

POLITECNICO DI MILANO



Dipartimento di Elettronica e Informazione

MODELLISTICA E IDENTIFICAZIONE DEL PROCESSO DI DIGESTIONE ANAEROBICA

Relatore: Chiar.mo Prof. Gianni FERRETTI

Correlatore: Ing. Alessandro DELLA BONA

Ing. Elena FICARA

Chiar.mo Prof. Francesca MALPEI

Gianluca INVERNIZZI

Matr. n. 754594

RINGRAZIAMENTI

Ringrazio il prof. Gianni Ferretti per avermi dato la possibilità di poter collaborare e far parte del progetto, l'ing. Elena Ficara per il supporto offertomi e in particolare colgo l'occasione per ringraziare l'ing. Alessandro Della Bona per la sua pazienza, disponibilità nell'aiutarmi e per avermi dispensato preziosi insegnamenti. Ringrazio tutti i membri del progetto per avermi fatto sentire parte di un team e per avermi trasmesso la loro passione nel suo svolgimento.

Nei ringraziamenti non posso omettere chi mi ha aiutato lungo tutto il mio percorso di studi, a cui vorrei dedicare questa tesi. Per questo ringrazio mia mamma e mio papà che hanno svolto un ottimo lavoro di genitori dandomi le basi di una solida educazione centrata sui valori e mi hanno fornito i mezzi per percorrere gli studi. Infine, per ultima ma non meno importante, voglio dedicare questa tesi a Nadia, la ringrazio perché è la vera artefice del coronamento del mio percorso di studi e senza il suo sostegno e i suoi preziosi consigli non avrei avuto la forza di arrivare fino alla laurea.

Indice

1. Introduzione	5
2. Modelli dinamici del processo di digestione anaerobica	9
2.1 Il Modello AMOCO	13
2.1.1 Analisi dinamica dell'AMOCO	15
2.1.2 Perturbazione del punto di equilibrio asintoticamente stabile	20
2.1.3 Perturbazione del punto di equilibrio instabile	21
2.2 Il modello ADM1	26
2.2.1 La catena biologica del modello ADM1	31
2.2.2 I ratei del modello ADM1	33
2.3 Il modello ADMS	36
2.3.1 Semplificazione dei fattori d'inibizione	37
2.3.2 Approssimazione bilancio degli ioni	38
2.3.3 Semplificazione trasferimento dell'idrogeno	40
2.3.4 Semplificazione pressione dei gas	40
2.3.5 Semplificazione delle dinamiche degli inerti	41
2.3.6 Esplicitazione dell'equazione algebrica	41
2.3.7 Approssimazione dell'alcalinità	42
2.3.8 Approssimazione del rateo di trasferimento del metano	42
2.3.9 Approssimazione del fattore d'inibizione I_{11}	43
2.4 Confronto fra il modello ADM1 e il modello ADMS	43
2.4.1 Scalino sotto il limite d'instabilità per acidità	44
2.4.2 Scalino al limite d'instabilità per acidità	46
3. Trasformazione in forma lineare frazionaria (LFT) di un modello acausale	48
3.1.1 Principio della forma LFT	48
3.1.2 La forma generale LFT e i suoi vantaggi	51
3.1.3 Da un modello acausale alla sua rappresentazione LFT	52
4. Identificazione del modello AMOCO	57
4.1 Identificazione nello spazio di stato, metodo Output-Error	57
4.2 Il filtro per modelli in forma LFT	60
4.3 Test preliminare di identificazione	61

4.3.1	Design dell'esperimento di test.....	62
4.3.2	Design dell'ingresso, della simulazione e delle misure per il test	64
4.3.3	Risultati del test.....	65
4.4	Identificazione del modello AMOCO con misure del modello ADM1	69
4.4.1	Design dell'esperimento d'identificazione	70
4.4.2	Design dell'ingresso, della simulazione e delle misure per l'identificazione.....	72
4.4.3	Risultati di identificazione	73
5.	Conclusioni	84
6.	Appendice	85
6.1	Matrici di Petersen del modello ADM1	85
6.2	Descrizione a gusci di un modello	87
7.	Bibliografia	88

1. Introduzione

Sempre più spesso il tema dei cambiamenti climatici è al centro di numerose vicende politico-economiche. Come si legge dal rapporto, pubblicato nei libri “Un piano per salvare il pianeta” e “Clima: è vera emergenza”, dello studioso ed economista Nicholas Stern (docente alla London School Of Economics) le ricadute economiche per i governi mondiali causate dal riscaldamento globale sarebbero paragonabili a quelle di due guerre mondiali. È stato ampiamente dimostrato, attraverso numerose ricerche, che la causa principale del surriscaldamento globale è l'aumento della concentrazione di carbonio disciolto in atmosfera, questo fenomeno prende il nome di *effetto serra*. Gli studi di Stern mostrano come l'impatto del carbonio nell'atmosfera sia peggiore di quello stimato fino ad ora. Per lo studioso, la probabilità che accada un aumento di 5°C della temperatura della terra nei prossimi 50 anni è del 50%. Se questo accadesse, milioni di persone sarebbero costrette a migrare a causa dell'innalzamento del livello medio dei mari e scomparirebbe gran parte della superficie coltivabile del mondo. Questo avrebbe ripercussioni economiche annuali stimabili fra il 5% e il 20% del PIL mondiale.

Secondo gli ultimi dati disponibili, il maggior produttore mondiale di anidride carbonica è la Cina, che immette in atmosfera circa 7 miliardi di tonnellate (Gt) annue di CO₂ equivalente, seguono gli U.S.A. con 5,5 Gt e l'unione europea con 4,2 Gt. L'Italia è il 12° produttore mondiale di CO₂ e il 3° all'interno dell'unione europea con circa 0,45 Gt annue di CO₂ equivalente [10].

Dalla fine degli anni '90 fino ad oggi si sono susseguite numerose conferenze ONU sui cambiamenti climatici, denominate COP UNFCCC (conferenze delle parti della Convenzione quadro delle Nazioni Unite sui cambiamenti climatici). Queste hanno cercato di proporre delle norme ai Paesi del mondo per cercare di ridurre l'immissione di CO₂ in atmosfera pena il pagamento di grosse multe. Fra le conferenze COP la più importante è la conferenza di Kyoto ratificata nel 2005. Il protocollo concordato in quella sede è entrato in vigore nel 2008, e scadrà presto, al termine del 2012. In sostanza, il protocollo di Kyoto, prevede l'obbligo da parte di tutti i paesi di tagliare, entro il 2012, le immissioni dei principali gas serra in misura non inferiore al 5% rispetto alle immissioni registrate nell'anno 1990 preso come anno di riferimento. L'Italia, alla scadenza del protocollo, avrà ridotto le immissioni di CO₂ del 4,8% anziché del 6.5% come previsto ciò comporterà il pagamento di una multa di 300 miliardi di euro, che è poco meno della metà della spesa pubblica annuale italiana [9]. Si comprende che, anche se la strada della riduzione dell'immissione di anidride carbonica in atmosfera è stata intrapresa, ancora molto deve essere fatto

poiché parte di questa riduzione è dovuta all'arretramento dell'economia dovuto alla crisi economica in atto. Uno dei campi più promettenti per permettere la riduzione della CO_2 immessa in atmosfera è l'utilizzo dei biocombustibili (propellente ottenuto dalle biomasse) per la produzione di energia. L'utilizzo di questa fonte energetica inoltre presenta il duplice vantaggio di permettere una riduzione della dipendenza dai combustibili fossili, i quali stanno diventando sempre più costosi.

I processi che producono energia sfruttando la combustione di biocombustibili sono ecologici in quanto sono "a breve ciclo del carbonio". Questo significa che l'anidride carbonica prodotta dalla combustione di quest'ultime fonti non è reintrodotta in atmosfera dopo essere stata stoccata nel sottosuolo per milioni di anni (come accade invece bruciando combustibile di origine fossile) ma è la stessa CO_2 prelevata dall'atmosfera e fissata dai vegetali o assunta dagli animali in maniera indiretta attraverso l'assunzione di vegetali. Dato che utilizzando fonti organiche a breve ciclo del carbonio si va a immettere in atmosfera la stessa quantità di anidride carbonica che era stata metabolizzata dalle fonti, il bilancio di CO_2 immessa in atmosfera risulta nullo.

Uno dei processi utilizzati per sfruttare una fonte di energia organica a breve ciclo di carbonio è il processo di digestione anaerobica. Questo processo consiste nella degradazione di sostanze organiche da parte di alcuni tipi di batteri anaerobici, ovvero il cui metabolismo non richiede il consumo di ossigeno, e si contrappone al processo di compostaggio, che utilizza invece batteri aerobici.

La digestione anaerobica avviene in impianti detti digestori (Figura 1.1), costituiti essenzialmente da un serbatoio coibentato e chiuso ermeticamente, nel quale è immessa della biomassa (scarti agro-industriali, liquami zootecnici, fanghi di depurazione) e una portata di acqua. Dentro il serbatoio, grazie all'intervento di diverse famiglie di batteri anaerobici, s'innescano una catena di reazioni biologiche che permettono, attraverso il passaggio per stadi intermedi, di trasformare la biomassa in ingresso in biogas e materiale digestato, disponibili in uscita al digestore.

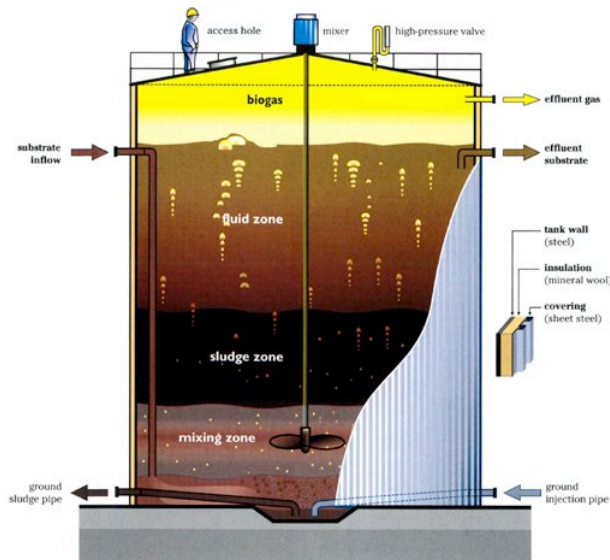


Figura 1.1 – Schema generale di un digestore a singolo stadio [11]

Il digestato è un materiale organico stabile e si divide in digestato acidogenico e metanogenico; il primo può essere utilizzato come succedaneo del compost domestico, il secondo è un eccellente fertilizzante.

Il biogas è una miscela di gas composta tipicamente dal 50% al 75% di metano (CH_4), dal 25% al 50% di anidride carbonica (CO_2), dallo 0% al 10% di azoto (N_2), dallo 0% all'1% d'idrogeno (H_2) e dallo 0% al 3% di acido solfidrico (H_2S). Questa miscela può essere utilizzata per la combustione in caldaie per il teleriscaldamento o per produrre energia elettrica e/o calore. Il biogas, se raffinato, dà origine al biometano, il quale può essere utilizzato direttamente come carburante per autotrazione di veicoli a metano o immesso nella rete di distribuzione del gas.

In Italia, alla fine del 2011, erano in funzione oltre 500 impianti per la produzione di biogas (leader del settore è la Germania, con circa 4000 impianti nel 2008) cui andranno aggiunti da 100 a 200 impianti, che saranno completati entro il 2012. La potenzialità di produrre biometano dell'Italia è rilevante e si stima che potenzialmente possa soddisfare circa dal 10% al 20% del fabbisogno energetico nazionale attuale [1].

I problemi legati al processo di digestione anaerobica sono:

- Complessità del processo.
- Elevata incertezza e variabilità dei parametri.
- Possibile insorgenza di fenomeni di instabilità, capaci di provocare un prolungato periodo di fermo impianto (le dinamiche del processo sono molto lente e sono nell'ordine di grandezza

dei giorni o dei mesi) che a sua volta conduce a una problematica di smaltimento delle sostanze tossiche non digerite.

- Necessità di ottimizzazione.
- Variabilità delle matrici organiche di substrato.
- Distribuzione territoriale degli impianti, che quindi richiedono un sistema di telecontrollo.

Le problematiche del processo di digestione anaerobica elencate portano ai seguenti aspetti critici legati alla supervisione e controllo del processo:

- Modellistica accurata.
- Identificazione dei parametri del processo.

L'obiettivo della tesi è lo sviluppo di un modello del processo di digestione anaerobica per la produzione di biogas, finalizzato sia al monitoraggio sia al controllo degli impianti stessi. In particolare, si sono analizzate ipotesi semplificative e formulazioni che consentissero di ottenere una rappresentazione necessaria e sufficiente al controllo del processo e l'identificazione dei parametri a partire da dati sperimentali.

Il lavoro di tesi è organizzato come segue. Nel Capitolo 2 saranno presentati due modelli dinamici di digestione anaerobica. Per comprendere i fondamenti della digestione anaerobica ne sarà studiato un semplice modello (detto AMOCO). Dopodiché sarà introdotto un modello dettagliato di digestione anaerobica (detto ADM1) il quale riprende i principi del modello precedente e descrive la digestione anaerobica a un grado di dettaglio maggiore. Sempre nel Capitolo 2 si propone una possibile modellistica alternativa del modello ADM1 atta a rendere più robusto il processo d'identificazione parametrica e il controllo. Quest'ultimo modello sarà chiamato ADMS e si contraddistingue per avere un numero di equazioni ridotto rispetto all'ADM1 pur mantenendo un'immutata capacità descrittiva del processo di digestione anaerobica nel campo operativo del sistema controllato. L'ADMS potrà essere utilizzato in futuro per identificare i parametri della catena biologica dell'ADM1 ai fini di ottimizzare il processo di digestione anaerobica. Nel Capitolo 3 è illustrata la procedura di derivazione della forma LFT di un modello matematico acausale. Nel Capitolo 4 sarà illustrato il metodo d'identificazione dei parametri di un modello per massima verosimiglianza, questo sarà applicato per creare un algoritmo d'identificazione dei parametri del modello AMOCO .

2. Modelli dinamici del processo di digestione anaerobica

La digestione anaerobica è un processo biologico che consente di produrre biogas dalla degradazione di sostanze organiche. Come suggerisce il nome, questo processo di digestione avviene in un ambiente anerobico, cioè in assenza di ossigeno. Al contrario del processo digestivo che avviene in presenza di ossigeno, ovvero la digestione aerobica, nel caso anaerobico il processo di degradazione avviene senza l'immissione condizionata di ossigeno ma impiega tempi più lunghi. Le sostanze organiche degradate dalla digestione anaerobica sono chiamate *substrati*, digerite da microorganismi chiamati *biomasse*. Il processo di digestione anaerobica avviene nel digestore anaerobico, detto anche *reattore*. Immettendo uno specifico tipo di substrato nel reattore (es. mono saccaridi), si alimenta una specifica colonia di biomassa (es. degradatori degli zuccheri) la quale produce in prima approssimazione anidride carbonica e un nuovo tipo di substrato, che servirà a sua volta per alimentare una diversa colonia di biomassa e così via (Figura 2.1).

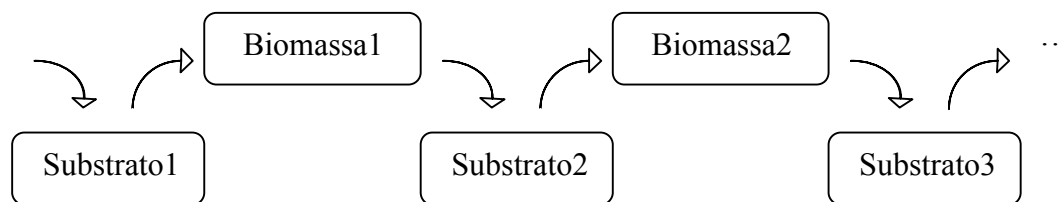


Figura 2.1 - Esempio di catena biologica

L'alternanza di substrati e biomasse è detta *catena biologica*, la cui natura varia molto dal tipo di substrato in ingresso. Il substrato, insieme a una portata d'acqua, andrà a formare il cosiddetto *carico* del reattore. Per i digestori agricoli il substrato in ingresso è una miscela costituita da reflui suini, da resti di lavorazione di prodotti agricoli, mais e altri prodotti "nobili" derivati dal processo di coltivazione agricola. Per quest'ultimo tipo di carico, se sono rispettate alcune condizioni nel reattore, s'inscenerà una catena biologica il cui ultimo stadio è costituito da una colonia di batteri che, oltre a produrre anidride carbonica e metano, produce un tipo di substrato detto *digestato metanogenico*. Quest'ultimo può essere utilizzato come fertilizzante, mentre l'insieme dei gas prodotti dalla digestione anaerobica dà origine al biogas. I punti di forza della digestione anaerobica sono la capacità di riuscire a degradare substrati molto complessi e concentrati con l'impiego di poca energia e producendo pochi scarti e la possibilità di poter impiegare il biogas come fonte

energetica, rendendo così il bilancio energetico fra energia prodotta e consumata ampiamente positivo.

Il processo di digestione anaerobica può in prima approssimazione essere scomposto a sua volta in quattro sottoprocessi, ognuno con una propria sotto catena biologica:

- disintegrazione e idrolisi;
- acidogenesi;
- acetogenesi,
- metanogenesi.

In questa tesi non si approfondiranno nelle specifico le reazioni fisico-chimiche coinvolte da questi processi ma verranno presentate le equazioni che ne descrivono il comportamento.

In letteratura sono presenti numerosi modelli matematici di digestione anaerobica, ognuno adattato per uno specifico reattore e carico in ingresso, che possono in prima battuta essere raggruppati in tre categorie:

- Modelli a singolo stadio: coinvolgono solo una popolazione batterica e sono poco espressivi
- Modelli a media complessità: descrivono un numero superiore di specie batteriche e sottoprocessi rispetto a quelli a singolo stadio e sono espressivi solo in determinate condizioni operative
- Modelli complessi: descrivono un alto numero di sottoprocessi e specifiche popolazioni batteriche e sono espressivi in condizioni operative generali.

Nelle tre categorie di modelli di digestione anaerobica variano di molto il numero di equazioni e di parametri, tutti però si basano su semplici equazioni di bilancio di massa. Le variabili di stato sono costituite dalle concentrazioni dei diversi substrati (indicati generalmente con la lettera S) e di biomasse (indicati generalmente con la lettera X) la cui unità di misura è il $[KgCOD/m^3]$.

Il COD (Chemical Oxygen Demand) è la misura della quantità di ossigeno richiesta per la completa ossidazione dei campioni organici e inorganici presenti in un campione di liquido. Nel nostro caso il COD rappresenterà la misura della quantità di ossigeno della biomassa necessaria a consumare il substrato di cui si nutre. Per questo motivo si può intuire che l'unità di misura $[KgCOD/m^3]$ si presta a determinare indirettamente la concertazione del substrato o di microorganismi presenti nel reattore.

Si voglia dunque descrivere la dinamica di una generica concentrazione dell' i -esimo substrato S_i , dato che si vuole descrivere un bilancio di massa si dovrà scrivere un'equazione differenziale del tipo:

$$\frac{dS_i}{dt} = \frac{Q}{V}(S_{i,in} - S_i) + \sum c(f_{j,i}, Y_i)r(X_i, S_i, K_i) \quad (2.1)$$

Dove V è il volume del reattore espresso in $[m^3]$ (il quale esprime il volume di controllo entro il quale si vuole fare il bilancio di massa) e Q è una portata d'acqua di ricambio (o di ricircolo) del reattore Q espressa in $[m^3/d]$. $S_{i,in}$ è la quantità dell' i -esimo substrato immessa direttamente dall'esterno nel reattore tramite la portata di ricambio. La funzione $r(\bullet)$ è detta *rateo di reazione*, e descrive gli scambi fra l' i -esimo substrato S_i e fra la sua biomassa "predatrice" X_i , indicata dalla catena biologica. Il rateo di reazione, o semplicemente rateo, è genericamente una funzione della concentrazione stessa del substrato e biomassa i -esima e di alcuni parametri cinetici K_i , che servono a descrivere la velocità di scambio fra S_i e X_i . Per comprendere il significato della funzione moltiplicativa $c(\bullet)$ che compare nella (2.1), ipotizziamo che la catena biologica indichi che la biomassa X_i (degradando il substrato S_i) produca il substrato S_j . La funzione $c(\bullet)$ descrive quanto del j -esimo substrato S_j è prodotto a partire dall' i -esimo substrato di origine S_i . La funzione $c(\bullet)$ di solito consiste in un prodotto o una divisione dei coefficienti f e Y , i quali sono detti *coefficienti stechiometrici*, e sono rispettivamente il *fattore di separazione* fra il substrato j -esimo e quello i -esimo (questo termine è utile in quanto un substrato può essere degradato da più batteri) e il *fattore di produzione*. Infine la sommatoria della (2.1) sta a indicare eventuali altri termini di consumo (se negativi) o di produzione (se positivi) della biomassa S_i regolati da nuove funzioni $c(\bullet)$ e $r(\bullet)$.

Il termine Q/V della (2.1) è definito come di *rapporto di diluizione* D , il suo inverso $1/D$ è detto tempo di ritenzione idraulica ed è indicato con t_{HR} . Quest'ultimo è quindi un ingresso del modello e rappresenta il tempo di ricambio del reattore espresso in giorni. Mettendo in evidenza il t_{HR} nella (2.1) si ottiene:

$$\frac{dS_i}{dt} = \frac{1}{t_{HR}}(S_{i,in} - S_i) + \sum c(f_{j,i}, Y_i)r(X_i, S_i, K_i) \quad (2.2)$$

Per quanto riguarda l'equazione di bilancio della biomassa i -esima X_i , la sua struttura è analoga a quella del substrato visto in precedenza e ha la seguente forma tipo:

$$\frac{dX_i}{dt} = \frac{1}{t_{HR}}(X_{i,in} - X_i) + c(Y_i)r(X_i, S_i, K_i) \quad (2.3)$$

Dove in questo caso la funzione moltiplicativa $c(\bullet)$ dipende solo del fattore di produzione Y perché una colonia di batteri si alimenta solo di un tipo di substrato.

Scrivendo una di queste equazioni di bilancio della massa per ogni substrato e biomassa coinvolta nel processo di digestione anaerobica è possibile rappresentare una catena biologica. A queste equazioni di bilancio della massa bisognerà poi aggiungere delle equazioni di bilancio per gli ioni e per i gas, e alcune equazioni algebriche per il calcolo del pH all'interno del reattore. Inoltre, nei modelli di digestione anaerobica accurati, si aggiungono termini d'interazione fra substrati che non sono "adiacenti" nella catena biologica e dei fattori d'inibizione nella funzione rateo di reazione per descrivere il fenomeno di destabilizzazione della crescita del substrato o della biomassa (il fenomeno verrà descritto in seguito). Questi aspetti rendono ancora più complessa la comprensione della dinamica della digestione anaerobica.

In prima analisi si è scelto di analizzare un modello di media complessità detto modello AMOCO [4], che offre il vantaggio di avere pochi parametri da identificare, ma non consente di modellizzare un'ampia gamma di scenari di funzionamento. Per questo motivo si è scelto di studiare in maniera approfondita un modello complesso detto ADM1 [5], nato proprio per descrivere la digestione anaerobica di differenti tipi di reattori e di carichi in ingresso. Il modello ADM1 è caratterizzato da un elevato numero di parametri che sono difficilmente identificabili, in questo lavoro si è quindi cercato di semplificare l'ADM1 per renderlo più idoneo all'identificazione, pur mantenendo lo stesso grado di rappresentatività.

