05	34.80–49.09	101.80	96.61–110.44	1.02	0.85–1.22	0.988
			1	38.17	35.30–41.83	65.38	63.60–67.68	1.32	1.17–1.49	0.993

Within the same reactor and run, no significant differences were found among the values of parameter a and c obtained by fitting individual settling curves measured at different levels, regardless of the used equation (Table 7.2). These points towards the validity of the hypothesis that there is a proportional relationship among the settlement curves measured at different depths within the same reactor. Such proportionality was also verified in binary plots, within each reactor, of the upper levels settlement curves versus the lower one (see Figs. C7-A1.1 and C7-A1.2), in which highly linear correlations were obtained ($R^2 > 0.993$). On the other hand, the initial (Z_0) and final (Z_1) position of the movable grids distributed along the mass, as well as those of the top surface, were measured during reactor loading and unloading (Table 7.3). The difference between these two values ($h_{\infty} = Z_0 - Z_1$) was always greater than the final settlement measured with the wires set up (δ_{∞}). This denotes that a certain degree of compaction had already occurred during the reactor loading, immediately after the recording of Z_0 upon partial loading, and before starting the continuous settlement monitoring with the wires. That was consistent with experiments reported by McCartney et al. (2001), where it was shown that about 60% and 90% of the compost volume reduction measured during the first 24 hours occurred within one minute and one hour after application of the load, respectively. As expected, the theoretical maximum attainable settlement (parameter b) obtained by fitting Eq. (7.8) was slightly higher (up to 10%) than the final measured settlement δ_{∞} . The results also demonstrate that the settlement profile $\delta(t, Z_0)$ has a linear trend with respect to the initial position Z_0 , as the quotient b/Z_0 remained fairly constant in all levels within a reactor experiment (Table 7.3).

Table 7.3. Initial position of the measured composting mass level, referred to level 0 (Fig. 7.1), and final settlement in the different composting experiments. The values of parameter b correspond to the fits of Eq. (7.8) under the proportionality hypothesis.

Run	Reactor	Level ^a	Z ₀ (mm)	Final settlement (mm)		b (mm)	b/Z ₀	Z _{oc} ^b (mm)
				h _∞	δ _∞			
r1	R1	NS	1030	220	–	–	–	–
		(2)	870	–	172	180.69	0.2077	870
		(I)	390	–	54	55.46	0.1422	267
	R2	NS	1030	230	–	–	–	–
		(2)	870	–	187	204.88	0.2355	870
		(I)	390	–	72	79.28	0.2032	337
	R3	NS	790	140	–	–	–	–
		(I)	390	–	55	54.76	0.1404	–
	r2	R1	N5	1040	230	–	–	–
N4 (3)			820	190	167	168.49	0.2055	820
N3 (2)			620	160	123	126.42	0.2039	615
N2 (I)			430	110	80	82.49	0.1918	401
N1			220	50	–	–	–	–
R2		N5	1040	140 ^c	–	–	–	–
		N4 (3)	820	180	125	125.63	0.1532	820
		N3 (2)	610	160	79	79.90	0.1310	522
		N2 (I)	420	90	59	62.64	0.1491	409
		N1	220	40	–	–	–	–
R3		N5	1030	180 ^c	–	–	–	–
		N4 (3)	810	190	126	132.31	0.1633	810
		N3 (2)	630	150	94	99.69	0.1582	610
		N2 (I)	490	100	63	67.98	0.1387	416
		N1	220	20	–	–	–	–

^a Positions N1, N2, N3, N4 and N5 correspond to the upper side of each layer (Fig. 7.1), and position NS to the upper surface of the composting material, levels (I), (2) and (3) indicate the height of the wood rod underneath the plastic grids.

^b Corrected initial positions accounting for the preliminary settling during reactor loading.

^c The measured settlement in the upper levels is lower than in the lower ones due to the preliminary mass compression during reactor loading.

The observation that, within one reactor experiment, the settlement curves at different levels are proportional and that the settlement at any time presented a linear profile in relation to the depth is summarized by Eq. (7.10), being a , b_1 and c the parameters to be fitted. Consequently, multiple settlement curves measured within a reactor were fitted with a single set of parameters, using the objective function defined by Eq. (7.9).

$$\delta(t, Z_o) = Z_o b_1 \frac{\left(\frac{t}{a}\right)^c}{1 + \left(\frac{t}{a}\right)^c} \quad (7.10)$$

Eq. (7.10) was fitted to the settlement data from Fig. 7.3, using the measured initial position Z_o , and the obtained parameter values presented in Table 7.4. An important deviation was observed in certain cases between experimental and modelled settlement values, particularly towards the end of the experimental runs. Such differences were attributed to the error contained in the initial positions of the internal movable grids (Z_o) because of the early settlement during reactor loading. Hence, the fitting with Eq.(7.10) was further improved by correcting the initial position values (Z_{oc}), in order to account for the early settling. For each reactor, the value of Z_{oc} in level j was estimated using the maximum value of the relation $(b/Z_o)_j$, this is $Z_{ocj}=b_j/(b/Z_o)_{max}$, as shown in Table 7.3. The determination coefficients obtained for the simultaneous fitting of the settlement multiple curves in one reactor with Eq. (7.10) decreased slightly when compared with individual fits using Eq. (7.8), but are still generally better than those obtained with Eq. (7.7) (Tables 7.2 and 7.4).

Table 7.4. Best fitted values for parameters a , b_1 and c from Eq. (7.10) using the measured initial position Z_o and the corrected value (Z_{oc}) accounting for the preliminary mass compression during reactor loading (Table 7.3). Determination coefficient (r^2) for each fit is also presented.

Run	Reactor	Level	Equation fit with Z_o				Equation fit with Z_{oc}			
			a (h)	b_1	c	r^2	a' (h)	b_1'	c'	r^2
r1	R1	2	27.13	0.16	1.21	0.685	27.03	0.21	1.22	0.995
		1				0.836				0.992
	R2	2	29.88	0.22	1.06	0.957	29.80	0.24	1.06	0.998
		1				0.966				0.995
r2	R1	3	45.37	0.20	1.32	0.974	45.36	0.21	1.31	0.981
		2				0.984				0.988
		1				0.975				0.990
	R2	3	78.58	0.14	2.16	0.966	78.32	0.15	2.15	0.991
		2				0.953				0.996
		1				0.986				0.995
	R3	3	38.62	0.15	1.11	0.922	38.70	0.16	1.10	0.977
		2				0.969				0.987
		1				0.906				0.990

To our knowledge, a correlation between settlement and the biological activity of the composting mass has not been described in the literature. From our data, such relationship between these two phenomena was not apparent in a preliminary analysis. Reactors with different temperature evolution curves presented no clear differentiating trends in relation to the settlement profile. Some authors have also reported the non-correlation between temperature and settlement (McCartney and Chen, 2001; Yue et al., 2008) and suggested that settlement can only be described as a function of time (Elagroudy et al., 2008). Here, the concept of biodegradation-induced settlement could not be established as a simple correlation between settlement and temperature or exhaust gas oxygen concentration. Besides biological activity, the temperature evolution

is affected by other physical factors, such as the thermal inertia of the bulk mass, the evaporation rate, the airflow, and the level of thermal insulation of the reactor. Hence, temperature is probably an inaccurate indicator of biological activity. On the other side, as an aerobic process, microbial activity in the composting process is directly linked to carbon oxidation and, thus, to oxygen consumption and carbon dioxide production rates. Oxygen concentration in the exhaust gases depends on the airflow rate and on the net oxygen consumption rate. Being the composting mass settlement measured at the upper level the effect of the cumulative strain of the underlying layers, it is reasonable to expect a relation with the biological activity measured as cumulative oxygen consumption (c_{O_2}). Eq. (7.11) was eventually selected, which expresses the settlement (δ) as a function of the cumulative oxygen consumption (c_{O_2}).

$$\delta = B(1 - e^{-\frac{c_{O_2}}{A}}) + C \cdot c_{O_2} \quad (7.11)$$

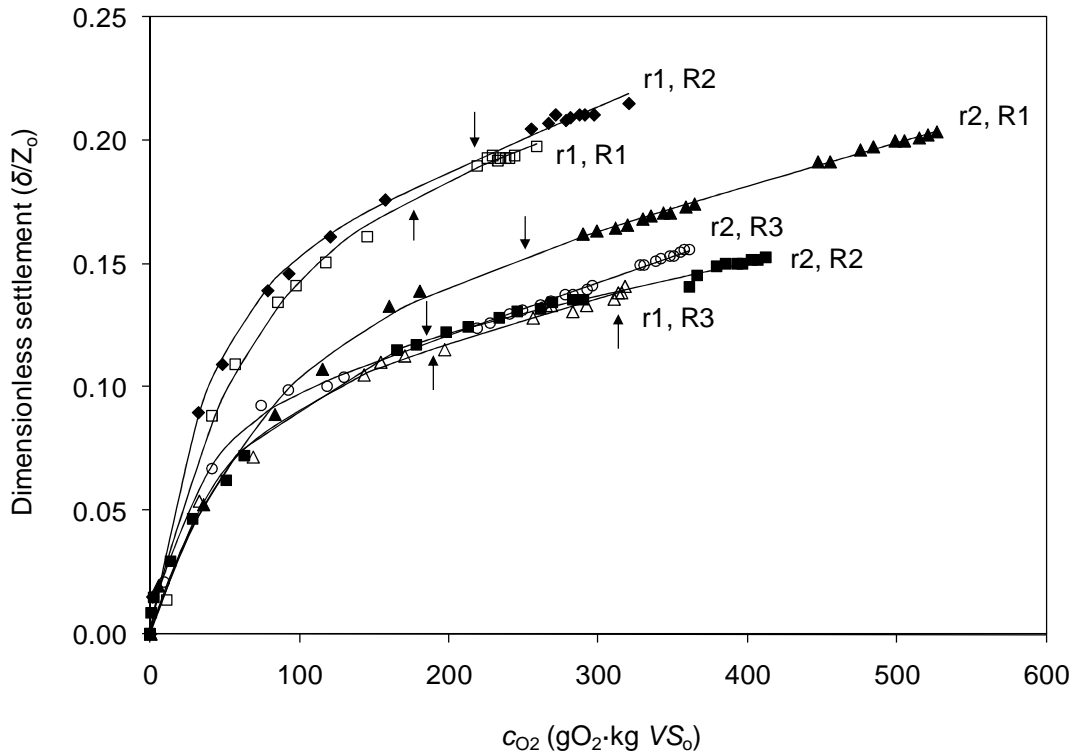


Figure 7.4. Dimensionless settlement (δ/Z_0) of the composting mass top level *versus* the cumulated oxygen consumption (c_{O_2}), per unit of initial volatile solids (VS_0), in runs r1 and r2 and reactors R1, R2, and R3. Points correspond to measured values and solid lines to fits with equation (7.11). Arrows denote the point at which the respiratory quotient shifts towards increasing values.

The representation of the measured upper level settlement versus cumulative oxygen consumption resulted in a series of plots consistently following a similar pattern (Fig. 7.4) that were successfully fitted with Eq. (7.11) (Table 7.5). A sensibility analysis on the dimensionless settlement predicted by Eq. (7.11) at the reference points x_1 and x_2 (x_1, x_2) = (150, 400) $gO_2 \cdot kg^{-1} VS_0$, has been carried out by increasing the parameter values in $\pm 5\%$, 10% and 20% around the values $A=50 gO_2 \cdot kg^{-1} VS_0$, $B=0.12$, and $C=0.2 \cdot 10^{-3} kg VS_0 \cdot g^{-1} O_2$. The greatest sensivity corresponded to parameter B, with dimensionless settlement variation as high as 16% when modifying the parameters

value up to 20%, parameter C caused an intermediate variation (up to 8%) and the influence of parameter A was less than 3%. No correlation between parameters A, B and C was found.

Table 7.5. Best fit values for parameters A, B and C from Eq. (7.11) with the corresponding 95% confidence intervals (*c.i.*), determination coefficient (r^2) and scaling factor VS_o used for plot of Fig. 7.4. Scaling factor Z_o see Table 7.3.

Run	Reactor	VS_o (kg)	A ($gO_2 \cdot kg^{-1} VS_o$)	<i>c.i.</i>	B (-)	<i>c.i.</i>	$C \cdot 10^3$ ($kgVS_o \cdot g^{-1} O_2$)	<i>c.i.</i> ($\cdot 10^3$)	r^2
r1	R1	11.110	57.07	40.89–78.71	0.15	0.12–0.20	0.20	0.02–0.32	0.996
	R2	12.097	36.95	30.79–44.50	0.14	0.13–0.15	0.26	0.21–0.30	0.998
	R3	7.784	44.55	35.51–55.95	0.08	0.08–0.09	0.18	0.14–0.21	0.996
r2	R1	7.858	69.44	61.12–80.22	0.11	0.11–0.12	0.17	0.16–0.19	0.998
	R2	15.120	54.93	47.37–65.83	0.10	0.09–0.11	0.13	0.11–0.15	0.996
	R3	11.863	29.89	26.32–33.87	0.08	0.08–0.08	0.21	0.20–0.22	0.998

It is interesting to notice the long term linear correlation between settlement and oxygen consumption. Such correlation was always observed after the respiratory quotient (RQ) reached its minimum value. It appears that, regardless of the composition of the composting mass, there are two clearly differentiated stages in the settlement process. A preliminary phase of fast settlement would primarily be attributed to the mechanical mass compression under its own weight, and would start already during the reactor loading. This phenomenon has largely been reported in the literature, being the load-strain relation often described with an exponential expression (Das and Keener 1997). The biological-driven settlement stage, instead, would correspond to a slower process possibly dominated by de progressive biodegradation of the more recalcitrant polymeric organic matter. Settlement would then be the result of the reduction of the organic fraction which is responsible of the composting mass structure. The point separating the two processes coincides approximately with the minimum RQ values (Fig. 7.2).

7.4 Conclusions

A number of equations expressing organic matter settlement as a time function were fitted to experimental data from composting batch reactors. A novel three parameter equation (Eq. 7.8) provided the best fits in comparison to other models. The settlement curves at different levels were consistently proportional and displayed a linear correlation to their initial depth. Hence, the settlement vertical profile was successfully described at reactor level with a single set of parameters. Additionally, a good correlation between settlement and biological activity was established on the basis of the cumulative oxygen consumption rate, allowing the integration of this phenomenon into global composting models.

Acknowledgements

This research was supported by the Spanish Ministry of Environment (Project 185/2006/3-4.3). The authors wish to thank Francina Solé Mauri for her support in managing the project and Núria Admetlla for her valuable help in running the experiments.

7.5 References

- Chia-Nan Liu, Rong-Her Chen, Kuo-Sheng Chen. 2006. Unsaturated consolidation theory for the prediction of long-term municipal solid waste landfill settlement. *Waste Manage Res* 24:80.
- Das K, Keener HM. 1997. Moisture effect on compactation and permeability in composts. *Journal of environmental engineering* 275-281.
- de Guardia A, Mallard P, Teglia C, Marin A, Le Pape C, Launay M, Benoist JC, Petiot C. 2010. Comparison of five organic wastes regarding their behaviour during composting: Part 1, biodegradability, stabilization kinetics and temperature rise. *Waste Manage* 30:402-414.
- Elagroudy SA, Abdel-Razik MH, Warith MA, Ghobrial FH. 2008. Waste settlement in bioreactor landfill models. *Waste Management*, 28:2366-2374.
- Gea T, Barrena R, Artola A, Sánchez A. 2004. Monitoring the Biological Activity of the Composting Process: Oxygen Uptake Rate (OUR), Respirimetric Index (RI), and Respiratory Quotient (RQ). *Biotechnology and Bioengineering* 88:520-527.
- Gil M.V.; Carballo M.T.; Calvo L.F., 2011. Modelling N mineralization from bovine manure and sewage sludge composts. *Bioresource Technology* 102 (2), pp. 863-871.
- Gourc J-, Staub MJ, Conte M. 2010. Decoupling MSW settlement into mechanical and biochemical processes – Modelling and validation on large-scale setups. *Waste Manage* 30:1556-1568.
- Hauser JR. 2009. *Numerical Methods for Nonlinear Engineering Models*. Springer.
- Hettiarachchi CH, Meegoda JN, Tavantzis J, Hettiaratchi P. 2007. Numerical model to predict settlements coupled with landfill gas pressure in bioreactor landfills. *Journal of Hazardous Materials* 514-522.
- Hettiarachchi H, Meegoda J, Hettiaratchi P. 2009. Effects of gas and moisture on modeling of bioreactor landfill settlement. *Waste Management* 29:1018-1025.
- Kaiser J. 1996. Modelling composting as a microbial ecosystem: a simulation approach. *Ecological Modelling* 91:25-37.
- McCartney D, Chen H. 2001. Using a biocell to measure the effect of compressive settlement on free air space and microbial activity in windrow composting. *Compost Science & Utilization* 9:285-302.
- Ponsà S, Puyuelo B, Gea T, Sánchez A. 2011. Modelling the aerobic degradation of organic wastes based on slowly and rapidly degradable fractions. *Waste Management* 31:1472-1479.

- Richard TL, Veeken AHM, Wilde Vd, Hammelers HVM. 2004. Air-filled porosity and permeability relationships during solid-state fermentation. *Bioresource Technology* 20:1372-1381.
- Schaub-Szabo SM, Leonard JJ. 1999. Characterizing the Bulk Density of Compost. *Compost Science & Utilization* 7:15-24.
- Sole-Mauri F, Illa J, Magrí A, Prenafeta-Boldú FX, Flotats X. 2007. An integrated biochemical and physical model for the composting process. *Bioresource Technology*, 98:3278-3293.
- Stoltz G, Gourc J, Oxarango L. 2010. Liquid and gas permeabilities of unsaturated municipal solid waste under compression. *J Contam Hydrol* 118:27-42.
- Tinet A-, Oxarango L. 2010. Stationary gas flow to a vertical extraction well in MSW landfill considering the effect of mechanical settlement on hydraulic properties. *Chemical Engineering Science* 65:6229-6237.
- Tremier A, de Guardia A, Massiani C, Paul E, Martel JL. 2005. A respirometric method for characterising the organic composition and biodegradation kinetics and the temperature influence on the biodegradation kinetics, for a mixture of sludge and bulking agent to be co-composted. *Bioresource Technology* 96:169-180.
- Trémier A, Teglia C, Barrington S. 2009. Effect of initial physical characteristics on sludge compost performance. *Bioresource Technol* 100:3751-3758.
- Van Lier JJC, Van Ginkel JT, Straatsma G, Gerrits JPG, Van Griensven LJLD. 1994. Composting of mushroom substrate in a fermentation tunnel: compost parameters and a mathematical model. *Netherlands Journal of Agricultural Science* 42:271-292.
- Wall DK, Zeiss C. 1995. Municipal landfill biodegradation and settlement. *Journal of Environmental Engineering* 121:214-223.
- Yue B, Chen T, Gao D, Zheng G, Liu B, Lee D. 2008. Pile settlement and volume reduction measurement during forced-aeration static composting. *Bioresource Technology*, 99:7450-7457.

Appendix C7-A1 ANNEXED FIGURES TO SETTLEMENT CHARACTERISATION

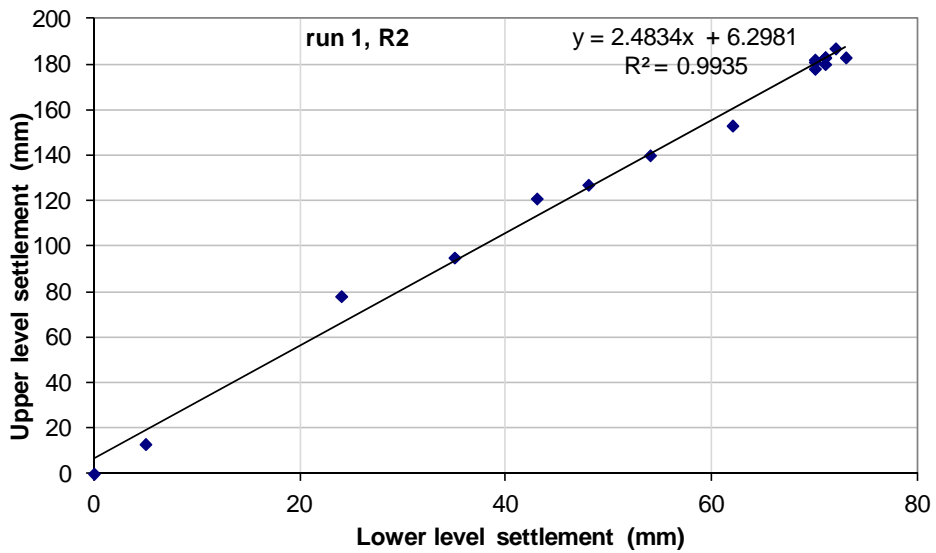
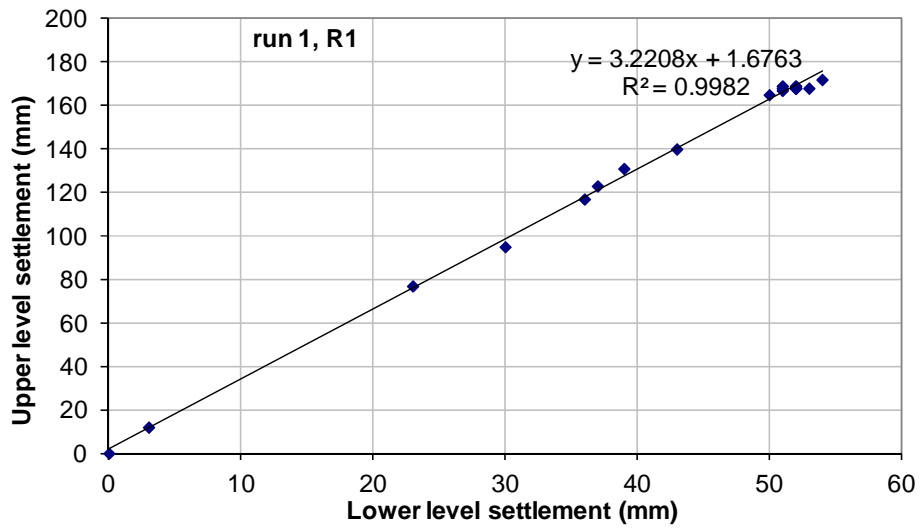


Figure C7-A1.1. Plots of the upper level settlement versus the lower level settlement in reactors R1 and R2 of run 1. Equation of linear correlation and correlation coefficient (R^2) are also showed. Measured data points are the ones of Fig. 7.3.

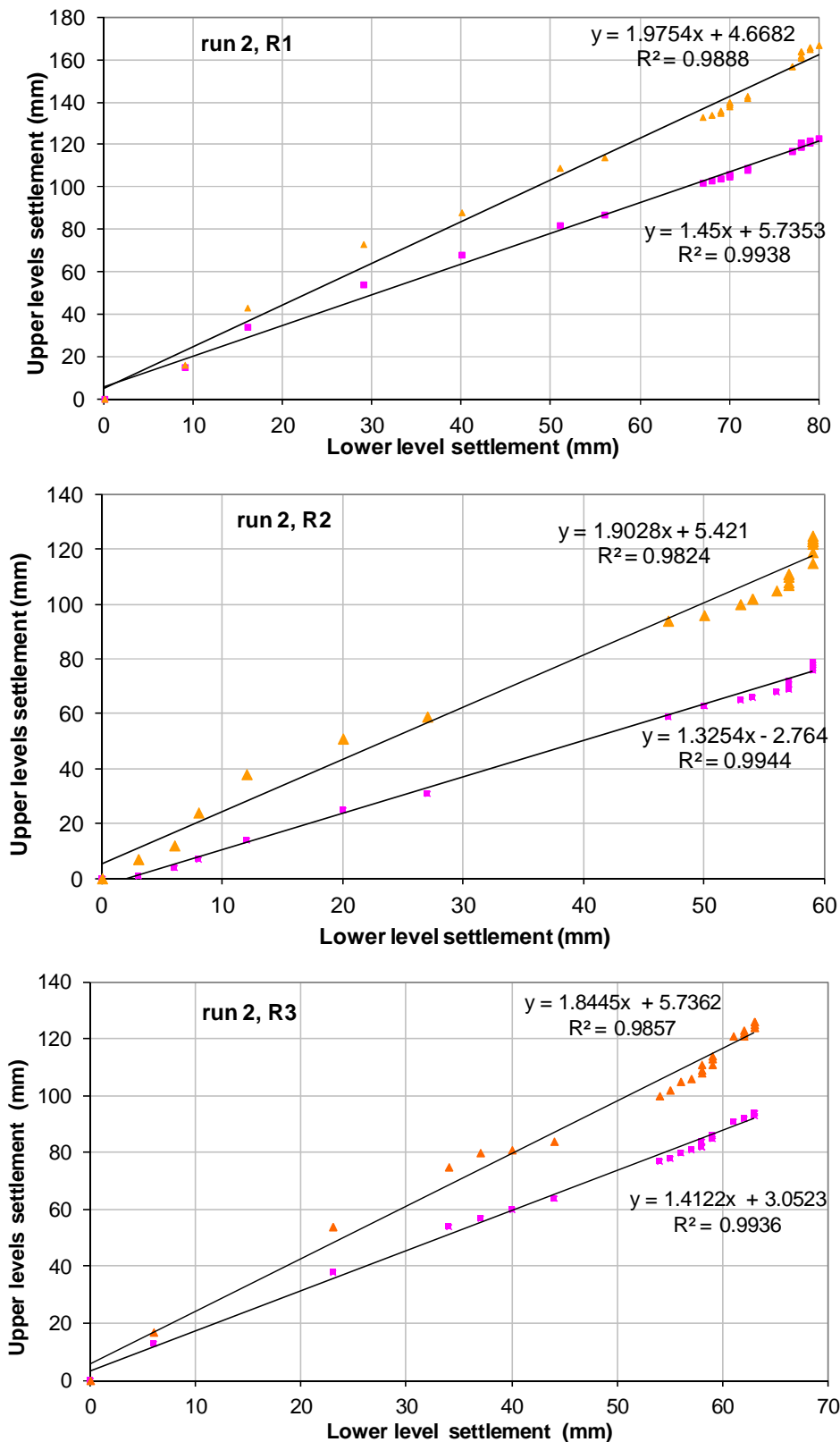


Figure C7-A1.2. Plots of the upper level (squares) and intermediate level settlement (diamonds) versus the lower level settlement in reactors R1, R2 and R3 of run 2. Equation of linear correlation and correlation coefficient (R^2) are also showed. Measured data points are the ones of Fig. 7.3.