Va sottolineato che sia l'ADM1 sia l'AMOCO sono modelli a parametri concentrati, quindi solo se è mantenuta un'opportuna miscelazione all'interno del reattore le equazioni che descrivono i comportamenti dei rispettivi modelli, rimangono valide¹. Inoltre, si può osservare che alcuni ratei di reazione r nei modelli ADM1 e AMOCO e alcune retroazioni rendono questi due modelli non lineari.

Di seguito si presenterà dettagliatamente il modello AMOCO di più semplice comprensione. Successivamente sarà introdotto il modello ADM1, molto più complesso ma che, ovviamente, consente una maggiore accuratezza.

¹ Per questo motivo dovrà essere scelta una portata di ricircolo abbastanza elevata da mantenere un'adeguata miscelazione all'interno del reattore. Dato che la portata di ricircolo è anche responsabile dell'uscita dei substrati e delle biomasse dal reattore, questa dovrà essere allo stesso tempo abbastanza bassa da garantire la presenza di materia organica una volta avviato il processo di digestione anaerobica.

2.1 Il Modello AMOCO

Il modello AMOCO è stato sviluppato in [4] con l'obiettivo di mantenere la minima complessità modellistica possibile (legata al numero di popolazioni coinvolte nella catena biologica) pur mantenendo una buona accuratezza.

Il modello AMOCO consente di rappresentare il processo che porta alla morte della biomassa presente nel reattore e causa un'interruzione del processo di digestione anaerobica. A seguito di tale interruzione cessa la produzione di biogas e non è più possibile tornare alla condizione operativa nominale senza re-inizializzare il processo di digestione anaerobica. Ciò comporta lunghi tempi di attesa perché le dinamiche in gioco nella ricrescita dei batteri sono nell'ordine di grandezza del mese, oltre che problemi di smaltimento del substrato non completamente digerito all'interno del reattore.

Nel modello AMOCO si suppone che la catena biologica sia composta da un substrato organico S_1 , degradato da una colonia batterica X_1 , la quale produce anidride carbonica e *VFA*, acidi grassi volatili. Gli acidi grassi andranno poi a costituire il substrato S_2 , che a sua volta alimenta una colonia batterica X_2 , che finalmente produce anidride carbonica e metano.

In questo modo si è condensato il processo di digestione anaerobica in due sottoprocessi: un processo di acidogenesi svolto dai batteri X_1 , detti *acidogenici*, e un processo di metanogenesi, svolto dai batteri X_2 detti *metanogenici*. I processi di disintegrazione e idrolisi e quello di acetogenesi non sono quindi più considerati esplicitamente. La parte principale del modello AMOCO è costituita dalle seguenti equazioni di bilancio della massa della catena biologica:

$$\begin{aligned}
 \frac{dX_1}{dt} &= -\alpha \frac{1}{t_{HR}} X_1 + \mu_1 X_1 \\
 \frac{dX_2}{dt} &= -\alpha \frac{1}{t_{HR}} X_2 + \mu_2 X_2 \\
 \frac{dS_1}{dt} &= \frac{1}{t_{HR}} (S_{1,in} - S_1) - k_1 \mu_1 X_1 \\
 \frac{dS_2}{dt} &= \frac{1}{t_{HR}} (S_{2,in} - S_2) + k_2 \mu_1 X_1 - k_3 \mu_2 X_2
 \end{aligned} \tag{2.4}$$

Dove α è un parametro che va da 0 (reattore a letto fisso ideale) a 1 (reattore CSTR ideale), ed è la frazione di biomassa in fase liquida che può essere trasportata dalla portata di ricircolo.

I ratei (o cinetiche) dei processi di acidogenesi e metanogenesi sono rispettivamente:

$$\mu_1 = \mu_{1max} \frac{S_1}{S_1 + K_{S1}} \quad , \quad \mu_2 = \mu_{2max} \frac{S_2}{S_2 + K_{S2} + \frac{S_2^2}{K_{I2}}} \quad (2.5)$$

Il rateo μ_1 modella una crescita batterica secondo la cinetica di Monod [4], nella quale compaiono il parametro μ_{1max} che è il massimo tasso di crescita specifico di X_1 espresso in $[1/d]$, e il parametro K_{S1} che è la costante di semisaturazione di X_1 espressa in $[d/m^3]$.

Il rateo μ_2 modella una crescita batterica secondo la cinetica di Haldane [4], nella quale compaiono il parametro μ_{2max} che è il massimo tasso di crescita specifico di X_2 espresso in $[1/d]$, il parametro K_{S2} che è la costante di semisaturazione di X_2 espressa in $[d/m^3]$ e il parametro K_{I2} che è la costante d'inibizione di X_2 .

Oltre a queste equazioni di bilancio della massa della catena biologica sono modellati anche il bilancio di alcalinità Z e di concentrazione C di anidride carbonica del reattore, le espressioni della portata di anidride carbonica q_c e metano q_M , l'espressione della pressione parziale dell'anidride carbonica P_c e l'espressione del pH .

$$\begin{aligned} \frac{dZ}{dt} &= \frac{1}{t_{HR}} (Z_{in} - Z) \\ \frac{dC}{dt} &= \frac{1}{t_{HR}} (C_{in} - C) - q_c + k_4 \mu_1 X_1 + k_5 \mu_2 X_2 \\ q_c &= k_L a [C + S_2 - Z - K_H P_c] \\ P_c &= \frac{\varphi - \sqrt{\varphi^2 - 4K_H P_T (C + S_2 - Z)}}{2K_H} \\ \varphi &= C + S_2 - Z + K_H P_T + \frac{k_6}{k_L a} \mu_2 X_2 \\ q_M &= k_6 \mu_2 X_2 \\ pH &= -\log \left(K_b \frac{C - Z + S_2}{Z - S_2} \right) \end{aligned} \quad (2.6)$$

Si noti che le equazioni che descrivono il bilancio della massa della catena biologica (2.4) sono indipendenti dalle equazioni (2.6) ed è quindi possibile focalizzare lo studio del modello AMOCO solo sulle equazioni (2.4). Questa affermazione è giustificata osservando l'espressione della portata di metano q_M la cui conoscenza è il fine principale della modellazione del processo di digestione anaerobica. Si osserva che q_M è nota, a meno di coefficienti moltiplicativi, una volta determinato l'andamento dello stadio finale della catena biologica X_2 . Sostituendo la (2.5) nella (2.4) si ottiene:

$$\begin{aligned}
\frac{dS_1}{dt} &= \frac{1}{t_{HR}}(S_{1,in} - S_1) - k_1 \mu_{1max} \frac{S_1}{S_1 + K_{S1}} X_1 \\
\frac{dX_1}{dt} &= -\alpha \frac{1}{t_{HR}} X_1 + \mu_{1max} \frac{S_1}{S_1 + K_{S1}} X_1 \\
\frac{dS_2}{dt} &= \frac{1}{t_{HR}}(S_{2,in} - S_2) + k_2 \mu_{1max} \frac{S_1}{S_1 + K_{S1}} X_1 - k_3 \mu_{2max} \frac{S_2}{S_2 + K_{S2} + S_2^2 / K_{I2}} X_2 \\
\frac{dX_2}{dt} &= -\alpha \frac{1}{t_{HR}} X_2 + \mu_{2max} \frac{S_2}{S_2 + K_{S2} + S_2^2 / K_{I2}} X_2
\end{aligned} \tag{2.7}$$

Si può notare che, immettendo substrato tramite $S_{1,in}$, s'innescava la catena biologica descritta in precedenza, a patto di avere preventivamente avviato il reattore tramite l'immissione iniziale di una colonia batterica X_1 e X_2 (le condizioni iniziali di queste due variabili di stato). Inoltre, si può notare che è modellizzato anche un ingresso diretto nella catena biologica di VFA tramite l'ingresso $S_{2,in}$. I batteri metanogenici X_2 sono i responsabili della produzione di metano, la cui portata è data da:

$$q_M = k_6 \mu_2 X_2 = k_6 \mu_{2max} \frac{S_2}{S_2 + K_{S2} + S_2^2 / K_{I2}} X_2 \tag{2.8}$$

Nel prossimo sotto-paragrafo sarà analizzato il comportamento dinamico del modello AMOCO, utile per comprendere la dinamica tipica della digestione anaerobica e in generale il fenomeno della destabilizzazione.

2.1.1 Analisi dinamica dell'AMOCO

Il modello (2.7) è nella forma triangolare bassa, ovvero le prime due equazioni sono indipendenti dalle ultime due. Per questo motivo è possibile analizzare prima il sotto-sistema composto dalle prime due equazioni e poi il sotto-sistema composto dalle ultime due (Figura 2.2).



Figura 2.2 - Catena biologica del modello AMOCO

Si prenda in considerazione il solo processo di acidogenesi in cui, per comodità, è stato messo in evidenza il rapporto di diluizione D anziché il tempo di ritenzione idraulica t_{HR} :

$$\begin{aligned}\frac{dS_1}{dt} &= D(S_{1,in} - S_1) - k_1 \mu_{1,max} \frac{S_1}{S_1 + K_{S1}} X_1 \\ \frac{dX_1}{dt} &= -\alpha D X_1 + \mu_{1,max} \frac{S_1}{S_1 + K_{S1}} X_1\end{aligned}\tag{2.9}$$

Il punto di equilibrio sarà fornito dalla soluzione del sistema ottenuto annullando le derivate temporali:

$$\begin{aligned}0 &= D(S_{1,in} - S_1) - k_1 \mu_{1,max} \frac{S_1}{S_1 + K_{S1}} X_1 \\ 0 &= -\alpha D X_1 + \mu_{1,max} \frac{S_1}{S_1 + K_{S1}} X_1\end{aligned}\tag{2.10}$$

Dalla seconda equazione (2.10), raccogliendo X_1 , si ricavano due condizioni sotto le quali nel sistema vige l'equilibrio:

$$\bar{X}_1 = 0 \quad \text{oppure} \quad \mu_{1,max} \frac{\bar{S}_1}{\bar{S}_1 + K_{S1}} = \alpha D\tag{2.11}$$

Sostituendo la prima delle (2.11) nella prima equazione del sistema (2.10) si ottiene il punto di equilibrio:

$$\begin{aligned}\bar{X}_1 &= 0 \\ \bar{S}_1 &= S_{1,in}\end{aligned}\tag{2.12}$$

Questo è un punto di equilibrio banale poiché mostra che, in assenza di batteri acidogenici, all'equilibrio la portata di substrato acidogenico in ingresso è uguale a quella che ne esce per ricircolo.

Invece sostituendo la seconda delle (2.11) nella prima equazione del sistema (2.10) si ottiene il punto di equilibrio non banale:

$$\begin{aligned}\bar{S}_1 &= K_{S1} \frac{\alpha D}{\mu_{1,max} - \alpha D} \\ \bar{X}_1 &= \frac{1}{k_1 \alpha} \left(S_{1,in} - K_{S1} \frac{\alpha D}{\mu_{1,max} - \alpha D} \right)\end{aligned}\tag{2.13}$$

Tale punto di equilibrio si può instaurare per qualsiasi condizione operativa (definita dagli ingressi $S_{1,in}$ e D) perché è vincolata al soddisfacimento di vincoli dettati dal processo (e quindi dai parametri μ_{1max} , K_{S1} , α).

Per garantire che il punto di equilibrio non banale sul substrato \bar{S}_1 sia fisicamente sensato (ovvero non sia negativo) occorre che sia rispettato il vincolo:

$$\mu_{1max} > \alpha D \quad (2.14)$$

Inoltre, per garantire che anche il punto di equilibrio sulla biomassa \bar{X}_1 sia fisicamente sensato, occorre rispettare il vincolo:

$$S_{1,in} > K_{S1} \frac{\alpha D}{\mu_{1max} - \alpha D} \quad (2.15)$$

Da cui si può facilmente ricavare:

$$\mu_{1max} \frac{S_{1,in}}{S_{1,in} + K_{S1}} > \alpha D \quad (2.16)$$

Si può notare che il vincolo (2.16)² è più stringente del vincolo (2.14), quindi una volta soddisfatto il vincolo sulla biomassa, quello sul substrato è automaticamente rispettato.

Per riuscire ad ottenere un punto di equilibrio fisicamente sensato e non banale bisognerà quindi agire sugli ingressi in modo tale che il vincolo (2.16) sia sempre rispettato. Questo vincolo sta a significare che il tasso di crescita massimo dei batteri acidogenici, opportunamente pesato secondo il suo substrato di alimentazione in ingresso, deve essere sempre superiore al tasso di perdita di biomassa e substrato legato alla portata di ricircolo. Se questo vincolo è rispettato, è possibile raggiungere un punto di equilibrio in cui la biomassa e il substrato sono positivi e non nulli.

Lo Jacobiano del sistema di acidogenesi (2.9) è il seguente:

$$J_1 = \begin{vmatrix} -D - k_1 \mu_{1max} \bar{X}_1 \left(\frac{1}{\bar{S}_1 + K_{S1}} - \frac{\bar{S}_1}{(\bar{S}_1 + K_{S1})^2} \right) & -k_1 \mu_{1max} \frac{\bar{S}_1}{\bar{S}_1 + K_{S1}} \\ \mu_{1max} \bar{X}_1 \left(\frac{1}{\bar{S}_1 + K_{S1}} - \frac{\bar{S}_1}{(\bar{S}_1 + K_{S1})^2} \right) & -\alpha D + \mu_{1max} \frac{\bar{S}_1}{\bar{S}_1 + K_{S1}} \end{vmatrix} \quad (2.17)$$

² Si può anche notare che il vincolo (2.16) è una disequaglianza stretta, infatti nel caso i due membri siano uguali si otterrebbe l'equilibrio banale di biomassa nulla.

Se valutiamo J_I nel punto di equilibrio banale (biomassa nulla) questo diventa:

$$J_{1_eq_b} = \begin{vmatrix} -D & -k_1 \mu_{1max} \frac{S_{1,in}}{S_{1,in} + K_{S1}} \\ 0 & -\alpha D + \mu_{1max} \frac{S_{1,in}}{S_{1,in} + K_{S1}} \end{vmatrix} \quad (2.18)$$

Dato che lo jacobiano $J_{1_eq_b}$ è triangolare gli autovalori sono gli elementi della diagonale e sono:

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= -D \\ \lambda_2 &= -\alpha D + \mu_{1max} \frac{S_{1,in}}{S_{1,in} + K_{S1}} \end{aligned} \quad (2.19)$$

Il vincolo (2.16)³ implica la positività del secondo autovalore della (2.19) quindi il sistema di acidogenesi è instabile nel punto di equilibrio banale.

La natura non lineare del sistema (2.9) di origine fa in modo che per piccole perturbazioni dal punto di equilibrio banale il movimento dello stato non divergerà indefinitamente ma sarà attratto dal punto di equilibrio non banale.

Il punto di equilibrio non banale è raggiunto quando il tasso di crescita della biomassa risulta uguale al tasso di fuoriuscita dal reattore della stessa. Va sottolineato il fatto che la biomassa può uscire naturalmente dal reattore sia perché abbandona il volume di controllo sia perché questa muore (o decade) e quindi non può svolgere più il suo compito di degradazione di sostanze organiche. Inoltre si trascura il fatto che una sostanza organica decaduta diviene essa stessa substrato, che può alimentare la catena biologica. Per i motivi sopra elencati, mancando i termini di decadimento della biomassa nelle equazioni di bilancio della massa nella catena biologica, si terrà conto della morte della biomassa grazie al parametro α . Il valore di questo coefficiente, per un reattore reale, non potrà essere mai pari a 0 (che indica mancanza di decadimento) e non potrà essere pari a 1 (che indica mancanza di alimentazione per decadimento). Sapendo che una parte della biomassa fuoriesce in ogni caso insieme alla portata di ricircolo è ragionevole considerare:

$$0.5 < \alpha < 1 \quad (2.20)$$

³ Il vincolo (2.16) ricavato analizzando il punto di equilibrio non banale è utilizzato anche per l'analisi di stabilità dell'equilibrio banale. Questo perché il reattore è progettato per funzionare rispettando questo vincolo. Se la (2.16) non fosse rispettata le condizioni di funzionamento del reattore non sarebbero sensate. È quindi prassi nell'analisi imporre sempre il soddisfacimento del vincolo (2.16).

Se valutiamo lo Jacobiano (2.17) nel punto di equilibrio non banale (biomassa non nulla) risulta:

$$J_{1_eq_nb} = \begin{vmatrix} -D - k_1 \bar{j}_{21} & -k_1 \mu_{1\max} \frac{\bar{S}_1}{\bar{S}_1 + K_{S1}} \\ \bar{j}_{21} & 0 \end{vmatrix} \quad (2.21)$$

dove:

$$\bar{j}_{21} = \mu_{1\max} \bar{X}_1 \left(\frac{1}{\bar{S}_1 + K_{S1}} - \frac{\bar{S}_1}{(\bar{S}_1 + K_{S1})^2} \right) = \mu_{1\max} \bar{X}_1 \frac{1}{\bar{S}_1 + K_{S1}} \left(1 - \frac{\bar{S}_1}{\bar{S}_1 + K_{S1}} \right) \quad (2.22)$$

Il soddisfacimento del vincolo (2.16) implica che tutti i termini della (2.22) siano strettamente positivi e quindi \bar{j}_{21} è sempre positivo. Il polinomio caratteristico di $J_{1_eq_nb}$ è:

$$\phi(\lambda) = \lambda^2 + \lambda(D + k_1 \bar{j}_{21}) + k_1 \bar{j}_{21} \mu_{1\max} \frac{\bar{S}_1}{\bar{S}_1 + K_{S1}} = \lambda^2 + \lambda(D + k_1 \bar{j}_{21}) + \alpha D k_1 \bar{j}_{21} \quad (2.23)$$

Per lo studio della natura del punto di equilibrio non banale, dato che il sistema è del second'ordine, basta analizzare il segno dei coefficienti del polinomio (2.23). Il segno del coefficiente $D + k_1 \bar{j}_{21}$ è sempre positivo perché è composto dalla somma di termini positivi, invece il coefficiente $\alpha D k_1 \bar{j}_{21}$ può assumere i valori compresi fra 0 per $\alpha=0$ e $D k_1 \bar{j}_{21}$ per $\alpha=1$.

Per $\alpha=0$ si avrà quindi una radice nulla e una negativa e quindi nulla si può concludere sulla stabilità del sistema dato che è non lineare. Per $\alpha=1$ si avranno due radici negative dato che il coefficiente $D k_1 \bar{j}_{21}$ è sempre positivo e quindi il sistema sarà asintoticamente stabile.

Nel caso reale $0.5 < \alpha < 1$, quindi si può dedurre che il luogo delle radici del polinomio caratteristico (2.23) sarà limitato in un tratto strettamente negativo del semiasse reale. Questo porta ad affermare che in condizioni di funzionamento realistiche il punto di equilibrio non banale è asintoticamente stabile. In altre parole, perturbando il punto di equilibrio non banale con perturbazioni sufficientemente piccole delle concentrazioni di biomassa e/o substrato acidogenico, il movimento dello stato ritornerà nel punto di equilibrio non banale dopo un transitorio.

Si andranno ora ad analizzare le risposte dinamiche dovute a perturbazioni delle concentrazioni di substrato o biomassa realistiche. In questo modo si andrà a completare il quadro di informazioni ottenute dall'analisi del sistema linearizzato nel punto di equilibrio svolte in precedenza. In particolare sarà illustrata, nelle successive due analisi, l'interazione presente fra le due equazioni non lineari che descrivono la dinamica del substrato e della biomassa acidogenica.

2.1.2 Perturbazione del punto di equilibrio asintoticamente stabile

In quest'analisi sarà simulato il “comportamento” del sistema di equazioni (2.9) partendo da una condizione di equilibrio non banale asintoticamente stabile. Perturbando a scalino il substrato acidogenico influente⁴ $S_{I,in}$ si verifica per prima cosa una perturbazione dell'equilibrio nell'equazione di bilancio di S_I , che avviene con una dinamica veloce. Dato che è presente un eccesso di substrato, come in un modello preda/predatore dove la preda è il substrato e il predatore è la biomassa, sarà sbilanciato anche l'equilibrio della biomassa X_I , la quale aumenterà, dato che ha a disposizione “più prede di cui nutrirsi”. La perturbazione sulla biomassa avviene con una dinamica lenta perché impiega molto tempo per riprodursi.

Tornando all'equazione che descrive il bilancio di substrato si può notare che il rateo di consumo di S_I cresce linearmente con l'aumentare della concentrazione di biomassa quindi, poiché quest'ultima aumenta, si ha un aumento del consumo del substrato che porta a far diminuire la concentrazione di S_I . L'equilibrio fra biomassa e substrato avverrà quando la concentrazione di biomassa sarà tale da poter garantire il consumo dell'eccesso di influente $S_{I,in}$. A questo punto la biomassa si assesta su una nuova concentrazione di equilibrio e il substrato torna al valore iniziale tale per cui riesce a garantire un tasso di crescita della biomassa pari al tasso di perdita della stessa per ricircolo. Il comportamento transitorio appena spiegato può essere riassunto qualitativamente nella seguente in Figura 2.3.

⁴ Per influente s'intende il termine di ingresso di substrato o biomassa immessa direttamente dall'esterno nel reattore. Questo termine indica un'immissione di carico da trattare dal digestore anaerobico.

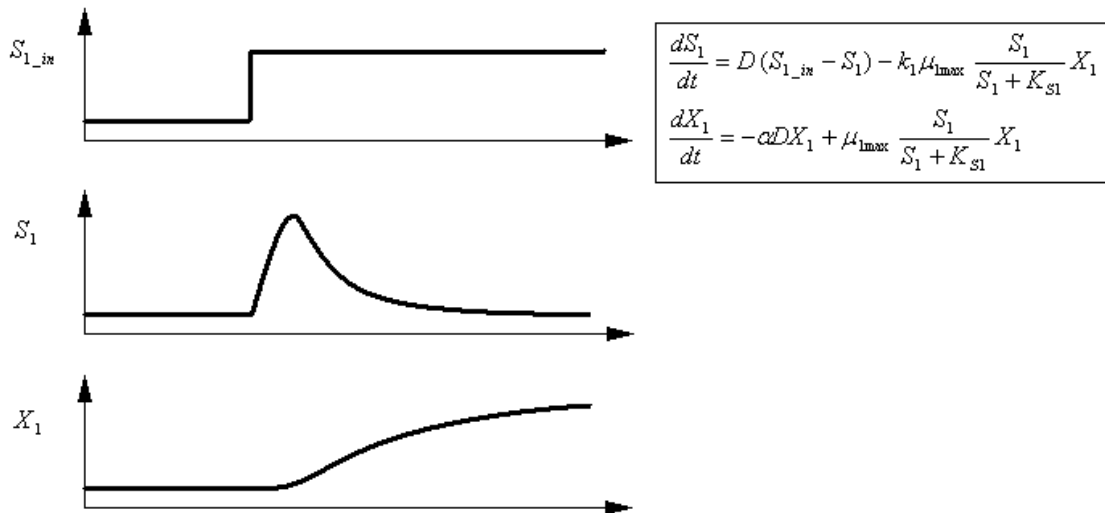


Figura 2.3 – Risposta del sistema acidogenico a fronte di uno step del substrato in ingresso

2.1.3 Perturbazione del punto di equilibrio instabile

In quest’analisi sarà simulato il “comportamento” del sistema di equazioni (2.9) partendo da una condizione di equilibrio banale instabile. Dando una perturbazione impulsiva della biomassa acidogenica questi tenderanno a divergere, ovvero ad aumentare in accordo con quanto afferma l’analisi degli autovalori (2.19). La crescita di X_1 causa anche un aumento del rateo di consumo del substrato S_1 presente nella prima equazione del modello del processo acidogenico (2.9). Per questo effetto il substrato acidogenico decresce portando un conseguente aumento del rateo di consumo di S_1 . Quest’ultimo continua a decrescere finché non è verificata la condizione:

$$\mu_{1\max} \frac{\bar{S}_1}{\bar{S}_1 + K_{S1}} = \alpha D \quad (2.24)$$

Ovvero il rateo di consumo del substrato acidogenico continua a decrescere finché non è verificata la condizione per l’equilibrio non banale. Si può quindi concludere che, partendo dal punto di equilibrio banale, a fronte dell’inserzione di biomassa acidogenica dall’esterno⁵, il movimento del sistema (2.9) finisce nel bacino di attrazione del punto di equilibrio non banale e asintoticamente stabile e finisce per raggiungere quest’ultimo dopo un transitorio (vedi Figura 2.4).