CAPÍTOL 8

CONCLUSIONS I LÍNIES DE TREBALL FUTURES

En aquest capítol se sintetitzen els aspectes més rellevants assolits en el present treball i alhora es deixa constància de tots aquells altres aspectes que no han estat recuits i pels que s'entreu la manera d'assolir-los en treballs futurs. És una dita popular que cal aprendre dels errors comesos i la millor manera de treure'n profit és deixar-ne constància perquè tot aquell que hi estigui interessat tingui elements de judici per evitar-los. L'objectiu general és que el model desenvolupat quedi obert i s'hi pugui anar integrant el nou coneixement que es vagi assolint.

8.1 Conclusions respecte al desenvolupament del model base

-S'ha desenvolupat una sistemàtica de presentació dels models biològics que permet acoblar-los amb el model físic proposat. Aquest contempla el procés de compostatge en una matriu porosa que conté les tres fases: sòlida, líquida i gasosa. El model base considera la matriu porosa del material com un sistema de mescla completa i la seva evolució està governada per un conjunt d'equacions diferencials ordinàries. Les fases sòlida i líquida es consideren fixes i en elles s'hi desenvolupen els processos biològics. La fase gasosa és mòbil i està formada per una mescla dels gasos oxigen, CO₂, amoníac, vapor d'aigua i nitrogen.

-El model físic integra els fenòmens de generació d'escalfor, transferència d'escalfor entre les fases sòlida-líquida i gasosa, tant en forma de calor sensible com latent, dissipació d'escalfor a través de la paret del reactor, transferència de massa dels components gasosos solubles entre la fase líquida i la gasosa, i l'equilibri d'espècies iòniques en la fase líquida.

-Al model físic proposat s'hi han acoblat alternativament, després de posar-los en una estructura comuna, dos models biològics diferents, els desenvolupats per J. Kaiser (1996) i per Solé-Mauri (2006). Les simulacions realitzades mostren la importància que el model biològic té en la determinació de l'evolució de la temperatura i les concentracions d'oxigen, CO₂ i amoníac.

-S'han definit 9 indicadors de l'evolució del procés i s'ha determinat la seva sensibilitat respecte als paràmetres del model físic. Aquesta anàlisi de sensibilitat ha posat de manifest que els paràmetres físics poden classificar-se en tres grups, atenent a la seva sensibilitat, coincidents pels dos models biològics analitzats:

a) Paràmetres amb forta influència: Nivell d'aïllament del reactor, cabal d'aireig i pH. El coeficient global de transferència d'escalfor d'un reactor mostra una gran influència sobre el desenvolupament del procés, principalment en reactors petits, a escala de laboratori, on la relació superfície volum és elevada. Reactors ben aïllats es mantenen durant més temps a temperatura elevada i proporcionen un producte final més sec. Malgrat aquesta rellevància, són escassos els treballs publicats que fan una mesura experimental del coeficient de transferència d'escalfor dels reactors utilitzats. A fi d'evitar falses interpretacions de resultats és recomanable fer-ne sempre una determinació experimental.

Cabals d'aireig elevats eliminen més humitat del producte però poden no assolir la temperatura necessària per garantir la higienització del material.

La pèrdua de nitrogen amoniacal del sistema és afectada principalment pel pH, paràmetre en el present model, i en menor quantia pel coeficient de transferència de massa de l'amoniac. Les pèrdues de nitrogen per volatilització es produeixen principalment en les etapes termòfiles si aquest està en forma amoniacal.

b) Paràmetres amb una influència moderada: Els coeficients de transferència de massa de l'oxigen, de l'amoniac i del vapor, i la humitat relativa del corrent d'aireig.

c) Paràmetres amb baixa influència: El coeficient de transferència de massa del CO₂, degut a que el model no té incorporat els equilibris del pH, el coeficient de convecció entre les fase sòlida i gasosa, el que mostra la predominança de la transferència d'escalfor en forma de calor latent, i la temperatura d'entrada del corrent d'aireig. L'escassa influència d'aquesta darrera en l'assecatge del material és causada pel fet que un corrent d'aireig més calent, a igual humitat relativa, també conté més vapor. La inèrcia tèrmica del contenidor i el volum ocupat per la fase gasosa també presenten una influència baixa. Cal destacar que aquest darrer no mostra influència decisiva en cap dels indicadors però en canvi és mencionat en alguns treballs com un dels paràmetres importants en el compostatge, possiblement degut a la seva correlació amb la permeabilitat a l'aire del medi, paràmetre sovint no analitzat i que sí té influència quan el procés es produeix en sistemes estàtics d'aireig forçat.

8.2 Conclusions respecte al desenvolupament del model 1D

-El model 1D proposat contempla les mateixes variables d'estat que el model base, però distribuïdes en l'espai. A partir de l'equació de flux gasós en medi porós i de l'equació d'estat dels gasos perfectes s'han desenvolupat les equacions que governen el moviment de la fase gasosa sota un gradient de pressió. Les equacions de conservació de la massa i de balanç energètic proporcionen un sistema d'equacions diferencials en derivades parcials que, juntament amb un estat inicial i unes condicions de contorn, determinen l'evolució del sistema. Per la resolució numèrica s'ha pres l'estratègia de discretitzar el domini en volums de control, adoptant un esquema de diferències centrades pels termes difusius i un esquema *upwind* pels termes convectius. Així es transforma el sistema d'equacions en derivades parcials en un sistema d'equacions diferencials ordinàries. Tot el codi de resolució numèrica s'ha implementat en Matlab.

-Les simulacions realitzades mostren la capacitat del model per predir els següents fenòmens físics: El refredament evaporatiu de la massa, la formació de condensacions al

plenum superior, l'evolució de la sobrepressió al plenum inferior en l'operació a cabal d'aireig constant, i l'evolució del procés en condicions de tiratge natural.

-Tal i com ja es va observar en l'anàlisi del model base, l'evolució del procés en el model 1D està molt marcada pel model biològic utilitzat.

-L'anàlisi de sensibilitat en el model 1D és més complex que en el model base degut al major nombre de variables presents (les mateixes variables d'estat que en el model base a cadascun dels volums de control de la discretització). La modificació de cada paràmetre repercuteix en els valors dels indicadors de manera diferent al volum de control inferior que al superior. Així, com exemple, un increment en el valor del coeficient de transferència de massa del vapor provoca més assecatge al nivell inferior del reactor però més condensació al nivell superior. Es mantenen com a paràmetres fortament influents el pH, el cabal d'aireig i el nivell d'aïllament del reactor, als que s'hi afegeix la permeabilitat del medi porós al flux gasós. Als paràmetres amb influència més baixa, ja detectats pel model base, s'hi afegeix la conductivitat tèrmica de la matriu porosa, el que confirma el predomini de la transferència d'escalfor per arrossegament convectiu en forma de calor latent.

8.3 Conclusions respecte al disseny i operació dels reactors

-S'han dissenyat i construït tres reactors iguals d'aireig forçat ascendent de 70 L de cabuda cadascun. Cada reactor duia inserida una tija central que sostenia els sensors de temperatura. Un analitzador de gasos succionava regularment gas del plenum superior i n'analitzava la concentració d'oxigen i CO₂. Tot el reactor estava col·locat sobre una bàscula per pesatge en continu. Les mesures fetes eren enregistrades automàticament a intervals regulars. A més a més es van fer manualment lectures periòdiques de l'assentament del material dins els reactors i de la sobrepressió i cabal d'aire de la canonada d'aireig.

-S'operaren els tres reactors alhora en dos experiments successius. En cada experiment es feia una primera càrrega i no s'obrien els reactors en tot el procés (360-400 h). En una segona càrrega, feta amb les mateixes proporcions de mescla de residus que la primera, s'obrien periòdicament els reactors per extreure'n mostres.

-Es va determinar experimentalment el nivell d'aïllament dels reactors mitjançant l'anàlisi de les corbes d'escalfament-refredament dels reactors plens d'aigua. El valor del coeficient global de transferència d'escalfor així obtingut, referit a l'àrea interna del reactor, fou de 1.03 a 1.11 W·m⁻¹·K⁻¹.

-De la comparació de l'evolució de temperatures registrada per sondes situades a les parets del reactor es conclou que la hipòtesi d'una simetria radial, àmpliament acceptada en la literatura, no sempre es verificava. L'origen d'aquesta asimetria fou possiblement l'heterogeneïtat en les mescles de residus utilitzades o la formació de vies d'aireig preferents.

-El registre de les temperatures al plenum superior va permetre concloure que el corrent gasós surt calent a través de la capa superior de material i es refreda, provocant fortes condensacions, per dissipació d'escalfor a través de la paret del plenum superior.

8.4 Conclusions respecte al contrast de dades mesurades i simulacions

El model 1D desenvolupat no reproduïx amb precisió les dades mesurades i en l'estadi actual no és possible arribar a fer un calibratge dels paràmetres del model, ja sigui per la dificultat d'obtenir dades experimentals que permetin la identificació, o per la pròpia dificultat d'aquesta en models amb un nombre tan elevat de paràmetres. Tanmateix el model desenvolupat té tres punts forts:

- a) Reproduïx qualitativament les tendències observades experimentalment en les variables seguides: temperatura, concentració d'oxigen i CO₂, quocient respiromètric, massa total, distribució del contingut d'humitat i evolució de la sobrepressió al plenum inferior. No es té constància que s'hagi publicat cap treball amb un seguiment simultani de tantes variables i de la seva inclusió en un model global.
- b) La reproducció pel model de les tendències en tots els experiments realitzats (en total dades de 12 reactors: 2 experiments x 2 càrregues/experiment x 3 reactors/càrrega) s'ha fet amb un únic conjunt de valors pels paràmetres tant del model físic com del model biològic.
- c) S'han fet les simulacions amb un model basat només en lleis físiques i biològiques generals, sense l'ús de cap correlació empírica entre variables del procés, podent explicar satisfactòriament els fenòmens observats durant el procés.

- S'ha demostrat que les mesures de l'assentament del material dins els reactors, fetes manualment i amb una metodologia molt simple, es poden descriure amb un patró comú. S'ha analitzat la capacitat de diferents funcions, algunes ja utilitzades per altres autors, per descriure l'assentament en funció del temps. La funció de tres paràmetres proposada és la que ajusta millor les dades experimentals, i fins i tot millora els ajustos de dades publicades. En un determinat instant l'assentament en un punt a l'interior de la massa resulta ser proporcional a la posició inicial respecte a la base de la massa. A més a més, es proposa una nova correlació per descriure l'assentament del material en funció del consum acumulat d'oxigen amb bons coeficients de determinació.

-Es va registrar l'evolució de la temperatura a cada nivell dels reactors. El model prediu les tendències generals però no alguns detalls. Així, la pujada inicial fins a l'etapa termòfila, la segona repuntada de temperatura i el descens final són predits qualitativament pel model. Per contra, la davallada per refredament evaporatiu en les primeres hores de procés als nivells inferiors no és reproduïda degut a que el model biològic no reproduïx el retard (etapa *lag*) a inici del creixement microbià. De manera similar, la davallada de la temperatura predita després de les etapes termòfila i mesòfila és més ràpida que la observada experimentalment. Això és causat pel fet que el model biològic adaptat només contempla tres poblacions de microorganismes i tres categories de substrat directament assimilables. En el model cada població degrada unes categories de substrat, l'esgotament de les quals atura el creixement microbià fins que el desenvolupament d'una altra població reprèn l'activitat degradadora. Les dades experimentals d'evolució de la temperatura indiquen que aquestes transicions són més progressives. Això es podria aconseguir incorporant al model més poblacions i categories de substrat o bé modificant les cinètiques de creixement microbià.

-Les tendències generals en l'evolució de les concentracions d'oxigen i CO₂ són reproduïdes pel model però amb mancances en els detalls degudes, possiblement, a les mateixes deficiències en les cinètiques de reacció ja mencionades que originen les transicions brusques en els canvis poblacionals. Les concentracions mínimes d'oxigen que s'assoleixen en l'etapa de pujada inicial de temperatures permeten estimar que els coeficients de transferència de massa de l'oxigen i del CO₂ són de l'ordre de $10^7 \text{ kg}\cdot\text{h}^{-1}\cdot\text{Pa}^{-1}\cdot\text{kg}_{\text{TM}}^{-1}$.

-L'evolució del quocient respiromètric és ben predita pel model, en particular els valors elevats registrats durant les primeres hores del procés, explicable per l'acumulació inicial de CO₂ en solució que s'allibera amb la pujada de temperatura, i la tendència a l'alça cap a final de procés, originada possiblement per la diferent composició dels substrats més recalitrants. Cal remarcar que el quocient respiromètric depèn essencialment de la composició dels components que s'estan degradant i no de la velocitat de degradació.

-La pèrdua de massa total dels reactors és relativament ben predita en la majoria de reactors. Les diferències entre valors predits i valors mesurats són, en la majoria de casos, similars a les diferències entre els valors mesurats en les dues càrregues consecutives dels reactors. El paràmetre que té més influència en la pèrdua de massa total és el coeficient de transferència de massa del vapor, però no és possible l'estimació directa del seu valor perquè la pèrdua de massa d'aigua és desigual als diferents nivells del reactor.

-Comparant les distribucions inicial i final d'humitat mesurades amb els resultats de simulació s'observa que el model reproduceix la tendència general d'assecatge als nivells inferiors i augment de la humitat al nivell superior per acumulació de condensats. Tanmateix alguns detalls observats en les distribucions mesurades fan pensar que el moviment de la fase líquida, no contemplat en el present model, pot ser important a elevats continguts d'humitat del material.

-La sobrepressió requerida al plenum inferior per mantenir un cabal d'aireig constant presenta una pujada a inici del procés seguida d'una tendència descendent irregular. El model pot explicar aquest patró a partir de l'augment de la resistència per increment del flux gasós a les capes superiors del reactor i de l'augment de la viscositat dinàmica de la fase gasosa amb la temperatura. El valor de la permeabilitat al gas del material utilitzat, admetent que es mantenia constant durant el procés, s'estima entre $1.6\cdot 10^{-10}$ i $4.6\cdot 10^{-10} \text{ m}^2$.

En termes generals, el model desenvolupat permet explicar els fenòmens observats en l'etapa experimental i reproduceix satisfactòriament les tendències globals d'evolució de les variables observades, esdevenint una eina d'utilitat per integrar el coneixement bàsic sobre els diferents fenòmens físics i biològics i per avaluar la seva importància relativa.

8.5 Línies de treball futures

Vistos els resultats obtinguts, tant en el desenvolupament del model com en el muntatge experimental, s'indiquen tot seguit alguns dels aspectes susceptibles de millora.

8.5.1 Milllores en el model biològic

-Ja s'ha mencionat que les dades obtingudes experimentalment, tant en l'evolució de la temperatura com de les concentracions d'oxigen i CO₂, presenten transicions més suaus que les proporcionades pel model. Per ajustar aquesta deficiència es suggereixen les següents opcions:

a) Augmentar el nombre de poblacions microbianes i de categories de substrat. Això proporcionaria al model la capacitat d'adaptacions successives més suaus. Tanmateix aquesta opció incorporaria nous paràmetres al model i requeriria definir una metodologia experimental per quantificar analíticament cada categoria.

b) Mantenir poques poblacions i categories de substrat, que siguin quantificables analíticament, i introduir cinètiques diferents a les de Monod que reproduïxin alguns dels trets característics que deixen entreveure els resultats experimentals, tals com: a) reproduïxin l'etapa *lag* inicial a baixes temperatures, b) incrementin la resistència a la biodegradació d'una categoria de substrat a mesura que s'esgota.

c) Considerar l'estructura física del substrat i les cinètiques de desintegració i hidròlisi lligades a aquesta estructura.

8.5.2 Suggestiments pel desenvolupament futur del model físic

El model físic 1D proposat en el present treball té una estructura que permet l'ampliació per incorporar-hi nous fenòmens. Alguns dels previstos són els següents:

1) *Modelització de l'assentament de la massa*. El model físic presentat considera el material en compostatge com una matriu rígida durant tot el procés. Les mesures experimentals fetes demostren que això no és així (Capítol 7). La mesura en que la deformació per assentament de la massa altera les prediccions del model és desconeguda. Per incorporar aquest fenomen al model cal simplement interpretar la deformació de la massa com un camp de velocitats que proporciona un flux d'entrada (o sortida) contínu dels components de les fases líquida i sòlida, amb la corresponent energia associada, a cadascun dels volums de control de la discretització. Es suggereix fer-ho en dos passos de complexitat creixent:

a) Introduir l'assentament com una funció del temps a partir de les correlacions determinades empíricament.

b) Introduir l'assentament com una funció del consum acumulat d'oxigen a partir de la correlació establerta al Capítol 7. Aquesta és la forma que es creu més adequada, ja que lliga directament l'assentament a l'evolució de les variables d'estat. Tanmateix és necessari verificar la validesa de la correlació proposada amb més experiments atès que el consum acumulat d'oxigen és una informació global de tot el reactor i podria no ser aplicable a cada volum de control.

- 2) *Modelització dels equilibris iònics que determinen el pH.* El model presentat considera el pH com un paràmetre físic del model, però diferents autors han mesurat l'evolució del pH durant el procés de compostatge. Aquesta depèn essencialment del residu utilitzat i sol caracteritzar-se per un augment al començament del procés que està relacionat amb la volatilització d'amoníac i la pujada de temperatures.
- 3) *Moviment de la fase líquida.* El model presentat considera la fase líquida lligada a la fase sòlida no deformable de la matriu porosa. Tal i com s'ha mencionat a l'apartat 6.9 el model no descriu acuradament la distribució final d'humitat als diferents nivells del reactor. Una de les maneres que possiblement permetrien explicar els resultats experimentals fora admetent un moviment per gravetat de la fase líquida del nivell superior on hi ha acumulació de condensats cap als nivells situats immediatament al dessota. El fenomen fora senzill d'implementar al model si es coneguessin els llistats a partir dels quals es produeix el moviment.
- 4) *Incorporació de la grandària de partícula i dels fenòmens de reacció i transport en medi particular.* El model presentat considera que el material és un medi porós homogeni on les partícules són prou petites com per poder negligir els efectes de transport difusiu al seu interior. Aquesta hipòtesi es basa més en la simplicitat que proporciona al model que en l'evidència experimental. Davant la dificultat d'una verificació experimental se suggereix una primera aproximació numèrica per visualitzar els efectes que una estructura granular "grossa" produiria respecte a l'estructura granular "fina" considerada en el present model.
- 5) *Extensió del model físic a geometries 2D i 3D.* L'extensió a la geometria 3D és la fita final del model. Davant la complexitat en la descripció del moviment de la fase gasosa en base als valors nodals de les variables d'estat fora convenient, en una etapa prèvia, analitzar els efectes de simplificar el comportament de la fase gasosa i considerar-la com un gas portador amb unes propietats mitjanes que no variessin amb la composició. Aquesta simplificació hauria, però, de poder simular acuradament el tiratge natural.
- 6) *Desenvolupament de models de variables aleatòries.* La gran heterogeneïtat observada en els substrats utilitzats fa pensar que l'enfocament de considerar els paràmetres del model com a distribucions aleatòries podria donar bons resultats.

8.5.3 Millores en el disseny experimental

Tot disseny de futurs experiments de compostatge ha d'incorporar almenys dos objectius:

- a) El disseny i operació de reactors s'ha de fer amb prou cura com per aconseguir resultats idèntics repetint l'experiment amb les mateixes condicions. L'heterogeneïtat dels substrats utilitzats en compostatge dificulta

aquesta tasca, però és imprescindible assolir-la abans d'entrar en l'etapa de modelització.

- b) Davant la complexa interrelació dels fenòmens que intervenen en el compostatge cal dissenyar els experiments per aconseguir el registre simultani i precís del major nombre possible de variables del model.

A la vista dels encerts i mancances detectades en l'execució de la part experimental del present treball es mencionen tot seguit algunes millores a introduir en experiments futurs:

- Determinació dels fluxos d'entrada i sortida d'aigua del sistema a fi de poder tancar el balanç d'aigua. Durant el procés es produeix aigua de reacció, però per mesurar-la experimentalment cal mesurar tots els altres fluxos que intervenen en el balanç màssic. A aquest efecte se suggereix el registre en continu del cabal d'aire que entra al reactor i del seu contingut en humitat. La possible acumulació de lixiviats al plenum inferior es pot mesurar amb un tub indicador de nivell, i la sortida d'aigua amb els gasos calents del plenum superior es pot mesurar refredant-los en un condensador a temperatura constant. L'experiència adquirida en l'operació dels reactors indica que, tot i mantenir un cabal d'aireig constant amb cabalímetres reguladors tèrmics, la humitat relativa de l'aire insuflat fluctuava molt. Per evitar-ho es recomana instal·lar un dispositiu d'humectació a l'aireig.
- La mesura en continu de la concentració d'amoníac als gasos de sortida és imprescindible per tancar el balanç de nitrogen. En els experiments realitzats no s'aconseguí mesurar en continu la concentració d'amoníac perquè en les etapes de forta volatilització es depassava el rang de mesura del sensor. A més a més, determinats sensors d'amoníac són sensibles a la presència d'altres compostos orgànics volàtils.
- La utilització d'un sistema d'aireig a polsos o amb un cabal fluctuant és del tot desaconsellable perquè produeix un dentelat en les corbes de concentració de gasos a la sortida que emmascara les pertorbacions produïdes per altres efectes i que poden donar informació important del sistema.
- La no igualtat en les corbes d'evolució de la temperatura i de les concentracions d'oxigen i CO_2 en la repetició dels experiments s'atribueix a l'heterogeneïtat dels residus recollits en dies diferents. Per aconseguir la repetitivitat dels resultats fora recomanable una única recollida de residus. La preparació de les mescles de sòlids és més complexa que la de líquids, per això es recomana fer un triturat uniforme dels diferents substrats, mesclar-los el més uniformement possible i conservar les mescles fetes en congelador per a la repetició de l'experiment. De no ser possible la congelació llavors cal operar diversos reactors en paral·lel exactament amb les mateixes condicions. La no uniformitat

en les mescles pot ser la causa de la formació de vies d'aireig preferents en els reactors i de l'asimetria en la distribució de temperatures.

- Donada la importància del moviment de la humitat en el medi porós fora interessant estudiar la viabilitat de mesurar en continu la humitat del material als diferents nivells del reactor amb mètodes no destructius tals com els sensors capacitius i inductius.
- Una de les maneres d'estudiar la dinàmica de reactors estàtics verticals fora la determinació experimental dels balanços de massa a cadascuna de les diferents capes. Per això es suggereix la construcció d'un reactor vertical en el que les diferents capes estiguessin separades per un filat rígid fixat, de manera que quedés un petit plenum entre dues capes successives. L'anàlisi de la fase gasosa extreta d'aquests plenums permetria tancar el balanç de massa dels components gasosos a cada capa i analitzar com la seva concentració afecta a la dinàmica de desenvolupament microbià.

REFERÈNCIES

- Ahn HK, Richard TL, Choi HL. 2007. Mass and thermal balance during composting of a poultry manure—Wood shavings mixture at different aeration rates. *Process Biochemistry* 42:215-223.
- APHA, AWWA, WEF. 1995. *Standard Methods for the Examination of Water and Wastewater*.
- Bach PD, Nakasaki K, Shoda M, Kubota H. 1987. Thermal balance in composting operations. *Journal of Fermentation Technology* 65:199-209.
- Bari QH, Koenig A. 2005. Mathematical model of composting in a closed system: effect of airflow rate on vertical temperature distribution. CD-ROM Proceedings Sardinia 2005 Tenth International Waste Management and Landfill Symposium (R.Cossu and R. Stegman eds.), s. Margherita di Pula -Calgary, Italy;3-7 October 2005. Environmental Sanitary Engineering Centre, University of Padua, Italy. 10pp.
- Bari QH, Koenig A, Guihe T. 2000. Kinetic analysis of forced aeration composting -I. Reaction rates and temperature. *Waste Management & Research* 18:303-312.
- Barrena R, Canovas C, Sánchez A. 2006. Prediction of temperature and thermal inertia effect in the maturation stage and stockpiling of a large composting mass. *Waste Management* 953-959.
- Batstone DJ, Keller J, Angelidaki I, Kalyuzhnyi SV, Pavlostathis SG, Rozzi A, Sanders WTM, Siegrist H, Vavilin VA. 2002. *Anaerobic Digestion Model n° 1 (ADM1)*. Scientific and Technical Report n° 13. IWA Publishing:88.
- Blanes-Vidal V, Sommer SG, Nadimi ES. 2009. Modelling surface pH and emissions of hydrogen sulphide, ammonia, acetic acid and carbon dioxide from a pig waste lagoon. *Biosystems Engineering* 104:510-521.
- Bongochgetsakul N, Ishida T. 2008. A new analytical approach to optimizing the design of large-scale composting systems. *Bioresource Technology*, 99:1630-1641.
- Chia-Nan Liu, Rong-Her Chen, Kuo-Sheng Chen. 2006. Unsaturated consolidation theory for the prediction of long-term municipal solid waste landfill settlement. *Waste Management & Research* 24:80.
- Chica AF, García JL. 2007. Aspectos técnicos en el desarrollo y control del procesos de compostaje. In:J. Moreno; R. Moral; 2007, *Compostaje*, ediciones Mundi-Prensa. p 141-164.
- CPCU Compagnie Parisienne de Chauffage Urbain. 1987. *Vapor de Agua*.
- Das K, Keener HM. 1997. Numerical model for the dynamic simulation of a large scale composting system. *Transactions of the ASAE* 40:1179-1189.

- Das KC, Minkara MY, Melear ND. 2002. Composting process for the stabilization of an industrial fermentation biomass byproduct. *Transactions of the ASAE* 45:1703-1708.
- Das K, Keener HM. 1997. Moisture effect on compactation and permeability in composts. *Journal of environmental engineering* 275-281.
- de Bertoldi M. 2008. The recycling of nutrients by means of organic residues. *Proceedings of the 6th International Conference ORBIT 2008*. Wageningen (Netherlands), 13th-15th October 2008.
- de Guardia A, Mallard P, Teglia C, Marin A, Le Pape C, Launay M, Benoist JC, Petiot C. 2010. Comparison of five organic wastes regarding their behaviour during composting: Part 1, biodegradability, stabilization kinetics and temperature rise. *Waste Management* 30:402-414.
- Ekinci K, Keener HM, Elwell DL. 2000. Composting short paper fiber with broiler litter and additives. Part I: effects of initial pH and carbon/nitrogen ratio on ammonia emission. *Compost Science & Utilization* 8:160-172.
- Elagroudy SA, Abdel-Razik MH, Warith MA, Ghobrial FH. 2008. Waste settlement in bioreactor landfill models. *Waste Management*, 28:2366-2374.
- Finger SM, Hatch RT, Regan TM. 1976. Aerobic Microbial Growth in Semisolid Matrices: Heat and Mass Transfer Limitation. *Biotechnology and Bioengineering* XVIII:1193-1218.
- Flotats X, Solé F. 2007. Situación actual en el tratamiento de los residuo orgánicos: aspectos científicos, ecoómicos y legislativos. In: Moreno J and Moral R, editors. *Compostaje*. Madrid:Ediciones Mundi-Prensa. p 43-74.
- Gea T, Richard TL. 2008. Evolution of physical properties during the composting process of wastes of different biodegradable organic matter content and their influence on biodegradation kinetics. *Proceedings of the 6th International Conference ORBIT 2008*, 13-15th Oct., 2008, Wageningen, The Netherlands 1-11.
- Gea T, Barrena R, Artola A, Sánchez A. 2004. Monitoring the Biological Activity of the Composting Process: Oxygen Uptake Rate (OUR), Respirometric Index (RI), and Respiratory Quotient (RQ). *Biotechnology and Bioengineering* 88:520-527.
- Ghaly AE, Alkoaik F, Snow A. 2006. Thermal balance of invessel composting of tomato plant residues. *Canadian Biosystems Engineering* 48:6.1-6.11.
- Gourc J-, Staub MJ, Conte M. 2010. Decoupling MSW settlement into mechanical and biochemical processes – Modelling and validation on large-scale setups. *Waste Management* 30:1556-1568.
- Haug RT. 1993. *The Practical Handbook of Compost Engineering*. Boca Raton, Florida (USA):Lewis Publishers.

- Hausen H. 1964. Berechnung der Wärmeübertragung in Regeneratoren bei temperaturabhängigen Stoffwerten und Wärmeübergangszahlen. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 7:112-123.
- Hauser JR. 2009. *Numerical Methods for Nonlinear Engineering Models*. Springer Science+Business Media
- Henze M, Grady Jnr CPL, Gujer W, Marais Gv, Matsuo T. 2000. Activated Sludge Model n°1 (ASM1). Scientific and Technical Report n°9:pp130.
- Hettiarachchi CH, Meegoda JN, Tavantzis J, Hettiaratchi P. 2007. Numerical model to predict settlements coupled with landfill gas pressure in bioreactor landfills. *Journal of Hazardous Materials* 514-522.
- Hettiarachchi H, Meegoda J, Hettiaratchi P. 2009. Effects of gas and moisture on modeling of bioreactor landfill settlement. *Waste Management* 29:1018-1025.
- Higgins AJ, Chen S, Singley ME. 1982. Airflow resistance in sewage sludge composting aeration systems. *Transactions of the ASAE* 1010-1018.
- Higgins CW, Walker LP. 2001. Validation for a new model for aerobic organic solids decomposition: simulations with substrate specific kinetics. *Process Biochemistry* 36:875-884.
- Hotta S, Funamizu N. 2009. Simulation of accumulated matter from human feces in the sawdust matrix of the composting toilet. *Bioresource Technology*, 100:1310-1314.
- Illa J, Prenafeta-Boldú FX, Bonmatí A, Flotats X. 2012. Empirical characterisation and mathematical modelling of settlement in composting batch reactors. *Bioresource Technology* 104:451-458.
- Kaiser J. 1996. Modelling composting as a microbial ecosystem: a simulation approach. *Ecological Modelling* 91:25-37.
- Keener HM, Marugg C, Hansen RC, Hoitink HAJ. 1993. Optimizing the efficiency of the composting process. *Science and Engineering of Composting: Design, Environmental, Microbiological and Utilization Aspects*. Wooster, Ohio:Ohio Agricultural Research and Development Center. p 59-94.
- Koch K, Lübken M, Gehring T, Wichern M, Horn H. 2010. Biogas from grass silage – Measurements and modeling with ADM1. *Bioresource Technology* 101:8158-8165.
- Liang Y, Leonard JJ, Feddes JJ, McGill WB. 2004. A simulation model for ammonia volatilization in composting. *Transactions of the ASAE* 47:1667-1680.
- Lide DR. 1993. *CRC Handbook of Chemistry and Physics. A Ready-Reference Book of Chemical and Physical Data* .

- Lin YP, Huang GH, Lu HW, He L. 2008. Modeling of substrate degradation and oxygen consumption in waste composting processes. *Waste Management* 28:1375-1385.
- Look DC, Sauer HJ. 1988. *Engineering Thermodynamics*. 781. Van Nostrand Reinhold.
- Lopez Zavala MA, Funamizu N, Takakuwa T. 2004. Modeling of aerobic biodegradation of feces using sawdust as a matrix. *Water Research*, 38:1327-1339.
- Malinska KA, Richard TL. 2006. The impact of physical properties and compaction on biodegradation kinetics during composting. *Proceedings of the 5th International Conference ORBIT 2006, Weimar 13-15 September 2006* 125-132.
- Mason IG. 2009. Predicting biodegradable volatile solids degradation profiles in the composting process. *Waste Management* 29:559-569.
- Mason IG. 2006. Mathematical modelling of the composting process: A review. *Waste Management*, 26:3-21.
- Mason IG, Milke MW. 2005. Physical modelling of the composting environment: A review. Part 1: Reactor systems. *Waste Management*, 25:481-500.
- McCartney D, Chen H. 2001. Using a biocell to measure the effect of compressive settlement on free air space and microbial activity in windrow composting. *Compost Science & Utilization* 9:285-302.
- Mills AF. 1995. *Heat and Mass Transfer*. Richard D. Irwin, Inc.
- Mohee R, White RK, Das KC. 1998. Simulation model for composting cellulosic (bagasse) substrates. *Compost Science & Engineering* 6:82-92.
- Morisaki N, Phae CG, Nakasaki K, Shoda M, Kubota H. 1989. Nitrogen transformation during thermophilic composting. *Journal of Fermentation and Bioengineering* 67:57-61.
- Multon JL. 1988. Preservation and storage of grains, seeds and their by-products: cereals, oilseeds, pulses and animal feed. *Technique et Documentation Lavoisier*.
- Musvoto E, Wentzel M, Loewenthal R, Ekama G. 1997. Kinetic-based model for mixed weak acid/base systems. *Water SA* 23:311-322.
- Mysliwiec MJ, VanderGheynst JS, Rashid MM, Schroeder ED. 2001. Dynamic volume-average model of heat and mass transport within a compost biofilter: I. Model development. *Biotechnology and Bioengineering* 73:282-294.
- Nakasaki K, Kato Y, Akiyama T, Kubota H. 1987a. A new composting model and assessment of effective drying of compost material. *Journal of Fermentation Technology* 65:441-447.

- Nakasaki K, Nakano Y, Akiyama T, Shoda M, Kubota H. 1987b. Oxygen diffusion and microbial activity in the composting of dehydrated sewage sludge cakes. *Journal of Fermentation Technology* 65:43-48.
- Ndegwa PM, Thompson SA, Merka WC. 2000. A dynamic simulation model of in-situ composting of caged layer manure. *Compost Science & Utilization* 8:190-202.
- Patankar SV. 1980. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. Hemisphere Publishing Corp.
- Pujol A, Debenest G, Pommier S, Quintard M, Chenu D. 2011. Modeling Composting Processes with Local Equilibrium and Local Non-Equilibrium Approaches for Water Exchange Terms. *Drying Technology* 29:1941-1953.
- Reklaitis GV, Schneider DR. 1989. *Balances de Materia y Energía*. 649. McGraw-Hill Interamericana.
- Richard TL, Veeken AHM, Wilde Vd, Hammelers HVM. 2004. Air-filled porosity and permeability relationships during solid-state fermentation. *Biotechnology Progress* 20:1372-1381.
- Rosso L, Lobry JR, Frandois JP. 1993. An unexpected correlation between cardinal temperatures of microbial growth highlighted by a new model. *Journal of Theoretical Biology* 162:447-463.
- Sander R. 1999. *Compilation of Henry's Law Constants for Inorganic and Organic Species of Potential Importance in Environmental Chemistry*. 1-107. <http://www.mpch-mainz.mpg.de/~sander/res/henry.html>
- Sangsurasak P, Mitchell DA. 1998. Validation of a model describing two-dimensional heat transfer during solid-state fermentation in packed bed bioreactors. *Biotechnology and Bioengineering* 60:739-749.
- Saucedo-Castañeda G, Gutiérrez-Rojas M, Bacquet G, Raimbault M, Viniegra-González G. 1990. Heat transfer simulation in solid substrate fermentation. *Biotechnology and Bioengineering* 35:802-808.
- Schaub-Szabo SM, Leonard JJ. 1999. Characterizing the Bulk Density of Compost. *Compost Science & Utilization* 7:15-24.
- Smith R, Eilers RG. 1980. Numerical simulation of activated sludge composting. EPA-600/2-8C-191:67.
- Solé-Mauri F. 2006. *Mathematical modelling of the composting process*. Ph.D Thesis. University of Lleida (Spain).
- Sole-Mauri F, Illa J, Magrí A, Prenafeta-Boldú FX, Flotats X. 2007. An integrated biochemical and physical model for the composting process. *Bioresource Technology*, 98:3278-3293.

- Stoltz G, Gourc J, Oxarango L. 2010. Liquid and gas permeabilities of unsaturated municipal solid waste under compression. *Journal of Contaminant Hydrology* 118:27-42.
- Stombaugh DP, Nokes SE. 1996. Development of a biologically based aerobic composting simulation model. *Transactions of the ASAE* 39:239-250.
- Sundberg C, Smars S, Jönsson H. 2004. Low pH as an inhibiting factor in the transition from mesophilic to thermophilic phase and composting. *Bioresource Technology* 95:145-150.
- Tinet A-, Oxarango L. 2010. Stationary gas flow to a vertical extraction well in MSW landfill considering the effect of mechanical settlement on hydraulic properties. *Chemical Engineering Science* 65:6229-6237.
- Tremier A, de Guardia A, Martel JL. 2006. Management strategies for a forced-aerated composting process: Use of a numerical method to predict and improve the treatment. *Proceedings of the International Conference ORBIT 2006* 203-212.
- Tremier A, de Guardia A, Massiani C, Paul E, Martel JL. 2005. A respirometric method for characterising the organic composition and biodegradation kinetics and the temperature influence on the biodegradation kinetics, for a mixture of sludge and bulking agent to be co-composted. *Bioresource Technology* 96:169-180.
- Trémier A, Teglia C, Barrington S. 2009. Effect of initial physical characteristics on sludge compost performance. *Bioresource Technology* 100:3751-3758.
- Turner C, Williams A, White R, Tillett R. 2005. Inferring pathogen inactivation from the surface temperatures of compost heaps. *Bioresource Technology* 96:521-529.
- Van Lier JJC, Van Ginkel JT, Straatsma G, Gerrits JPG, Van Griensven LJLD. 1994. Composting of mushroom substrate in a fermentation tunnel: compost parameters and a mathematical model. *Netherlands Journal of Agricultural Science* 42:271-292.
- VanderGheynst JS, Gosset JM, Walker LP. 1997. High-solids aerobic decomposition: pilot-scale reactor development and experimentation. *Process Biochemistry* 32:361-375.
- von Meien OF, Mitchell DA. 2002. A Two-Phase Model for Water and Heat Transfer Within an Intermittently-Mixed Solid-State Fermentation Bioreactor with Forced Aeration. *Biotechnology and Bioengineering* 79:416-428.
- Wall DK, Zeiss C. 1995. Municipal landfill biodegradation and settlement. *Journal of Environmental Engineering* 121:214-223.
- Xi B, Zhang G, Liu H. 2005. Process kinetics of inoculation composting of municipal solid waste. *Journal of Hazardous Materials* B124:165-172.

- Yu S, Clark OG, Leonard JJ. 2008. A statistical method for the analysis of nonlinear temperature time series from compost. *Bioresource Technology* 99:1886-1895.
- Yu S, Grant Clark O, Leonard JJ. 2009. Influence of free air space on microbial kinetics in passively aerated compost. *Bioresource Technology*, 100:782-790.
- Yue B, Chen T, Gao D, Zheng G, Liu B, Lee D. 2008. Pile settlement and volume reduction measurement during forced-aeration static composting. *Bioresource Technology*, 99:7450-7457.

ANNEX 1: LLISTATS MATLAB DE LES RUTINES UTILITZADES

Amb la finalitat de donar la màxima transparència als procediments de còmput utilitzats i obrir-los a la crítica de tota persona coneixedora del tema, s'adjunten els llistats íntegres en Matlab de les rutines utilitzades en les simulacions realitzades. Els llistats són còpia fidedigna de les darreres versions utilitzades per obtenir els resultats numèrics presentats, i cal entendre'ls com una eina de treball potser encara poc polida per a la divulgació. S'hi inclouen les rutines del model base, tant les que utilitzen el model biològic de J. Kaiser com les que utilitzen el model adaptat de Solé-Mauri, i les del model 1D, basades en el model biològic adaptat de Solé-Mauri. A la Taula A1.1 es mostren les subrutines de cada model.

Taula A1.1. Rutines utilitzades per al model base i el model 1D amb els models biològics de J. Kaiser i de Solé-Mauri adaptat. La forma en que es criden successivament les subrutines en la simulació del procés s'indica a la Fig. 4.14.			
	Model base		Model 1D
Model biològic	J. Kaiser	Solé-Mauri adaptat	Solé-Mauri adaptat
Simulació de procés	<i>compKai00</i> <i>genkfbKai00</i> <i>genvinitKai00</i> <i>genzmabKai00</i> <i>fKai00</i>	<i>compSa</i> <i>genkfbSa</i> <i>genvinitSa</i> <i>genzmabSa</i> <i>fSa</i>	<i>compSa1D</i> <i>genkfbSa1D</i> <i>genvinitSa1D</i> <i>genzmabSa</i> <i>fSa1D</i>
Anàlisi de sensibilitat	<i>asensiKai00</i>	<i>asensiSa</i>	
Gràfiques			<i>graf1D</i>

A1.1 Llistats de les rutines del model base utilitzant el model biològic de J. Kaiser

```

=====
%compKai00
%Programa main per simular l'evolució del procés de compostatge en un
%reactor batch de mescla completa segons el model biològic de J. Kaiser i
%el model de transferència de massa i energia BME3.
%No és necessària cap variable en el workspace.

disp('S''esta en proces de calcul')
C0=fix(clock);           %Registre instant inici del proces de calcul.

TSPAN=[0:360];          %h Vector de punts en el temps

[GD,KF,KB]=genkfbKai00(); %Vectors constants geometriques, físiques i biològiques

VINIT=genvinitKai00(KF,GD); %Vector d'estat inicial

ZMAB=genzmabKai00(KB,VINIT); %Matriu ZMAB en l'estat inicial

options=odeset('RelTol',1e-9,'AbsTol',1e-11,...
'MaxStep',1e-1,'Stats','on');

%options=odeset('RelTol',1e-9,'AbsTol',1e-11,'OutputFcn',@contrlC4,...
%'MaxStep',1e-1,'Stats','on');

[T,Y]=ode15s(@fKai00,TSPAN,VINIT,options,ZMAB,KF,GD,KB);

disp('Proces acabat')
fprintf('Hora de fi proces de calcul:  %4.0f%4.0f%4.0f%4.0f%4.0f%4.0f\n',fix(clock))
fprintf('Hora inici proces de calcul:  %4.0f%4.0f%4.0f%4.0f%4.0f%4.0f\n',C0)

%DETERMINACIÓ DELS INDICADORS DE PROCÉS %=====
is=GD(16);
iw=GD(17);
it=GD(18);
TM0=sum(VINIT(1:iw)); %kg Initial total mass
TM=sum(Y(:,1:iw))'; %Total mass evolution
mc=Y(:,iw)./TM*100; %Moisture content (wb) evolution

I(1)=Y(end,it+1+1)/TM0; %kgO2 /kgTM0 Indicador 1
I(2)=Y(end,it+1+2)/TM0; %kgCO2/kgTM0 Indicador 2
I(3)=Y(end,it+1+3)/TM0; %kgNH3/kgTM0 Indicador 3
I(4)=Y(end,it+1+4)/TM0; %kgvap/kgTM0 Indicador 4
I(5)=Y(end,it+1+5); %h Temps a T>Tr1 Indicador 5
I(6)=Y(end,it+1+6); %°C·h Integral tèrmica Indicador 6
I(7)=mc(end); %-- Humitat final prod Indicador 7
I(8)=min(Y(:,is+1)./Y(:,iw))*1e6; %mgO2/L Conc O2 minima Indicador 8
I(9)=max((Y(:,it+1)>KF(52)).*TSPAN')+1; %h Durada procés Indicador 9

%REPRESENTACIONS GRÀFIQUES DE L'EVOLUCIÓ DEL PROCÉS %=====
%Gràfica 1
Psat=10.^(22.443-2795./Y(:,it)-1.6798*log(Y(:,it))); %Pa Saturated vapor pressure
Pv=Y(:,iw+4)*KF(1).*Y(:,it)/KF(37); %Pa Vapour pressure in gaseous phase
HR=Pv./Psat*100; %Relative moisture in gas phase

subplot(2,2,1)
hold on

```

```

plot(T,Y(:,it:it+1)-KF(2)); %Temperature evolution gaseous and solid phases
plot(T,[TM,Y(:,iw),mc]); %Evolution total mass, mass of water, moisture content
plot(T,HR,'g'); %Evolution of relative moisture in gas phase
hold off

```

```
%Gràfica 3
```

```

%O2 content in dry air
Heo2=1e5*exp(16.7886-1800./Y(:,it+1)); %Pa Henry constant for O2
Po2s=Heo2*18/32.*Y(:,is+1)./Y(:,iw); %Pa O2 partial pressure if saturated
nas=sum(Y(:,iw+1:iw+3)'+Y(:,iw+5)); %kmol Molar mass of dry air
CVo2=Y(:,iw+1)./nas*100; %-- O2 molar fraction in dry air
CVo2s=Po2s./(KF(19)-Pv); %-- O2 molar fraction in dry air if sat
Cwo2=Y(:,is+1)./Y(:,iw)*1e6; %mgO2/L O2 concentration in water

```

```
%CO2 content in dry air
```

```

pKc1=-14.8435+0.03279*Y(:,it+1)+3404.7./Y(:,it+1);
pKc2= -6.498 +0.02379*Y(:,it+1)+2902.4./Y(:,it+1);
fFco2=1./(1+10.^(KF(7)-pKc1)+10.^(2*KF(7)-pKc1-pKc2));
Heco2=1e5*exp(15.4570-2400./Y(:,it+1)); %Pa Constant de Henry CO2
Pco2s=Heco2.*fFco2*18/44.*Y(:,is+2)./Y(:,iw); %Pa CO2 partial press if saturated
CVco2=Y(:,iw+2)./nas*100; %-- CO2 molar fraction in dry air
CVco2s=Pco2s./(KF(19)-Pv)*100; %-- CO2 molar fraction in dry air if sat.