⁵ Questo avviene nel caso d’inizializzazione del processo di digestione anaerobica.

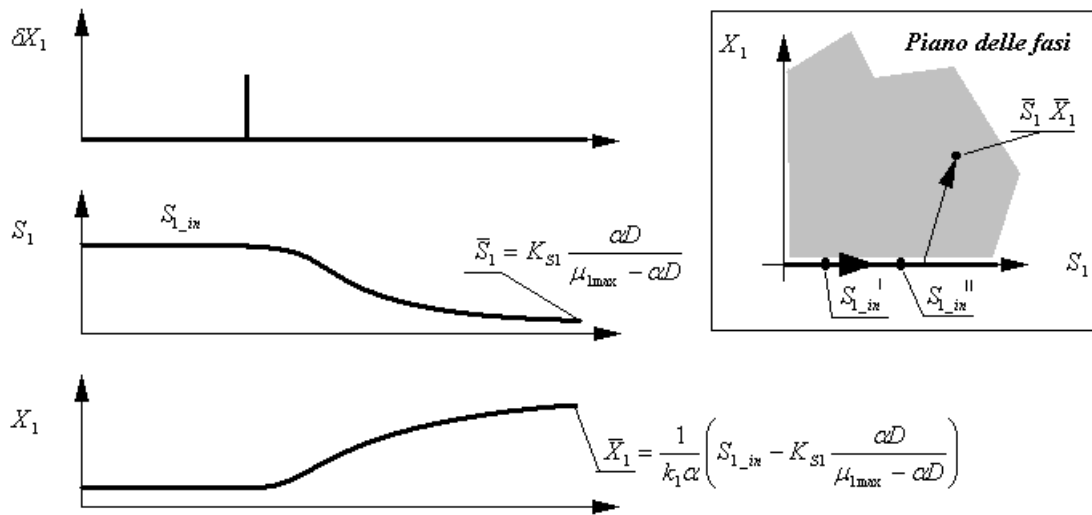


Figura 2.4 - Risposta del sistema acidogenico a fronte di un impulso della biomassa e piano delle fasi con bacino di attrazione (in grigio)

È bene precisare che, sempre partendo dal punto di equilibrio banale e instabile, se invece della biomassa viene perturbato l'influente passando da $S_{1,in}'$ a $S_{1,in}''$, il sistema si sposta semplicemente su un altro punto di equilibrio instabile, senza entrare nel bacino di attrazione del punto di equilibrio non banale e asintoticamente stabile. Si può quindi dedurre che il piano delle fasi del sistema acidogenico, oltre a essere composto dai soli i semiassi positivi delle variabili di stato, è così composto:

- Il semiasse positivo dei substrati è l'insieme dei punti di equilibrio banali e instabili.
- Tutto il primo quadrante, esclusa l'origine e l'asse del substrato, rappresenta il bacino di attrazione del punto di equilibrio non banale e asintoticamente stabile.

Si può vedere il piano delle fasi sempre nella Figura 2.4.

Si prenda ora in considerazione il solo processo di metanogenesi:

$$\begin{aligned} \frac{dS_2}{dt} &= D(S_{2,in} - S_2) + k_2 \mu_{1,max} \frac{S_1}{S_1 + K_{S1}} X_1 - k_3 \mu_{2,max} \frac{S_2}{S_2 + K_{S2} + S_2^2 / K_{I2}} X_2 \\ \frac{dX_2}{dt} &= -\alpha D X_2 + \mu_{2,max} \frac{S_2}{S_2 + K_{S2} + S_2^2 / K_{I2}} X_2 \end{aligned} \quad (2.25)$$

Il termine dovuto al processo di acidogenesi (si ricordi la triangolarità del modello che descrive la catena biologica) può essere visto come un ingresso, per cui ponendo:

$$S_{ac} = k_2 \mu_{1\max} \frac{S_1}{S_1 + K_{S1}} X_1 \quad (2.26)$$

E sostituendolo nella (2.25) si ottiene il modello:

$$\begin{aligned} \frac{dS_2}{dt} &= D(S_{2,in} - S_2) + S_{ac} - k_3 \mu_{2\max} \frac{S_2}{S_2 + K_{S2} + S_2^2 / K_{I2}} X_2 \\ \frac{dX_2}{dt} &= -\alpha D X_2 + \mu_{2\max} \frac{S_2}{S_2 + K_{S2} + S_2^2 / K_{I2}} X_2 \end{aligned} \quad (2.27)$$

Il vantaggio della scrittura nella forma (2.27) è che è possibile focalizzarsi sulle peculiarità del modello metanogenico. Infatti, si può notare che la differenza sostanziale con il modello di acidogenesi sta nel fatto che il rateo di crescita dei batteri metanogenici è il seguente:

$$\mu_2(S_2) = \mu_{2\max} \frac{S_2}{S_2 + K_{S2} + S_2^2 / K_{I2}} \quad (2.28)$$

Per comprendere il comportamento del rateo (2.28) bisogna derivare quest'ultimo secondo il substrato metanigeno, facendo ciò si ottiene:

$$\frac{\partial \mu_2(S_2)}{\partial S_2} = \frac{\mu_{2\max}}{\left(\frac{S_2^2}{K_{I2}} + S_2 + K_{S2} \right)} \left[1 - \frac{S_2 \left(\frac{2S_2}{K_{I2}} + 1 \right)}{\frac{S_2^2}{K_{I2}} + S_2 + K_{S2}} \right] \quad (2.29)$$

Come si può osservare la (2.29) è il prodotto fra due termini razionali, e poiché il primo termine è sempre positivo il segno della derivata è dettato dal secondo termine fra parentesi quadre. Studiando il segno di quest'ultimo si ottiene:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mu_2(S_2)}{\partial S_2} > 0 & \quad \text{per} \quad S_2 < S_2^* & \quad \text{con} \quad S_2^* = \sqrt{K_{I2} K_{S2}} \\ \frac{\partial \mu_2(S_2)}{\partial S_2} = 0 & \quad \text{per} \quad S_2 = S_2^* \\ \frac{\partial \mu_2(S_2)}{\partial S_2} < 0 & \quad \text{per} \quad S_2 > S_2^* \end{aligned} \quad (2.30)$$

Tipicamente, per il processo di metanogenesi, si ha che $K_{I2} \gg K_{S2}$ per cui l'andamento qualitativo del rateo che descrive il tasso di crescita dei batteri metanigeni può essere rappresentato come in Figura 2.5.

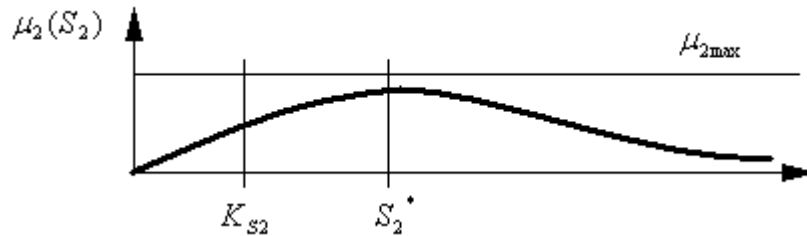


Figura 2.5 – Andamento del tasso di crescita dei batteri metanigeni

La Figura 2.5 mostra che, per concentrazioni di substrato metanigeno⁶ S_2 inferiori alla soglia critica di S_2^* , l'andamento qualitativo di μ_2 è uguale all'andamento qualitativo di μ_1 . Per questo motivo, fino alla soglia di substrato metanigeno critica, il comportamento del sotto-sistema di metanogenesi è analogo al comportamento della dinamica del sotto-sistema di acidogenesi. Per concentrazioni di acido superiori alla soglia critica S_2^* si ha un crollo del rateo.

Si supponga ora di avere una contrazione di substrato metanigeno S_2 di poco inferiore alla soglia critica S_2^* e di perturbarlo con un substrato acido equivalente in ingresso U tale da provocare il superamento di questa soglia, dove U è:

$$U = S_{2,in} + \frac{1}{D} k_2 \mu_{1,max} \frac{S_1}{S_1 + K_{S1}} X_1 = S_{2,in} + \frac{1}{D} S_{ac} \quad (2.31)$$

La perturbazione provoca un iniziale incremento di S_2 con un transitorio analogo a quello visto per acidogenesi ma, una volta superato S_2^* , si avrà una diminuzione del rateo di crescita della biomassa (che allo stesso tempo è anche il rateo di consumo del substrato) anziché un suo aumento. Così facendo si può osservare, nelle equazioni di bilancio del sistema di metanogenesi (2.27), che la biomassa inizierà a ridursi (ovvero inizia a morire). Riducendosi la biomassa ne consegue una diminuzione di capacità della stessa di degradare substrato acido, quindi questo inizierà ad aumentare facendo diminuire ancora di più il rateo μ_2 . In questo modo s'innescerà un transitorio che porta alla morte di tutta la biomassa (concentrazione di X_2 nulla) e la concentrazione di S_2 pari alla concentrazione del substrato metanigeno equivalente in ingresso U (vedi Figura 2.6).

⁶ Il substrato metanigeno S_2 verrà anche chiamato semplicemente acido in quanto è il prodotto dello stadio di acidogenesi.

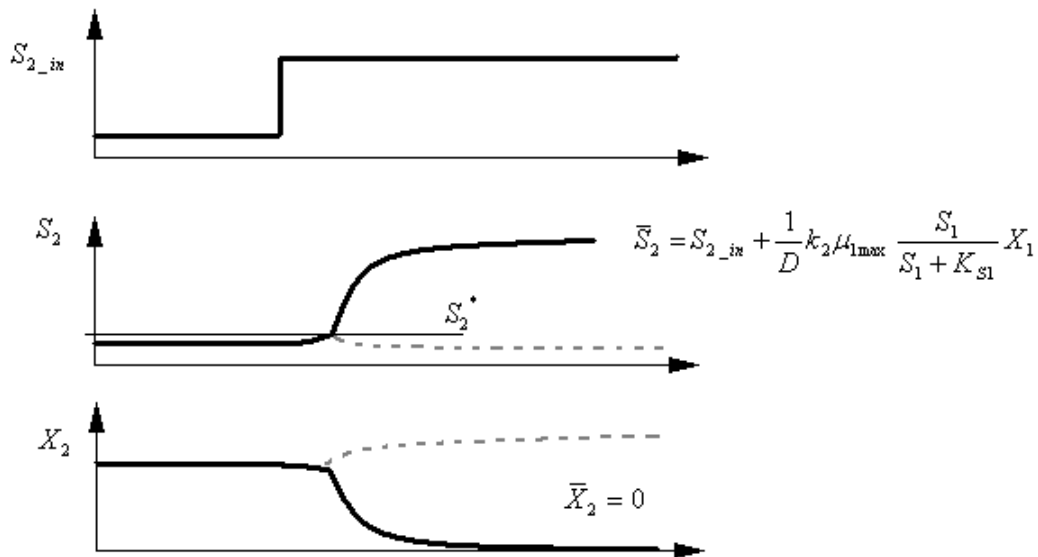


Figura 2.6 – Transitorio di destabilizzazione da accesso di acidi

Il punto di equilibrio che si raggiunge è l'equilibrio banale del sotto-sistema di metanogenesi:

$$\bar{S}_2 = S_{2,in} + \frac{1}{D} k_2 \mu_{1,max} \frac{S_1}{S_1 + K_{S1}} X_1 \quad (2.32)$$

$$\bar{X}_2 = 0$$

Una volta giunti all'equilibrio banale se s'immette nel reattore nuova biomassa X_2 , in altre parole se si perturba la concentrazione di biomassa metanigena, questa, dopo un transitorio, tenderà nuovamente ad azzerarsi, cioè non sarà più in grado di ridurre la concentrazione di acido ormai presente nel reattore per far riprendere nuovamente la catena biologica.

In generale, ogni tipologia di batteri riesce a degradare il substrato di cui si ciba e a riprodursi solo all'interno di un determinato intervallo di acidità dell'ambiente in cui si trova.

I batteri metanigeni possono dunque lavorare e produrre metano solo se l'ambiente in cui si trovano non è troppo acido. Generalizzando per una qualsiasi colonia batterica si parla d'inibizione da pH (che è strettamente legato al livello di acidità) e le espressioni delle cinetiche sono strutturate in due termini: una cinetica di Mood senza inibizione (analoga a μ_i del modello AMOCO), e un fattore pH-dipendente $I_{(pH)}$ che descrive l'inibizione dell'attività batterica superata una certa soglia di acidità:

$$\mu_i = \mu_{i,max} \frac{S_i}{S_i + K_{Si}} X_i I_{(pH)} \quad (2.33)$$

Nel modello AMOCO si è tenuto conto del fattore pH-dipendente nella particolare forma della cinetica (Haldane) perché la concentrazione da cui dipende il tasso di crescita di questa cinetica è anche l'unica acidità da cui dipende il pH. Per modelli più dettagliati, come per esempio l'ADM1, non sarà possibile eseguire la modellazione di Haldane e si parlerà più in generale di "inibizione da pH" con ratei che avranno un'espressione simile alla (2.33).

2.2 Il modello ADM1

Nel processo di digestione anaerobica intervengono ovviamente molte più specie batteriche rispetto alle due modellate dal modello AMOCO. Tenere conto nel modello di ogni singola specie batterica però condurrebbe a un modello con un numero di equazioni troppo grande. Per ottenere un modello di digestione più accurato dell'AMOCO e che allo stesso tempo sia caratterizzato da un numero accettabile di equazioni, è possibile raggruppare le specie batteriche in famiglie di biomasse che hanno simili caratteristiche di alimentazione, crescita e produzione di substrato. In questo modo, ogni famiglia di biomassa potrà essere considerata nella catena biologica, dato che si alimenta di un dato substrato e produce un dato substrato ad una determinata velocità. La scelta del numero di famiglie determinerà poi il numero di stadi di una catena biologica e conseguentemente il numero di equazioni di bilancio della massa di substrato e biomassa. In letteratura esistono metodi per individuare il numero adeguato di famiglie batteriche e quindi equazioni per modellare una determinata catena biologica [5].

In questo lavoro di tesi si è scelto di studiare il modello ADM1, adeguato al controllo di un reattore destinato alla digestione anaerobica in impianti agricoli. Questo modello è stato proposto in [5] ed è stato poi modificato da diversi autori, in modo da essere reso più robusto e considerare più effetti sulle cinetiche. In questa trattazione sarà adottato il modello ADM1 modificato da Rosen e Jeppsson [6] (che per semplicità chiameremo ugualmente ADM1). Questo modello semplificato si basa sull'ipotesi che il processo di digestione anaerobica avvenga in un reattore CSTR a singolo stadio con un volume di liquido V_l [m^3] costante, una temperatura T [K] controllata e senza ritenzione di biomassa.

Il modello consiste in un sistema DAE di 35 equazioni differenziali e una algebrica. Le equazioni differenziali sono composte da 24 equazioni di bilancio di massa della catena biologica, che hanno come variabili di stato le concentrazioni delle biomasse e dei substrati, 3 equazioni di bilancio dei gas prodotti nel reattore (anidride carbonica, metano e idrogeno) e 8 equazioni di bilancio di cationi,

anioni, valerato, butirrato, propionato, acetato, bicarbonato e ammoniaca. L'equazione algebrica descrive la concentrazione degli ioni d'idrogeno all'interno del reattore, dalla quale si ricava il livello di pH dello stesso. I sottoprocessi chimici considerati in questo modello sono 19 (anziché i soli 2 considerati dall'AMOCO) e sono elencati nella Tabella 1.

1 - Disintegrazione	8 - Assorbimento del valerato	15 - Decadimento di X_{fa}
2 - Idrolisi dei carboidrati	9 - Assorbimento del butirrato	16 - Decadimento di X_{C4}
3 - Idrolisi delle proteine	10 - Assorbimento del propionato	17 - Decadimento di X_{pro}
4 - Idrolisi dei lipidi	11 - Assorbimento dell'acetato	18 - Decadimento di X_{ac}
5 - Assorbimento degli zuccheri	12 - Assorbimento dell'idrogeno	19 - Decadimento di X_{H2}
6 - Assorbimento degli aminoacidi	13 - Decadimento di X_{su}	
7 - Assorbimento degli LCFA	14 - Decadimento di X_{aa}	

Tabella 1 - sottoprocessi chimici ADM1

Delle 35 equazioni DAE, 29 hanno come variabili di stato le concentrazioni degli elementi in fase liquida o gassosa elencati nella Tabella 2 e Tabella 3. I flussi in ingresso e uscita dal reattore sono espressi in $[KgCOD/m^3]$, ad eccezione delle concentrazioni di $C_{10}^l = S_{IC}$, $C_{11}^l = S_{IN}$, $C_{25}^l = S_{cat}$, $C_{26}^l = S_{an}$ e $C_1^g = S_{CO2}$ che sono espresse in $[kmol/m^3]$.

$C_1^l = S_{su}$ Zuccheri	$C_8^l = S_{H_2}$ Idrogeno disciolto	$C_{15}^l = X_{pr}$ Proteine	$C_{22}^l = X_{ac}$ Degradatori acetato
$C_2^l = S_{aa}$ Aminoacidi	$C_9^l = S_{CH_4}$ Metano disciolto	$C_{16}^l = X_{li}$ Lipidi	$C_{23}^l = X_{H_2}$ Degradatori idrogeno
$C_3^l = S_{fa}$ LFA	$C_{10}^l = S_{IC}$ Carbonio inorganico totale	$C_{17}^l = X_{su}$ Degradatori zuccheri	$C_{24}^l = X_i$ Degradatori inerti
$C_4^l = S_{va}$ Acido valerico	$C_{11}^l = S_{IN}$ Azoto inorganico totale	$C_{18}^l = X_{aa}$ Degradatori aminoacidi	$C_{25}^l = S_{cat}$ Cationi
$C_5^l = S_{bu}$ Acido butirrico	$C_{12}^l = S_i$ Inerti solubili	$C_{19}^l = X_{fa}$ Degradatori LFA	$C_{26}^l = S_{an}$ Anioni
$C_6^l = S_{pro}$ Acido propionico	$C_{13}^l = X_c$ Composito	$C_{20}^l = X_{C4}$ Degradatori del valerato e butirrato	
$C_7^l = S_{ac}$ Acido Acetico	$C_{14}^l = X_{ch}$ Carboidrati	$C_{21}^l = X_{pro}$ Degradatori propionato	

Tabella 2 – Concentrazioni dei flussi liquidi in ingresso

$C_1^g = S_{g,CO_2}$ Anidride carbonica	$C_2^g = S_{g,CH_4}$ Metano	$C_3^g = S_{g,H_2}$ Idrogeno
---	---------------------------------------	--

Tabella 3 – Concentrazioni dei flussi gassosi in uscita

Le restanti 6 variabili di stato sono le concentrazioni, in fase liquida, degli acidi disassociati (detti VFA e comprendono valerato, butirrato, propionato e acetato), del bicarbonato e della ammoniaca

libera e sono riportati nella Tabella 4. Queste grandezze sono espresse in $[KgCOD/m^3]$ ad eccezione di $C_{31}^l = S_{HCO_3}$, espressa in $[kmolC/m^3]$ e $C_{32}^l = S_{NH_3}$ espressa in $[kmolN/m^3]$.

$C_{27}^l = S_{van}$ Valerato	$C_{29}^l = S_{prom}$ Propionato	$C_{31}^l = S_{HCO_3}$ Bicarbonato
$C_{28}^l = S_{bum}$ Butirrato	$C_{30}^l = S_{acm}$ Acetato	$C_{32}^l = S_{NH_3}$ Ammoniaca libera

Tabella 4 – Concentrazioni degli VFA, bicarbonato e dell'ammoniaca libera

La variabile algebrica è la concentrazione degli ioni d'idrogeno S_H espressa in $[kmolN/m^3]$.

Le equazioni differenziali del modello ADM1 sono date dai bilanci di massa delle variabili dinamiche che coinvolgono: i 19 sottoprocessi chimici di Tabella 1, 3 trasferimenti gas-liquido e 6 processi acido-base addizionali.

Partendo dalla materia solubile e particolata (rispettivamente substrati e biomasse) le equazioni di bilancio della massa della catena biologica sono date da:

$$\frac{dC_i^l}{dt} = \frac{1}{t_{HR}} (C_{i,in}^l - C_i^l) + \sum_{j=1}^{19} \rho_j \nu_{i,j} \quad i \neq 8, \dots, 11 \quad (2.34)$$

Dove t_{HR} è il tempo di ritenzione idraulica $[d]$, il pedice j indica il sotto-processo chimico j -esimo, il pedice i indica la concentrazione dell' i -esimo componente riportato nella Tabella 2, $C_{i,in}^l$ è la generica concentrazione proveniente dall'esterno del reattore, ρ_j è il rateo cinetico del processo j e $\nu_{i,j}$ è il coefficiente stechiometrico dell' i -esimo componente coinvolto nel processo j . A sua volta, quest'ultime due quantità sono usualmente raggruppate nella matrice di Petersen, dove le colonne si riferiscono ai componenti e le righe sono riferite ai sottoprocessi chimici, una colonna aggiuntiva contiene le equazioni dei ratei associati a ogni processo. La matrice di Petersen completa è riportata in Appendice 6.1.

Le equazioni che descrivono il bilancio di massa della fase liquida di idrogeno, metano, carbonio e azoto sono le seguenti:

$$\frac{dC_i^l}{dt} = \frac{1}{t_{HR}}(C_{i,in}^l - C_i^l) + \sum_{j=1}^{19} \rho_j v_{i,j} - \rho_{T,k} \quad \begin{matrix} i = 8 & i = 9 & i = 10 \\ k = 3 & k = 2 & k = 1 \end{matrix} \quad (2.35)$$

$$\frac{dC_{11}^l}{dt} = \frac{1}{t_{HR}}(C_{11,in}^l - C_{11}^l) + \sum_{j=1}^{19} \rho_j v_{11,j} \quad (2.36)$$

Dove $\rho_{T,k}$ è il tasso di conversione da stato liquido a gassoso⁷ riferito al componente C_k^g .

Il bilancio di anioni e cationi è definito dall'effetto di diluizione del reattore, dato che sono specie non reattive:

$$\frac{dC_i^l}{dt} = \frac{1}{t_{HR}}(C_{i,in}^l - C_i^l) \quad i = 25, 26 \quad (2.37)$$

I bilanci degli acidi dissociati e dell'ammoniaca libera sono definiti da:

$$\frac{dC_i^l}{dt} = -\rho_{A,i} \quad i = 27, \dots, 32 \quad (2.38)$$

Dove $\rho_{A,i}$ [kgCOD/m³d] è il tasso cinetico acido-base.

Le equazioni di bilancio dei gas sono date dalla:

$$\frac{dC_i^g}{dt} = -\frac{q_g}{V_g} C_i^g + \rho_{T,i} \frac{V_l}{V_g} \quad i = 1, 2, 3 \quad (2.39)$$

Dove V_g [m³] è il volume di gas totale all'interno del reattore, $\rho_{T,i}$ è il tasso di conversione fra stato liquido e gassoso del componente C_i^g e q_g [m³/d] è la porta di metano uscente dal reattore.

L'equazione algebrica del modello ADM1 definisce il bilancio delle cariche ed è la seguente:

$$S_{cat} + S_{NH4} - S_{HCO3} - \frac{S_{acm}}{64} - \frac{S_{prom}}{112} - \frac{S_{bum}}{160} - \frac{S_{vam}}{208} - S_{an} + S_h - \frac{K_w}{S_h} = 0 \quad (2.40)$$

Dove $S_{NH4} = S_{IN} - S_{NH3}$ è la concentrazione di ammonio e K_w [kmol²/L] è la costante di dissociazione dell'acqua. La (2.40) serve per determinare la concentrazione molare di idrogeno S_h , che a sua volta definisce il pH^8 (che interessa la dissociazione dei VFA e dell'ammoniaca):

⁷ L'azoto non passa dalla fase liquida a quella gassosa, per cui la (2.36) non contiene il tasso di trasferimento liquido-gas.

⁸ Il pH è una misura, in scala logaritmica, del grado di acidità (o basicità) di una soluzione. Il pH solitamente assume valori compresi fra 0 (acido forte) e 14 (base forte), ma in casi particolari può andare da meno infinito a più infinito. Il

$$pH = -\log_{10} S_h \quad (2.41)$$

Nel modello ADM1, oltre all'equazione per il calcolo del pH, è stata anche introdotta, una variabile che descrive la capacità di neutralizzazione della soluzione all'interno del reattore:

$$A = S_{cat} - S_{an} + S_{IN} \quad (2.42)$$

Inoltre, per ricavare il pH del substrato influente, l'equazione di bilancio della carica (2.40) è calcolata in relazione alla composizione dell'influente.

Infine, la portata di biogas uscente può essere calcolata tramite:

$$q_g = k_p (p_g - p_{atm}) \frac{P_g}{P_{atm}} \quad (2.43)$$

Dove k_p [$m_N^3/bar \cdot d$] è il coefficiente del flusso di uscita, p_g [bar] è la pressione del biogas e p_{atm} [bar] è la pressione atmosferica. A sua volta, la pressione del biogas è data dalla somma delle pressioni parziali di idrogeno, metano, anidride carbonica e vapore acqueo:

$$p_g = p_{H_2} + p_{CH_4} + p_{CO_2} + p_{H_2O} = S_{g,H_2} \frac{RT_g}{16} + S_{g,CH_4} \frac{RT_g}{64} + S_{g,CO_2} RT_g + p_{H_2O} \quad (2.44)$$

Dove R è la costante dei gas, T_g [K] è la temperatura dei gas all'interno del reattore.

2.2.1 La catena biologica del modello ADM1

La ricostruzione della catena biologica del modello ADM1 è ovviamente molto più complessa rispetto al modello AMOCO. Per una migliore comprensione si sono quindi considerate delle ipotesi semplificative:

- Si sono trascurati alcuni termini di inibizione nei ratei (vedi sotto-paragrafo successivo).
- Si è considerato l'apporto di substrato dovuto all'influente come nettamente superiore all'apporto di substrato dovuto al decadimento dei batteri. Questo significa modificare la matrice di Petersen e porre nulli i coefficienti di apporto di biomassa dovuti ai sette sottoprocessi di decadimento.

Successivamente applicando l'algoritmo di Tarjan [14] al sistema di equazioni, si è definito un ordinamento in forma triangolare bassa a blocchi (BLT) rappresentato in Figura 2.7.

valore intermedio, 7, è detto di pH neutro. In prima approssimazione la biomassa presente nel reattore predilige pH basici, cioè leggermente superiori al pH neutro.

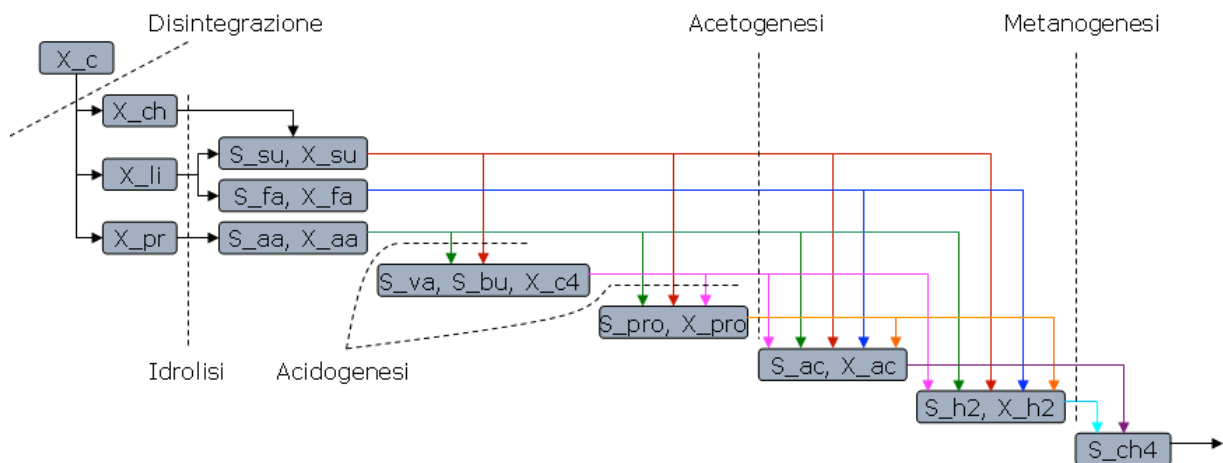


Figura 2.7 - Catena biologica ADM1

Nella Figura 2.7 non sono riportate le dinamiche di S_{ic} , X_{ic} , S_i e X_i perché scarsamente influenti sulla produzione di metano. Gli stadi della catena biologica sono composti da combinazioni di substrati e biomasse, tranne che per gli stadi di disintegrazione e idrolisi. In questi sottoprocessi infatti, non sono coinvolte famiglie batteriche e sono svolti dall'azione dell'acqua, immessa nel reattore tramite la portata di ricircolo. Le biomasse, ovvero le famiglie di degradatori coinvolte nella catena sono sette: X_{su} , X_{fa} , X_{aa} , X_{c4} , X_{pro} , X_{ac} , e X_{H2} , i substrati prodotti/di alimentazione sono 9: S_{su} , S_{fa} , S_{aa} , S_{va} , S_{bu} , S_{pro} , S_{ac} , S_{H2} e S_{CH4} .

Il modello ADM1 ordinato secondo la Figura 2.7 costituisce un sistema triangolare in cui però, a differenza dell'AMOCO, per alcuni stadi della catena biologica l'alimentazione non proviene esclusivamente dallo stadio precedente ma può provenire anche da stadi più a monte. Si possono quindi raggruppare i sottoprocessi della catena biologica in 5 categorie:

- Disintegrazione
- Idrolisi
- Acidogenesi
- Acetogenesi
- Metanogenesi

Poiché i ratei (2.33) descrivono la velocità con cui una biomassa consuma il substrato, maggiore sarà il valore del coefficiente μ_{max} , maggiore sarà la rapidità di variazione del tasso di

consumo/crescita legato al rateo considerato. Per questo motivo, più elevato sarà il valore di μ_{max} , più il processo legato al reato considerato risulterà reattivo a perturbazioni del proprio influente. Tipicamente, l'acidogenesi e l'acetogenesi rispondono velocemente a variazione del proprio influente, mentre la metanogenesi risponde lentamente. La disintegrazione e l'idrolisi invece variano la loro velocità di risposta in base al tipo di alimentazione in ingresso. Per queste ultime due categorie di processi si hanno due comportamenti tipici:

- A fronte di uno step di alimentazione composto da substrati difficilmente disintegrabili e idrolizzabili queste due categorie di processi rispondono molto lentamente. Il sistema si dice che rimane stabile perché la disintegrazione e l'idrolisi producono influente per i processi a valle della catena biologica molto lentamente.
- Perturbando l'alimentazione aumentando la concentrazione di substrati facilmente disintegrabili e idrolizzabili, i processi di acidogenesi e acetogenesi riescono ad adattarsi facilmente dal punto di vista dinamico, mentre ciò non avviene per il processo di metanogenesi. Questo può provocare un accumulo di acidità, e quindi un fenomeno di destabilizzazione analogo a quanto visto nell'AMOCO.

2.2.2 I ratei del modello ADM1

Come osservato, il fenomeno d'inibizione della crescita batterica all'interno di un reattore è legato al livello di acidità dell'ambiente in cui operano i batteri e dipende dalla concentrazione di diversi substrati. Nel caso specifico dell'ADM1 il livello di acidità all'interno del reattore è determinato principalmente dalla concentrazione dei quattro substrati prodotti dai sottoprocessi appartenenti alle categorie di acidogenesi e acetogenesi, ovvero da: S_{va} , S_{bu} , S_{pro} e S_{ac} , ed il corrispondente effetto d'inibizione è modellizzato da una cinetica più complessa di quella di Haldane considerata nel modello AMOCO. Le espressioni dei ratei riguardanti i processi soggetti a inibizione, sono le seguenti:

$$\begin{aligned}
\rho_5 &= k_{m,su} \frac{S_{su}}{S_{su} + K_{S,su}} X_{su} I_5 \\
\rho_6 &= k_{m,aa} \frac{S_{aa}}{S_{aa} + K_{S,aa}} X_{aa} I_6 \\
\rho_7 &= k_{m,fa} \frac{S_{fa}}{S_{fa} + K_{S,fa}} X_{fa} I_7 \\
\rho_8 &= k_{m,c4} \frac{S_{va}}{S_{va} + K_{S,c4}} X_{c4} \frac{S_{va}}{S_{va} + S_{bu}} I_8 \\
\rho_9 &= k_{m,c4} \frac{S_{bu}}{S_{bu} + K_{S,c4}} X_{c4} \frac{S_{bu}}{S_{va} + S_{bu}} I_9 \\
\rho_{10} &= k_{m,pro} \frac{S_{pro}}{S_{pro} + K_{S,pro}} X_{pro} I_{10} \\
\rho_{11} &= k_{m,ac} \frac{S_{ac}}{S_{ac} + K_{S,ac}} X_{ac} I_{11} \\
\rho_{12} &= k_{m,h2} \frac{S_{h2}}{S_{h2} + K_{S,h2}} X_{h2} I_{12}
\end{aligned} \tag{2.45}$$

I tassi responsabili dei sottoprocessi di disintegrazione e idrolisi non sono caratterizzati da fattori di inibizione e sono i seguenti:

$$\begin{aligned}
\rho_1 &= k_{dis} X_c \\
\rho_2 &= k_{hyd,ch} X_{ch} \\
\rho_3 &= k_{hyd,pr} X_{pr} \\
\rho_4 &= k_{hyd,li} X_{li}
\end{aligned} \tag{2.46}$$

Infine, anche i tassi di decadimento che esprimono il tasso di mortalità delle biomasse non sono caratterizzati da un fattore d'inibizione e sono i seguenti:

$$\begin{aligned}
\rho_{13} &= k_{dec,Xsu} X_{su} & \rho_{17} &= k_{dec,Xpro} X_{pro} \\
\rho_{14} &= k_{dec,Xaa} X_{aa} & \rho_{18} &= k_{dec,Xac} X_{ac} \\
\rho_{15} &= k_{dec,Xfa} X_{fa} & \rho_{19} &= k_{dec,Xh2} X_{h2} \\
\rho_{16} &= k_{dec,Xc4} X_{c4}
\end{aligned} \tag{2.47}$$

I fattori d'inibizione delle (2.45), sono a loro volta definiti come segue:

$$\begin{aligned}
I_{5,6} &= I_{pH,aa} I_{IN,lim} \\
I_7 &= I_{pH,aa} I_{IN,lim} I_{h2,fa} \\
I_{8,9} &= I_{pH,aa} I_{IN,lim} I_{h2,c4} \\
I_{10} &= I_{pH,aa} I_{IN,lim} I_{h2,pro} \\
I_{11} &= I_{pH,ac} I_{IN,lim} I_{nh3} \\
I_{12} &= I_{pH,h2} I_{IN,lim}
\end{aligned} \tag{2.48}$$

Ove i termini dipendenti dal pH sono definiti dalle seguenti espressioni:

$$\begin{aligned}
I_{pH,aa} &= \begin{cases} \exp\left(-3\left(\frac{pH - pH_{max,aa}}{pH_{max,aa} - pH_{min,aa}}\right)^2\right) & , \quad pH < pH_{max,aa} \\ 1 & , \quad pH > pH_{max,aa} \end{cases} \\
I_{pH,ac} &= \begin{cases} \exp\left(-3\left(\frac{pH - pH_{max,ac}}{pH_{max,ac} - pH_{min,ac}}\right)^2\right) & , \quad pH < pH_{max,ac} \\ 1 & , \quad pH > pH_{max,ac} \end{cases} \\
I_{pH,h2} &= \begin{cases} \exp\left(-3\left(\frac{pH - pH_{max,h2}}{pH_{max,h2} - pH_{min,h2}}\right)^2\right) & , \quad pH < pH_{max,h2} \\ 1 & , \quad pH > pH_{max,h2} \end{cases}
\end{aligned} \tag{2.49}$$

I termini dipendenti dal pH sono dunque definiti da una funzione discontinua fra i valori 0 e 1. In condizioni di funzionamento nominale questi termini sono pari a 1 e si annullano bruscamente all'aumentare dell'acidità, cioè al diminuire del pH . Il termine che si annulla per il valore di pH più elevato ($pH \approx 7$) è il termine $I_{pH,ac}$, che segnala in questo modo la transizione del processo verso condizioni di instabilità.

Gli altri termini delle equazioni (2.48) sono dei termini che variano con le concentrazioni e sono i seguenti:

$$\begin{aligned}
I_{IN,lim} &= \frac{1}{1 + K_{S,IN} / S_{IN}} \\
I_{h2,fa} &= \frac{1}{1 + S_{h2} / K_{I,h2,fa}} \\
I_{h2,c4} &= \frac{1}{1 + S_{h2} / K_{I,h2,c4}} \\
I_{h2,pro} &= \frac{1}{1 + S_{h2} / K_{I,h2,pro}} \\
I_{nh3} &= \frac{1}{1 + S_{nh3} / K_{I,nh3}}
\end{aligned} \tag{2.50}$$

2.3 Il modello ADMS

Il modello ADM1 è caratterizzato da un numero molto elevato di parametri (circa un centinaio). Per questo motivo le procedure d'identificazione risultano difficili anche perché molti parametri dipendono dal substrato in ingresso.

Con l'obiettivo di ottenere un modello utilizzabile per l'identificazione dei parametri e per la sintesi di tecniche avanzate di controllo si è poi proceduto ad introdurre alcune ipotesi semplificative, in grado anche di favorire una futura determinazione del modello in forma LFT, cioè *Linear Fractional Transformation*.

Per la semplificazione del modello ADM1 si è osservata la sua catena biologica (vedi Figura 2.7) e le curve d'inibizione da *pH*. Si può osservare che il fenomeno di destabilizzazione si avvia con l'inibizione della biomassa metanigena S_{ch4} . Se l'acidità all'interno del reattore cresce (ovvero il *pH* decresce) e supera una certa soglia, i batteri metanigeni rallentano la loro attività di produzione di metano. Questo causa un ulteriore accumulo di acidità nel reattore che riduce ulteriormente il *pH*. In questo modo s'innesca un andamento di deriva che porta a inibire ulteriormente l'attività dei batteri metanigeni e così via. Inoltre, con l'accumulo di acidità nel reattore si andranno poi ad attivare via via le inibizioni dell'attività dei batteri a valle nella catena biologica rispetto a quelli metanigeni andando a bloccare il funzionamento della catena biologica.

Risulta quindi chiaro che l'obiettivo principale di un controllo in anello chiuso sarà quello di confinare il livello di acidità, ovvero il *pH*, all'interno di un'opportuno intervallo operativo, in modo da evitare il fenomeno di destabilizzazione.

2.3.1 Semplificazione dei fattori d'inibizione

Per $pH > 6$ quasi tutti i fattori d'inibizione (2.48) sono pari ad 1, in condizioni di funzionamento nominale quindi possono essere eliminati dal modello. Si è invece considerato il fattore di inibizione relativo al processo di metanogenesi:

$$I_{11} = I_{pH,ac} I_{IN,lim} I_{nh3} \quad (2.51)$$

Il primo anello della catena biologica che risente dall'accumulo di acidi nel reattore è l'ultimo nella sequenza di produzione del metano.

Il termine $I_{pH,ac}$ è definito da una espressione condizionale ed è quindi discontinuo. Poiché ciò può creare problemi nella determinazione della forma LFT è possibile considerarne una approssimazione in due forme diverse:

- Approssimazione di Hill [6]:

$$I_{pH,ac} = \frac{pH^{45}}{pH^{45} + \left(\frac{pH_{max,ac} + pH_{min,ac}}{2} \right)^{45}} \quad (2.52)$$

- Funzione arcotangente creata per il caso in esame:

$$I_{pH,ac} = \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \arctan \left(KpH + 5 \frac{pH_{max,ac} + pH_{min,ac}}{2} \right), K = 5 \quad (2.53)$$

In Figura 2.8 si confrontano gli andamenti delle due forme approssimate con la forma discontinua. Il vantaggio dell'approssimazione di Hill è che ricalca molto fedelmente la funzione $I_{pH,ac}$ originale, ma può comunque creare problemi dal punto di vista numerico a causa della forte discontinuità nella derivata. Il vantaggio dell'approssimazione con una funzione arcotangente è che crea meno problemi dal punto di vista numerico, per valori non eccessivi di K . Per questo motivo, unito al fatto che la forma (2.53) è più prudente dal punto di vista della supervisione e del controllo in quanto anticipa il fenomeno di destabilizzazione, si è scelto di utilizzare la forma arcotangente del fattore d'inibizione $I_{pH,ac}$.

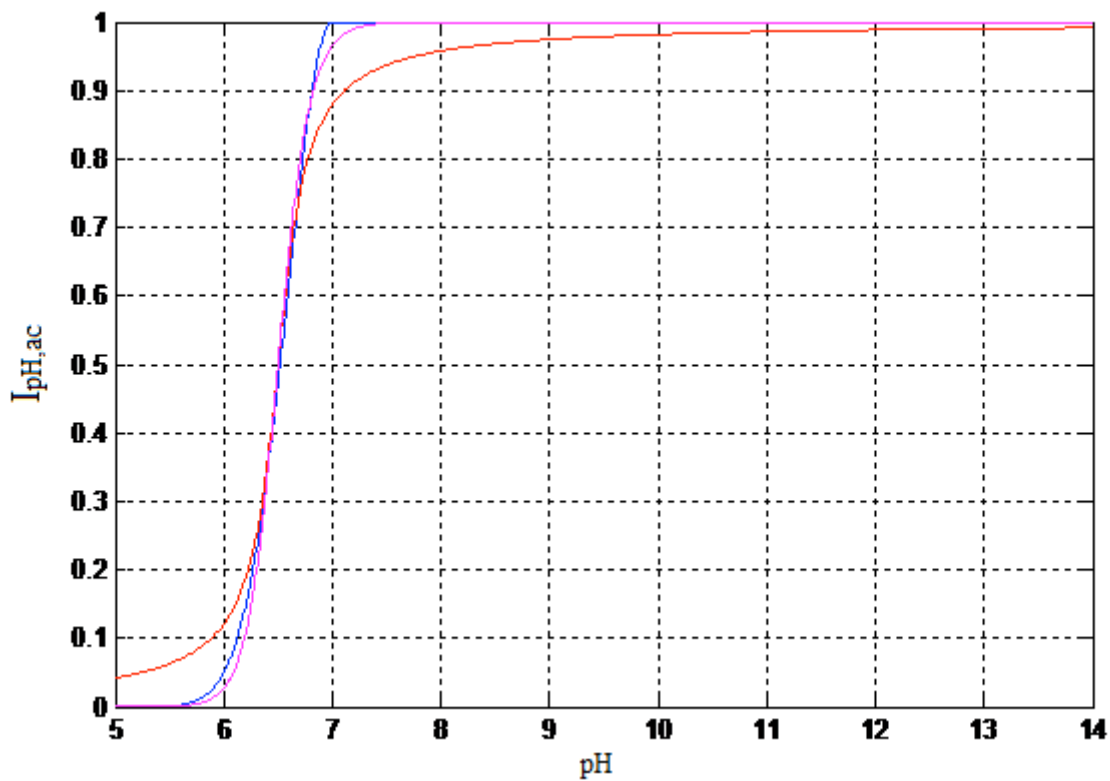


Figura 2.8 – Andamento $I_{pH,ac}$: funzione discontinua (blu), approssimazione di Hill (magenta), approssimazione arcotangente (rosso).

Tornando all'espressione (2.51), il termine $I_{IN,lim}$ vale circa sempre 1 in condizioni di normale funzionamento e il termine I_{nh3} parte da 1 e decresce con l'aumentare della concentrazione di ammoniaca presente nel reattore. Il fattore d'inibizione I_{I1} semplificato è quindi:

$$I_{11} = I_{pH,ac} I_{nh3} \quad (2.54)$$

Come detto, confinando la validità del modello nell'intorno delle condizioni di funzionamento nominali non è necessario modellizzare gli altri fattori di inibizione.

2.3.2 Approssimazione bilancio degli ioni

Le dinamiche delle concentrazioni degli ioni degli acidi grassi volatili (VFA) sono descritte dalle seguenti equazioni:

$$\begin{aligned}
\frac{dS_{vam}}{dt} &= -k_{a,B,va}(S_{vam}(K_{a,va} + S_h) - K_{a,va}S_{va}) \\
\frac{dS_{bum}}{dt} &= -k_{a,B,bu}(S_{bum}(K_{a,bu} + S_h) - K_{a,bu}S_{bu}) \\
\frac{dS_{prom}}{dt} &= -k_{a,B,pro}(S_{prom}(K_{a,pro} + S_h) - K_{a,pro}S_{pro}) \\
\frac{dS_{acm}}{dt} &= -k_{a,B,ac}(S_{acm}(K_{a,ac} + S_h) - K_{a,ac}S_{ac})
\end{aligned} \tag{2.55}$$

dove S_{vam} , S_{bum} , S_{prom} e S_{acm} sono rispettivamente le concentrazioni degli ioni di valerato, butirrato, propionato e acetato; $k_{a,B,va}$ e $K_{a,B,va}$, $k_{a,B,bu}$ e $K_{a,B,bu}$, $k_{a,B,pro}$ e $K_{a,B,pro}$, $k_{a,B,ac}$ e $K_{a,B,ac}$, sono dei coefficienti fisico-chimici rispettivamente relativi a acido valerico, acido butirrico, acido propionato e acido acetico; S_h , S_{va} , S_{bu} , S_{pro} e S_{ac} sono rispettivamente le concentrazioni di ioni di idrogeno, di acido valerico, acido butirrato, acido propionato e di acido acetico.