```

```

subplot(2,2,3)
plot(T,[CVo2,CVo2s,CVco2,CVco2s]);

```

```
%Gràfica 2
```

```

%Respirometric ratio
subplot(2,2,2)
plot(T,CVco2./(21-CVo2));

```

```
%genkfbKai00
```

```

%Rutina per generar els vectors de constants pel model de J.Kaiser
% GD Vector de constants de geometria i discretització
% KF Vector de constants físiques
% KB Vector de paràmetres del model biològic i índexs d'estructura

```

```
function [GD,KF,KB]=genkfbKai00();
```

```
%PARAMETRES DE GEOMETRIA I DISCRETITZACIÓ (GD)=====
```

```
%Parametres de la discretitzacio 1D i de geometria -----
```

```

%GD(1)=7; % -- tv VC superior
%GD(2)=0.3; % m d Diametre de la columna
%GD(3)=1.0; % m h Alçaria de la columna
%GD(4)=GD(3)/(GD(1)-1); % m dz Alçaria d'un VC
%GD(5)=pi*GD(2)^2/4; % m2 S Area de la seccio recta de la columna

```

```
%Parametres de l'estructura del model fis1D -----
```

```

GD(15)=5; % ix Index de la darrera variable de substrat (cal. esp: cps)
GD(16)=10; % is Index de la darrera variable no volatil
GD(17)=14; % iw Index de la variable aigua
GD(18)=20; % it Index de la variable temperatura gasos
%GD(19)=21; % ni Nombre de variables d'estat en cada VC
GD(19)=27; % ni Nombre de variables d'estat en cada VC (inclou indicadors)

```

```
%PARAMETRES FÍSICS (KF) =====
```

```
%Parametres termodinamics -----
```

```

KF(1)=8314;          % J/kmol.K   R   Constant universal dels gasos
KF(2)=273.15;       % K           zc  Temperatura de referència
KF(4)=4183;         % J/kg.K     cpw Calor especifica aigua i microorgs. (u7,      ,u14)
KF(5)=2300;         % J/kg.K     cps Calor especifica substrats (u1,      ,u5)
KF(6)=800;          % J/kg.K     cpm Calor especifica fraccio mineral (u6)
KF(7)=7.5;          % --         pH  de la fase líquida

KF(10)=45.0756e6;  % J/kmol     h0  Terme fix relació lineal entalpia vapor
KF(11)=29595;      % J/kmol.K   Cp1 Calor molar O2
KF(12)=38233;      % J/kmol.K   Cp2 Calor molar CO2
KF(13)=36641;      % J/kmol.K   Cp3 Calor molar NH3
KF(14)=31369;      % J/kmol.K   Cp4 Calor molar H2O
KF(15)=29136;      % J/kmol.K   Cp5 Calor molar N2

%Propietats físiques del contenidor-----
KF(16)=3e4;         % J/h.K      UA  Coef transf d'escalfor del contenidor
KF(17)=1e5;         % J/K        CCON Capacitat calorifica del contenidor
%KF(17)=3e4;        % J/h.K.m    UA  Coef transf d'escalfor per ml de columna
%KF(18)=9e4;        % J/K.m      CCON Capacitat calorifica contenidor per ml de columna

%Parametres del contorn -----
KF(19)=1.013e5;     % Pa         Pa  Pressio atmosferica (al nivell sup. de la columna)
KF(20)=20+KF(2);    % K          Ta  Temperatura de l'ambient exterior
KF(21)=1.00;        % m3/h       Qo  Cabal d'aire humit d'entrada (MODE Q0)
KF(22)=1.013e5;     % Pa         Po  Pressió d'entrada al reactor (s'hi mesura Qo)
KF(23)=20+KF(2);    % K          To  Temperatura d'entrada de l'aire (s'hi mesura Qo)
KF(24)=0.70;        % --         eo  Humitat relativa aire en el corrent d'entrada
KF(25)=0.21;        % --         yo1 Fracció molar d'O2 en l'aire sec d'entrada
KF(26)=0.00;        % --         yo2 Fracció molar d'CO2 en l'aire sec d'entrada
KF(27)=0.00;        % --         yo3 Fracció molar d'NH3 en l'aire sec d'entrada
KF(28)=0.79;        % --         yo5 Fracció molar d'N2 en l'aire sec d'entrada

%Propietats físiques material-----
%KF(30)=350;        % kg/m3      ro  Densitat aparent medi
%KF(31)=0.30;       % --         FAS Free Air Space
%KF(32)=1e-10;      % m2         kp  Permeabilitat a l'aire del medi poros
%KF(33)=1500;       % J/m2.h.K   k   Conductivitat termica del medi poros
%KF(34)=.55;        % --         mc  Moisture content (wet basis)
%KF(35)=5.067e-9;   % Pa.h       mu  Viscositat dinamica de l'aire (valor a 20°C)
KF(37)=0.50;        %m3         Vg  Volum de la fase gasosa
%mu=(5.067+1.2168e-2*(U(36)-293))*1e-9; %Pa.h Viscositat depen temperatura

%Heat and mass transfer coeficients-----
KF(41)=1e-6;        % kgO2/h.Pa.kgTM xklo2 Oxygen mass transfer coef liq-gas phase
KF(42)=1e-6;        % kgCO2/h.Pa.kgTM xklco2 CO2 mass transfer coef liq-gas phase
KF(43)=1e-6;        % kgNH3/h.Pa.kgTM xklnh3 NH3 mass transfer coef liq-gas phase
KF(44)=1e-6;        % kgH2O/h.Pa.kgTM xklw  Water mass transfer coef liq-gas phase
KF(45)=1000;        % J/h.K.kgTM  hcsv Heat transfer coef solid-gas phase

%Temperatures de referència pel càlcul dels indicadors
KF(50)=55+KF(2);    %K          Tr1 Temperatura de referència
KF(51)=60+KF(2);    %K          Tr2 Temperatura de referència
KF(52)=KF(20)+7;    %K          Tfp Temperatura de final de procés

%PARÀMETRES DEL MODEL BIOLÒGIC (KB) =====
%Paràmetres cinètics -----
KB(1)=0.2;          %h-1        Maximum growth rate for bacteria
KB(2)=0.1;          %h-1        Maximum growth rate for actinomycetes

```

```

KB(3)=0.05;    %h-1  Maximum growth rate for brown-rot fungi
KB(4)=0.03;    %h-1  Maximum growth rate for white-rot fungi

KB(11)=0.02;   %--   K1 Monod saturation constant for bacteria
KB(12)=0.02;   %--   K2 Monod saturation constant for actinomycetes
KB(13)=0.02;   %--   K3 Monod saturation constant for brown-rot fungi
KB(14)=0.02;   %--   K4 Monod saturation constant for white-rot fungi

KB(16)=0.001;  %h-1  kd Decay rate for all microorganisms
KB(17)=.2e-3;  %kgO2/m3 K02 Saturation constant for oxygen (Not present in J. Kaiser)

%Paràmetres estequiomètrics -----
KB(20)=0.2;    %--   y Microorganiss yield on substrate
KB(21)=0.44;   %--   cc Carbon contents in microorganisms and substrate
KB(22)=14e6;   %J/kg  Release of heat per kg O2 consumed

```

```
%genvinitKai00
```

```

%Rutina per generar el vector d'estat inicial del model de J.Kaiser.
%S'admet que en l'estat inicial tant la fase gasosa com la líquida estan a
%la temperatura de l'ambient i que la fase gasosa està saturada de vapor.
%Les concentracions de O2, CO2 i NH3 en la fase líquida són tals que estan en
%equilibri amb la composició de la fase gasosa.

```

```
function VINIT=genvinitKai00(KF,GD);
```

```
%Assignació da valor a constants
```

```

is=GD(16);    % -      is  Index darrera variable no volàtil
iw=GD(17);    % -      iw  Index de la variable aigua
it=GD(18);    % -      it  Index de la variable temperatura gasos
ni=GD(19);    % -      ni  Nombre de variables d'estat en cada VC

```

```

R=KF(1);      % J/kmol.K  R  Constant universal dels gasos
pH=KF(7);     % -        pH  de la fase líquida
Pa=KF(19);    % Pa       Pa  Pressio atmosferica
Vg=KF(37);    % m3       Vg  Volum de la fase gasosa

```

```
U=zeros(ni,1); %U Vector columna
```

```
%Definició del vector d'estat inicial
```

```

U(1)=5;       %kg  Mass of sugars and starches
U(2)=10;      %kg  Mass of hemicellulose
U(3)=15;      %kg  Mass of cellulose
U(4)=10;      %kg  Mass of lignin
U(5)=0;       %kg  Mass of death microorganisms
U(6)=10;      %kg  Mass of mineral substances
U(7)=0.001;   %kg  Mass of bacteria
U(8)=0.004;   %kg  Mass of actinomycetes
U(9)=0.02;    %kg  Mass of brown-rot fungi
U(10)=0.1;    %kg  Mass of white-rot fungi

```

```
U(iw)=50;     %kg  Mass of water
```

```

U(it)=KF(20); %K  Temperature of the gaseous phase
U(it+1)=KF(20); %K  Temperature of the solid-liquid phase

```

```

%Composició molar de la fase gasosa
if U(it)<273 psat=1.674244239e-6*exp(7.218389e-2*U(it)); %Pa vap pressure
elseif U(it)>373 psat=-1.2461451015e6+3.61059966e3*U(it);
else psat=10^(22.443-2795/U(it)-1.6798*log(U(it)));
end

nT=(Pa-psat)*Vg/R/U(it); %kmol Massa molar d'aire sec
U(15)=0.21*nT; %kmol Massa molar de O2 en fase gasosa
U(16)=0.00*nT; %kmol Massa molar de CO2 en fase gasosa
U(17)=0.00*nT; %kmol Massa molar de NH3 en fase gasosa
U(18)=psat*Vg/R/U(it); %kmol Massa molar de H2Ov en fase gasosa
U(19)=0.79*nT; %kmol Massa molar de N2 en fase gasosa

%Pressions parcials en la fase gasosa de O2, CO2 i NH3
po2= U(iw+1)*R*U(it)/Vg; %Pa Pressió parcial O2
pco2=U(iw+2)*R*U(it)/Vg; %Pa Pressió parcial CO2
pnh3=U(iw+3)*R*U(it)/Vg; %Pa Pressió parcial NH3

%Determinació de les constants de Henry
heo2= 1e5*exp(16.7886-1800/U(it+1)); %Pa Constant de Henry O2
heco2=1e5*exp(15.4570-2400/U(it+1)); %Pa Constant de Henry CO2
henh3=1e5*exp(13.7521-4100/U(it+1)); %Pa Constant de Henry NH3

%Determinació del pk dels equilibris iònics
pkc1=-14.8435+0.03279*U(it+1)+3404.7/U(it+1);
pkc2= -6.498 +0.02379*U(it+1)+2902.4/U(it+1);
pknh=0.09018+2729.92/U(it+1);

%Determinació de les fraccions volàtils
ffco2=1/(1+10^(pH-pkc1)+10^(2*pH-pkc1-pkc2));
ffnh3=1/(1+10^(pknh-pH));

%Determinació de la massa de components volàtils en solució
U(is+1)=32/18*U(iw)*po2/heo2; %kg Massa d'oxigen en solució
U(is+2)=44/18*U(iw)*pco2/heco2/ffco2; %kg Massa de CO2 total en solució
U(is+3)=17/18*U(iw)*pnh3/henh3/ffnh3; %kg Massa de NH3 total en solució

VINIT=U; %VINIT argument de sortida

```

```

%genzmabKai00
%Subroutine per generar la matriu ZMAB del model biològic de Kaiser.

function ZMAB=genzmabKai00(KB,U);

%Paràmetres estequiomètrics
y=KB(20); %kgx/kgS Microorganisms yield on substrate
cc=KB(21); %kgC/kgS Carbon content in microorganisms and substrates

%Variables intermèdies
TM=sum(U(1:14)); %kg Total mass in composter
s=U(1:4)/TM; %- Vector of substrate mass fractions
S1=s(1);
S2=s(1)+s(2);
S3=s(1)+s(2)+s(3);
S4=s(1)+s(2)+s(3)+s(4);

%Muntatge de la matriu ZMAB

```

```

ZMAB=zeros(8,14);

ZMAB(1,1)=-1/y;
ZMAB(2,1:2)=-s(1:2)'/y/S2;
ZMAB(3,1:3)=-s(1:3)'/y/S3;
ZMAB(4,1:4)=-s(1:4)'/y/S4;

ZMAB(5:8,5)=1;
ZMAB(1:4,7:10)=eye(4);
ZMAB(5:8,7:10)=-eye(4);

ZMAB(1:4,11)=-32/12*cc*(1/y-1);
ZMAB(1:4,12)= 44/12*cc*(1/y-1);
ZMAB(1:4,14)= (1-cc)*(1/y-1);

```

```

%fkai00
%Subrutina per calcular les derivades temporals del sistema d'edos que
%governen el model, F=dU/dt, on F i U són vectors columna.

function F=fkai00(t,U,ZMAB,KF,GD,KB);

%Assignació da valor a constants
R=KF(1);          % J/kmol.K   R   Constant universal dels gasos
zc=KF(2);         % K           zc  Temperatura de referència
pH=KF(7);         % -           pH  de la fase líquida
Vg=KF(37);        % m3          Vg  Volum de la fase gasosa

is=GD(16);        % -           is  Index darrera variable no volàtil
iw=GD(17);        % -           iw  Index de la variable aigua
it=GD(18);        % -           it  Index de la variable temperatura gasos
ni=GD(19);        % -           ni  Nombre de variables d'estat en cada VC

PM=[32,44,17,18,28]; %kg/kmol Pes molecular dels components gasosos

%Funcions auxiliars
TM=sum(U(1:iw));   %kg Massa total en compostatge
s=U(1:4)/TM;       %- Vector de fraccions màssiques dels substrats
X=U(7:10)/TM;      %- Vector de fraccions màssiques dels microorganismes
S1=s(1);
S2=sum(s(1:2));
S3=sum(s(1:3));
S4=sum(s(1:4));

%Actualització de ZMAB
ZMAB(2,1:2)=-s(1:2)'/KB(20)/S2;
ZMAB(3,1:3)=-s(1:3)'/KB(20)/S3;
ZMAB(4,1:4)=-s(1:4)'/KB(20)/S4;

%Funcions de limitació del creixement
T=U(it+1)-zc;      %T Temperatura fase líquida en °C
ft1=(T>0&T<80)*T*(80-T)/1600;
if (T>0&T<60) ft2=T*(60-T)/20/(80-T); else ft2=0; end
fO2=U(is+1)/(KB(17)*U(iw)*1e-3+U(is+1)); %Limitació per manca d'oxigen.

%VECTOR DE VELOCITATS DE REACCIÓ
P=zeros(8,1);      %P Vector columna [kg Xi/h·kgTM]

```

```

%Creixement específic microorganismes
P(1)=fO2*ft1*KB(1)*S1/(KB(11)+S1)*X(1);
P(2)=fO2*ft2*KB(2)*S2/(KB(12)+S2)*X(2);
P(3)=fO2*ft2*KB(3)*S3/(KB(13)+S3)*X(3);
P(4)=fO2*ft2*KB(4)*S3/(KB(14)+S3)*X(4);

%Mort de microorganismes
P(5)=KB(16)*X(1);
P(6)=KB(16)*X(2);
P(7)=KB(16)*X(3);
P(8)=KB(16)*X(4);

%Vector de termes de reacció
RXB=ZMAB'*P*TM;          %RX(1:14)  kg Ui/h Vector columna

%CABALS MÀSSICS MOLARS D'ENTRADA AL REACTOR
nT0=zeros(5,1);          %kmol/h Cabals màssics molars d'entrada

Pv=KF(24)*10^(22.443-2795/KF(23)-1.6798*log(KF(23)));  %Pa Pressió parcial vapor
na=(KF(22)-Pv)*KF(21)/R/KF(23);  %kmol/h Cabal molar d'aire sec d'entrada

nT0(1)=KF(25)*na;          %kmol/h Cabal molar d'O2
nT0(2)=KF(26)*na;          %kmol/h Cabal molar de CO2
nT0(3)=KF(27)*na;          %kmol/h Cabal molar de NH3
nT0(4)=Pv*KF(21)/R/KF(23);  %kmol/h Cabal molar de vapor
nT0(5)=KF(28)*na;          %kmol/h Cabal molar de N2

%CABALS MÀSSICS DE TRANSFERÈNCIA LÍQUID-GAS
%Pressió de vapor saturat a la temperatura de la fase gasosa
if U(it)<273 psat=1.674244239e-6*exp(7.218389e-2*U(it));  %Pa vap pressure
elseif U(it)>373 psat=-1.2461451015e6+3.61059966e3*U(it);
else
    psat=10^(22.443-2795/U(it)-1.6798*log(U(it)));
end

%Determinació de les constants de Henry a la temperatura de la fase líquida
heo2= 1e5*exp(16.7886-1800/U(it+1));  %Pa Constant de Henry O2
heco2=1e5*exp(15.4570-2400/U(it+1));  %Pa Constant de Henry CO2
henh3=1e5*exp(13.7521-4100/U(it+1));  %Pa Constant de Henry NH3

%Determinació del pk dels equilibris iònics
pkc1=-14.8435+0.03279*U(it+1)+3404.7/U(it+1);
pkc2= -6.498 +0.02379*U(it+1)+2902.4/U(it+1);
pknh=0.09018+2729.92/U(it+1);

%Determinació de les fraccions volàtils
ffco2=1/(1+10^(pH-pkc1)+10^(2*pH-pkc1-pkc2));
ffnh3=1/(1+10^(pknh-pH));

%Determinació de les velocitats específiques de transferència líquid-gas
RT=zeros(5,1);          %kg/h·kgTM
RT(1)=KF(41)*(heo2 *18/32* U(is+1)/U(iw)-U(iw+1)*R*U(it)/Vg);  %O2
RT(2)=KF(42)*(heco2*18/44*ffco2*U(is+2)/U(iw)-U(iw+2)*R*U(it)/Vg);  %CO2
RT(3)=KF(43)*(henh3*18/17*ffnh3*U(is+3)/U(iw)-U(iw+3)*R*U(it)/Vg);  %NH3
RT(4)=KF(44)*(psat-U(iw+4)*R*U(it)/Vg);  %Compte: POT ACABAR-SE L'AIGUA %H2Ov

%L'EQUACIÓ DE BE DE LA FASE GASOSA DEL MODEL BME3
F=zeros(ni,1);          %F vector columna de derivades de les variables d'estat

```



```

Z5=zeros(1,5);
qcT=KF(45)*(U(it+1)-U(it))*TM;      %J/h Flux d'escalfor de la fase liq a la gasosa
F(it)=(qcT+(KF(23)-U(it))*KF(11:15)*nT0+...
      (U(it+1)-U(it))*TM*KF(11:15)*max([Z5;RT']'))/(KF(11:15)*U(iw+1:iw+5));

%EQUACIONS DE BM DEL MODEL BME3
F(1:iw)=RXB;                          %kg/h Les components de reacció biològica
F(is+1:iw)=F(is+1:iw)-TM*RT(1:4);      %kg/h Substracció termes transferència liq-gas
aa=R*U(it)/KF(22)/Vg*sum(nT0+TM*RT./PM')+F(it)/U(it);
F(iw+1:iw+5)=nT0-aa*U(iw+1:iw+5)+TM*RT./PM';      %kmol/h

%EQUACIÓ DE BE PER LA FASE SÒLID-LÍQUIDA DEL MODEL BME3
H0=zeros(5,1);                          %J/kmol Terme fixe de l'entalpia molar gasos
H0(4)=KF(10);                            %J/kmol Terme fix de l'aigua
qG=-KB(22)*(TM*RT(1)+F(is+1));          %J/h Escalfor generat pel consum d'oxigen
qcw=KF(16)*(U(it+1)-KF(20));            %J/h Escalfor dissipat per les parets del reactor

F(it+1)=(qG-qcw-qcT-TM*(max([Z5;RT']./PM))*(H0+KF(11:15))*(U(it+1)-zc))+...
        min([Z5;RT']./PM))*(H0+KF(11:15))*(U(it)-zc))-...
        (U(it+1)-zc)*(KF(4)*sum(F(7:14))+KF(5)*sum(F(1:5)))/...
        (KF(17)+KF(4)*sum(U(7:14))+KF(5)*sum(U(1:5))+KF(6)*U(6));

%VARIABLES D'ACUMULACIÓ (INDICADORS)
F(it+1+1)=-TM*RT(1)-F(is+1);             %kgo2/h Consum biològic instantani d'O2
F(it+1+2)=TM*RT(2)-44*F(iw+2);          %kgco2/h Emissió neta instantània de CO2
F(it+1+3)=TM*RT(3)-17*F(iw+3);          %kgnh3/h Emissió neta instantània de NH3
F(it+1+4)=TM*RT(4)-18*F(iw+4);          %kgvap/h Emissió neta instantània de vapor
F(it+1+5)=(U(it+1)>KF(50));               % --
F(it+1+6)=(U(it+1)>KF(51))*(U(it+1)-KF(51)); %°C

```

```

%asensiKai00
%Programa main per generar la Taula d'anàlisi de sensibilitat dels
%indicadors I1,...,I9 respecte a modificacions del valor de referència dels
%paràmetres físics del model. Els resultats són dins la matriu MRI, a la
%primera fila els indicadors calculats amb els valors de referència dels
%paràmetres. A la primera columna els valors modificats de cada paràmetre.
%Evidentment, a la posició MRI(1,1) hi un zero.

disp('S''esta en proces de calcul')
C0=fix(clock);                          %Registre instant inici del proces de calcul.
TSPAN=[0:360];                          %h Vector de punts en el temps
[GD,KF,KB]=genkfbKai00();                %Vectors constants geometriques, físiques i biològiques

%Inicialització de matrius i assignació de valors
MRI=[];                                  %Inicialització matriu contindrà els valors dels indicadors
ikf=[7,41,42,43,44,45,21,23,24,16,17,37]; %Índexs dels paràmetres dins de KF

%Matriu de valors modificats dels paràmetres (MVP: tantes files com elements te ikf)
MVP=zeros(length(ikf),6);               %Inicialització matriu
MVP(1,:)= [9,8.5,8,7,6.5,6];            %Valors de pH
MVP(2,:)= [10,5,2,0.9,0.5,0.1]*1e-6;    %Valors de xklo2
MVP(3,:)= [10,5,2,0.9,0.5,0.1]*1e-6;    %Valors de xklco2
MVP(4,:)= [10,5,2,0.9,0.5,0.1]*1e-6;    %Valors de xklnh3
MVP(5,:)= [10,5,2,0.9,0.5,0.1]*1e-6;    %Valors de xklw
MVP(6,:)= [10,5,2,0.9,0.5,0.1]*1e3;     %Valors de hcsv
MVP(7,:)= [3,2,1.5,0.9,0.5,0.1];        %Valors de Qo
MVP(8,:)= [35,30,25,15,10,5]+KF(2);     %Valors de To
MVP(9,:)= [1,0.9,0.8,0.6,0.5,0.4];      %Valors de eo

```

```

MVP(10,:)=[10,5,4,1,0.5,0]*1e4;           %Valors de UA
MVP(11,:)=[2,1.5,1.1,0.9,0.5,0.1]*1e5;   %Valors de Ccon
MVP(12,:)=[1.5,1,0.75,0.25,0.1,0.05];    %Valors de Vg

%Procés de càlcul dels indicadors
for i=1:length(ikf);
    [GD,KF,KB]=genkfbKai00();
    k=1;
    if i==1;k=0;end                          %Per calcular valors de referència
    for j=k:length(MVP(1,:));
        if j>0;KF(ikf(i))=MVP(i,j);end
        VINIT=genvinitKai00(KF,GD);          %Vector d'estat inicial
        ZMAB=genzmabKai00(KB,VINIT);        %Matriu ZMAB en l'estat inicial

        options=odeset('RelTol',1e-9,'AbsTol',1e-11,...
            'MaxStep',1e-1,'Stats','on');

        [T,Y]=ode15s(@fKai00,TSPAN,VINIT,options,ZMAB,KF,GD,KB);

        %DETERMINACIÓ DELS INDICADORS DE PROCÉS
        %=====
        is=GD(16);
        iw=GD(17);
        it=GD(18);
        TM0=sum(VINIT(1:iw));                %kg Initial total mass
        TM=sum(Y(:,1:iw)');                 %Total mass evolution
        mc=Y(:,iw)./TM*100;                 %Moisture content (wb) evolution

        I(1)=Y(end,it+1+1)/TM0;            %kgO2 /kgTM0   Indicador 1
        I(2)=Y(end,it+1+2)/TM0;            %kgCO2/kgTM0   Indicador 2
        I(3)=Y(end,it+1+3)/TM0;            %kgNH3/kgTM0   Indicador 3
        I(4)=Y(end,it+1+4)/TM0;            %kgvap/kgTM0   Indicador 4
        I(5)=Y(end,it+1+5);                 %h             Temps a T>Tr1     Indicador 5
        I(6)=Y(end,it+1+6);                 %°C·h          Integral tèrmica   Indicador 6
        I(7)=mc(end);                       %--           Humitat final prod Indicador 7
        I(8)=min(Y(:,is+1)./Y(:,iw))*1e6;    %mgO2/L       Conc O2 minima    Indicador 8
        I(9)=max((Y(:,it+1)>KF(52)).*TSPAN')+1; %h            Durada procés     Indicador 9

        MRI=[MRI;I];
    end
end

%Afegir una primera columna amb els valors dels paràmetres
MVP=MVP';
MRI=[[0;MVP(:)],MRI]; %Zero a la primera posició
save MRI MRI -ascii; %Sintaxis: save nomfitx X -ascii

disp('Proces acabat')
fprintf('Hora de fi proces de calcul: %4.0f%4.0f%4.0f%4.0f%4.0f%4.0f\n',fix(clock))
fprintf('Hora inici proces de calcul: %4.0f%4.0f%4.0f%4.0f%4.0f%4.0f\n',C0)