Sotto l'ipotesi di reattore controllato, e quindi $\text{pH} > 6$, la concentrazione di S_h è numericamente trascurabile rispetto ai coefficienti $K_{a,B,va,bu,pro,ac}$ e quindi le equazioni (2.55) diventano:

$$\begin{aligned}
\frac{dS_{vam}}{dt} &= -k_{a,B,va}S_{vam}K_{a,va} - K_{a,va}S_{va} \\
\frac{dS_{bum}}{dt} &= -k_{a,B,bu}S_{bum}K_{a,bu} - K_{a,bu}S_{bu} \\
\frac{dS_{prom}}{dt} &= -k_{a,B,pro}S_{prom}K_{a,pro} - K_{a,pro}S_{pro} \\
\frac{dS_{acm}}{dt} &= -k_{a,B,ac}S_{acm}K_{a,ac} - K_{a,ac}S_{ac}
\end{aligned} \tag{2.56}$$

Si può notare che le equazioni (2.56) sono lineari e rappresentano delle dinamiche passa-basso con costante di tempo dell'ordine del secondo. Paragonate quindi al tempo di risposta del reattore, che è di parecchi giorni, possono essere considerate istantanee, può quindi essere eliminato il comportamento dinamico e semplificate come segue:

$$\begin{aligned}
S_{vam} &= S_{va} \\
S_{bum} &= S_{bu} \\
S_{prom} &= S_{pro} \\
S_{acm} &= S_{ac}
\end{aligned} \tag{2.57}$$

2.3.3 Semplificazione trasferimento dell'idrogeno

Nelle equazioni di bilancio della concentrazione d'idrogeno in fase liquida $C_8^l = S_{H_2}$ e in fase gassosa $C_3^g = S_{g,H_2}$ compare il termine di trasferimento dell'idrogeno fra queste due fasi; questo termine ha la seguente espressione:

$$\rho_{T,3} = k_{L,a}(C_8^l - 16K_{H,h_2}p_{H_2}) \quad (2.58)$$

dove $k_{L,a}$ è un parametro, K_{H,h_2} è un parametro dipendente dalla temperatura operativa del reattore e p_{H_2} è la pressione parziale di idrogeno nel reattore. In condizioni di funzionamento normale e nel caso di reattore controllato il termine (2.58) è trascurabile numericamente e quindi può essere trascurato nelle equazioni in cui compare.

2.3.4 Semplificazione pressione dei gas

La pressione della fase gassosa all'interno del reattore è determinata nel modo seguente:

$$p_g = p_{H_2} + p_{CH_4} + p_{CO_2} + p_{H_2O} \quad (2.59)$$

dove p_{H_2} , p_{CH_4} , p_{CO_2} e p_{H_2O} sono rispettivamente le pressioni parziali di idrogeno, metano, anidride carbonica e vapore acqueo presenti nel reattore. Il termine p_{H_2} è numericamente trascurabile rispetto alle altre pressioni parziali e quindi può essere eliminato. Dato che questo termine non è più d'interesse può essere eliminata dal modello l'equazione algebrica relativa:

$$p_{H_2} = S_{g,H_2} \frac{RT_g}{16} \quad (2.60)$$

Inoltre, può essere eliminata anche l'equazione differenziale che descrive il bilancio di concentrazione d'idrogeno in fase gassosa, poiché serve per determinare la variabile S_{H_2} utile esclusivamente all'equazione (2.60) trascurata:

$$\frac{dS_{g,H_2}}{dt} = -S_{g,H_2} \frac{q_g}{V_g} + \rho_{T,3} \frac{V_l}{V_g} \quad (2.61)$$

2.3.5 Semplificazione delle dinamiche degli inerti

Dalla Figura 2.7 che descrive la forma triangolare a blocchi delle equazioni del modello ADM1 si nota che non esistono archi uscenti dalle equazioni delle concentrazioni d'inerti solubili S_i e di inerti particolati X_i che entrano nella catena biologica. In altre parole queste concentrazioni non hanno alcuna influenza sulla catena biologica e quindi si possono eliminare le equazioni che ne descrivono il bilancio.

2.3.6 Esplicitazione dell'equazione algebrica

La concentrazione dell'acidità totale all'interno del reattore è fornita dalla seguente espressione:

$$S_{cat} + S_{NH4} - S_{HCO3} - \frac{S_{acm}}{64} - \frac{S_{prom}}{112} - \frac{S_{bum}}{160} - \frac{S_{vam}}{208} - S_{an} + S_h - \frac{K_w}{S_h} = 0 \quad (2.62)$$

dove S_{cat} , S_{nh4} , S_{hco3} , S_{acm} , S_{prom} , S_{bum} , S_{vam} , S_{an} , S_h e K_w sono rispettivamente le concentrazioni di cationi, ammonio, bicarbonato, acetato, propionato, butirato, anioni, ioni d'idrogeno la costante di dissociazione dell'acqua. Moltiplicando i membri per S_h si ottiene un'equazione di 2° grado le cui soluzioni sono date da:

$$S_h = -\frac{b}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{b^2 + 4K_w} \quad (2.63)$$

dove:

$$\begin{aligned} b &= S_{cat} - S_{an} + S_{nh4} - S_{hco3} - ac \\ ac &= S_{acm}/64 + S_{prom}/112 + S_{bum}/160 + S_{vam}/208 \end{aligned} \quad (2.64)$$

Fra le due soluzioni (2.63) la sola con significato fisico è quella positiva, cioè:

$$S_h = -\frac{b}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{b^2 + 4K_w} \quad (2.65)$$

Che verrà dunque considerata nel modello semplificato.

2.3.7 Approssimazione dell'alcalinità

L'equazione che descrive l'alcalinità è la seguente:

$$alk = \left(S_{hco3} - \frac{S_{acm}}{64} - \frac{S_{prom}}{112} - \frac{S_{bum}}{160} - \frac{S_{vam}}{208} - S_h - \frac{K_w}{S_h} + S_{nh3} \right) \cdot 50000 \quad (2.66)$$

Sempre supponendo condizioni in cui il pH sia maggiore di 6, l'espressione dell'alcalinità può essere approssimata trascurando il contributo derivante dall'acidità. In questo modo si ottiene:

$$alk = (S_{hco3} + ac + S_{nh3}) \cdot 50000 \quad (2.67)$$

dove ac è il termine descritto nella (2.64).

2.3.8 Approssimazione del rateo di trasferimento del metano

Nelle equazioni di bilancio della concentrazione di metano in fase liquida $C_9^l = S_{CH4}$ e in fase gassosa $C_2^g = S_{g,CH4}$ compare il termine di trasferimento del metano fra queste due fasi; questo termine ha la seguente espressione:

$$\rho_{T,2} = k_{L,a} (C_9^l - 64K_{H,ch4} p_{CH4}) \quad (2.68)$$

dove $k_{L,a}$ è un parametro, $K_{H,ch4}$ è un parametro dipendente dalla temperatura operativa del reattore e p_{CH4} è la pressione parziale di metano nel reattore. In condizioni di funzionamento normale e nel caso di reattore controllato il termine p_{CH4} si può considerare sempre all'equilibrio $p_{CH4,0}$. Per questo motivo la (2.68) diventa:

$$\rho_{T,2} = k_{L,a} (C_9^l - 64K_{H,ch4} p_{CH4,0}) \quad (2.69)$$

Alla luce di quest'approssimazione può essere eliminata dal modello, in maniera analoga a quanto visto nel sotto paragrafo 2.3.4, l'equazione algebrica che serve per descrivere la pressione di metano all'interno del reattore p_{CH4} e l'equazione differenziale per descrivere il bilancio di metano all'interno del reattore.

2.3.9 Approssimazione del fattore d'inibizione I_{11}

Si può descrivere il fattore d'inibizione I_{11} in modo che questo non sia più pH dipendente ma sia substrato dipendente. Così facendo si ottiene un'approssimazione all'Haldane del fattore d'inibizione (ovvero simile all'andamento di Figura 2.5).

Definendo il substrato metanigeno aggregato per il modello ADMS $S_{2\delta}$ come:

$$S_{2\delta} = \left(\frac{S_{va}}{208} + \frac{S_{bu}}{160} + \frac{S_{pro}}{112} + \frac{S_{ac}}{64} - K_{cat} S_{cat} \right) 1000 \quad (2.70)$$

dove K_{cat} è un parametro. Posso definire l'approssimazione di I_{11} come:

$$I_{11} \equiv \frac{S_{2\delta} + K_{s0}}{\frac{S_{2\delta}^2}{K_I} + S_{2\delta} + K_{S_{2\delta}}} \quad (2.71)$$

Dove K_{s0} è un parametro. Grazie all'approssimazione (2.71) è possibile eliminare dal modello le equazioni utilizzate per il calcolo del pH .

2.4 Confronto fra il modello ADM1 e il modello ADMS

Grazie alle approssimazioni e semplificazione introdotte il modello ADMS è composto da: 20 equazioni differenziali che descrivono la catena biologica, 1 equazione differenziale che descrive il bilancio di cationi e 3 equazioni algebriche per descrivere I_{11} , $\rho_{T,2}$ e $S_{2\delta}$.

Si è proceduto al confronto fra il comportamento del modello ADM1 e il modello ADMS considerando i seguenti scenari di simulazione:

- Uno scalino sulla concentrazione di acido presente nel reattore di entità tale da non innescare il comportamento di instabilità da acidità.
- Uno scalino sulla concentrazione di acido presente nel reattore di entità tale da portare il modello ADM1 al limite di instabilità da acidità.

Questi scenari ricreano il comportamento del modello a fronte dell'immissione d'influente acido facilmente idrolizzabile e disintegrabile, e hanno lo scopo di testare l'aspetto critico del modello finalizzato al controllo del sistema di digestione anaerobica, cioè la destabilizzazione da acidità. Per incrementare l'acidità nel reattore si piloteranno gli ingressi $S_{va,in}$, $S_{bu,in}$, $S_{pro,in}$ e $S_{ac,in}$ fornendo una variazione a scalino all'istante iniziale di simulazione. L'entità della variazione a scalino sarà specificata in seguito e sarà pesata diversamente sui diversi ingressi: 0.1*scalino su $S_{va,in}$, $S_{bu,in}$,

$S_{pro,in}$ e $0.7 \cdot S_{ac,in}$. Per brevità di trattazione non sarà riportato il confronto fra il modello ADM1 e ADMS con uno scalino sulla concentrazione di acido presente nel reattore tale da innescare l'instabilità per acidità nel modello ADM1. Questo in quanto, come vedremo, il modello ADMS rileva per primo la destabilizzazione per acidità e quindi, sotto ipotesi di sistema controllato, quest'area non sarà d'interesse modellistico perché al di fuori del campo operativo del sistema.

2.4.1 Scalino sotto il limite d'instabilità per acidità

Attraverso Dymola si è eseguita una simulazione dei modelli ADM1 e ADMS sottoposti a uno scalino sull'acido dell'entità di 3 ordini di grandezza rispetto al valore nominale. In Figura 2.9 si riporta l'andamento del confronto fra ADM1 (curva rossa) e ADMS (curva nera) dei substrati acidi.

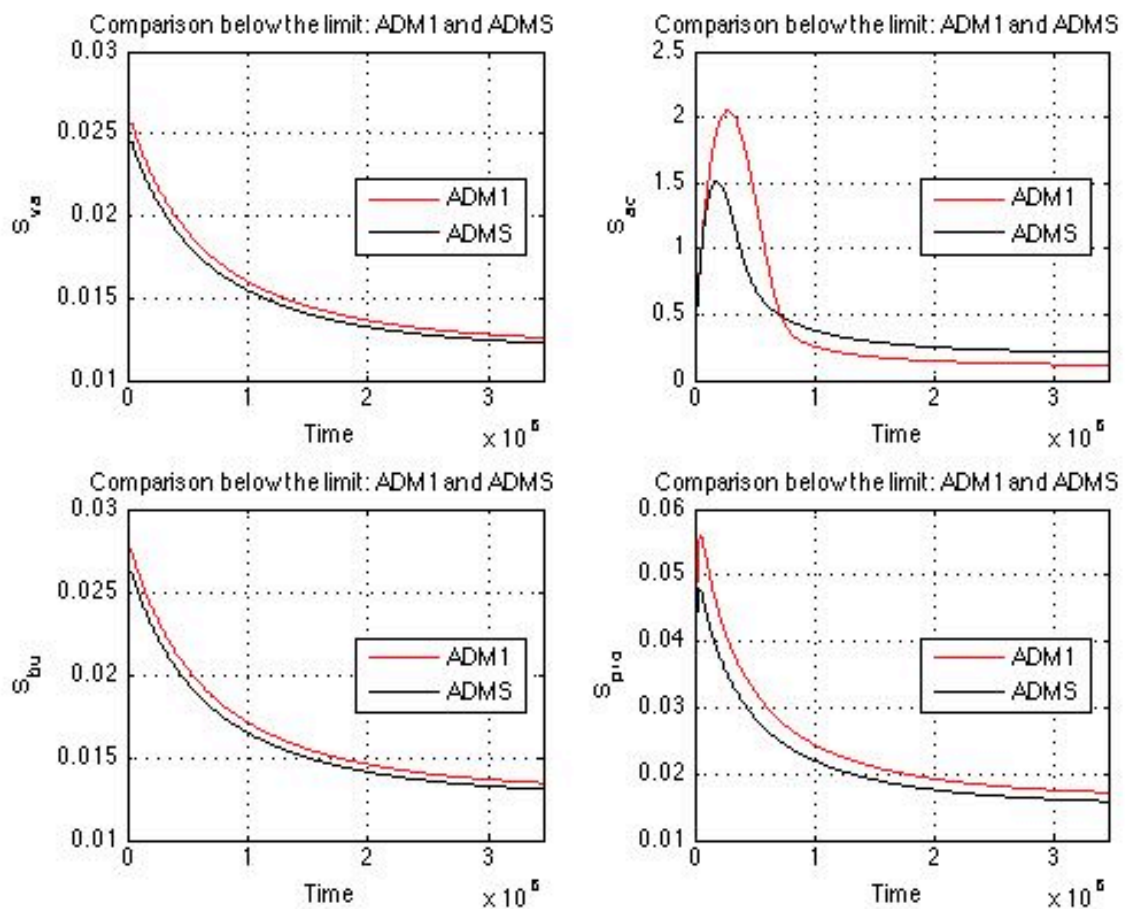


Figura 2.9 – Confronto substrati acidi ADM1 e ADMS sotto il limite di destabilizzazione

Osservando la Figura 2.9 si nota che l'andamento della dinamica dei substrati acidi, cioè S_{va} , S_{bu} , S_{pro} e S_{ac} , è riprodotto, a meno di un errore dal modello ADMS. Questo errore potrà essere successivamente colmato tramite un'opportuna fase d'identificazione dei parametri dell'ADMS.

Osservando la Figura 2.10, in cui sono riportate con una linea rossa le grandezze simulate dell'ADM1 e con una linea nera le grandezze simulate per l'ADMS, si nota che l'andamento delle curve di S_{CH4} e $\rho_{T,2}$, le quali servono per calcolare la portata di metano, sono riprodotte a meno di un errore dall'ADMS. Per ciò anche in questo caso sarà necessaria un'opportuna identificazione dei parametri del modello ADMS per colmare la differenza fra i valori dei due andamenti. Sempre osservando la figura Figura 2.10 si nota che il comportamento di I_{11} del modello ADMS (curva nera), dopo un transitorio, si discosta inferiormente dall' I_{11} del modello ADM1 (curva rossa). Questo comportamento mostra che il modello ADMS fa una stima pessimistica della destabilizzazione in quanto più il fattore d'inibizione è prossimo allo zero più il sistema è prossimo alla destabilizzazione. Questo comportamento è utile ai fini del controllo in quanto questo dovrà intervenire prima che la destabilizzazione si manifesti.

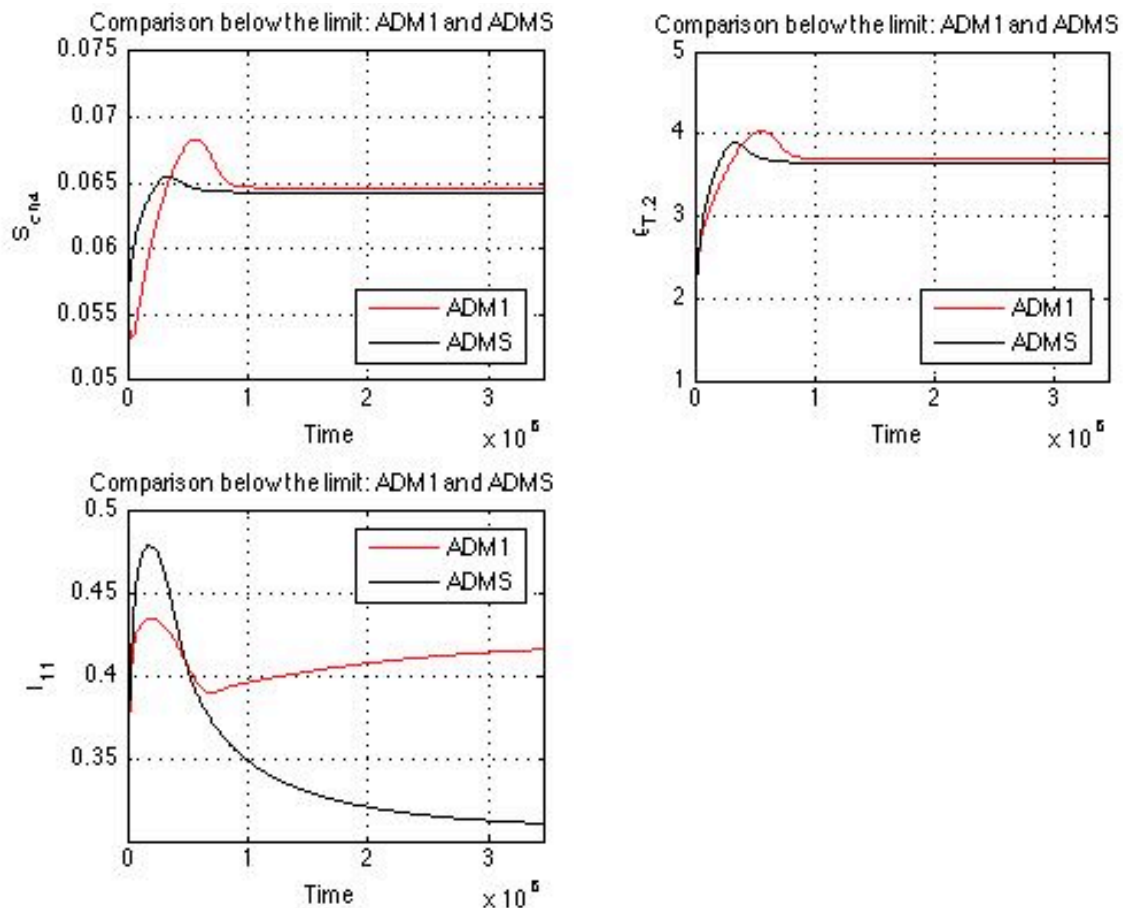


Figura 2.10 - Confronto S_{CH4} , $\rho_{T,2}$ e I_{11} ADM1 e ADMS sotto il limite di destabilizzazione

2.4.2 Scalino al limite d'instabilità per acidità

Sempre attraverso Dymola si è eseguita una simulazione dei modelli ADM1 e ADMS sottoposti a uno scalino sull'acido dell'entità di 10 ordini di grandezza rispetto al valore nominale. In Figura 2.11 si riporta l'andamento del confronto fra ADM1 (curva rossa) e ADMS (curva nera).

Osservando la Figura 2.11 si nota che la curva dei substrati S_{va} , S_{bu} e S_{pro} è riprodotto dal modello ADMS a meno di un errore (ridotto rispetto al caso precedente). Invece S_{ac} del modello ADMS (curva nera) si discosta superiormente da S_{ac} del modello ADM1 (curva rossa), questo perché il modello ADMS ha già segnalato la destabilizzazione per acidità. Il comportamento del modello ADMS è da ritenersi ugualmente accettabile perché si presuppone che grazie al controllo non si supererà la soglia di destabilizzazione.

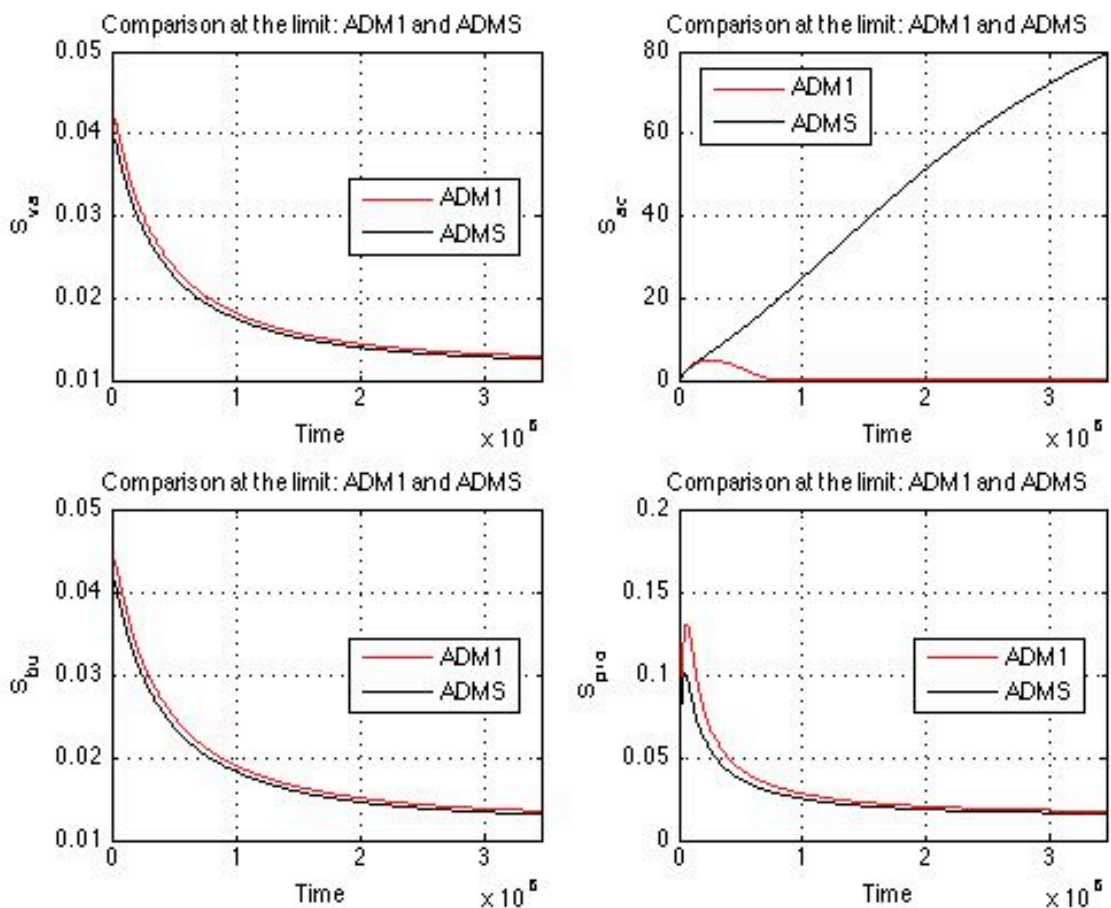


Figura 2.11 - Confronto substrati acidi ADM1 e ADMS al limite di destabilizzazione

Osservando la Figura 2.12 si vede che l'andamento della concentrazione di S_{CH4} e del valore di $\rho_{T,2}$ (linea nera) e quindi le conseguente produzione di metano sono crollati rispetto al modello ADM1

(linea rossa), il che è un altro sintomo del fatto che il modello ADMS coglie in anticipo l'imminente destabilizzazione del modello ADM1. L'andamento del fattore d'inibizione I_{II} dell'ADMS (linea nera) a fine di un transitorio è prossimo allo zero, anche questo comportamento chiarisce che il sistema ADMS ha superato il limite di destabilizzazione. È bene tornare a sottolineare che il comportamento del modello semplificato è da ritenere accettabile in quanto sarà compito del controllore intervenire prima che si manifesti quanto osservato in Figura 2.12 e portare il modello di digestione anaerobica nell'opportuna regione operativa.