```

A1.2 Llistats de les rutines del model base utilitzant el model biològic adaptat de Solé-Mauri

```

=====
%compSa
%Programa MAIN per simular el proces de compostatge. Model Sa.
%No es necessaria cap variable en el workspace.

disp('S''esta en proces de calcul')
C0=fix(clock);           %Registre instant inici dels proces de calcul

TSPAN=[0:360];          %h Vector de punts en el temps

[GD,KF,KB]=genkfbSa();   %Vectors constants fisiques, geomètriques i biològiques

VINIT=genvinitSa(KF,GD); %VINIT Vector columna valors inicials

[ZMAB,MF,PM]=genzmabSa(KB); %ZMAB(13,14) Matriu coefs estequiometrics

options=odeset('RelTol',1e-9,'AbsTol',1e-11,...
'MaxStep',1e-1,'Stats','on')
[T,Y]=ode15s(@fSa,TSPAN,VINIT,options,ZMAB,KF,GD,KB);

disp('Proces acabat')
fprintf('Hora de fi proces de calcul:  %4.0f%4.0f%4.0f%4.0f%4.0f%4.0f\n',fix(clock))
fprintf('Hora inici proces de calcul:  %4.0f%4.0f%4.0f%4.0f%4.0f%4.0f\n',C0)

%Detecció de variables amb valors negatius
a=[(1:28);sum(Y<0)]';
a(a(:,2)>0,:);
disp('Var n°, n°punts<0')

%DADES=[T,Y];
%save DADES DADES;
%save DADES DADES -ascii;

%REPRESENTACIÓ GRÀFICA =====
is=GD(16); iw=GD(17); it=GD(18);
Vg=KF(37);           % m3 Volum fase gasosa

%Grafica d'evolucio de la temperatura i humitat relativa aire
Psat=10.^(22.443-2795./Y(:,it)-1.6798*log(Y(:,it))); %Pa Saturated vapor pressure
Pv=Y(:,iw+4)*KF(1).*Y(:,it)/KF(37); %Pa Vapour pressure in gaseous phase
HR=Pv./Psat*100; %Relative moisture in gas phase
subplot(4,3,1); plot(T,[HR,Y(:,it:it+1)-KF(2)]); ylabel('HR(%), T °C')

%Grafica %O2 i CO2 en fase gasosa
nT=sum(Y(:,iw+[1,2,3,5]))'; %kmol Aire sec
subplot(4,3,4); plot(T,[Y(:,iw+1)./nT,Y(:,iw+2)./nT]*100); ylabel('O2 i CO2 %')

%Grafica concentracio d'amoniac en fase gasosa
subplot(4,3,7); plot(T,Y(:,iw+3)*17e6/Vg); ylabel('mgNH3/m3')

%Grafica TM i IW
TM=sum(Y(:,1:iw))'; % kg Massa total
mc=Y(:,iw)./TM*100; % Humitat massa (wb)
subplot(4,3,10); plot(T,[Y(:,iw),mc,TM,]); ylabel(' IW kg,mc(%),TM kg')

```

```

%Grafica de poblacio de bacteris
subplot(4,3,2); plot(T,Y(:,4:5)); ylabel('XMB i XTB')

%Grafica de poblacio de fongs
subplot(4,3,5); plot(T,Y(:,6)); ylabel('XMF')

%Gràfica de l'evolució dels substrats solubles
subplot(4,3,8); plot(T,Y(:,is-2:is)); ylabel('SLC, SCN, SRC')

%Gràfica de l'evolució dels substrats particulars
subplot(4,3,11); plot(T,Y(:,1:3)); ylabel('XLC, XCN, XRC')

%Grafica de les funcions de limitacio del creixement per manca d'O2, NH3 i H2O
FO2= (Y(:,is+1)./Y(:,iw)*1e3)./(KB(10)+Y(:,is+1)./Y(:,iw)*1e3);
FNH4=(Y(:,is+3)./Y(:,iw)*1e3)./(KB(11)+Y(:,is+3)./Y(:,iw)*1e3);

M=Y(:,iw)./TM; m2=0.2; m3=0.4;
FIW=(M>m2 & M<=m3).*((M-m2)/(m3-m2))+ (M>m3)*1;
subplot(4,3,3); plot(T,[FO2,FNH4,FIW]); ylabel('fO2, fNH4, fIW')

%Grafica de les funcions de limitacio del creixement per temperatura
Tmin1=KB(15); Topt1=KB(16); Tmax1=KB(17);
Tmin2=KB(18); Topt2=KB(19); Tmax2=KB(20);
Tmin3=KB(21); Topt3=KB(22); Tmax3=KB(23);
TT=Y(:,it+1);

%Temperature functions HY (Hyperbola de J.Kaiser) -----
%alf1=1/(2*Topt1-Tmin1-Tmax1);
%c1=alf1*(Topt1^2-Tmin1*Tmax1);
%fT1=alf1*(TT-Tmin1).*(TT-Tmax1)./(TT-c1);
%fT1=(TT>=Tmin1 & TT<=Tmax1).*fT1;

%alf2=1/(2*Topt2-Tmin2-Tmax2);
%c2=alf2*(Topt2^2-Tmin2*Tmax2);
%fT2=alf2*(TT-Tmin2).*(TT-Tmax2)./(TT-c2);
%fT2=(TT>=Tmin2 & TT<=Tmax2).*fT2;

%alf3=1/(2*Topt3-Tmin3-Tmax3);
%c3=alf3*(Topt3^2-Tmin3*Tmax3);
%fT3=alf3*(TT-Tmin3).*(TT-Tmax3)./(TT-c3);
%fT3=(TT>=Tmin3 & TT<=Tmax3).*fT3;

%Temperature functions QP (Rosso)-----
fT1=(TT-Tmax1).*(TT-Tmin1).^2/(Topt1-Tmin1)./...
((Topt1-Tmin1)*(TT-Topt1)-(Topt1-Tmax1)*(Topt1+Tmin1-2*TT));
fT1=(TT>=Tmin1 & TT<=Tmax1).*fT1;

fT2=(TT-Tmax2).*(TT-Tmin2).^2/(Topt2-Tmin2)./...
((Topt2-Tmin2)*(TT-Topt2)-(Topt2-Tmax2)*(Topt2+Tmin2-2*TT));
fT2=(TT>=Tmin2 & TT<=Tmax2).*fT2;

fT3=(TT-Tmax3).*(TT-Tmin3).^2/(Topt3-Tmin3)./...
((Topt3-Tmin3)*(TT-Topt3)-(Topt3-Tmax3)*(Topt3+Tmin3-2*TT));
fT3=(TT>=Tmin3 & TT<=Tmax3).*fT3;

subplot(4,3,6); plot(T,[fT1,fT2,fT3]); ylabel('fT1, fT2, fT3')

%L'evolució dels termes de Monod de limitació per manca de substrat

```

```

S2=(Y(:,is-2)+Y(:,is-1))./Y(:,iw)*1e3;           %kg/m3 Concentració en aigua de
SLC+SCN
S3=(Y(:,is-2)+Y(:,is-1)+Y(:,is))./Y(:,iw)*1e3; %kg/m3 Concentració en aigua de
SLC+SCN+SRC
fSMB=S2./(KB(7)+S2);
fSTB=S2./(KB(8)+S2);
fSMF=S3./(KB(9)+S3);
subplot(4,3,9); plot(T,[fSMB,fSTB,fSMF]); ylabel('fSMB,fSTB,fSMF');

%L'evolució de C, N i C/N
MX=Y(:,1:iw-1); MX(:,7)=MX(:,7)-VINIT(7);       %Substracció de la matèria inert
C=MX(:,1:is)*(MF(1,1:is)./PM(1:is))*12;         %kgC Massa total de Carboni
N=MX*(MF(4,1:iw-1)./PM(1:iw-1))*14;            %kgN Massa total de Nitrogen
subplot(4,3,12); plot(T,C./N); ylabel('C/N');

%Grafica estratificada de substrats particulats
%G=Y(:,3);
%for i=2:-1:1; G=[G,sum(Y(:,i:3))]; end
%subplot(4,3,8); plot(T,G); ylabel('strat XRC,XCN i XLC kg')

%Grafica estratificada de substrats solubles
%G=Y(:,10);
%for i=9:-1:8; G=[G,sum(Y(:,i:10))]; end
%subplot(4,3,11); plot(T,G); ylabel('strat SRC,SCN,SLC kg')

%Anàlisi de l'evolució del N
YN=[];                                           %kgN Inicialització matriu continguts en N
Y(:,7)=Y(:,7)-VINIT(7);                         %Sostracció de la matèria inert
for i=1:length(Y(:,1));
    YN(i,:)=Y(i,1:iw)./PM(1:iw).*MF(4,1:iw)*14;
end

```

```

%genkfbSa
%Rutina per generar els vectors de constants pel model Sa
%    GD  Vector de constants de geometria i discretització
%    KF  Vector de constants físiques
%    KB  Vector de paràmetres del model biològic i índexs d'estructura

function [GD,KF,KB]=genkfbSa();

%PARAMETRES DE GEOMETRIA I DISCRETITZACIÓ (GD)=====
%Parametres de la discretitzacio 1D i de geometria -----
%GD(1)=7;           % -- tv VC superior
%GD(2)=0.3;         % m  d  Diametre de la columna
%GD(3)=1.0;         % m  h  Alçaria de la columna
%GD(4)=GD(3)/(GD(1)-1); % m  dz Alçaria d'un VC
%GD(5)=pi*GD(2)^2/4; % m2  S  Area de la seccio recta de la columna

%Parametres de l'estructura del model fis1D -----
GD(15)=3;          % ix Index de la darrera variable de substrat (cal. esp: cps)
GD(16)=11;         % is Index de la darrera variable no volatil
GD(17)=15;         % iw Index de la variable aigua
GD(18)=21;         % it Index de la variable temperatura gasos
GD(19)=28;         % ni Nombre de variables d'estat en cada VC (inclou indicadors)

%PARAMETRES FÍSICS (KF) =====
%Parametres termodinàmics -----

```

```

KF(1)=8314;          % J/kmol.K  R   Constant universal dels gasos
KF(2)=273.15;       % K      zc  Temperatura de referència
KF(4)=4183;        % J/kg.K   cpw Calor especifica aigua i microorgs. (u4,      ,u14)
KF(5)=2300;        % J/kg.K   cps Calor especifica substrats (u1,      ,u3)
KF(6)=800;         % J/kg.K   cpm Calor especifica fraccio mineral  (--)
KF(7)=7.5;         % --      pH  de la fase líquida

KF(10)=45.0756e6;  % J/kmol   h0  Terme fix relació lineal entalpia vapor
KF(11)=29595;     % J/kmol.K Cp1 Calor molar O2
KF(12)=38233;    % J/kmol.K Cp2 Calor molar CO2
KF(13)=36641;    % J/kmol.K Cp3 Calor molar NH3
KF(14)=31369;    % J/kmol.K Cp4 Calor molar H2O
KF(15)=29136;    % J/kmol.K Cp5 Calor molar N2

%Propietats fisiques del contenidor-----
KF(16)=4.2e3;     % J/h.K   UA  Coef transf d'escalfor del contenidor
KF(17)=4e4;       % J/K     CCON Capacitat calorifica del contenidor
%KF(17)=3e4;     % J/h.K.m UA  Coef transf d'escalfor per ml de columna
%KF(18)=9e4;     % J/K.m   CCON Capacitat calorifica contenidor per ml de columna

%Parametres del contorn -----
KF(19)=1.013e5;   % Pa      Pa  Pressio atmosferica (al nivell sup. de la columna)
KF(20)=20+KF(2);  % K      Ta  Temperatura de l'ambient exterior
KF(21)=0.24;     % m3/h   Qo  Cabal d'aire humit d'entrada (MODE Q0)
KF(22)=1.013e5;  % Pa      Po  Pressió d'entrada al reactor (s'hi mesura Qo)
KF(23)=20+KF(2); % K      To  Temperatura d'entrada de l'aire (s'hi mesura Qo)
KF(24)=0.7;      % --     eo  Humitat relativa aire en el corrent d'entrada
KF(25)=0.21;    % --     yo1 Fracció molar d'O2 en l'aire sec d'entrada
KF(26)=0.00;    % --     yo2 Fracció molar d'CO2 en l'aire sec d'entrada
KF(27)=0.00;    % --     yo3 Fracció molar d'NH3 en l'aire sec d'entrada
KF(28)=0.79;    % --     yo5 Fracció molar d'N2 en l'aire sec d'entrada

%Propietats fisiques material-----
%KF(30)=350;     % kg/m3   ro  Densitat aparent medi
%KF(31)=0.30;    % --      FAS Free Air Space
%KF(32)=1e-10;   % m2      kp  Permeabilitat a l'aire del medi poros
%KF(33)=1500;    % J/m2.h.K k  Conductivitat termica del medi poros
%KF(34)=.55;     % --      mc  Moisture content (wet basis)
%KF(35)=5.067e-9; % Pa.h    mu  Viscositat dinamica de l'aire (valor a 20°C)
KF(37)=0.35;    %m3      Vg  Volum de la fase gasosa
%mu=(5.067+1.2168e-2*(U(36)-293))*1e-9; %Pa.h Viscositat depen temperatura

%Heat and mass transfer coeficients-----
KF(41)=1e-6;    % kgO2/h.Pa.kgTM xklo2 Oxygen mass transfer coef liq-gas phase
KF(42)=1e-6;    % kgCO2/h.Pa.kgTM xklco2 CO2 mass transfer coef liq-gas phase
KF(43)=1e-6;    % kgNH3/h.Pa.kgTM xklnh3 NH3 mass transfer coef liq-gas phase
KF(44)=1e-6;    % kgH2O/h.Pa.kgTM xklw  Water mass transfer coef liq-gas phase
KF(45)=1e3;     % J/h.K.kgTM   hcsv  Heat transfer coef solid-gas phase

%Temperatures de referència pel càlcul dels indicadors
KF(50)=55+KF(2); %K   Tr1 Temperatura de referència
KF(51)=60+KF(2); %K   Tr2 Temperatura de referència
KF(52)=KF(20)+7; %K   Tfp Temperatura de final de procés

%PARÀMETRES DEL MODEL BIOLÒGIC (KB) =====
%Paràmetres cinètics -----
KB(1)=32e-4;     %h-1   Hydrolysis constant for XLC
KB(2)=13e-4;     %h-1   Hydrolysis constant for XCN

```

```

KB(3)=10e-4;    %h-1    Hydrolysis constant for XRC

KB(4)=0.36;    %h-1    Maximum growth rate for XMB
KB(5)=0.32;    %h-1    Maximum growth rate for XTB
KB(6)=0.12;    %h-1    Maximum growth rate for XMF

KB(7)=5; %5.1e-3;    %kgi/m3    Ks1 Monod sat constant for growth of XMB on SLC+SCN
KB(8)=5; %5e-3;    %kgi/m3    Ks2 Monod sat constant for growth of XTB on SLC+SCN
KB(9)=5; %5e-3;    %kgi/m3    Ks3 Monod sat constant for growth of XMF on SLC+SCN+SRC

KB(10)=.2e-3;    %kgO2/m3    KO2 Saturation constant for oxygen
KB(11)=.5e-1;    %kgNH3/m3    KNH3 Saturation constant for NH3

KB(12)=0.011;    %h-1    kdMB Decay constant for XMB
KB(13)=0.025;    %h-1    kdTB Decay constant for XTB
KB(14)=0.029;    %h-1    kdMF Decay constant for XMF

KB(15)= 5.1 +KF(2);    %K    Tmin for XMB
KB(16)=35.4 +KF(2);    %K    Topt for XMB
KB(17)=44.0 +KF(2);    %K    Tmax for XMB
                                COMPTE: Si s'utilitzen les funcions QP
                                de Rosso s'ha de verificar:
                                (Tmin+Tmax)/2 <= Topt <= Tmax

KB(18)=20+KF(2);    %K    Tmin for XTB
KB(19)=50+KF(2);    %K    Topt for XTB
KB(20)=75+KF(2);    %K    Tmax for XTB

KB(21)= 5.1 +KF(2);    %K    Tmin for XMF
KB(22)=35.4 +KF(2);    %K    Topt for XMF
KB(23)=60.0 +KF(2);    %K    Tmax for XMF

%Paràmetres estequiomètrics -----
KB(24)=0.35;    %kgXkgS    YMB Mesophilic bacteria yield on substrate
KB(25)=0.35;    %kgXkgS    YTB Thermophilic bacteria yield on substrate
KB(26)=0.35;    %kgXkgS    YMF Mesophilic fungi yield on substrate

KB(27)=44e6;    %J/kg    Release of heat in the degradation of SLC
KB(28)=14e6;    %J/kg    Release of heat in the degradation of SCN
KB(29)=17e6;    %J/kg    Release of heat in the degradation of SRC

```

```
%genvinitSa
```

```
%Rutina per generar el vector d'estat inicial del model Sa.
```

```
%S'admet que en l'estat inicial tant la fase gasosa com la líquida estan a
%la temperatura ambient i que la fase gasosa està saturada de vapor.
```

```
%En l'estat inicial hi ha equilibri entre les concentracions en fase gasosa
%i les corresponents concentracions en fase líquida dels components
```

```
%volàtils (O2, CO2 i NH3). Les concentracions d'O2 i CO2 en la fase gasosa
```

```
%definides al bloc "Composició molar de la fase gasosa" determinen les
```

```
%corresponents concentracions en la fase líquida. La concentració de NH3 en
```

```
%fase líquida, obtinguda a partir de la concentració de Namoniacal analític,
```

```
%determina la corresponent concentració en la fase gasosa.
```

```
function VINIT=genvinitSa(KF,GD);
```

```
%Assignació de valor a constants
```

```
is=GD(16);    % -    is Index darrera variable no volàtil
```

```
iw=GD(17);    % -    iw Index de la variable aigua
```

```
it=GD(18);    % -    it Index de la variable temperatura gasos
```

```

ni=GD(19);      % -          ni  Nombre de variables d'estat en cada VC

R=KF(1);        % J/kmol.K  R   Constant universal dels gasos
pH=KF(7);       % -          pH  de la fase líquida
Pa=KF(19);      % Pa          Pa  Pressio atmosferica
Vg=KF(37);      % m3         Vg  Volum de la fase gasosa
U=zeros(ni,1);  %U Vector columna
DA=zeros(13,6);

%DADES ANALITIQUES
%=====Experiment 1=====      Experiment 2=====      =====
%          R1      R2      R3      R1      R2      R3
DA(1,:)=[ .651, .652, .699, .729, .462, .699]; %kgw/kgmf  Humitat
DA(3,:)=[ .8524, .8128, .8518, .8294, .7758, .8518]; %kg/kgms  Sòlids volàtils
DA(4,:)=[ .2176, .2983, .2339, .3226, .3013, .2339]; %kgC/kgms  Carboni total
DA(5,:)=1e-3*[13.0, 16.5, 19.3, 19.2, 14.6, 19.3]; %kgN/kgms  N Kjeldahl
DA(6,:)=1e-3*[ 2.2,  2.4,  2.9,  3.3,  1.4,  2.9]; %kgN/kgms  Nitrogen amoniacal
DA(8,:)= [ 16.8, 18.1, 12.1, 16.8, 20.7, 12.1]; % ---      C/N      (NOT USED)
DA(9,:)=1e-3*[16.0, 47.0, 18.0, 23.0, 90.0, 17.0]; %kg/kgms  Greixos
DA(11,:)=[ .390, .500, .380, .580, .440, .380]; %kg/kgms  Fibra
DA(12,:)=[ 502.7, 578.9, 553.3, 466.0, 492.7, 627.0]; %kg/m3     Dens ap (NOT USED)
DA(13,:)=[ 36.60, 42.15, 30.90, 34.26, 36.05, 45.65]; %kg        Massa totl inicial
DA(2,:)=1-DA(1,:); %kgms/kgmf  Sòlids totals
DA(7,:)=DA(5,:)-DA(6,:); %kgN/kgms  Nitrogen orgànic
DA(10,:)=6.25*DA(7,:); %kg/kgms   Proteïna

DA=DA(:,1); %Selecció de l'experiment i reactor

%DEFINICIÓ DEL VECTOR D'ESTAT INICIAL
%Definició del vector d'estat inicial a partir de dades analitiques
fLC=0.0; %Fracció de greixos en forma no hidrolitzada
fCN=0.0; %Fracció de proteïnes en forma no hidrolitzada
fRC=0.8; %Fracció de fibra en forma no hidrolitzada

U(1)= DA(9)*DA(2)*DA(13)*fLC; % kg  Mass of XLC
U(2)=DA(10)*DA(2)*DA(13)*fCN; % kg  Mass of XCN
U(3)=DA(11)*DA(2)*DA(13)*fRC; % kg  Mass of XRC
U(4)=1.2e-4*DA(13); % kg  XMB Mesophilic Bacteria
U(5)=1.4e-4*DA(13); % kg  XTB Thermophilic Bacteria
U(6)=0.3e-4*DA(13); % kg  XMF Mesophilic Fungi

U(is-2)=DA(9)*DA(2)*DA(13)*(1-fLC); % kg  Mass of SLC: XLC hydrolysis products
U(is-1)=DA(10)*DA(2)*DA(13)*(1-fCN); % kg  Mass of SCN: XCN hydrolysis products
U(is)=DA(11)*DA(2)*DA(13)*(1-fRC); % kg  Mass of SRC: XRC hydrolysis products
U(is+3)=DA(13)*DA(2)*DA(6)*17/14; % kg  Mass of NH3 in solution
U(iw)=DA(1)*DA(13); % kg  Mass of water

U(it)=KF(20); %K  Temperature of the gaseous phase
U(it+1)=KF(20); %K  Temperature of the solid-liquid phase

%Determinació de les constants de Henry
heo2= 1e5*exp(16.7886-1800/U(it+1)); %Pa  Constant de Henry O2
heco2=1e5*exp(15.4570-2400/U(it+1)); %Pa  Constant de Henry CO2
henh3=1e5*exp(13.7521-4100/U(it+1)); %Pa  Constant de Henry NH3

%Determinació del pk dels equilibris iònics
pkc1=-14.8435+0.03279*U(it+1)+3404.7/U(it+1);
pkc2= -6.498 +0.02379*U(it+1)+2902.4/U(it+1);
pknh=0.09018+2729.92/U(it+1);

```



```

%Determinació de les fraccions volàtils
ffco2=1/(1+10^(pH-pkcl)+10^(2*pH-pkcl-pkc2));
ffnh3=1/(1+10^(pknh-pH));

%Pressions parcials d'amoniac i de vapor
pnh3=henh3*ffnh3*(U(is+3)/17)/(U(iw)/18); %Pa Pressió parcial de l'amoniac
if U(it)<273 psat=1.674244239e-6*exp(7.218389e-2*U(it)); %Pa vap pressure
elseif U(it)>373 psat=-1.2461451015e6+3.61059966e3*U(it);
else psat=10^(22.443-2795/U(it)-1.6798*log(U(it)));
end

%Composició molar de la fase gasosa
nT=(Pa-pnh3-psat)*Vg/R/U(it); %kmol Massa molar de: O2+CO2+N2
U(iw+1)=0.21*nT; %kmol Massa molar de O2 en fase gasosa XXXX
U(iw+2)=0.00*nT; %kmol Massa molar de CO2 en fase gasosa XXXX
U(iw+3)=pnh3*Vg/R/U(it); %kmol Massa molar de NH3 en fase gasosa
U(iw+4)=psat*Vg/R/U(it); %kmol Massa molar de H2Ov en fase gasosa
U(iw+5)=0.79*nT; %kmol Massa molar de N2 en fase gasosa XXXX

%Pressions parcials en la fase gasosa de O2 i CO2
po2= U(iw+1)*R*U(it)/Vg; %Pa Pressió parcial O2
pco2=U(iw+2)*R*U(it)/Vg; %Pa Pressió parcial CO2

%Determinació de la massa de components volàtils en solució
U(is+1)=32/18*U(iw)*po2/heo2; %kg Massa d'oxigen en solució
U(is+2)=44/18*U(iw)*pco2/heco2/ffco2; %kg Massa de CO2 total en solució

%Detrminació de la massa de materia inert: dif suma components amb la massa total
U(7)=DA(13)-sum(U(1:iw)); %kg Materia inert

VINIT=U; %VINIT argument de sortida

```

```

% genzmabSa
% Programa per generar la matriu de coeficients estequiometrics ZMAB del model Sa.
% Utilitza els coeficients estequiometrics continguts en el vector KB.

function [ZMAB,MF,PM]=genzmabSa(KB);

% Assignacio de valor a Matriu de Formules (MF) i vector Pesos Atomics (PA)
MF=zeros(4,15);
MF(:,1)=[25;45;3;0]; % XLC (i=1) Particulate labile carbon compounds
MF(:,2)=[16;24;5;4]; % XCN (i=2) Particulate proteins
MF(:,3)=[10;18;9;0]; % XRC (i=3) Particulate recalcitrant carbon compounds
MF(:,4)=[5;7;2;1]; % XMB (i=4) Mesophilic Bacteria
MF(:,5)=[5;7;2;1]; % XTB (i=5) Thermophilic Bacteria
MF(:,6)=[10;17;6;1]; % XMF (i=6) Mesophilic Fungi
MF(:,7:8)=MF(:,5:6); %XDB de bacteris i fongs, s'usa en càlcul de C/N a compSa

MF(:,9:11)=MF(:,1:3); %SLC, SCN, SRC Hydrolized forms have the same composition

MF(:,12)=[0;0;2;0]; % SO2 (i=11) Dissolved oxigen
MF(:,13)=[1;0;2;0]; % SCO2(i=12) Dissolved carbon dioxide
MF(:,14)=[0;3;0;1]; % SNH3(i=13) Dissolved ammonia-ammonium
MF(:,15)=[0;2;1;0]; % IW (i=14) Water

PA=[12,1,16,14]; % Pesos atomics de C, H, O i N

```

```

PM=PA*MF; % PM vector fila de pesos moleculars de cada component

% Assignacio de valor als termes de ZMAT per files (processos) i ZCTN
ZMAB=zeros(13,15);

% Process 1. Hidrolysis of XLC (i=1)
ZMAB(1,1)=-1;
ZMAB(1,9)=1;

% Process 2. Hidrolysis of XCN (i=2)
ZMAB(2,2)=-1;
ZMAB(2,10)=1;

% Process 3. Hidrolysis of XRC (i=3)
ZMAB(3,3)=-1;
ZMAB(3,11)=1;

% Process 4. Growth of XMB (i=4) on SCL (i=9)
ix=4; is=9;
ZMAB(4,ix)=1;
ZMAB(4,is)=-1/KB(24);
ns=PM(ix)/KB(24)/PM(is); %nº mols de S consumits per formar 1 mol de X
ZMAB(4,12:15)=(MF(:,12:15)\(ns*MF(:,is)-MF(:,ix)))'.*PM(12:15)/PM(ix);

% Process 5. Growth of XMB (i=4) on SCN (i=10)
ix=4; is=10;
ZMAB(5,ix)=1;
ZMAB(5,is)=-1/KB(24);
ns=PM(ix)/KB(24)/PM(is); %nº mols de S consumits per formar 1 mol de X
ZMAB(5,12:15)=(MF(:,12:15)\(ns*MF(:,is)-MF(:,ix)))'.*PM(12:15)/PM(ix);

% Process 6. Growth of XTB (i=5) on SCL (i=9)
ix=5; is=9;
ZMAB(6,ix)=1;
ZMAB(6,is)=-1/KB(25);
ns=PM(ix)/KB(25)/PM(is); %nº mols de S consumits per formar 1 mol de X
ZMAB(6,12:15)=(MF(:,12:15)\(ns*MF(:,is)-MF(:,ix)))'.*PM(12:15)/PM(ix);

% Process 7. Growth of XTB (i=5) on SCN (i=10)
ix=5; is=10;
ZMAB(7,ix)=1;
ZMAB(7,is)=-1/KB(25);
ns=PM(ix)/KB(25)/PM(is); %nº mols de S consumits per formar 1 mol de X
ZMAB(7,12:15)=(MF(:,12:15)\(ns*MF(:,is)-MF(:,ix)))'.*PM(12:15)/PM(ix);

% Process 8. Growth of XMF (i=6) on SLC (i=9)
ix=6; is=9;
ZMAB(8,ix)=1;
ZMAB(8,is)=-1/KB(26);
ns=PM(ix)/KB(26)/PM(is); %nº mols de S consumits per formar 1 mol de X
ZMAB(8,12:15)=(MF(:,12:15)\(ns*MF(:,is)-MF(:,ix)))'.*PM(12:15)/PM(ix);

% Process 9. Growth of XMF (i=6) on SCN (i=10)
ix=6; is=10;
ZMAB(9,ix)=1;
ZMAB(9,is)=-1/KB(26);
ns=PM(ix)/KB(26)/PM(is); %nº mols de S consumits per formar 1 mol de X
ZMAB(9,12:15)=(MF(:,12:15)\(ns*MF(:,is)-MF(:,ix)))'.*PM(12:15)/PM(ix);

```

```

% Process 10. Growth of XMF (i=6) on SRC (i=11)
ix=6;    is=11;
ZMAB(10,ix)=1;
ZMAB(10,is)=-1/KB(26);
ns=PM(ix)/KB(26)/PM(is);          %nº mols de S consumits per formar 1 mol de X
ZMAB(10,12:15)=(MF(:,12:15)\(ns*MF(:,is)-MF(:,ix)))'.*PM(12:15)/PM(ix);

% Process 11. XMB (i=4) lysis into XDB (i=7) (death bacteria)
ZMAB(11,4)=-1;
ZMAB(11,7)=1;

% Process 12. XTB (i=5) lysis into XDB (i=7) (death bacteria)
ZMAB(12,5)=-1;
ZMAB(12,7)=1;

% Process 13. Lysis of XMF(i=6) into XDF(i=8) (death fungui)
ZMAB(13,6)=-1;
ZMAB(13,8)=1;

```

```

%fSa
%Subrutina per calcular les derivades temporals del sistema d'edos que
%governen el model Sa, F=dU/dt, on F i U són vectors columna.

function F=fSa(t,U,ZMAB,KF,GD,KB);

%Assignació da valor a constants
R=KF(1);          % J/kmol.K   R   Constant universal dels gasos
zc=KF(2);         % K          zc  Temperatura de referència
pH=KF(7);         % -          pH  de la fase líquida
Vg=KF(37);        % m3         Vg  Volum de la fase gasosa

is=GD(16);        % -          is  Index darrera variable no volàtil
iw=GD(17);        % -          iw  Index de la variable aigua
it=GD(18);        % -          it  Index de la variable temperatura gasos
ni=GD(19);        % -          ni  Nombre de variables d'estat en cada VC

PM=[32,44,17,18,28]; %kg/kmol Pes molecular dels components gasosos
LDA=[0,0,0,KF(10),0]'; %J/kmol   Vector de calors latents (càlcul entalpia gasos)

%Paràmetres de les funcions limitadores de creixement per temperatura
Tmin1=KB(15); Topt1=KB(16); Tmax1=KB(17);          %Temperatures cardinals pels XMB
Tmin2=KB(18); Topt2=KB(19); Tmax2=KB(20);          %Temperatures cardinals pels XTB
Tmin3=KB(21); Topt3=KB(22); Tmax3=KB(23);          %Temperatures cardinals pels XMF

%EL MODEL BIOLÒGIC =====
%Funcions auxiliars
TM=sum(U(1:iw));          %kg Massa total en compostatge
W=U(1:iw)/TM;            %- Vector de fraccions màssiques
V=U(1:iw)*1e3/U(iw);     %kg/m3 (g/L) concentració de solubles en aigua
S2=V(is-2)+V(is-1);      %kg/m3 Conc. en aigua d'hidrolitzats: SLC + SCN
S3=V(is-2)+V(is-1)+V(is); %kg/m3 Conc. en aigua d'hidrolitzats: SLC + SCN + SRC

%Temperature functions HY (Hyperbola de J.Kaiser) -----
%alf1=1/(2*Topt1-Tmin1-Tmax1);
%c1=alf1*(Topt1^2-Tmin1*Tmax1);
%fT1=alf1*(U(it+1)-Tmin1).*(U(it+1)-Tmax1)./(U(it+1)-c1);

```

```

%ft1=(U(it+1)>=Tmin1 & U(it+1)<=Tmax1).*ft1;

%alf2=1/(2*Topt2-Tmin2-Tmax2);
%c2=alf2*(Topt2^2-Tmin2*Tmax2);
%ft2=alf2*(U(it+1)-Tmin2).*(U(it+1)-Tmax2)./(U(it+1)-c2);
%ft2=(U(it+1)>=Tmin2 & U(it+1)<=Tmax2).*ft2;

%alf3=1/(2*Topt3-Tmin3-Tmax3);
%c3=alf3*(Topt3^2-Tmin3*Tmax3);
%ft3=alf3*(U(it+1)-Tmin3).*(U(it+1)-Tmax3)./(U(it+1)-c3);
%ft3=(U(it+1)>=Tmin3 & U(it+1)<=Tmax3).*ft3;

%Funcions de limitació del creixement per temperatura (Rosso)
ft1=0; %Limitació del creixement dels XMB per temperatura
if Tmin1<U(it+1) & U(it+1)<Tmax1
    ft1=(U(it+1)-Tmax1)*(U(it+1)-Tmin1)^2/(Topt1-Tmin1)/...
        ((Topt1-Tmin1)*(U(it+1)-Topt1)-(Topt1-Tmax1)*(Topt1+Tmin1-2*U(it+1)));
end

ft2=0; %Limitació del creixement dels XTB per temperatura
if Tmin2<U(it+1) & U(it+1)<Tmax2
    ft2=(U(it+1)-Tmax2)*(U(it+1)-Tmin2)^2/(Topt2-Tmin2)/...
        ((Topt2-Tmin2)*(U(it+1)-Topt2)-(Topt2-Tmax2)*(Topt2+Tmin2-2*U(it+1)));
end

ft3=0; %Limitació del creixement dels XMF per temperatura
if Tmin3<U(it+1) & U(it+1)<Tmax3
    ft3=(U(it+1)-Tmax3)*(U(it+1)-Tmin3)^2/(Topt3-Tmin3)/...
        ((Topt3-Tmin3)*(U(it+1)-Topt3)-(Topt3-Tmax3)*(Topt3+Tmin3-2*U(it+1)));
end

%Limitació del creixement per manca d'oxigen
fO2=V(is+1)/(KB(10)+V(is+1));

%Limitació del creixement per manca d'aigua. Segons Stombaugh-Nokes
m2=0.2; m3=0.4;
fIW=(m2<W(iw) & W(iw)<m3).*((W(iw)-m2)/(m3-m2))+(W(iw)>=m3)*1;

%Limitació del creixement per manca de nitrogen
fNH4=V(is+3)/(KB(11)+V(is+3));

%VECTOR DE VELOCITATS DE REACCIÓ =====
P=zeros(13,1); %P Vector columna [kg Xi/h.kgTM]

%Hidrolisi
P(1)=KB(1)*W(1);
P(2)=KB(2)*W(2);
P(3)=KB(3)*W(3);

%Creixement específic dels microorganismes
PXMB=ft1*fO2*fIW*KB(4)*S2/(KB(7)+S2)*W(4); %Total growth rate for XMB
PXTB=ft2*fO2*fIW*KB(5)*S2/(KB(8)+S2)*W(5); %Total growth rate for XTB
PXMF=ft3*fO2*fIW*KB(6)*S3/(KB(9)+S3)*W(6); %Total growth rate for XMF

P(4)= V(9)/S2*fNH4*PXMB; %XMB growth on SLC
P(5)= V(10)/S2* PXMB; %XMB growth on SCN

P(6)= V(9)/S2*fNH4*PXTB; %XTB growth on SLC
P(7)= V(10)/S2* PXTB; %XTB growth on SCN

```

```

P(8)= V(9)/S3*fNH4*PXMf;          %XMF growth on SLC
P(9)= V(10)/S3*      PXMf;          %XMF growth on SCN
P(10)=V(11)/S3*fNH4*PXMf;          %XMF growth on SRC

%Mort de microorganismes
P(11)=KB(12)*W(4);                %XMB death rate
P(12)=KB(13)*W(5);                %XTB death rate
P(13)=KB(14)*W(6);                %XMF death rate

%Vector de termes de reacció
RXB=ZMAB'*P*TM;                    %RXB(1:15) kg Ui/h Vector columna

%CABALS MÀSSICS DE TRANSFERÈNCIA LÍQUID-GAS =====
%Pressió de vapor saturat a la temperatura de la fase gasosa
if      U(it)<273 psat=1.674244239e-6*exp(7.218389e-2*U(it)); %Pa vap pressure
elseif  U(it)>373 psat=-1.2461451015e6+3.61059966e3*U(it);
else    psat=10^(22.443-2795/U(it)-1.6798*log(U(it)));
end

%Determinació de les constants de Henry a la temperatura de la fase líquida
heo2= 1e5*exp(16.7886-1800/U(it+1)); %Pa Constant de Henry O2
heco2=1e5*exp(15.4570-2400/U(it+1)); %Pa Constant de Henry CO2
henh3=1e5*exp(13.7521-4100/U(it+1)); %Pa Constant de Henry NH3

%Determinació del pk dels equilibris iònics
pkc1=-14.8435+0.03279*U(it+1)+3404.7/U(it+1);
pkc2= -6.498 +0.02379*U(it+1)+2902.4/U(it+1);
pknh=0.09018+2729.92/U(it+1);

%Determinació de les fraccions volàtils
ffco2=1/(1+10^(pH-pkc1)+10^(2*pH-pkc1-pkc2));
ffnh3=1/(1+10^(pknh-pH));

%Determinació de les velocitats de transferència líquid-gas
RG=zeros(5,1); %kg/h
RG(1)=KF(41)*TM*(heo2 *18/32*      U(is+1)/U(iw)-U(iw+1)*R*U(it)/Vg); %O2
RG(2)=KF(42)*TM*(heco2*18/44*ffco2*U(is+2)/U(iw)-U(iw+2)*R*U(it)/Vg); %CO2
RG(3)=KF(43)*TM*(henh3*18/17*ffnh3*U(is+3)/U(iw)-U(iw+3)*R*U(it)/Vg); %NH3
RG(4)=KF(44)*TM*(psat-U(iw+4)*R*U(it)/Vg); %Compte: POT ACABAR-SE L'AIGUA %H2Ov

%CABALS MÀSSICS MOLARS D'ENTRADA AL REACTOR =====
nT0=zeros(5,1); %kmol/h Cabals màssics molars d'entrada

Pv=KF(24)*10^(22.443-2795/KF(23)-1.6798*log(KF(23))); %Pa Pressió parcial vapor
na=(KF(19)-Pv)*KF(21)/R/KF(23); %kmol/h Cabal molar d'aire sec d'entrada

nT0(1)=KF(25)*na; %kmol/h Cabal molar d'O2
nT0(2)=KF(26)*na; %kmol/h Cabal molar de CO2
nT0(3)=KF(27)*na; %kmol/h Cabal molar de NH3
nT0(4)=Pv*KF(21)/R/KF(23); %kmol/h Cabal molar de vapor
nT0(5)=KF(28)*na; %kmol/h Cabal molar de N2

%L'EQUACIÓ DE BE DE LA FASE GASOSA DEL MODEL BME3 (eq. 3.53)
F=zeros(ni,1); %F vector columna de derivades de les variables d'estat
Z5=zeros(1,5);
qcT=KF(45)*TM*(U(it+1)-U(it)); %J/h Flux d'escalfor de fase liq a gasosa eq.(3.54)
F(it)=(qcT+(KF(23)-U(it))*KF(11:15)*nT0+...
      (U(it+1)-U(it))*KF(11:15)*max([Z5;RG'./PM])))/(KF(11:15)*U(iw+1:iw+5));

```

```

%EQUACIONS DE BM DEL MODEL BME3
F(1:iw)=RXB; %kg/h Les components de reacció biològica
F(is+1:iw)=F(is+1:iw)-RG(1:4); %kg/h Substracció termes transferència liq-gas
aa=R*U(it)/KF(19)/Vg*sum(nT0+RG./PM')+F(it)/U(it);
F(iw+1:iw+5)=nT0-aa*U(iw+1:iw+5)+RG./PM'; %kmol/h

%EQUACIÓ DE BE PER LA FASE SÒLID-LÍQUIDA DEL MODEL BME3 (eq. 3.60)
qG=-TM*KB(27:29)*ZMAB(4:10,9:11)'*P(4:10); %J/h Heat generation in substrate
consumption
qcw=KF(16)*(U(it+1)-KF(20)); %J/h Escalfor dissipat per les parets del reactor

F(it+1)=(qG-qcw-qcT -max([Z5;RG'./PM])*(LDA+(U(it+1)-zc)*KF(11:15))'...
-min([Z5;RG'./PM])*(LDA+(U(it) -zc)*KF(11:15))'...
-(U(it+1)-zc)*(KF(5)*sum(F(1:8))+KF(4)*sum(F(9:iw)))/...
(KF(17)+KF(5)*sum(U(1:8))+KF(4)*sum(U(9:iw))));

%VARIABLES D'ACUMULACIÓ (INDICADORS)
F(it+1+1)=-RG(1)-F(is+1); %kgo2/h Consum biològic instantani d'O2
F(it+1+2)=RG(2)-44*F(iw+2); %kgco2/h Emissió neta instantània de CO2
F(it+1+3)=RG(3)-17*F(iw+3); %kgnh3/h Emissió neta instantània de NH3
F(it+1+4)=RG(4)-18*F(iw+4); %kgvap/h Emissió neta instantània de vapor
F(it+1+5)=(U(it+1)>KF(50)); % --
F(it+1+6)=(U(it+1)>KF(51))*(U(it+1)-KF(51)); %°C
%F(28)=qG; %J/h Producció instantània de calor biològic

```

```
%asensiSa
```

```

%Programa main per generar la Taula d'anàlisi de sensibilitat dels
%indicadors I1,...,I9 respecte a modificacions del valor de referència dels
%paràmetres físics del model. Els resultats són dins la matriu MRI, a la
%primera fila els indicadors calculats amb els valors de referència dels
%paràmetres. A la primera columna els valors modificats de cada paràmetre.
%Evidentment, a la posició MRI(1,1) hi un zero.

```

```

disp('S''esta en proces de calcul')
C0=fix(clock); %Registre instant inici del proces de calcul.
TSPAN=[0:360]; %h Vector de punts en el temps
[GD,KF,KB]=genkfbSa(); %Vectors constants geometriques, físiques i biològiques

```

```
%Inicialització de matrius i assignació de valors
```

```

MRI=[]; %Inicialització matriu contindrà els valors dels indicadors
ikf=[7,41,42,43,44,45,21,23,24,16,17,37]; %Índexs dels paràmetres dins de KF

```

```
%Matriu de valors modificats dels paràmetres (MVP: tantes files com elements te ikf)
```

```

MVP=zeros(length(ikf),6); %Inicialització matriu
MVP(1,:)= [9,8.5,8,7,6.5,6]; %Valors de pH
MVP(2,:)= [10,5,2,0.9,0.5,0.1]*1e-6; %Valors de xklo2
MVP(3,:)= [10,5,2,0.9,0.5,0.1]*1e-6; %Valors de xklco2
MVP(4,:)= [10,5,2,0.9,0.5,0.1]*1e-6; %Valors de xklnh3
MVP(5,:)= [10,5,2,0.9,0.5,0.1]*1e-6; %Valors de xklw
MVP(6,:)= [10,5,2,0.9,0.5,0.1]*1e3; %Valors de hcsv
MVP(7,:)= [2,1,0.5,0.2,0.1,0.03]; %Valors de Qo
MVP(8,:)= [35,30,25,15,10,5]+KF(2); %Valors de To
MVP(9,:)= [1,0.9,0.8,0.6,0.5,0.4]; %Valors de eo
MVP(10,:)= [20,10,6,2,0.5,0]*1e3; %Valors de UA
MVP(11,:)= [15,10,6,3,2,0.4]*1e4; %Valors de Ccon
MVP(12,:)= [1.5,1,0.5,0.2,0.1,0.02]; %Valors de Vg

```

```

%Procés de càlcul dels indicadors
for i=1:length(ikf);
    [GD,KF,KB]=genkfbSa();
    k=1;
    if i==1;k=0;end %Per calcular valors de referència
    for j=k:length(MVP(1,:));
        if j>0;KF(ikf(i))=MVP(i,j);end
        VINIT=genvinitSa(KF,GD); %Vector d'estat inicial
        [ZMAB,MF,PM]=genzmabSa(KB); %Matriu ZMAB en l'estat inicial

        options=odeset('RelTol',1e-9,'AbsTol',1e-11,...
            'MaxStep',1e-1,'Stats','on');

        [T,Y]=ode15s(@fSa,TSPAN,VINIT,options,ZMAB,KF,GD,KB);

        %DETERMINACIÓ DELS INDICADORS DE PROCÉS
        %=====
        is=GD(16);
        iw=GD(17);
        it=GD(18);
        TM0=sum(VINIT(1:iw)); %kg Initial total mass
        TM=sum(Y(:,1:iw))'; %Total mass evolution
        mc=Y(:,iw)./TM*100; %Moisture content (wb) evolution

        I(1)=Y(end,it+1+1)/TM0; %kgO2 /kgTM0 Indicador 1
        I(2)=Y(end,it+1+2)/TM0; %kgCO2/kgTM0 Indicador 2
        I(3)=Y(end,it+1+3)/TM0; %kgNH3/kgTM0 Indicador 3
        I(4)=Y(end,it+1+4)/TM0; %kgvap/kgTM0 Indicador 4
        I(5)=Y(end,it+1+5); %h Temps a T>Tr1 Indicador 5
        I(6)=Y(end,it+1+6); %°C·h Integral tèrmica Indicador 6
        I(7)=mc(end); %-- Humitat final prod Indicador 7
        I(8)=min(Y(:,is+1)./Y(:,iw))*1e6; %mgO2/L Conc O2 minima Indicador 8
        I(9)=max((Y(:,it+1)>KF(52)).*TSPAN')+1; %h Durada procés Indicador 9

        MRI=[MRI;I];
    end
end

%Afegir una primera columna amb els valors dels paràmetres
MVP=MVP';
MRI=[[0;MVP(:)],MRI]; %Zero a la primera posició
save MRI MRI -ascii; %Sintaxis: save nomfitx X -ascii

disp('Proces acabat')
fprintf('Hora de fi proces de calcul: %4.0f%4.0f%4.0f%4.0f%4.0f%4.0f\n',fix(clock))
fprintf('Hora inici proces de calcul: %4.0f%4.0f%4.0f%4.0f%4.0f%4.0f\n',C0)

```

A1.2 Llistats de les rutines del model 1D utilitzant el model biològic adaptat de Solé-Mauri

```

=====
%compSalD
%Programa MAIN per simular el proces de compostatge. Model SalD.
%No es necessaria cap variable en el workspace.

disp('S''esta en proces de calcul')
C0=fix(clock);           %Registre instant inici dels proces de calcul

TSPAN=(0:360);          %h Vector de punts en el temps

[GD,KF,KB]=genkfbSalD(); %Vectors constants fisiques, geomètriques i biològiques

VINIT=genvinitSalD(KF,GD); %VINIT Vector columna valors inicials

[ZMAB,MF,PM]=genzmabSa(KB); %ZMAB(13,14) Matriu coefs estequiometrics

options=odeset('RelTol',1e-9,'AbsTol',1e-11,...
'MaxStep',1e-1,'Stats','on');
[T,Y]=ode15s(@fSalD,TSPAN,VINIT,options,ZMAB,KF,GD,KB);

disp('Proces acabat')
fprintf('Hora de fi proces de calcul:  %4.0f%4.0f%4.0f%4.0f%4.0f%4.0f\n',fix(clock))
fprintf('Hora inici proces de calcul:  %4.0f%4.0f%4.0f%4.0f%4.0f%4.0f\n',C0)

%Detecció de variables amb valors negatius
tv=GD(1); is=GD(16); iw=GD(17); it=GD(18); ni=GD(19);
a=[(1:ni*(tv-1));sum(Y<0)'];
a(a(:,2)>0,:);
disp('Var n°, n°punts<0')

%DADES=[T,Y];
%save DADES DADES;
%save DADES DADES -ascii;

%Inicialització de variables
Vgs=KF(31)*GD(4)*GD(5); % m3 Volum fase gasosa en cada VC
PM=[32,44,17,18,28]; %kg/kmol Vector de pesos moleculars gasos
S=(2:tv); % Vector d'índexs de les capes (o VC)
MTOTAL=[]; %kg Inicialització matriu massa total reactor
NT=[]; %kmol Inicialització matriu evolució masses molars
totals

%DETERMINACIÓ DELS INDICADORS A CADA VC-----
II=zeros(tv-1,9); %Inicialització matriu contindrà valors dels indicadors a cada VC
for s=2:tv
    ir=ni*(s-2);
    TM=sum(Y(:,1+ir:iw+ir),2); %kg Evolució de la massa total del VC
    nT=sum(Y(:,iw+1+ir:iw+5+ir),2); %kmol Evolució massa molar total del VC

    II(s-1,1)=Y(end,it+1+1+ir)/TM(1); %kgO2 /kgTM0 Indicador 1
    II(s-1,2)=Y(end,it+1+2+ir)/TM(1); %kgCO2/kgTM0 Indicador 2
    II(s-1,3)=Y(end,it+1+3+ir)/TM(1); %kgNH3/kgTM0 Indicador 3
    II(s-1,4)=Y(end,it+1+4+ir)/TM(1); %kgvap/kgTM0 Indicador 4
    II(s-1,5)=Y(end,it+1+5+ir); %h Temps a T>Tr1 (55) Indicador 5
    II(s-1,6)=Y(end,it+1+6+ir); %°C·h Integral tèrmica Indicador 6
    II(s-1,7)=Y(end,iw+ir)/TM(end)*100; %-- Humitat final prod Indicador 7
    II(s-1,8)=min(Y(:,is+1+ir)./Y(:,iw+ir))*1e6; %mgO2/L Conc O2 min Indicador 8
    II(s-1,9)=max((Y(:,it+1+ir)>KF(52)).*T)+1; %h Durada procés Indicador 9
end