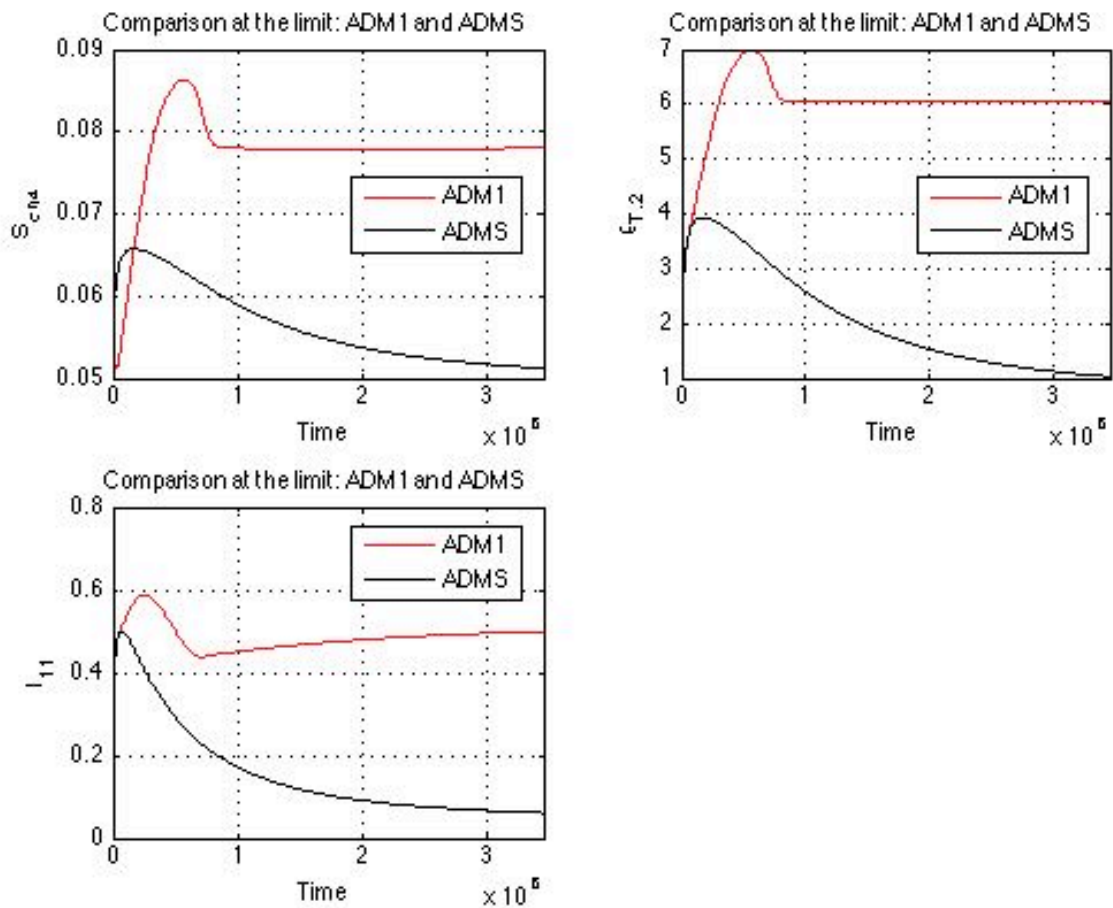


Figura 2.12 - Confronto S_{CH_4} , $\rho_{T,2}$ e I_{II} ADM1 e ADMS al limite di destabilizzazione

3. Trasformazione in forma lineare frazionaria (LFT) di un modello acausale

3.1.1 Principio della forma LFT

Si consideri una semplice relazione ingresso-uscita del tipo:

$$y(t) = \frac{1}{a} u(t) \quad (3.1)$$

dove a un parametro non noto. In questo caso l'identificazione del parametro è banale sebbene la dipendenza dal parametro stesso sia non lineare. Applicando alla (3.1) una trasformazione in forma LFT è possibile rendere lineare la dipendenza del parametro da identificare.

Si consideri il seguente sistema lineare:

$$\begin{bmatrix} z(t) \\ y(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w(t) \\ u(t) \end{bmatrix} \quad (3.2)$$

$$w(t) = k z(t)$$

Cioè:

$$\begin{aligned} z(t) &= a_{11}w(t) + a_{12}u(t) \\ y(t) &= a_{21}w(t) + a_{22}u(t) \\ w(t) &= k z(t) \end{aligned} \quad (3.3)$$

Dove $a_{11}, a_{12}, a_{21}, a_{22}$ e k sono parametri. Il (3.3) può essere rappresentato anche come in Figura 3.1.

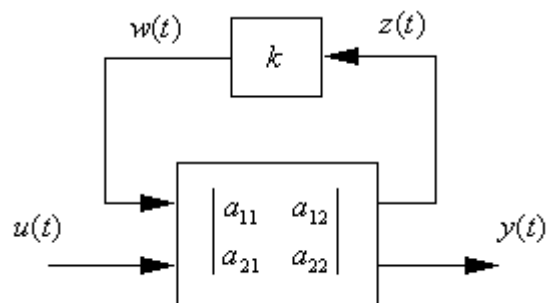


Figura 3.1 – Schema a blocchi sistema lineare retroazionato.

Il sistema (3.3) determina la seguente relazione ingresso-uscita:

$$y(t) = \left[a_{21}k \frac{a_{12}}{1 - a_{11}k} + a_{22} \right] u(t) \quad (3.4)$$

Nel caso in cui $y(t)$ e $u(t)$ fossero vettori si avrebbe:

$$y(t) = \left[A_{21}K \frac{A_{12}}{1 - A_{11}K} + A_{22} \right] u(t) \quad (3.5)$$

Dove K è composta da termini non noti, mentre le matrici $A_{11,12,21,22}$ sono note. Raggruppando quest'ultime nella matrice M così definita:

$$M = \begin{vmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{vmatrix} \quad (3.6)$$

è possibile definire la funzione che lega ingresso e uscita del sistema (3.5) nel modo seguente:

$$y(t) = F_{upper}(M, K)u(t) = \left[A_{21}K \frac{A_{12}}{1 - A_{11}K} + A_{22} \right] u(t) \quad (3.7)$$

dove la funzione $F_{upper}(M, K)$ viene denominata *Upper Function* [12], che ha come argomenti:

- M , cioè la matrice che raggruppa i parametri noti, che compare nel blocco di andata nello schema a blocchi equivalente del sistema ingresso-uscita (vedi Figura 3.1);
- K , cioè la matrice che raggruppa i parametri non noti, che compare nel blocco di retroazione nello schema a blocchi equivalente del sistema ingresso-uscita (vedi Figura 3.1).

In base al lemma di inversione di matrice, l'inversa della Upper Function è data da:

$$F_{upper}(M, K)^{-1} = -A_{22}^{-1}A_{21}K \left[I - (A_{11} - A_{12}A_{22}^{-1}A_{21})K \right]^{-1} A_{12}A_{22}^{-1} + A_{22}^{-1} \quad (3.8)$$

Per cui definendo un sistema che abbia la (3.8) come Upper Function del tipo:

$$F_{upper}(\tilde{M}, \tilde{K}) = \left[\tilde{A}_{21}\tilde{K} \frac{\tilde{A}_{12}}{1 - \tilde{A}_{11}\tilde{K}} + \tilde{A}_{22} \right] \quad (3.9)$$

Si dovrà porre:

$$\begin{aligned}
\tilde{A}_{11} &= (A_{11} - A_{12}A_{22}^{-1}A_{21}) & \tilde{A}_{12} &= A_{12}A_{22}^{-1} \\
\tilde{A}_{21} &= -A_{22}^{-1}A_{21} & \tilde{A}_{22} &= A_{22}^{-1} \\
\tilde{K} &= K
\end{aligned} \tag{3.10}$$

In questo modo si ottiene una Upper Function che restituisce a^{-1} come relazione fra ingresso e uscita. Tornando al caso scalare, si avrà per $A_{11}=a_{11}=0$, $A_{22}=a_{22}=a_0$, $A_{12}=A_{21}=a_{12}=a_{21}=1$ e $k=\Delta a$:

$$F_{upper}(\tilde{M}, \tilde{K}) = \left[-\frac{1}{a_0} \Delta a \frac{\frac{1}{a_0}}{1 + \frac{1}{a_0} \Delta a} + \frac{1}{a_0} \right] = \frac{1}{a_0} \left[1 - \frac{\Delta a}{a_0 + \Delta a} \right] = \frac{1}{a_0} \left[\frac{a_0 + \Delta a - \Delta a}{a_0 + \Delta a} \right] = \frac{1}{a_0 + \Delta a} \tag{3.11}$$

oppure, in forma matriciale:

$$\begin{bmatrix} z(t) \\ y(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{1}{a_0} & \frac{1}{a_0} \\ \frac{1}{a_0} & \frac{1}{a_0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w(t) \\ u(t) \end{bmatrix} \tag{3.12}$$

$$w(t) = \Delta a z(t)$$

Si può quindi notare come la dipendenza del parametro da identificare Δa sia divenuta lineare. Il modello nella forma (3.12) si dice in forma LFT, e lo schema a blocchi equivalente è riportato in Figura 3.2.

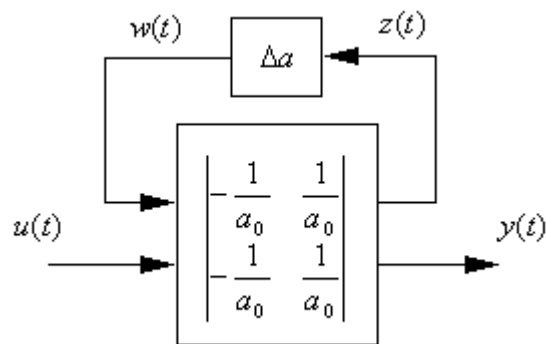


Figura 3.2 -- Schema a blocchi retroazionato per $y(t)=1/au(t)$

3.1.2 La forma generale LFT e i suoi vantaggi

Si consideri ora la forma generale di un sistema dinamico tempo invariante con equazioni di vincolo descritto dal sistema DAE:

$$\begin{aligned} F_0(x_0, \dot{x}_0, v_0, u, p_0) &= 0 \\ p_0 &= G_0(p_0) \end{aligned} \quad (3.13)$$

Dove $F_0(\bullet)$ è una funzione vettoriale, x_0 è il vettore delle variabili dinamiche che appare anche derivato rispetto al tempo, v_0 è il vettore delle variabili algebriche, u è il vettore degli ingressi esogeni al sistema, p_0 è il vettore dei parametri del sistema e $G_0(\bullet)$ è la funzione vettoriale che esprime i vincoli dei parametri con un valore numerico oppure con una funzione di altri parametri.

La rappresentazione LFT del sistema (3.13) è esprimibile dal sistema di equazioni [7]:

$$\begin{aligned} \dot{x} &= Ax + B_1 w + B_2 \zeta + B_3 u \\ z &= C_1 x + D_{11} w + D_{12} \zeta + D_{13} u \\ \omega &= C_2 x + D_{21} w + D_{22} \zeta + D_{23} u \\ y &= C_3 x + D_{31} w + D_{32} \zeta + D_{33} u \\ w &= \text{diag}\{\delta_1 I_{r_1}, \dots, \delta_q I_{r_q}\} z = \Delta z \\ \zeta &= \Theta(\omega) \end{aligned} \quad (3.14)$$

Dove le lettere maiuscole indicano le opportune matrici, i δ_j sono i q parametri non noti e r_j sono le dimensioni delle corrispondenti matrici d'identità nel blocco Δ ($j = 1, \dots, q$). La struttura di $\Theta(\omega)$ è tale che dati gli ingressi ω e ζ possono essere partizionati in m_f sotto-vettori ω_i e ζ_i , tali che $\zeta_i = \Theta_i(\omega_i)$. Per meglio comprendere la struttura del sistema (3.14) si riporta il suo schema a blocchi in Figura 3.3.

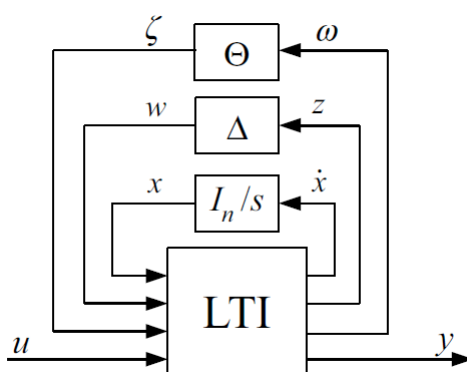


Figura 3.3 – Generica forma LFT di un sistema DAE

Osservando la Figura 3.3 si può notare che il sistema (3.14) è composto da:

- Un sistema LTI in linea di andata. Questo è formato dalle prime 4 equazioni del sistema (3.14) e contiene solo parametri noti o i valori medi noti dei parametri incerti.
- Il blocco di retroazione Δ contiene tutti i parametri da identificare o la parte non nota da identificare dei parametri (si veda l'analogia con quanto esposto nel sotto paragrafo 3.1.1).
- Il blocco di retroazione Θ contiene le funzioni non lineari nei parametri noti.
- Il blocco I_n/s è il blocco contenente la dinamica (I_n è la matrice identità $n \times n$ dove n è il numero degli stati).

Con un approccio alla modellazione di un processo a scatola grigia orientato al controllo manca integrazione fra i metodi e gli strumenti per la modellazione e simulazione con i metodi e gli strumenti per l'identificazione dei parametri. Inoltre, nel caso di un eventuale applicazione del modello per l'analisi e la sintesi del controllo, la struttura matematica del modello deve essere compatibile con i metodi e gli strumenti per risolvere tali problemi. Sotto questa luce si comprende l'importanza della forma LFT la quale colma gli aspetti critici appena elencati poiché fornisce una struttura orientata al controllo e all'identificazione per modelli matematici ottenuti con un approccio a scatola grigia.

3.1.3 Da un modello acausale alla sua rappresentazione LFT

Derivare il modello (3.14) dalla forma (3.13) è un processo non banale e a forte rischio di errori, se fatto manualmente, verrà quindi illustrato un metodo automatico per ottenere una rappresentazione LFT a partire da un modello descritto nel linguaggio object-oriented (O-O) Modelica. Si suppone inoltre che il modello O-O sia corredato da una lista di parametri incerti, definiti da un valore nominale e da un valore minimo e massimo. Questa informazione può essere fornita separatamente dal modello Modelica, o integrata nel modello Modelica mediante gli attributi *min/max/nominal* o con una nota apposita per segnalare i parametri incerti.

Di seguito sarà descritta la traccia dell'algoritmo che porta a ottenere una rappresentazione LFT di un modello O-O Modelica.

Manipolazione preliminare con il compilatore Modelica

I primi passi devono essere svolti con il compilatore Modelica, e sono simili ai passi che normalmente sono eseguiti dal compilatore Modelica per produrre il codice di simulazione. La

rappresentazione O-O del sistema è resa *flat*, cioè è ridotta a un unico modello senza nessuna struttura gerarchica, sia in termini di aggregazione sia in termini di ereditarietà lungo i sotto-modelli. Il modello in forma flat è equivalente al sistema DAE (3.13), la cui seconda equazione assumiamo non contenere alcuna equazione implicita o dipendenza ciclica dagli altri parametri, in questo modo può essere risolta con un opportuno riordinamento delle corrispondenti equazioni scalari. La prima equazione del sistema (3.13) può avere un indice strutturale maggiore di uno, in questo caso è possibile trasformarla in modo da ottenere una formulazione di indice 1 equivalente, applicando l'algoritmo di Pantelides e quello delle derivate fittizie di Mattsson e Söderlind [12]. Il risultato della manipolazione della prima equazione del sistema (3.13) è un sistema DAE con indice (strutturale) 1 del tipo:

$$F(x, \dot{x}, v, u, p_0) = 0 \quad (3.15)$$

Dove il vettore x può essere definito vettore delle variabili di stato e non più vettore delle variabili dinamiche, mentre il vettore delle variabili algebriche v contiene anche le variabili fittizie. Ad ogni istante di tempo, il valore degli stati e degli ingressi sono noti; i valori dei parametri p_0 non sono noti esplicitamente, ma possono essere considerati come noti, data l'equazione di vincolo $G_0(\bullet)$ del sistema (3.13). Per questo motivo, per maggiore chiarezza espositiva, tale equazione può essere momentaneamente tralasciata. L'obiettivo è calcolare l'insieme degli ignoti del sistema, cioè il vettore delle derivate delle variabili di stato \dot{x} e il vettore delle variabili algebriche v . A tal fine le equazioni del problema (3.15) possono essere riordinate in modo che la matrice d'incidenza (equazioni sulle righe e variabili non note sulle colonne vedi esempio di Figura 3.4) sia trasformata nella forma triangolare bassa a blocchi (BLT).

X				
X	X			
X		X	X	
	X	X	X	
			X	X

Figura 3.4 – Esempio di matrice d'incidenza in forma BLT

Questo passaggio è effettuato usando l'algoritmo di Tarjan [14], applicato al grafo bipartito equazioni-variabili, equivalente alla matrice d'incidenza del sistema. Dopo il riordinamento il sistema (3.15) può essere formulato come:

$$\Phi(x, u, \Xi, p_0) = 0 \quad (3.16)$$

Dove $\Phi(\bullet)$ è l'insieme delle equazioni riordinate e Ξ è l'insieme riordinato delle incognite del sistema (3.15) (cioè tutti gli elementi dei vettori \dot{x} e v). La matrice BLT sarà composta da q blocchi diagonali, si può quindi definire $\Phi_j(\bullet)$ come il j -esimo sottoinsieme delle equazioni di uno di questi blocchi e Ξ_j il corrispondente sottoinsieme di incognite del blocco considerato. In questo modo il sistema (3.16) può essere riscritto nel seguente modo:

$$\Phi_j(x, u, \Xi_1, \dots, \Xi_{j-1}, \Xi_j, p_0) = 0 \quad \text{per } j = 1, \dots, q \quad (3.17)$$

Il sistema (3.17) può essere esportato dal compilatore Modelica ed essere importato in un ambiente che supporta la manipolazione simbolica di modelli LFT (ad esempio Matlab).

Riformulazione ricorsiva delle equazioni del sistema

Il primo passo della trasformazione in forma LFT consiste nel portare le equazioni in una forma che dipende esplicitamente dai parametri incerti del vettore p , i cui elementi sono un sottoinsieme degli elementi del vettore p_0 ; questa operazione può essere effettuata usando uno strumento di manipolazione simbolica. Le equazioni di vincolo corrispondenti a parametri incerti p sono rimosse dalla seconda equazione del sistema (3.13), gli elementi di p sono definiti come oggetti simbolici, e le rimanenti equazioni sono risolte per secondo i parametri rimanenti, che saranno dati da valori numerici o da espressioni simboliche dipendenti dagli elementi di p . Queste espressioni possono essere simbolicamente sostituite nelle equazioni del sistema (3.17), in questo modo la funzione Φ_j può essere ridefinita in modo da dipendere solo dai parametri incerti p :

$$\Phi_j(x, u, \Xi_1, \dots, \Xi_{j-1}, \Xi_j, p) = 0 \quad \text{per } j = 1, \dots, q \quad (3.18)$$

Data la struttura triangolare a blocchi del sistema, è possibile (almeno in principio) risolvere localmente le equazioni (3.18) in sequenza, così concettualmente il sistema è portato nella forma:

$$\Xi_j = \Psi_j(x, u, \Xi_1, \dots, \Xi_{j-1}, p) \quad \text{per } j = 1, \dots, q \quad (3.19)$$

È poi possibile raggruppare tutti gli argomenti di ingresso di ogni funzione $\Psi_j(\bullet)$ (eccetto i parametri incerti p) in un vettore:

$$X_j = \begin{bmatrix} x^T & u^T & \Xi_1^T & \dots & \Xi_{j-1}^T \end{bmatrix}^T \quad (3.20)$$

Le equazioni derivate da modelli O-O sono caratterizzate da sparsità elevata, così ogni funzione $\Psi_j(X_j, p)$ dipenderà solo da pochi elementi del vettore X_j . Questo può essere sfruttato ridefinendo le funzioni $\Psi_j(\bullet)$ come funzioni dei vettori Σ_j , contenenti elementi di X_j che compaiono esplicitamente come argomenti d'ingresso della funzione:

$$\Xi_j = \Psi_j(\Sigma_j, p) \quad \text{per } j = 1, \dots, q \quad (3.21)$$

La relazione fra Σ_j e X_j è data dall'ideale matrice di selezione (cioè una matrice che contiene solo zeri e uni) S_j :

$$\Sigma_j = S_j X_j \quad (3.22)$$

È ora possibile formulare il sistema (3.16) in forma ricorsiva:

$$X_1 = \begin{bmatrix} x \\ u \end{bmatrix}, \quad X_{j+1} = \begin{bmatrix} X_j \\ \Psi_j(S_j X_j, p) \end{bmatrix} \quad \text{per } j = 1, \dots, q \quad (3.23)$$

Quest'ultimo è rappresentato in Figura 3.5. Qui, si nota che l'uscita di un sottosistema è l'ingresso del successivo.

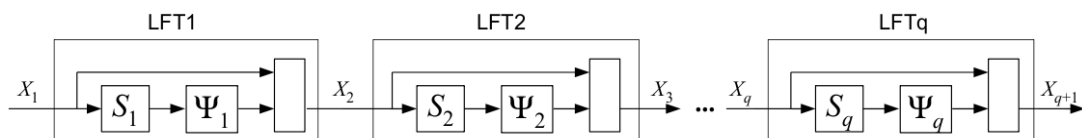


Figura 3.5 – Rappresentazione con uno schema a blocchi del sistema DAE in forma ricorsiva¹⁷¹

Costruzione della rappresentazione LFT

Le relazioni funzionali espresse dalle funzioni $\Psi_j(\Sigma_j, p)$ possono essere sia lineari che non lineari rispetto all'argomento d'ingresso Σ_j . Nel caso di relazioni lineari, i cui coefficienti sono funzioni razionali nei parametri incerti p , il blocco Ψ_j può essere interpretato come una istanza di un sistema LFT (3.14) con un opportuno blocco Δ , senza dinamica e senza blocchi di funzione di retroazione

non lineare. Nel caso di relazioni non lineari, assumendo che queste non coinvolgano i parametri incerti p , queste possono essere rappresentate come un'istanza di un sistema LFT (3.14), in cui le funzioni $\Psi_j(\Sigma_j)$ costituiscono un blocco non lineare $\Theta(\bullet)$, senza dinamica e blocco Δ e con le equazioni banali $\omega = u$ e $y = \xi$.

È poi possibile costruire la forma LFT dall'ingresso X_l fino all'uscita X_q attraverso la connessione in serie ricorsiva e la concatenazione vettoriale verticale, come suggerito dall'equazione (3.23) e la Figura 3.5. Questa operazione è supportata dal toolbox LFR [15] di Matlab. Il modello LFT ottenuto finora conterrà un blocco Δ e un blocco Θ ma non ancora il blocco della dinamica. È ora

possibile ottenere una forma LFT dall'ingresso $\tilde{u} = \begin{bmatrix} x \\ u \end{bmatrix}$ all'uscita $\tilde{y} = \begin{bmatrix} \dot{x} \\ y \end{bmatrix}$ selezionando le righe

della matrice corrispondenti agli elementi di \dot{x} e y all'interno di X_q , e riordinandole di conseguenza. Infine, è possibile applicare gli algoritmi di riduzione dell'ordine, disponibili nell'LFR Toolbox, per ottenere un LFT equivalente avente il blocco Δ più piccolo possibile. Dopo questo passo il sistema LFT risultante avrà la forma:

$$\begin{aligned}
 z &= D_{11}w + D_{12}\xi + D_{13}\tilde{u} \\
 \omega &= D_{21}w + D_{22}\xi + D_{23}\tilde{u} \\
 \tilde{y} &= D_{31}w + D_{32}\xi + D_{33}\tilde{u} \\
 w &= \text{diag}\{\delta_1 I_{r_1}, \dots, \delta_q I_{r_q}\}z = \Delta z \\
 \xi &= \Theta(\omega)
 \end{aligned} \tag{3.24}$$

Il sistema (3.24) può essere riformulato nella forma LFT standard (3.14), comprensiva di blocco di retroazione dinamico, attraverso un corretto riordinamento della matrici.