```



```

        MTOTAL=[MTOTAL, TM];           %kg   Evolució massa total
        NT=[NT, nT];                   %kmol  Evolució massa molar total
end
NTa=NT-Y(:, (S-2)*ni+iw+4);          %kmol  Evolució massa molar total seca

%REPRESENTACIÓ GRÀFICA =====
%Grafica d'evolucio de les temperatures
subplot(2,2,1); plot(T,Y(:, (S-2)*ni+it)-KF(2)); ylabel('Temperatura (°C)');

%Grafica de l'evolució de les concentracions de O2 i CO2 en fase gasosa
subplot(2,2,3); plot(T,Y(:, (S-2)*ni+iw+1)./NTa*100); ylabel(' O2 %'); %Evolució
O2

subplot(2,2,2); plot(T,Y(:, (S-2)*ni+iw+2)./NTa*100); ylabel('CO2 %'); %Evolució
CO2

%Gràfica d'evolució de la concentració d'amoníac en fase gasosa
subplot(2,2,4); plot(T,Y(:, (S-2)*ni+iw+3)*17e6/Vgs); ylabel('mgNH3/m3'); %Evolució
NH3

%Gràfica conjunta evolució O2 i CO2 al plenum superior
%plot(T,Y(:, (tv-2)*ni+iw+[1,2])./(NTa(:,end)*[1,1])*100); xlabel('Temps
(h)'); ylabel('Concentració (%)');

%Gràfica evolució quocient respiromètric
%RQ=(Y(:, (tv-2)*ni+iw+2)./NTa(:,end))./(.21-Y(:, (tv-2)*ni+iw+1)./NTa(:,end));
%subplot(2,2,4); plot(T,RQ); xlabel('Temps (h)'); ylabel('RQ (-)'); %Evolució
RQ

%xxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxx
%Gràfica d'evolució del contingut en humitat
%plot(T,Y(:, (S-2)*ni+iw)./MTOTAL*100);

%Grafica d'evolucio de la temperatura i humitat relativa aire
%Psat=10.^(22.443-2795./Y(:,it)-1.6798*log(Y(:,it))); %Pa Saturated vapor pressure
%Pv=Y(:,iw+4)*KF(1).*Y(:,it)/KF(37); %Pa Vapour pressure in gaseous phase
%HR=Pv./Psat*100; %Relative moisture in gas phase
%subplot(4,3,1); plot(T,[HR,Y(:,it:it+1)-KF(2)]); ylabel('HR(%), T °C')

%Grafica %O2 i CO2 en fase gasosa
%nT=sum(Y(:,iw+[1,2,3,5]))'; %kmol Aire sec
%subplot(4,3,4); plot(T,[Y(:,iw+1)./nT,Y(:,iw+2)./nT]*100); ylabel('O2 i CO2 %')

%Grafica concentracio d'amoniac en fase gasosa
%subplot(4,3,7); plot(T,Y(:,iw+3)*17e6/Vg); ylabel('mgNH3/m3')

%Grafica TM i IW
%TM=sum(Y(:,1:iw))'; % kg Massa total
%mc=Y(:,iw)./TM*100; % Humitat massa (wb)
%subplot(4,3,10); plot(T,[Y(:,iw),mc, TM,]); ylabel(' IW kg,mc(%),TM kg')

```

```

%genkfbSalD
%Rutina per generar els vectors de constants pel model SalD
%      GD  Vector de constants de geometria, discretització i índexs d'estructura
%      KF  Vector de constants físiques
%      KB  Vector de paràmetres del model biològic

function [GD,KF,KB]=genkfbSalD()

%PARAMETRES DE GEOMETRIA I DISCRETITZACIÓ (GD)=====
%Parametres de la discretitzacio 1D i de geometria -----
GD(1)=6;           % -- tv VC superior
GD(2)=0.3;        % m  D  Diametre de la columna
GD(3)=1.0;        % m  L  Alçaria de la columna
GD(4)=GD(3)/(GD(1)-1); % m  dz Alçaria d'un VC
GD(5)=pi*GD(2)^2/4; % m2  S  Area de la seccio recta de la columna
GD(6)=GD(5)+pi*GD(2)*.2; % m2  Aps Àrea plenum superior
GD(7)=0;          %      imd Mode cabal imd=0; mode sobrepressió imd=1

%Parametres de l'estructura del model fisic -----
GD(15)=3;         % ix Index de la darrera variable de substrat (cal. esp: cps)
GD(16)=11;        % is Index de la darrera variable no volatil
GD(17)=15;        % iw Index de la variable aigua
GD(18)=21;        % it Index de la variable temperatura gasos
GD(19)=28;        % 22      % ni Nombre de variables d'estat en cada VC (inclou indicadors)

%PARAMETRES FÍSICS (KF) =====
%Parametres termodinamics -----
KF(1)=8314;       % J/kmol.K  R  Constant universal dels gasos
KF(2)=273.15;    % K          zc  Temperatura de referència
KF(3)=9.81;      % N/kg       g  Acceleració de la gravetat
KF(4)=4183;      % J/kg.K     cpw  Calor especifica aigua i microorgs. (u9,      ,uiw)
KF(5)=2300;      % J/kg.K     cps  Calor especifica substrats (u1,      ,u8)
KF(6)=800;       % J/kg.K     cpm  Calor especifica fraccio mineral  (--)
KF(7)=7.5;       % --        pH  de la fase líquida

KF(10)=45.0756e6; % J/kmol     h0  Terme fix relació lineal entalpia vapor
KF(11)=29595;    % J/kmol.K   Cp1  Calor molar O2
KF(12)=38233;   % J/kmol.K   Cp2  Calor molar CO2
KF(13)=36641;   % J/kmol.K   Cp3  Calor molar NH3
KF(14)=31369;   % J/kmol.K   Cp4  Calor molar H2O
KF(15)=29136;   % J/kmol.K   Cp5  Calor molar N2

%Propietats físiques del contenidor-----
%KF(16)=4.2e3;   % J/h.K     UA  Coef transf d'escalfor del contenidor (Model
BME)
%KF(17)=4e4;     % J/K       CCON  Capacitat calorifica del contenidor (Model
BME)
KF(16)=3900;     % J/h.K.m2  U    Coef transf d'escalfor parets del reactor (Model
1D)
KF(17)=3.3e4;    % J/K.m2    Ccon  Capacitat cal. contenidor per m2 de paret (Model
1D)

%Parametres del contorn -----
KF(19)=1.013e5;  % Pa        Pa  Pressio atmosferica (a nivell inf, s'hi mesura Qa)
KF(20)=20+KF(2); % K         Ta  Temperatura de l'ambient exterior (s'hi mesura Qa)
KF(21)=0.24;    % m3/h      Qa  Cabal d'aire humit d'entrada (MODE 0)
KF(22)=60; % 0.0; % % Pa        dP  Sobrepressió donada pel bufador (MODE 1)
KF(23)=20+KF(2); % K         T1  Temperatura entrada aire al reactor
KF(24)=0.7;     % --        eo  Humitat relativa aire en el corrent d'entrada
KF(25)=0.21;    % --        yo1  Fracció molar d'O2 en l'aire sec d'entrada

```

KF(26)=0.00; % -- yo2 Fracció molar d'CO2 en l'aire sec d'entrada
 KF(27)=0.00; % -- yo3 Fracció molar d'NH3 en l'aire sec d'entrada
 KF(28)=0.79; % -- yo5 Fracció molar d'N2 en l'aire sec d'entrada
 KF(29)=20+KF(2); % K T0 Temperatura inicial del reactor

%Propietats físiques material-----
 %KF(30)=350; % kg/m3 ro Densitat aparent medi
 KF(31)=0.50; % -- FAS Free Air Space
 KF(32)=2.86e-10; % % m2 kp Permeabilitat a l'aire del medi poros
 KF(33)=540; % J/m.h.K k Conductivitat termica del medi poros
 %KF(34)=.55; % -- mc Moisture content (wet basis)
 KF(35)=5.067e-9; % Pa.h mu Viscositat dinamica de l'aire (valor a 20°C)
 KF(36)=0.012168e-9; % Pa.h/K -- Increment lineal viscositat amb la temperatura
 %KF(37)=0.35; %m3 Vg Volum de la fase gasosa

%Heat and mass transfer coeficients-----
 KF(41)=1e-6; % kgO2/h.Pa.kgTM xklo2 Oxygen mass transfer coef liq-gas phase
 KF(42)=1e-6; % kgCO2/h.Pa.kgTM xklco2 CO2 mass transfer coef liq-gas phase
 KF(43)=1e-6; % kgNH3/h.Pa.kgTM xklnh3 NH3 mass transfer coef liq-gas phase
 KF(44)=1e-6; % kgH2O/h.Pa.kgTM xklw Water mass transfer coef liq-gas phase
 KF(45)=1e3; % J/h.K.kgTM hcsv Heat transfer coef solid-gas phase

%Temperatures de referència pel càlcul dels indicadors
 KF(50)=55+KF(2); %K Tr1 Temperatura de referència
 KF(51)=60+KF(2); %K Tr2 Temperatura de referència
 KF(52)=KF(20)+7; %K Tfp Temperatura de final de procés

%PARÀMETRES DEL MODEL BIOLÒGIC (KB) =====

%Paràmetres cinètics -----
 KB(1)=32e-4; %h-1 Hydrolysis constant for XLC
 KB(2)=13e-4; %h-1 Hydrolysis constant for XCN
 KB(3)=10e-4; %h-1 Hydrolysis constant for XRC

 KB(4)=0.36; %h-1 Maximum growth rate for XMB
 KB(5)=0.32; %h-1 Maximum growth rate for XTB
 KB(6)=0.12; %h-1 Maximum growth rate for XMF

 KB(7)=5; %5.1e-3; %kgi/m3 Ks1 Monod sat constant for growth of XMB on SLC+SCN
 KB(8)=5; %5e-3; %kgi/m3 Ks2 Monod sat constant for growth of XTB on SLC+SCN
 KB(9)=5; %5e-3; %kgi/m3 Ks3 Monod sat constant for growth of XMF on SLC+SCN+SRC

 KB(10)=.2e-3; %kgO2/m3 KO2 Saturation constant for oxygen
 KB(11)=.5e-1; %kgNH3/m3 KNH3 Saturation constant for NH3

 KB(12)=0.011; %h-1 kdMB Decay constant for XMB
 KB(13)=0.025; %h-1 kdTB Decay constant for XTB
 KB(14)=0.029; %h-1 kdMF Decay constant for XMF

 KB(15)= 5.1 +KF(2); %K Tmin for XMB COMPTE: Si s'utilitzen les funcions QP
 KB(16)=35.4 +KF(2); %K Topt for XMB de Rosso s'ha de verificar:
 KB(17)=44.0 +KF(2); %K Tmax for XMB (Tmin+Tmax)/2 <= Topt <= Tmax

 KB(18)=20+KF(2); %K Tmin for XTB
 KB(19)=50+KF(2); %K Topt for XTB
 KB(20)=75+KF(2); %K Tmax for XTB

 KB(21)= 5.1 +KF(2); %K Tmin for XMF
 KB(22)=35.4 +KF(2); %K Topt for XMF

KB(23)=60.0 +KF(2); %K Tmax for XMF

%Paràmetres estequiomètrics -----

KB(24)=0.35; %kgXkgS YMB Mesophilic bacteria yield on substrate
KB(25)=0.35; %kgXkgS YTB Thermophilic bacteria yield on substrate
KB(26)=0.35; %kgXkgS YMF Mesophilic fungi yield on substrate

KB(27)=44e6; %J/kg Release of heat in the degradation of SLC
KB(28)=14e6; %J/kg Release of heat in the degradation of SCN
KB(29)=17e6; %J/kg Release of heat in the degradation of SRC

%genvinitSalD

%Rutina per generar el vector d'estat inicial del model SalD. La columna de material d'alçaria L és compartimentada en tv-1 VC iguals. La massa total inicial es reparteix a parts iguals entre els tv-1 VC.
%S'admet que en l'estat inicial hi ha una distribució de temperatura als VC (Ts) i que en cada VC la fase sòlida i la gasosa estan a la mateixa temperatura i que la fase gasosa està saturada de vapor.
%En l'estat inicial hi ha equilibri entre les concentracions en fase gasosa i les corresponents concentracions en fase líquida dels components volàtils (O2, CO2 i NH3). Les concentracions d'O2 i CO2 en la fase gasosa definides al bloc "Composició molar de la fase gasosa" determinen les corresponents concentracions en la fase líquida. La concentració de NH3 en fase líquida, obtinguda a partir de la concentració de Namoniacal analític, determina la corresponent concentració en la fase gasosa.

function VINIT=genvinitSalD(KF,GD);

%Assignació de valor a constants

tv=GD(1); % - tv Número del VC superior
imd=GD(7); % - imd Mode sobrepressió imd=1; Mode cabal imd=0
is=GD(16); % - is Index darrera variable no volàtil
iw=GD(17); % - iw Index de la variable aigua
it=GD(18); % - it Index de la variable temperatura gasos
ni=GD(19); % - ni Nombre de variables d'estat en cada VC

R=KF(1); %J/kmol.K R Constant universal dels gasos
g=KF(3); %N/kg g Acceleració de la gravetat
pH=KF(7); % - pH de la fase líquida
Pa=KF(19); %Pa Pa Pressio atmosferica
Ta=KF(20); %K Ta Temperatura ambient
Vgs=KF(31)*GD(4)*GD(5); %m3 Vgs Volum de la fase gasosa d'un VC
PM=[32,44,17,18,28]; %kg/kmol Vector pes molecular dels gasos

%Distribucions inicials

PT0=ones(tv,1)*Pa; %Pa Distribució inicial de pressió total
T0=ones(tv,1)*KF(29); %K Distribució inicial de temperatura
PG=zeros(tv,1); %kg/m3 Inicialització vector densitat gas a cada VC
PGM=zeros(tv,1); %kmol/m3 Inicialització vector densitat molar gas a cada VC
MU=zeros(tv,1); %Pa.h Inicialització vector visc din gas a cada VC
KP=ones(tv,1)*KF(32); %m2 Permeabilitat del medi a cada VC
KK=ones(tv,1)*KF(33); %J/h.m.K Conductivitat tèrmica material a cada VC

U=zeros(ni*(tv-1),1); % Inicialització vector d'estat global (U Vector columna)
DA=zeros(13,6);

```

%DADES ANALITIQUES
%=====Experiment 1=====      Experiment 2=====      =====
%          R1          R2          R3          R1          R2          R3
DA(1,:)=[ .651, .652, .699, .729, .462, .699]; %kgw/kgmf Humitat
DA(3,:)=[ .8524, .8128, .8518, .8294, .7758, .8518]; %kg/kgms Sòlids volàtils
DA(4,:)=[ .2176, .2983, .2339, .3226, .3013, .2339]; %kgC/kgms Carboni total
DA(5,:)=1e-3*[13.0, 16.5, 19.3, 19.2, 14.6, 19.3]; %kgN/kgms N Kjeldahl
DA(6,:)=1e-3*[ 2.2, 2.4, 2.9, 3.3, 1.4, 2.9]; %kgN/kgms Nitrogen amoniacal
DA(8,:)= [ 16.8, 18.1, 12.1, 16.8, 20.7, 12.1]; % --- C/N (NOT USED)
DA(9,:)=1e-3*[16.0, 47.0, 18.0, 23.0, 90.0, 17.0]; %kg/kgms Greixos
DA(11,:)=[ .390, .500, .380, .580, .440, .380]; %kg/kgms Fibra
DA(12,:)=[ 502.7, 578.9, 553.3, 466.0, 492.7, 627.0]; %kg/m3 Dens ap (NOT USED)
DA(13,:)=[ 36.60, 42.15, 30.90, 34.26, 36.05, 45.65];%kg Massa totl inicial
DA(2,:)=1-DA(1,:); %kgms/kgmf Sòlids totals
DA(7,:)=DA(5,:)-DA(6,:); %kgN/kgms Nitrogen orgànic
DA(10,:)=6.25*DA(7,:); %kg/kgms Proteïna

DA=DA(:,1); %Selecció de l'experiment i reactor

%DEFINICIÓ COMPOSICIÓ MÀSSICA DEL VECTOR D'ESTAT INICIAL
%Definició del vector d'estat inicial a partir de dades analitiques
fLC=0.0; %Fracció de greixos en forma no hidrolitzada
fCN=0.0; %Fracció de proteïnes en forma no hidrolitzada
fRC=0.8; %Fracció de fibra en forma no hidrolitzada

U(1)= DA(9)*DA(2)*DA(13)*fLC; % kg Mass of XLC
U(2)=DA(10)*DA(2)*DA(13)*fCN; % kg Mass of XCN
U(3)=DA(11)*DA(2)*DA(13)*fRC; % kg Mass of XRC
U(4)=1.2e-4*DA(13); % kg XMB Mesophilic Bacteria
U(5)=1.4e-4*DA(13); % kg XTB Thermophilic Bacteria
U(6)=0.3e-4*DA(13); % kg XMF Mesophilic Fungi

U(is-2)=DA(9)*DA(2)*DA(13)*(1-fLC); % kg Mass of SLC: XLC hydrolysis products
U(is-1)=DA(10)*DA(2)*DA(13)*(1-fCN); % kg Mass of SCN: XCN hydrolysis products
U(is)=DA(11)*DA(2)*DA(13)*(1-fRC); % kg Mass of SRC: XRC hydrolysis products

U(is+3)=DA(13)*DA(2)*DA(6)*17/14; % kg Mass of NH3 in solution
U(iw)=DA(1)*DA(13); % kg Mass of water

U(1:iw)=U(1:iw)/(tv-1); % kg Fracció de la massa total a cada VC

erp=1e-5; %Error permès
in=0; inmax=8; %Inicialització comptador d'iteracions
vii=zeros(1,2); %Inicialització variable
while vii(1)*vii(2)==0 && in<inmax
  %DETERMINACIÓ MASSES MOLARS I DENSITATS DE LA FASE GASOSA EN CADA VC
  for s=2:tv;
    ir=ni*(s-2);

    U(1+ir:iw+ir)=U(1:iw); %Assignació massa al VC s
    U(7+ir)=0; %Inicialització U(7)=0
    U(it+ir)=T0(s); %K Assignació temperatura inicial a fase gasosa
    U(it+1+ir)=T0(s); %K Assignació temperatura inicial a fase sòlida
    Tg=U(it+ir); %K Temperatura fase gasosa del VC s
    Ts=U(it+1+ir); %K Temperatura fase sol-liq del VC s

    %Determinació de les constants de Henry
    heo2= 1e5*exp(16.7886-1800/Ts); %Pa Constant de Henry O2
    heco2=1e5*exp(15.4570-2400/Ts); %Pa Constant de Henry CO2
    henh3=1e5*exp(13.7521-4100/Ts); %Pa Constant de Henry NH3
  end
end

```

```

%Determinació del pk dels equilibris iònics
pkc1=-14.8435+0.03279*Ts+3404.7/Ts;
pkc2= -6.498 +0.02379*Ts+2902.4/Ts;
pknh=0.09018+2729.92/Ts;

%Determinació de les fraccions volàtils
ffco2=1/(1+10^(pH-pkc1)+10^(2*pH-pkc1-pkc2));
ffnh3=1/(1+10^(pknh-pH));

%Pressions parcials d'amoniac i de vapor
pnh3=henh3*ffnh3*(U(is+3+ir)/17)/(U(iw+ir)/18); %Pa Pressió parcial amoniac
if Tg<273 psat=1.674244239e-6*exp(7.218389e-2*Tg); %Pa vap pres
elseif Tg>273 psat=-1.2461451015e6+3.61059966e3*Tg;
else
    psat=10^(22.443-2795/Tg-1.6798*log(Tg));
end

%Composició molar de la fase gasosa
nT=(PT0(s)-pnh3-psat)*Vgs/R/Tg; %kmol Massa molar de: O2+CO2+N2
U(iw+1+ir)=0.21*nT; %kmol Massa molar de O2 en fase gasosa XX
U(iw+2+ir)=0.00*nT; %kmol Massa molar de CO2 en fase gasosa XX
U(iw+3+ir)=pnh3*Vgs/R/Tg; %kmol Massa molar de NH3 en fase gasosa
U(iw+4+ir)=psat*Vgs/R/Tg; %kmol Massa molar de H2Ov en fase gasosa
U(iw+5+ir)=0.79*nT; %kmol Massa molar de N2 en fase gasosa XX

%Pressions parcials en la fase gasosa de O2 i CO2
po2= U(iw+1+ir)*R*Tg/Vgs; %Pa Pressió parcial O2
pco2=U(iw+2+ir)*R*Tg/Vgs; %Pa Pressió parcial CO2

%Determinació de la massa de components volàtils en solució
U(is+1+ir)=32/18*U(iw+ir)*po2/heo2; %kg Massa d'oxigen en solució
U(is+2+ir)=44/18*U(iw+ir)*pco2/heco2/ffco2; %kg Massa CO2 total en solució

%Determinació de la massa de materia inert: dif suma components amb la mass total
U(7+ir)=DA(13)/(tv-1)-sum(U(1+ir:iw+ir)); %kg Materia inert

%Determinació de les densitats de la fase gasosa
PGM(s)=PT0(s)/R/Tg; %kmol/m3 Densitat molar (eq. 4.3)
PG(s)=PM*U(iw+1+ir:iw+5+ir)/Vgs; %kg/m3 Densitat (eq. 4.41)

%Determinació viscositat dinàmica a cada VC
MU(s)=KF(35)+KF(36)*(Tg-293); %Pa·h Viscositat dinàmica aire
end

%DETERMINACIÓ NOVA DISTRIBUCIÓ DE PRESSIONS
%Càlcul dels termes as i bs del sistema (4.71)
a=zeros(tv,1); b=zeros(tv,1);
a(1)=GD(4)/2/GD(5)/PGM(2)/(KP(2)/MU(2)); %eq. (4.68a)
b(1)=PG(2)*g*GD(4)/2; %eq (4.68b)

for s=2:tv-1
    kpmus=2*(KP(s)/MU(s))*KP(s+1)/MU(s+1)/(KP(s)/MU(s)+KP(s+1)/MU(s+1)); %eq. (4.49)
    a(s)=GD(4)/GD(5)/PGM(s)/kpmus; %eq. (4.69a)
    b(s)=(PG(s)+PG(s+1))*g*GD(4)/2; %eq. (4.69b)
end
a(tv)=GD(4)/2/GD(5)/PGM(tv)/(KP(tv)/MU(tv)); %eq. (4.70a)
b(tv)=PG(tv)*g*GD(4)/2; %eq. (4.70b)

```

```

%Muntatge i resolució del sistema d'equacions (4.71)
M=eye(tv); %Inicialització matriu M del sistema
for i=1:tv-1; M(i,i+1)=-1; end %Omple diagonal superior
roa=Pa*28.84/R/Ta; %kg/m3 Densitat aire exterior eq. (4.55)
Pu=Pa-roa*g*GD(3); %Pa Pressió al plenum superior eq. (4.54)
b(tv)=b(tv)+Pu;

if imd==0; %Mode 0 Cabal molar d'entrada fixat
    nTT=KF(21)*Pa/R/Ta; %kmol/h Cabal molar d'entrada eq. (4.72)
    PT=M\b+(nTT*a); %Pa La nova distribució de pressions
end

if imd==1; %Mode 1 Sobrepressió donada pel bufador fixada
    P1=Pa+KF(22); %Pa Pressió al plenum inferior eq. (4.37)
    b(1)=b(1)-P1;
    M(:,1)=-a;
    PT=M\b; %Pa Nova distr de pressions i cabal (nTT, P2,...,Ptv)
    nTT=PT(1); %kmol/h Cabal molar uniforme inicial
    PT(1)=P1;
end
in=in+1; %Comptador d'iteracions

%Càlcul de l'error
if sum(abs(PT0-PT))<=erp; ii=1; else ii=0; end
vii(1)=vii(2);
vii(2)=ii;
PT0=PT; %Actualitzaió vector de pressions nodals
end

if in==inmax disp('COMPTE NO CONVERGEIX LA DETERMINACIO DE LES PRESSIONS'); return; end
VINIT=U; %VINIT argument de sortida