4. Identificazione del modello AMOCO

4.1 Identificazione nello spazio di stato, metodo Output-Error

In questo paragrafo saranno presentati i principi del metodo della “Massima Verosimiglianza” per l’identificazione dei parametri di modelli espressi in forma di spazio di stato la cui struttura è la seguente:

$$\begin{aligned} \dot{x} &= F(x(t), u(t), \delta_0) & x(0) &= x_0 \\ y(t) &= G(x(t), u(t), \delta_0) \\ y_{mis}(t) &= y(t) + v(t) & v(t) &= WN(0, \lambda^2) \quad \lambda^2 = 1 \end{aligned} \quad (4.1)$$

Dove si suppone che la funzione di stato $F(\bullet)$ e quella d’uscita $G(\bullet)$ siano note e quindi non contengono termini di disturbo che terrebbero conto di eventuali dettagli non modellati. L’unico termine di rumore è presente sull’uscita misurata $y_{mis}(t)$ ed è un rumore bianco $v(t)$ assunto, senza perdere di generalità di trattazione, con media nulla e varianza pari a 1. Si supponga di disporre della storia temporale dell’ingresso $u(t)$ e dell’uscita $y(t)$ su un dato periodo di osservazione T . Si supponga inoltre che alcuni parametri del modello (4.1) siano noti con certezza mentre altri, che indicheremo con δ (il cui valore esatto è δ_0), siano noti con incertezza.

L’obiettivo dell’identificazione è di determinare i parametri, che indicheremo con $\hat{\delta}$ tali per cui la simulazione del modello (4.1) approssima al meglio la storia dell’uscita nei parametri incogniti $y(t, \delta_0)$ sul periodo T . Si omette la trattazione stocastica del problema, per approfondimenti si rimanda a [16].

Si definisca l’errore:

$$e(t) = y_{mis}(t, \delta_0) - y(t, \delta) \quad (4.2)$$

Dove $y_{mis}(t, \delta_0)$ per $1 \leq t \leq T$ è la storia temporale dell’uscita misurata associata ai parametri esatti e soggetta a rumore, mentre $y(t, \delta_0)$ per $1 \leq t \leq T$ è la storia temporale dell’uscita simulata con i parametri approssimanti δ . Con l’errore si può costruire la cifra di merito quadratica del tipo:

$$J(\delta) = \frac{1}{2} \langle e(t, \delta), e(t, \delta) \rangle = \frac{1}{2} \frac{1}{N} \sum_{t=1}^T e(t, \delta) e(t, \delta) \quad (4.3)$$

Dove l'operatore $\langle \cdot, \cdot \rangle$ sta a indicare il prodotto scalare e $N = 1, 2, \dots, T$ è la lunghezza del periodo di osservazione della storia temporale dell'ingresso e dell'uscita del sistema da identificare .

L'obiettivo dell'identificazione consiste nel determinare il set di parametri $\hat{\delta}$ che minimizzano la (4.3); ipotizzando una generica forma della cifra di merito, si può ricavare la soluzione seguendo i seguenti passi:

- Si approssima la cifra di merito con l'espansione in serie di Taylor troncata al second'ordine e centrata nei parametri approssimanti al passo r -esimo $\delta^{(r)}$:

$$\begin{aligned} V(\delta) &= J(\delta^{(r)}) + \left(\frac{\partial J}{\partial \delta} \Big|_{\delta^{(r)}} \right)' (\delta - \delta^{(r)}) + \frac{1}{2} (\delta - \delta^{(r)})' \left(\frac{\partial^2 J}{\partial \delta^2} \Big|_{\delta^{(r)}} \right) (\delta - \delta^{(r)}) = \\ &= J(\delta^{(r)}) + g(\delta^{(r)})' (\delta - \delta^{(r)}) + \frac{1}{2} (\delta - \delta^{(r)})' H(\delta^{(r)}) (\delta - \delta^{(r)}) \end{aligned} \quad (4.4)$$

Dove:

$$\begin{aligned} g(\delta^{(r)}) &= \left(\frac{\partial J}{\partial \delta} \Big|_{\delta^{(r)}} \right) \\ H(\delta^{(r)}) &= \left(\frac{\partial^2 J}{\partial \delta^2} \Big|_{\delta^{(r)}} \right) \end{aligned} \quad (4.5)$$

sono rispettivamente il gradiente e l'Hessiano calcolati al passo r -esimo.

- Si calcola il minimo della derivata della cifra di merito approssimata, derivando rispetto a δ e uguagliando a zero, in questo modo si ottiene:

$$\frac{\partial V}{\partial \delta} = g(\delta^{(r)})' + (\delta - \delta^{(r)})' H(\delta^{(r)}) = 0 \quad (4.6)$$

- Risolvendo la (4.6) rispetto a δ si ottiene:

$$\delta = \delta^{(r)} - H(\delta^{(r)})^{-1} g(\delta^{(r)})' \quad (4.7)$$

Il valore ottenuto è il valore dei parametri approssimanti al passo $r+1$, ovvero è possibile riscrivere la (4.7) come:

$$\delta^{(r+1)} = \delta^{(r)} - H(\delta^{(r)})^{-1} g(\delta^{(r)})' \quad (4.8)$$

Data una sfera B di raggio R centrata in δ_0 , con δ_0 set di parametri localmente ottimi per l'approssimazione della storia temporale dell'uscita, inizializzando la (4.8) in un punto $\delta^1 \in$

$B(\delta_0, R)$ e applicando ricorsivamente la (4.8), fino a che la norma Euclidea $\|\delta^{(r+1)} - \delta^{(r)}\|_2$ è inferiore a un ε sufficientemente piccolo, si determina il set di parametri ricercati $\hat{\delta}$. Questi ultimi saranno i parametri che approssimano i parametri esatti δ_0 e che minimizzano localmente la cifra di merito (4.3) a meno di un errore $\eta(\varepsilon) = \left| J(\hat{\delta}) - J(\delta_0) \right|$. Disponendo teoricamente di una precisione macchina piccola a piacere si può determinare un errore di approssimazione piccolo a piacere diminuendo il valore di ε , cioè in termini rigorosi $\forall \bar{\eta} > 0, \quad \exists \varepsilon = \eta(\varepsilon) < \bar{\eta}$. È bene precisare che se l'Hessiano è singolare o quasi e quindi non è possibile invertirlo come nella (4.8), bisogna ridurre il numero di parametri da identificare, eliminando quelli associati ai valori singolari più piccoli, in questo modo si ha anche il duplice vantaggio di contenere gli effetti del rumore nei risultati dell'identificazione.

Avendo discusso il principio di identificazione del set di parametri approssimanti $\hat{\delta}$, il gradiente a ogni iterazione r -esima può essere calcolato secondo, secondo la seguente espressione (vedi [12]):

$$g(\delta^{(r)}) = - \left\langle e(t, \delta), \frac{\partial y(t, \delta)}{\partial \delta} \right\rangle_{\delta^{(r)}} \equiv - \frac{1}{N} \sum_{t=1}^T e(t, \delta) \frac{\partial y(t, \delta)}{\partial \delta} \Big|_{\delta^{(r)}} \quad (4.9)$$

L'Hessiano, per ogni iterazione r -esima, può a sua volta essere calcolato in maniera approssimata trascurando i termini del secondo ordine secondo l'espressione (vedi [12]):

$$H(\delta^{(r)}) = - \left\langle \frac{\partial y(t, \delta)}{\partial \delta}, \frac{\partial y(t, \delta)}{\partial \delta} \right\rangle_{\delta^{(r)}} \equiv - \frac{1}{N} \sum_{t=1}^T \frac{\partial e(t, \delta)}{\partial \delta} \frac{\partial e(t, \delta)}{\partial \delta} \Big|_{\delta^{(r)}} \quad (4.10)$$

Guardando la (4.9) e la (4.10) si nota che per iterare la (4.8) è necessario conoscere la storia dell'errore $e(t, \delta) \Big|_{\delta^{(r)}}$, e la storia della derivata dell'errore rispetto al set di parametri $\frac{\partial e(t, \delta)}{\partial \delta} \Big|_{\delta^{(r)}}$

lungo il periodo di osservazione T . Il calcolo della storia della derivata dell'errore $e(t, \delta) \Big|_{\delta^{(r)}}$ è banale in quanto basta applicare la (4.2). Sorgono invece problemi computazionali per calcolare la storia della derivata dell'errore $\frac{\partial e(t, \delta)}{\partial \delta} \Big|_{\delta^{(r)}}$ se la dipendenza da x di $F(\bullet)$ e $G(\bullet)$ è non lineare. Se il

modello (4.1) è in forma LFT è però possibile trovare la storia della derivata dell'errore in maniera

agevole attraverso un filtro appositamente progettato. Nel paragrafo successivo sarà mostrato come ottenerlo.

4.2 Il filtro per modelli in forma LFT

Si supponga che il modello (4.1) sia stato trasformato nella forma equivalente canonica LFT, che si ricorda essere la seguente:

$$\begin{aligned}
 \dot{x} &= Ax + B_1 w + B_2 \zeta + B_3 u \\
 z &= C_1 x + D_{11} w + D_{12} \zeta + D_{13} u \\
 \omega &= C_2 x + D_{21} w + D_{22} \zeta + D_{23} u \\
 y &= C_3 x + D_{31} w + D_{32} \zeta + D_{33} u \\
 w &= \text{diag}\{\delta_1 I_{r_1}, \dots, \delta_q I_{r_q}\} z = \Delta z \\
 \zeta &= \Theta(\omega)
 \end{aligned} \tag{4.11}$$

Derivando le (4.11) rispetto ai parametri da identificare δ , e ricordando che i parametri contenuti nella parte LTI della (4.11) (cioè dalla prima alla quarta equazione) sono tutti noti e che l'ingresso non dipende da δ , si ottiene:

$$\begin{aligned}
 \dot{x}_\delta &= Ax_\delta + B_1 w_\delta + B_2 \zeta_\delta \\
 z_\delta &= C_1 x_\delta + D_{11} w_\delta + D_{12} \zeta_\delta \\
 \omega_\delta &= C_2 x_\delta + D_{21} w_\delta + D_{22} \zeta_\delta \\
 y_\delta &= C_3 x_\delta + D_{31} w_\delta + D_{32} \zeta_\delta \\
 w_\delta &= \text{diag}\{\delta_1 I_{r_1}, \dots, \delta_q I_{r_q}\} z_\delta = \Delta z_\delta \\
 \zeta_\delta &= \frac{\partial \Theta}{\partial \delta} = \frac{\partial \Theta}{\partial \omega} \frac{\partial \Theta}{\partial \delta} = \frac{\partial \Theta}{\partial \omega} \omega_\delta
 \end{aligned} \tag{4.12}$$

Dove per chiarezza espositiva si è indicato con il pedice δ la derivata della grandezza rispetto a δ (cioè $\partial \backslash \partial \delta$).

Il sistema (4.12) è equivalente a un sistema che ha come ingresso $z(t)$ dal sistema (4.11) e ha la seguente struttura (vedi [12]):

$$\begin{aligned}
\dot{x}_\delta &= Ax_\delta + B_1 w_\delta + B_2 \zeta_\delta + B_1 z \\
z_\delta &= C_1 x_\delta + D_{11} w_\delta + D_{12} \zeta_\delta + D_{11} z \\
\omega_\delta &= C_2 x_\delta + D_{21} w_\delta + D_{22} \zeta_\delta + D_{21} z \\
y_\delta &= C_3 x_\delta + D_{31} w_\delta + D_{32} \zeta_\delta + D_{31} z \\
w_\delta &= \text{diag} \{ \delta_1 I_{r_1}, \dots, \delta_q I_{r_q} \} z_\delta = \Delta z_\delta \\
\zeta_\delta &= \frac{\Theta(\omega)}{\partial \omega} \omega_\delta
\end{aligned} \tag{4.13}$$

Ricordando che:

$$e(t) = y_{mis}(t, \delta_0) - y(t, \delta) \tag{4.14}$$

Si può interpretare il filtro come l'insieme delle equazioni (4.12), (4.13), (4.14), le quali possono essere sintetizzate nello schema a blocchi di Figura 4.1.

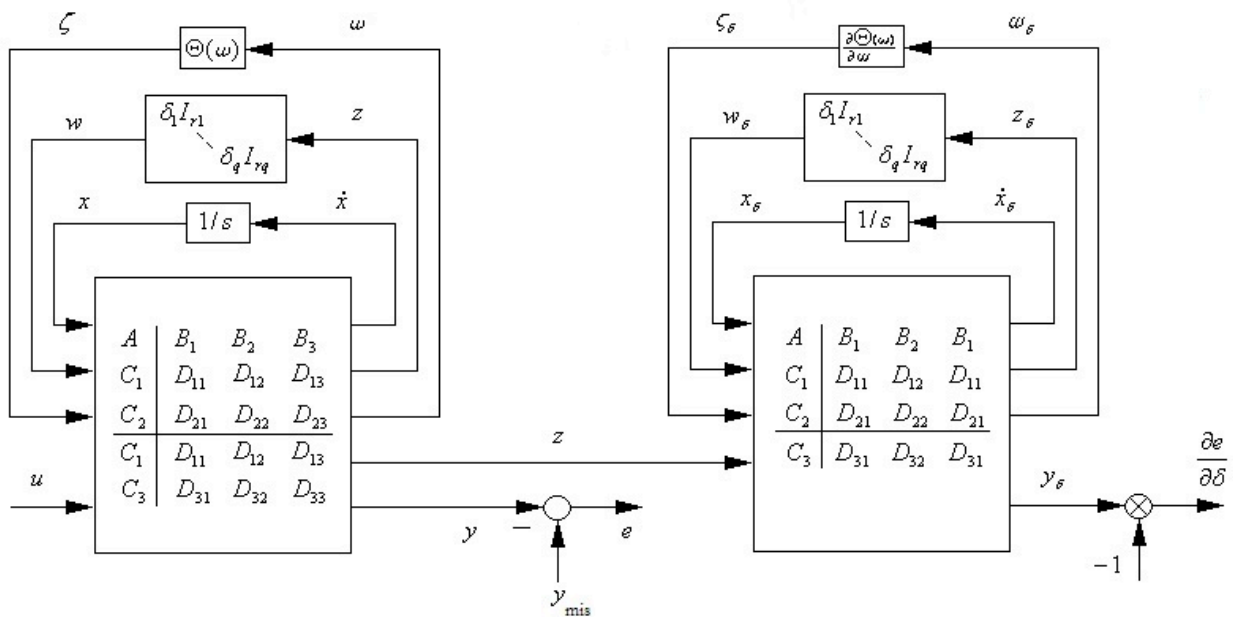


Figura 4.1 – Filtro per un modello in forma LFT

4.3 Test preliminare di identificazione

In questo paragrafo sarà svolto un test per validare l'algoritmo di identificazione di un modello in forma LFT. A tal fine sarà illustrato come attraverso la simulazione del modello AMOCO sarà possibile identificare i parametri del modello AMOCO in forma LFT e con parametri differenti da quello simulato.

4.3.1 Design dell'esperimento di test

È stato simulato, attraverso Dymola il modello AMOCO descritto in linguaggio Modelica e tarato con un set di parametri, identificati in [3], per substrati facilmente disintegrabili e idrolizzabili i cui valori sono riportati in Tabella 5.

Parametro		Valore
μ_{1max}	$[1/d]$	0.206
K_{S1}	$[d/m^3]$	1.096
μ_{2max}	$[1/d]$	0.20
K_{S2}	$[d/m^3]$	6.86
K_{I2}	$[-]$	433968
k_1	$[-]$	15
k_2	$[-]$	198.7
k_3	$[-]$	440.1
α	$[-]$	1
t_{HR}	$[d]$	20

Tabella 5 –Parametri AMOCO

La procedura per trasformare un modello acausale nella sua rappresentazione LFT, espressa nel paragrafo 3.1.3, è stata applicata al modello AMOCO in linguaggio Modelica ottenendo il modello AMOCO LFT. Prima di svolgere l'algoritmo per la trasformazione in forma LFT si è prestato attenzione nell'inserire le opportune variabili ausiliare nella descrizione Modelica del modello, in modo tale da garantire il buon fine della procedura per ottenere la forma LFT (si rimanda all'appendice 6.2 per comprendere come e quando è necessario inserire una variabile ausiliaria in un modello descritto con il linguaggio Modelica).

Fra i parametri del modello AMOCO elencati Tabella 5 si sono considerati noti i parametri riguardanti la stechiometria del processo di digestione anaerobica, cioè k_1 , k_2 e k_3 , il parametro riguardante la mortalità dei batteri per destabilizzazione, cioè K_{I2} , α e il tempo ritenzione idraulica

t_{HR} . Gli altri 4 parametri, strettamente legati al tipo di substrato in ingresso, si possono ritenere incerti e per questi si è definito l'intervallo in cui possono essere identificati (vedi Tabella 6).

Parametro		Valore		
		min	med	max
μ_{1max}	$[1/d]$	0.0206	0.206	0.3914
K_{S1}	$[d/m^3]$	0.5480	1.096	1.6440
μ_{2max}	$[1/d]$	0.020	0.2	0.38
K_{S2}	$[d/m^3]$	3.43	6.86	10.29

Tabella 6 – Intervallo di confidenza parametri non noti per il test di identificazione

Per definire l'intervallo di confidenza di K_{S1} e K_{S2} si sono calcolati gli estremi inferiori e superiori in modo da centrare l'intervallo sui valori riportati in Tabella 5. Per definire l'intervallo di confidenza di μ_{1max} , e μ_{2max} si è definito l'estremo inferiore in modo tale che questo corrisponda a un valore un ordine di grandezza più lento rispetto al valore riportato in Tabella 5 e si è calcolato l'estremo superiore in modo da centrare l'intervallo sul valore di Tabella 5. In questo modo, ricordando che i parametri riportati in Tabella 5 sono quelli del modello simulato e misurato ai fini dell'identificazione con la tecnica di massima verosimiglianza, ci si aspetterà che i valori ottimi di μ_{1max} , K_{S1} , μ_{2max} , K_{S2} del modello AMOCO LFT saranno coincidenti con il valore medio dell'intervallo di confidenza.

È stato definito il valore iniziale dei parametri non noti del modello LFT in modo tale da differire dall'ottimo ricercato e tastare il funzionamento dell'identificazione (vedi Tabella 7).

Parametro	Valore
μ_{1max}	0.15
K_{S1}	1.26
μ_{2max}	0.254
K_{S2}	5.831

Tabella 7 – Valore iniziale dei parametri non noti per il test

Il valore ottimo atteso dei parametri non noti sarà quindi prossimo a quello nominale a meno di un errore d'identificazione dovuto a errori numerici causati dalla precisione macchina.

4.3.2 Design dell'ingresso, della simulazione e delle misure per il test

Per stimolare tutta la catena biologica dell'AMOCO si è agito pilotando l'ingresso $S_{l,in}$ attraverso un'onda a tre gradini (detta anche *sequence doubletes* [16] del tipo 3-2-1-1) di ampiezza 10 volte il valore iniziale di $S_{l,in}$. L'ampiezza è stata scelta tale da non innescare il comportamento di destabilizzazione. La forma d'onda dell'ingresso è un'onda a tre gradini, perché in questo modo è possibile sollecitare adeguatamente il sistema e fornire l'informazione necessaria per identificare i 4 parametri incerti del modello, per ulteriori approfondimenti si rimanda a [16]. L'onda a tre gradini utilizzata è del tipo riportata in Figura 4.2.

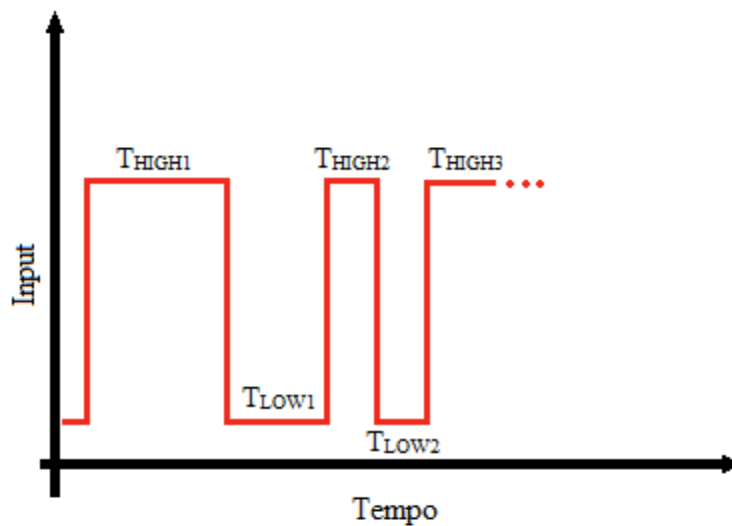


Figura 4.2 – Onda a tre gradini

Dove T_{LOW1} è pari alla metà della costante di tempo dominante del sistema, T_{HIGH3} è scelto in modo arbitrario in base alle esigenze di simulazione e gli altri tempi valgono:

$$\begin{aligned}
 T_{HIGH1} &= 1.5T_{LOW1} \\
 T_{HIGH2} &= 0.5T_{LOW1} \\
 T_{LOW2} &= 0.5T_{LOW1}
 \end{aligned}
 \tag{4.15}$$

La costante di tempo dominante del modello AMOCO è pari a t_{HR} , che nel caso in esame è di 20 giorni, per cui si sono utilizzati i parametri di Tabella 8 per l'onda a tre gradini.

Parametro		Valore
T_{HIGH1}	[d]	15
T_{LOW1}	[d]	$0.5 * t_{HR} = 10$
T_{HIGH2}	[d]	5
T_{LOW2}	[d]	5
T_{HIGH3}	[d]	5

Tabella 8 – Parametri onda a tre gradini

L'onda a tre gradini sull'ingresso pilotato è stata imposta all'istante di tempo $t_{start_in} = 0$, è stato simulato un periodo di tempo lungo tanto quanto la durata dell'onda a tre gradini ($t_{stop} = 40$ giorni) ed è stato scelto un numero di intervalli di simulazione tale da ottenere un campione dei dati misurati ogni ora.

Parametro		Valore
t_{start_in}	[s]	0
t_{stop}	[d]	40
# intervalli	[-]	960

Tabella 9 – Parametri di simulazione

Si suppone che le misure provenienti dal sistema AMOCO simulato, necessarie per la procedura d'identificazione, ovvero S_1 , S_2 , X_1 e X_2 siano affette da un disturbo assimilabile a un rumore bianco gaussiano con rapporto segnale rumore pari a 30dB.

4.3.3 Risultati del test

La Figura 4.3 si riferisce alle variabili del primo anello della catena biologica e mostra il confronto fra la misura della simulazione, ottenuta con Dymola, del modello AMOCO con i parametri nominali (linea nera) con la simulazione, ottenuta tramite Matlab, dello stesso modello AMOCO ma in forma LFT e con i parametri di Tabella 7 (linea nera). Si può notare che gli andamenti dei due

modelli non coincidono, in particolare il modello AMOCO LFT mostra una capacità di digestione del substrato S_1 maggiore.