```

```
%fSalD
```

%Rutina per calcular les derivades temporals del sistema d'edos que governen el %modelSalD. Les variables d'estat del modelSalD són dins el vector global U, les %seves derivades temporals són dins el vector columna F=dU/dt.

```
function F=fSalD(t,U,ZMAB,KF,GD,KB);
```

```
%Assignació de valor a constants
```

```

tv=GD(1); % - tv Número del VC superior
imd=GD(7); % - imd Mode sobrepressió imd=1; Mode cabal imd=0
is=GD(16); % - is Index darrera variable no volàtil
iw=GD(17); % - iw Index de la variable aigua
it=GD(18); % - it Index de la variable temperatura gasos
ni=GD(19); % - ni Nombre de variables d'estat en cada VC

R=KF(1); %J/kmol.K R Constant universal dels gasos
g=KF(3); %N/kg g Acceleració de la gravetat
pH=KF(7); % - pH de la fase líquida
Pa=KF(19); %Pa Pa Pressio atmosferica
Ta=KF(20); %K Ta Temperatura ambient
Vgs=KF(31)*GD(4)*GD(5); %m3 Vgs Volum de la fase gasosa d'un VC
PM=[32,44,17,18,28]; %kg/kmol Vector pes molecular dels gasos
LDA=[0,0,0,KF(10),0]'; %J/kmol Vector de calors latents (càlcul entalpia gasos)

```

```
%Paràmetres de les funcions limitadores del creixement per temperatura
```

```
Tmin1=KB(15); Topt1=KB(16); Tmax1=KB(17); %Temperatures cardinals pels XMB
```

```

Tmin2=KB(18); Topt2=KB(19); Tmax2=KB(20); %Temperatures cardinals pels XTB
Tmin3=KB(21); Topt3=KB(22); Tmax3=KB(23); %Temperatures cardinals pels XMF

%Inicialització de distribucions
PT=zeros(1,tv); %Pa Distribució de pressions totals
PG=zeros(1,tv); %kg/m3 Distribució de densitat dels gas a cada VC
PGM=zeros(1,tv); %kmol/m3 Distribució de densitat molar del gas a cada VC
MU=zeros(1,tv); %Pa·h Distribució de viscositat fase gasosa a cada VC
KP=ones(1,tv)*KF(32); %m2 Permeabilitat del material de cada VC
KK=ones(1,tv)*KF(33); %J/h·m·K Conductivitat tèrmica material de cada VC

nTT=zeros(1,tv); %kmol/h Cabals molars totals a les fronteres
qK=zeros(1,tv); %J/h Flux d'escalfor per conducció a les fronteres
NK=zeros(tv,5); %kmol/h Cabals de cada component a les fronteres
y=zeros(1,5); %-- Inicialització vector fraccions molars fase gasosa

%Determinació de propietats associades als VC
for s=2:tv
    ir=ni*(s-2);

    PGM(s)=sum(U(iw+1+ir:iw+5+ir))/Vgs; %kmol/m3 Densitat molar fase gaosa eq.(4.40)
    PT(s)=PGM(s)*R*U(it+ir); %Pa Pressio total fase gasosa eq.(4.39)
    PG(s)=PM*U(iw+1+ir:iw+5+ir)/Vgs; %kg/m3 Densitat gas eq.(4.41)
    MU(s)=KF(35)+KF(36)*(U(it+ir)-293); %Pa·h Viscositat dinàmica aire
end

%Composició molar corrent d'aire de l'ambient exterior
if Ta<273; psata=1.674244239e-6*exp(7.218389e-2*Ta); %Pa press vap a Ta
elseif Ta>273; psata=-1.2461451015e6+3.61059966e3*Ta;
else psata=10^(22.443-2795/Ta-1.6798*log(Ta));
end

y(4)=KF(24)*psata/Pa; %Fracció molar de vapor
y(1)=KF(25)*(1-y(4)); %Fracció molar de O2
y(2)=KF(26)*(1-y(4)); %Fracció molar de CO2
y(3)=KF(27)*(1-y(4)); %Fracció molar de NH3
y(5)=KF(28)*(1-y(4)); %Fracció molar de N2

%DETERMINACIÓ DELS FLUXOS MOLARS TOTALS A LES FRONTERES
%Frontera inferior
if imd==0; %Mode 0: Cabal d'aire d'entrada fixat (es mesura a Pa, Ta)
    nTT(1)=KF(21)*Pa/R/Ta; %kmol/h eq.(4.72)
end

if imd==1; %Mode 1: Pressió en secció d'entrada fixada (P1=Pa+dP) eq. (4.37)
    nTT(1)=GD(5)*KP(2)/MU(2)*((Pa+KF(22)-PT(2))/((GD(4)/2)-PG(2)*g)); %kmol/h eq.4.50
    if nTT(1)>=0;
        rom2=(Pa+KF(22)+PT(2))/R/(KF(23)+U(it)); %kmol/m3 Flux ascendent eq.(4.51)
    else
        rom2=PGM(2); %kmol/m3 Flux decendent eq.(4.40)
    end
    nTT(1)=rom2*nTT(1); %kmol/h eq. (4.50) completa
end

%Fronteres intermèdies
for s=2:tv-1
    ir=ni*(s-2);

    roms=(PT(s)+PT(s+1))/R/(U(it+ir)+U(it+ir+ni)); %kmol/m3 eq.(4.47)

```



```

kpmus=2*(KP(s)/MU(s))*KP(s+1)/MU(s+1)/(KP(s)/MU(s)+KP(s+1)/MU(s+1)); %eq.(4.49)
nTT(s)=roms*GD(5)*kpmus*((PT(s)-PT(s+1))/GD(4)-(PG(s)+PG(s+1))/2*g); %eq.(4.48)

km=2*KK(s)*KK(s+1)/(KK(s)+KK(s+1)); %J/h·m·K Mitjana harmònica
qK(s)=km*GD(5)*(U(it+1+ir)-U(it+1+ir+ni))/GD(4); %J/h eq.(4.57)
end

%Frontera superior
roa=Pa*28.84/R/Ta; %kg/m3 Densitat aire exterior eq. (4.55)
Pu=Pa-roa*g*GD(3); %Pa Pressió al plenum superior eq. (4.54)
nTT(tv)=GD(5)*KP(tv)/MU(tv)*((PT(tv)-Pu)/(GD(4)/2)-PG(tv)*g); %eq. (4.52)parcial

if nTT(tv)>=0;
    romtv=PGM(tv); %kmol/m3 eq. (4.40) flux ascendent
else
    romtv=(PT(tv)+Pu)/R/(KF(20)+U(it+ni*(tv-2))); %kmol/m3 eq. (4.53)
end
nTT(tv)=romtv*nTT(tv); %kmol/h eq. (4.52) completa

%DETERMINACIÓ DEL FLUX MOLAR DELS COMPONENTS GASOSOS A LES FRONTERES =====
%Frontera inferior
if nTT(1)>=0
    NK(1,:)=nTT(1)*y; %kmol/h Entrada d'aire exterior
else
    NK(1,:)=nTT(1)*U(iw+1:iw+5)'/PGM(2)/Vgs; %kmol/h Flux descendent
end

%Fronteres intermèdies
for s=2:tv-1
    ir=ni*(s-2);
    if nTT(s)>=0
        NK(s,:)=nTT(s)*U(iw+1+ir:iw+5+ir)'/PGM(s)/Vgs; %kmol/h Flux ascendent
    else
        NK(s,:)=nTT(s)*U(iw+1+ir+ni:iw+5+ir+ni)'/PGM(s+1)/Vgs; %kmol/h Flux descendent
    end
end

%Frontera superior
ir=ni*(tv-2);
if nTT(tv)>=0
    NK(tv,:)=nTT(tv)*U(iw+1+ir:iw+5+ir)'/PGM(tv)/Vgs; %kmol/h Flux de sortida
else
    NK(tv,:)=nTT(tv)*y; %kmol/h entrada d'aire exterior
end

%LES EQUACIONS DE BALANÇ DE MASSA =====
F=zeros(ni*(tv-1),1); %Inicialització vector F global
FL=zeros(ni,1); %kg/h i=1,...,iw; kmol/h i=iw+1,...,iw+5 Vector F local
RG=zeros(5,1); %kg/h Inicialització vector transferència liq-gas

Z5=zeros(1,5); %Utilitzat en les equacions de BE

for s=2:tv
    ir=ni*(s-2);
    Tg=U(it+ir); %K Temperatura fase gasosa del VC s
    Ts=U(it+1+ir); %K Temperatura fase sòlida del VC s

%EL MODEL BIOLÒGIC-----
%Funcions auxiliars

```

```

TM=sum(U(1+ir:iw+ir));           %kg Massa total en compostatge
W=U(1+ir:iw+ir)/TM;             %- Vector de fraccions m̀ssiques
V=U(1+ir:iw+ir)*1e3/U(iw+ir);   %kg/m3 (g/L) concentraci3 de solubles en aigua
S2=V(is-2)+V(is-1);             %kg/m3 Conc. en aigua d'hidrolitzts: SLC+SCN
S3=V(is-2)+V(is-1)+V(is);       %kg/m3 Conc. en aigua d'hidrolitzats: SLC+SCN+SRC

%Funcions de limitaci3 del creixement per temperatura (Rosso)
fT1=0; %Limitaci3 del creixement dels XMB per temperatura
if Tmin1<Ts && Ts<Tmax1
    fT1=(Ts-Tmax1)*(Ts-Tmin1)^2/(Topt1-Tmin1)/...
        ((Topt1-Tmin1)*(Ts-Topt1)-(Topt1-Tmax1)*(Topt1+Tmin1-2*Ts));
end

fT2=0; %Limitaci3 del creixement dels XTB per temperatura
if Tmin2<Ts && Ts<Tmax2
    fT2=(Ts-Tmax2)*(Ts-Tmin2)^2/(Topt2-Tmin2)/...
        ((Topt2-Tmin2)*(Ts-Topt2)-(Topt2-Tmax2)*(Topt2+Tmin2-2*Ts));
end

fT3=0; %Limitaci3 del creixement dels XMF per temperatura
if Tmin3<Ts && Ts<Tmax3
    fT3=(Ts-Tmax3)*(Ts-Tmin3)^2/(Topt3-Tmin3)/...
        ((Topt3-Tmin3)*(Ts-Topt3)-(Topt3-Tmax3)*(Topt3+Tmin3-2*Ts));
end

%Limitaci3 del creixement per manca d'oxigen
fO2=V(is+1)/(KB(10)+V(is+1))*(V(is+1)>0);

%Limitaci3 del creixement per manca d'aigua. Segons Stombaugh-Nokes
m2=0.2; m3=0.4;
fIW=(m2<W(iw) & W(iw)<m3).*((W(iw)-m2)/(m3-m2))+(W(iw)>=m3)*1;

%Limitaci3 del creixement per manca de nitrogen
fNH4=V(is+3)/(KB(11)+V(is+3));

%Determinaci3 del vector de velocitats de reacci3 biol3gica
P=zeros(13,1); %P Vector columna [kg Xi/h.kgTM]

%Hidrolisi
P(1)=KB(1)*W(1);
P(2)=KB(2)*W(2);
P(3)=KB(3)*W(3);

%Creixement específic dels microorganismes
PXMB=fT1*fO2*fIW*KB(4)*S2/(KB(7)+S2)*W(4); %Total growth rate for XMB
PXTB=fT2*fO2*fIW*KB(5)*S2/(KB(8)+S2)*W(5); %Total growth rate for XTB
PXMF=fT3*fO2*fIW*KB(6)*S3/(KB(9)+S3)*W(6); %Total growth rate for XMF

P(4)= V(9)/S2*fNH4*PXMB; %XMB growth on SLC
P(5)= V(10)/S2* PXMB; %XMB growth on SCN

P(6)= V(9)/S2*fNH4*PXTB; %XTB growth on SLC
P(7)= V(10)/S2* PXTB; %XTB growth on SCN

P(8)= V(9)/S3*fNH4*PXMF; %XMF growth on SLC
P(9)= V(10)/S3* PXMF; %XMF growth on SCN
P(10)=V(11)/S3*fNH4*PXMF; %XMF growth on SRC

%Mort de microorganismes

```

```

P(11)=KB(12)*W(4);          %XMB death rate
P(12)=KB(13)*W(5);          %XTB death rate
P(13)=KB(14)*W(6);          %XMF death rate

%Vector de termes de reacció biològica
RXB=ZMAB'*P*TM;             %RXB(1:15) kg Ui/h Vector columna

%DETERMINACIÓ DELS CABALS MÀSSICS DE TRANSFERÈNCIA LÍQUID-GAS -----
if      Tg<273; psat=1.674244239e-6*exp(7.218389e-2*Tg);      %Pa pressió vapor a Tg
elseif  Tg>373; psat=-1.2461451015e6+3.61059966e3*Tg;
else
      psat=10^(22.443-2795/Tg-1.6798*log(Tg));
end

%Determinació de les constants de Henry a temperatura fase líquida
heo2= 1e5*exp(16.7886-1800/Ts);      %Pa Constant de Henry O2
heco2=1e5*exp(15.4570-2400/Ts);      %Pa Constant de Henry CO2
henh3=1e5*exp(13.7521-4100/Ts);      %Pa Constant de Henry NH3

%Determinació del pk dels equilibris iònics
pkc1=-14.8435+0.03279*Ts+3404.7/Ts;
pkc2= -6.498 +0.02379*Ts+2902.4/Ts;
pknh=0.09018+2729.92/Ts;

%Determinació de les fraccions volàtils
ffco2=1/(1+10^(pH-pkc1)+10^(2*pH-pkc1-pkc2));
ffnh3=1/(1+10^(pknh-pH));

%Determinació de les velocitats de transferència líquid-gas (kg/h)
RG(1)=KF(41)*TM*(heo2 *18/32*      U(is+1+ir)/U(iw+ir)-U(iw+1+ir)*R*Tg/Vgs);      %O2
RG(2)=KF(42)*TM*(heco2*18/44*ffco2*U(is+2+ir)/U(iw+ir)-U(iw+2+ir)*R*Tg/Vgs);      %CO2
RG(3)=KF(43)*TM*(henh3*18/17*ffnh3*U(is+3+ir)/U(iw+ir)-U(iw+3+ir)*R*Tg/Vgs);      %NH3
RG(4)=KF(44)*TM*(psat-U(iw+4+ir)*R*Tg/Vgs);      %Compte: POT ACABAR-SE L'AIGUA %H2Ov

%DETERMINACIÓ DELS CABALS MÀSSICS MOLARS D'ENTRADA I SORTIDA DEL VC s--
EN=NK(s-1,:)';             %kmol/h Cabals màssics molars d'entrada al VCs EN(5,1)vect col
EX=NK(s,:)';               %kmol/h Cabals màssics molars de sortida del VCs EX(5,1)vect col

%EQUACIONS DE BALANÇ DE MASSA (eq. 3.2)-----
%Muntatge vector termes de reacció
RX=RXB;                     %kg/h
RX(is+1:iw)=RX(is+1:iw)-RG(1:4);      %kg/h
RX=[RX;RG./PM]';           %kg/h i=1,...,iw; kmol/h i=iw+1,...,iw+5

%Les derivades temporals dels termes màssics (eq. 3.2)
FL(1:iw+5)=[zeros(iw,1);EN]-[zeros(iw,1);EX]+RX;      %kg/h 1:iw; kmol/h iw+1:iw+5

%L'EQUACIÓ DE BALANÇ D'ENERGIA DE LA FASE GASOSA eq. (4.63)-----
qcT=KF(45)*TM*(Ts-Tg);      %J/h Transferència convectiva entre fases

%Temperatura gas a la frontera inferior (Tg0)
if nTT(s-1)>=0
  if s==2
    Tg0=KF(23);
  else
    Tg0=U(it+ir-ni);
  end
else
  Tg0=U(it+ir);
end
end

```

```

%Temperatura gas a la frontera superior (Tg1)
if nTT(s)>=0
    Tg1=U(it+ir);
else
    if s==tv
        Tg1=Ta;
    else
        Tg1=U(it+ir+ni);
    end
end

FL(it)=(qcT+(Tg0-Tg1)*KF(11:15)*EN...
        +(Ts-Tg1)*KF(11:15)*(max([Z5;RG'./PM]))'...
        +(Tg-Tg1)*KF(11:15)*(min([Z5;RG'./PM]))'...
        +(R*Tg-(Tg-Tg1)*KF(11:15))*FL(iw+1:iw+5))...
        /((KF(11:15)-R)*U(iw+ir+1:iw+ir+5));

%L'EQUACIÓ DE BALANÇ D'ENERGIA DE LA FASE SÒLID-LÍQUID eq. (4.64)-----
ALs=pi*GD(2)*GD(4); %m2 Àrea superfície lateral del VC s
if s==tv; ALs=ALs+GD(6); end %m2 El Vctv inclou àrea plenum superior
qG=-TM*KB(27:29)*ZMAB(4:10,9:11)'*P(4:10); %J/h Gen escalf en consum substrat
%qG=-KB(28)*(RG(1)+F(is+1)); %J/h Generació escalfor basada en consum O2
qcw=KF(16)*ALs*(Ts-Ta); %J/h Dissipació escalfor per paret eq.(4.58)
Ccons=KF(17)*ALs; %J/K Capacitat calorífica contenidor

FL(it+1)=(qG+qK(s-1)-qK(s)-qcw-qcT...
        -(max([Z5;RG'./PM]))*(LDA+(Ts-KF(2))*KF(11:15))'...
        -(min([Z5;RG'./PM]))*(LDA+(Tg-KF(2))*KF(11:15))'...
        -(Ts-KF(2))*(KF(5)*sum(FL(1:8))+KF(4)*sum(FL(9:iw))))...
        /(Ccons+KF(5)*sum(U(1+ir:8+ir))+KF(4)*sum(U(9+ir:iw+ir)));

%VARIABLES D'ACUMULACIÓ (INDICADORS)
FL(it+1+1)=-RG(1)-FL(is+1); %kgo2/h Consum biològic instantani d'O2
FL(it+1+2)=RG(2)-44*FL(iw+2); %kgco2/h Emissió neta instantània de CO2
FL(it+1+3)=RG(3)-17*FL(iw+3); %kgnh3/h Emissió neta instantània de NH3
FL(it+1+4)=RG(4)-18*FL(iw+4); %kgvap/h Emissió neta instantània de vapor
FL(it+1+5)=(U(it+1+ir)>KF(50)); % --
FL(it+1+6)=(U(it+1+ir)>KF(51))*(U(it+1+ir)-KF(51)); %°C

F(1+ir:ni+ir)=FL; %F: Vector de derivades global
end

```

```

%graf1D

```

```

%Rutina per determinar l'evolució de la sobrepressió requerida al plenum
%inferior (quan s'opera en mode0, cabal fixat) i el cabal d'aire d'entrada
%al reactor (quan s'opera en model, sobrepressió fixada).

```

```

%DETERMINACIÓ DE L'EVOLUCIÓ DE PRESSIONS I CABALS MAÀSSICS =====

```

```

%Distribucions auxiliars i inicialització de variables
m=length(T); %nº de punts en l'evolució temporal
PP=zeros(m,tv); %Pa Inicialització matriu contindrà evol pressions nodals
NTT=zeros(m,tv); %kmol/h Inicialització matriu contindrà evol cabals màssics
RO=zeros(1,tv); %kg/m3 Vector densitat gas a cada VC
MU=zeros(1,tv); %Pa·h Vector viscositat dinàmica gas a cada VC
KP=ones(1,tv)*KF(32); %m2 Vector permeabilitat del material a cada VC

```

```

%Evolució pressions nodals((eq. estat GP, PVg=nRT)
PP(:,2:tv)=NT*KF(1).*Y(:,(S-2)*ni+it)./Vgs;           %Pa Evol press nodes 2,...,tv
if GD(7)==1; PP(:,1)=KF(19)+KF(22); end               %Mode 1 Pres fixada plenum inferior

%DETERMINACIÓ DELS FLUXOS A LES FRONTERES =====
for i=1:m
%Determinació de propietats associades als VC
for s=2:tv
  ir=ni*(s-2);
  RO(s)=Y(i,iw+1+ir:iw+5+ir)*PM'/Vgs;                %kg/m3 Densitat gas
  MU(s)=KF(35)+KF(36)*(Y(i,it+ir)-293);               %Pa.h Visc din fase gasosa
end

%Frontera inferior
if GD(7)==0; %Mode 0: Cabal d'aire d'entrada fixat (es mesura a Pa, Ta)
  NTT(i,1)=KF(21)*KF(19)/KF(1)/KF(20);                %kmol/h eq.(4.72)

%Determinació pressió al plenum inferior
a=2/GD(4);
b=RO(2)*KF(3);
c=a*PP(i,2)^2+b*PP(i,2)+KF(1)*(KF(23)+Y(i,it))*MU(2)/KP(2)*NTT(i,1)/GD(5);
PP(i,1)=(b+(b^2+4*a*c)^.5)/2/a;                        %Pa Press req al plenum inferior
end

if GD(7)==1; %Mode 1: Pressió en secció d'entrada fixada (P1=Pa+dP) eq. (4.37)
  NTT(i,1)=GD(5)*KP(2)/MU(2)*((PP(i,1)-PP(i,2))/GD(4)*2-RO(2)*KF(3)); %kmol/h eq4.50
  if NTT(i,1)>=0;
    rom2=(PP(i,1)+PP(i,2))/KF(1)/(KF(23)+Y(i,it)); %kmol/m3 Flux ascendnt eq(4.51)
  else
    rom2=NTT(i,1)/Vgs; %kmol/m3 Flux decendnt eq(4.40)
  end
  NTT(i,1)=rom2*NTT(i,1); %kmol/h eq. (4.50) completa
end

%Fronteres intermèdies s=2,...,tv-1
for s=2:tv-1
  ir=ni*(s-2);

  roms=(PP(i,s)+PP(i,s+1))/KF(1)/(Y(i,it+ir)+Y(i,it+ir+ni)); %kmol/m3 eq.(4.47)
  kpmus=2*KP(s)/MU(s)*KP(s+1)/MU(s+1)/(KP(s)/MU(s)+KP(s+1)/MU(s+1)); %eq.(4.49)
  NTT(i,s)=roms*GD(5)*kpmus*((PP(i,s)-PP(i,s+1))/GD(4)-(RO(s)+RO(s+1))/2*KF(3));%448
end

%Frontera superior
roa=KF(19)*28.84/KF(1)/KF(20); %kg/m3 Densitat aire exterior eq. (4.55)
Pu=KF(19)-roa*KF(3)*GD(3); %Pa Pressió plenum superior eq. (4.54)
NTT(i,tv)=GD(5)*KP(tv)/MU(tv)*((PP(i,tv)-Pu)/GD(4)*2-RO(tv)*KF(3)); %eq.(4.52)parc

if NTT(i,tv)>=0;
  romtv=NTT(i,end)/Vgs; %kmol/m3 eq. (4.40) flux ascendent
else
  romtv=(PP(i,tv)+Pu)/KF(1)/(KF(20)+Y(i,it+ni*(tv-2))); %kmol/m3 eq. (4.53)
end
NTT(i,tv)=romtv*NTT(i,tv); %kmol/h eq. (4.52) completa
end

QQa=NTT(:,1)*KF(1)*KF(20)/KF(19); %m3/h Cabal frontera 1 mesurat: Pa, Ta eq.(4.72)

```

```
%Treure gràfiques
subplot(2,2,1); plot(T,Y(:,(S-2)*ni+it)-KF(2)); ylabel('Temperatura (°C)');

subplot(2,2,3); plot(T,QQa); ylabel('Cabal aire Qa(m3/h)');

subplot(2,2,2); plot(T,PP-KF(19)); xlabel('Temps (h)'); ylabel('Sobrepessió dP (Pa)');

subplot(2,2,4); plot(T,NTT); xlabel('Temps (h)'); ylabel('Flux molar (kmol/h)');
```