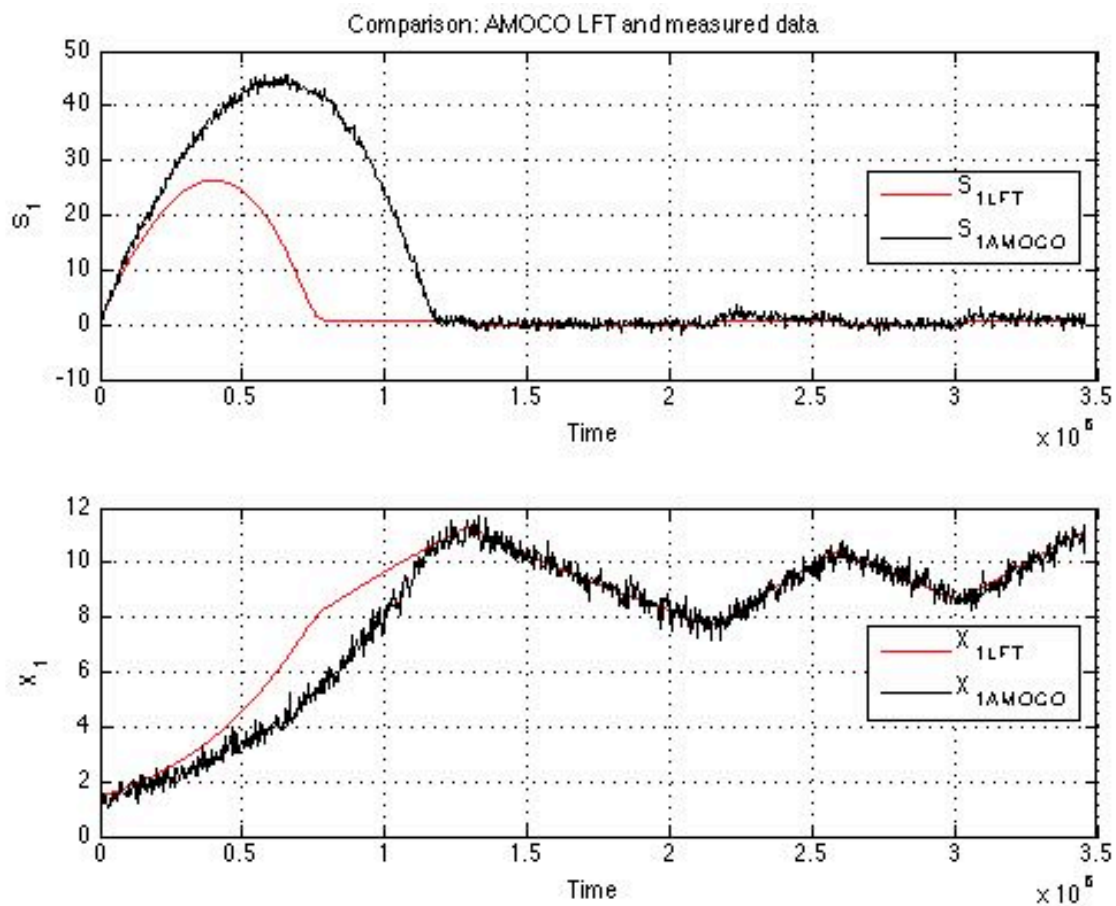


Figura 4.3 – Confronto AMOCO e AMOCO LFT non ottimo: S_1 e X_1

La Figura 4.4 mostra l'analogo confronto fra i modelli AMOCO e AMOCO LFT non ottimo della figura precedente ma si riferisce alle variabili del secondo anello della catena biologica. Anche in questo caso si può notare che l'andamento dei due modelli non coincide e si osserva una sottostimata capacità di digestione del substrato S_2 da parte del modello LFT.

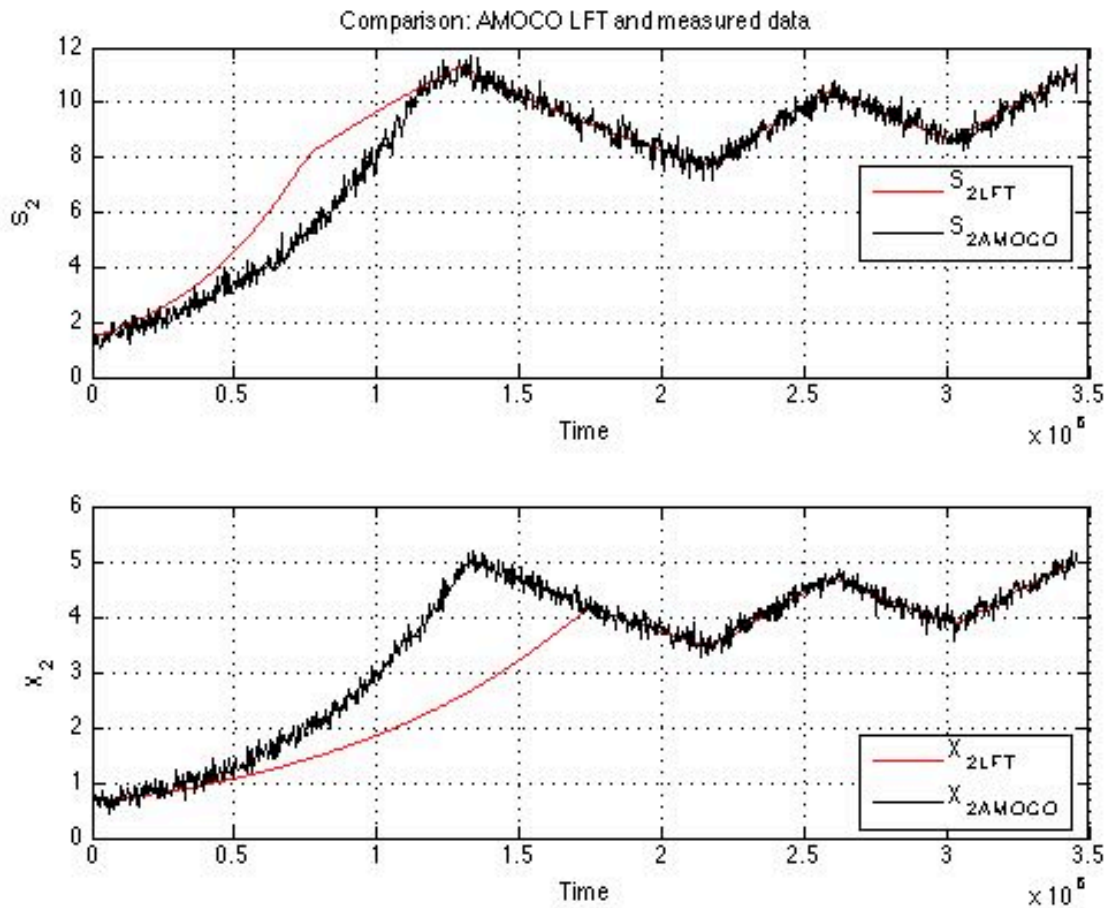


Figura 4.4 Confronto AMOCO e AMOCO LFT non ottimo: S_2 e X_2

Dopo aver portato a termine la procedura di identificazione si riscontra il valore dei parametri non noti riportato in Tabella 10. Come aspettato i valori di $\mu_{1max,OTT}$, $K_{S1,OTT}$, $\mu_{2max,OTT}$ e $K_{S2,OTT}$ si discostano poco dallo dal valore esatto (nominale).

Parametro		Valore ottimo	Valore esatto
$\mu_{1max,OTT}$	$[1/d]$	0.2062	0.206
$K_{S1,OTT}$	$[d/m^3]$	1.0976	1.096
$\mu_{2max,OTT}$	$[1/d]$	0.2011	0.2
$K_{S2,OTT}$	$[d/m^3]$	6.8806	6.86

Tabella 10 - Parametri ottimi AMOCO LFT e valore esatto per il test

Simulando il sistema AMOCO LFT con i parametri ottimi e confrontandolo con i dati misurati dal modello AMOCO, si ottiene per quanto riguarda il primo stadio della catena biologica la Figura 4.5.

Osservano la figura citata in precedenza si nota come il modello AMOCO LFT ottimizzato (curva rossa) ricalca fedelmente l'andamento dell'AMOCO misurato (curva nera).

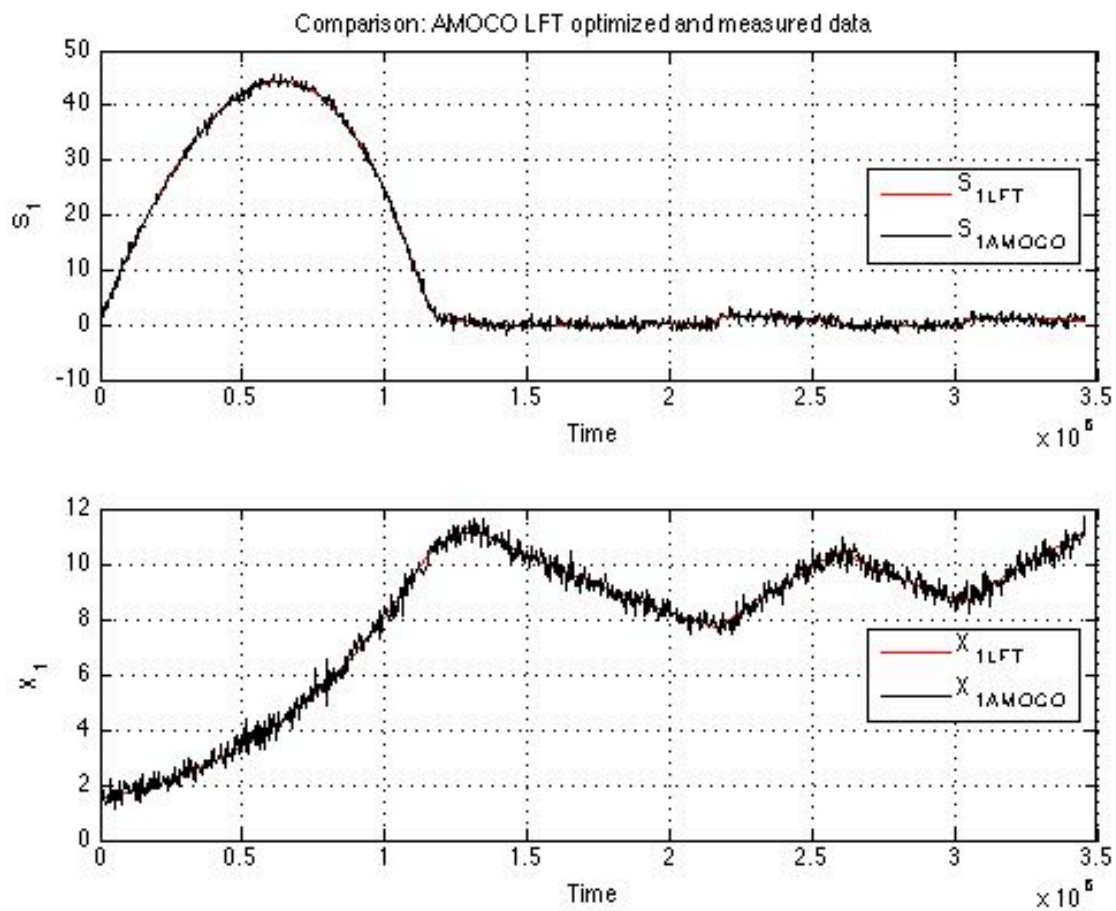


Figura 4.5 – Confronto AMOCO LFT ottimo e AMOCO: S_1 e X_1

Anche il confronto di Figura 4.6, riguardate il secondo anello della catena biologica, fra AMOCO LFT con parametri ottimi (curva rossa) e AMOCO misurato (curva nera) da risultati analoghi a quanto osservato per il primo stadio della catena biologica.

Per quanto mostrato si può ritenere validato il funzionamento dell'algoritmo di identificazione.

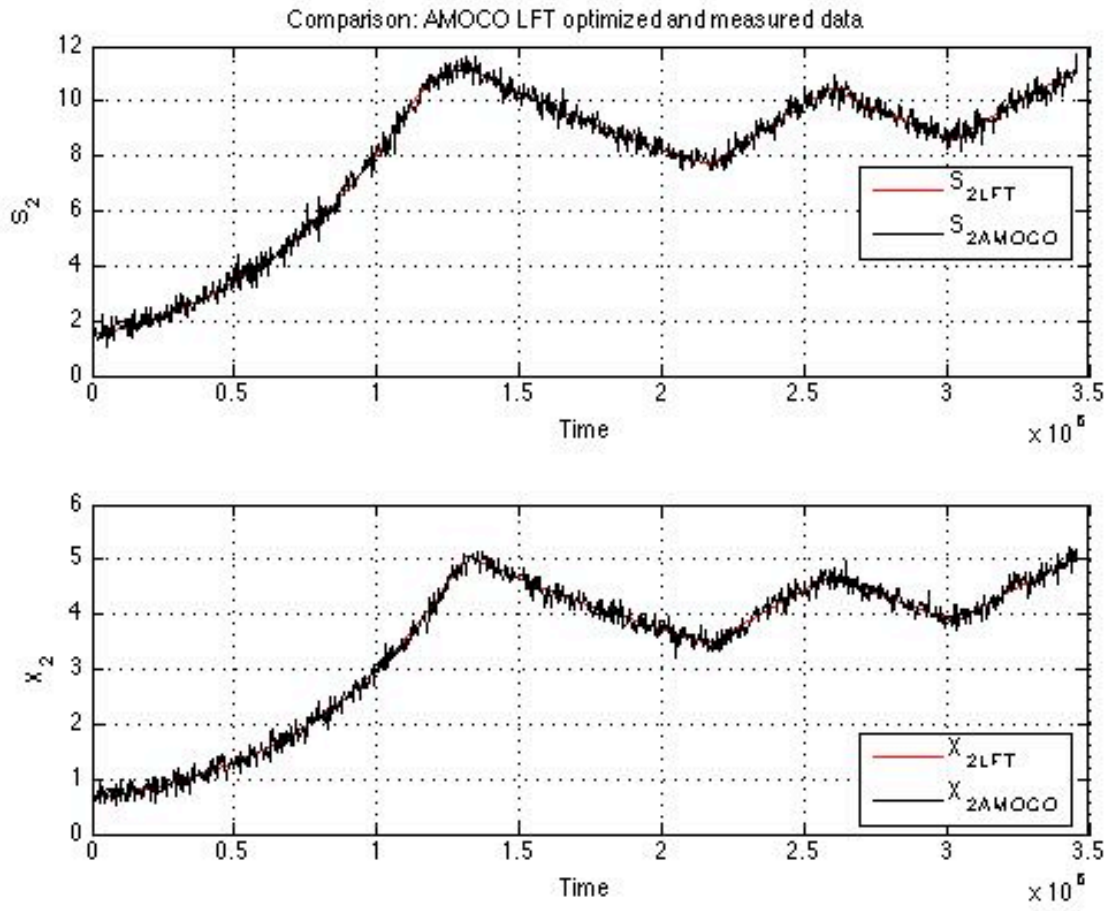


Figura 4.6 - Confronto AMOCO LFT ottimo e AMOCO: S_2 e X_2

4.4 Identificazione del modello AMOCO con misure del modello ADM1

In questo paragrafo sarà illustrata l'identificazione dei parametri del modello AMOCO modificato (4.16) proposto in [2], questo differisce del modello AMOCO descritto dalle equazioni per dei termini correttivi sulle equazioni di bilancio delle biomasse X_1 e X_2 che tengono conto del decadimento dei batteri.

$$\begin{aligned}
\frac{dS_1}{dt} &= \frac{1}{t_{HR}}(S_{1,in} - S_1) - k_1 \mu_{1max} \frac{S_1}{S_1 + K_{S1}} X_1 \\
\frac{dX_1}{dt} &= -\alpha \frac{1}{t_{HR}} X_1 + \mu_{1max} \frac{S_1}{S_1 + K_{S1}} X_1 - c_1 \mu_{1max} X_1 \\
\frac{dS_2}{dt} &= \frac{1}{t_{HR}}(S_{2,in} - S_2) + k_2 \mu_{1max} \frac{S_1}{S_1 + K_{S1}} X_1 - k_3 \mu_{2max} \frac{S_2}{S_2 + K_{S2} + S_2^2 / K_{I2}} X_2 \\
\frac{dX_2}{dt} &= -\alpha \frac{1}{t_{HR}} X_2 + \mu_{2max} \frac{S_2}{S_2 + K_{S2} + S_2^2 / K_{I2}} X_2 - c_2 \mu_{2max} X_2
\end{aligned} \tag{4.16}$$

Dove i nuovi parametri introdotti, detti coefficienti dei fattori correttivi, sono stati considerati noti ed è stato assegnato loro il valore nominale $c_1 = 0.1$ e $c_2 = 0.1$.

L'identificazione sarà basata su dati ottenuti dalla simulazione del modello ADM1 (descritto con un set di parametri per substrati facilmente disintegrabili [2]), il quale si ricorda essere un modello di digestione anaerobica molto più dettagliato di quello da identificare. Il modello AMOCO sarà trasformato LFT e sarà tarato con parametri per trattare substrati difficilmente disintegrabili, sarà mostrato come questo non è in grado di descrivere il processo di digestione anaerobica se è fornito in ingresso un substrato facilmente disintegrabile.

In questo modo è stato riprodotto uno scenario di notevole interesse nel campo della digestione anaerobica, e in particolare della sua regolazione, perché rappresenta una manovra pericolosa che può causare l'arresto dell'intero sistema col conseguente blocco della produzione di metano per mesi.

In seguito sarà mostrato come, grazie all'identificazione dei parametri, è possibile catturare i cambiamenti importanti nelle dinamiche della digestione anaerobica.

4.4.1 Design dell'esperimento d'identificazione

Analogamente a quanto visto nel paragrafo 4.3.1 il modello AMOCO è stato trasformato in forma LFT considerando non noti i soli parametri legati al tipo di substrato in ingresso, cioè μ_{1max} , μ_{2max} , K_{S1} e K_{S2} . Per questi ultimi si è definito l'intervallo in cui possono essere identificati (vedi Tabella 11).

Parametro		Valore		
		min	med	max
μ_{1max}	$[1/d]$	0	0.125	0.25
K_{S1}	$[d/m^3]$	0.5480	1.096	1.6440
μ_{2max}	$[1/d]$	0.020	0.2	0.38
K_{S2}	$[d/m^3]$	3.43	6.86	10.29

Tabella 11 – Intervallo di confidenza parametri non noti per l'identificazione

L'intervallo di confidenza di μ_{2max} , K_{S1} e K_{S2} è stato definito come riportato nel paragrafo 4.3.1, per definire l'intervallo di confidenza di μ_{1max} , ai fini di valutare la bontà del metodo d'identificazione, è stata scelta una strategia differente da quella utilizzata per quanto è stato visto con μ_{2max} . L'intervallo di μ_{1max} è definito in modo tale da contenere nel suo semi-intervallo destro il valore nominale di Tabella 5. In questo modo, ricordando che i parametri nominali sono quelli identificati in [2] per un substrato facilmente disintegrabile, ci si aspetterà che il valore ottimo di μ_{1max} sia spostato nei pressi del limite destro del suo intervallo di confidenza mentre i valori ottimi di μ_{2max} , K_{S1} e K_{S2} si discosteranno poco dal loro valore medio.

È stato definito il valore iniziale dei parametri del modello LFT riportato in Tabella 12.

Parametro	Valore
μ_{1max}	0.025
K_{S1}	1.096
μ_{2max}	0.2
K_{S2}	6.86

Tabella 12 – Valore iniziale normalizzato dei parametri non noti per l'identificazione

Come si può notare da Tabella 12, sempre al fine di testare la bontà dell'identificazione, si è posto il valore iniziale di μ_{1max} nei pressi dell'estremo sinistro del suo intervallo di confidenza. In questo modo si suppone che il sistema AMOCO LFT di partenza sia tarato con parametri per digerire substrati difficilmente disintegrabili, infatti il valore $\mu_{1max} = 0.025$ sta ad indicare una velocità di

disintegrazione di un ordine di grandezza inferiore rispetto ai valori nominali (per substrati facilmente disintegrabili).

4.4.2 Design dell'ingresso, della simulazione e delle misure per l'identificazione

Dato che saranno identificati i parametri AMOCO rispetto alle uscite misurate dal modello considerato esatto, cioè l'ADM1, è necessario aggregare le variabili del modello ADM1, tali variabili sono denotate dal pedice δ e hanno le seguenti espressioni [2]:

$$\begin{aligned}
 S_{1\delta} &= S_{su} + S_{aa} + S_{fa} + X_c + X_{ch} + X_{pr} + X_{li} \\
 S_{1\delta,in} &= S_{su,in} + S_{aa,in} + S_{fa,in} + X_{c,in} + X_{ch,in} + X_{pr,in} + X_{li,in} \\
 X_{1\delta} &= \left(X_{su} + X_{aa} + X_{fa} + X_{c4} + X_{pro} \right) / 1.55 \\
 S_{2\delta} &= \left(\frac{S_{va}}{208} + \frac{S_{bu}}{160} + \frac{S_{pro}}{112} + \frac{S_{ac}}{64} \right) 1000 \\
 S_{2\delta,in} &= \left(\frac{S_{va,in}}{208} + \frac{S_{bu,in}}{160} + \frac{S_{pro,in}}{112} + \frac{S_{ac,in}}{64} \right) 1000 \\
 X_{1\delta} &= \left(X_{ac} + X_{H2} \right) / 1.55
 \end{aligned} \tag{4.17}$$

Per stimolare tutta la catena biologica dell'ADM1 con un substrato facilmente disintegrabile si è scelto di pilotare l'ingresso $X_{c,in}$ con un'onda a tre gradini (discussa nel paragrafo 4.3.2) con ampiezza 10 volte il valore iniziale.

Poiché i modelli AMOCO LFT e ADM1 devono essere sottoposti al medesimo ingresso, il modello in forma LFT sarà pilotato tramite l'ingresso $S_{1\delta,in}$, anziché $S_{1,in}$, questo (come si può notare osservando la seconda equazione delle (4.17)) sarà a sua volta un'onda a tre gradini grazie alla forma d'onda imposta a $X_{c,in}$.

L'ingresso $X_{c,in}$ è stato pilotato con l'onda a 3 gradini all'istante di tempo $t_{start_in} = 0$, è stato simulato un periodo di tempo lungo tanto quanto la durata dell'onda a tre gradini ($t_{stop} = 40$ giorni) ed è stato scelto un numero di intervalli di simulazione tale da ottenere un campione dei dati misurati ogni ora.

Parametro		Valore
t_{start_in}	[s]	0
t_{stop}	[d]	40
# intervalli	[-]	960

Tabella 13 – Parametri di simulazione

Infine si suppone che le misure provenienti dal sistema ADM1, necessarie per la procedura d'identificazione, ovvero $S_1\delta$, $S_2\delta$, $X_1\delta$ e $X_2\delta$ siano affette da un disturbo assimilabile a un rumore bianco gaussiano con rapporto segnale rumore pari a 30dB.

4.4.3 Risultati di identificazione

Simulando il sistema AMOCO LFT con i parametri iniziali e confrontandolo con i dati misurati dal modello ADM1 si ottiene la Figura 4.7, che riporta sull'asse delle ascisse il tempo di simulazione e sull'asse delle ordinate il valore della concentrazione dei substrati e delle biomasse della catena biologica del modello AMOCO.

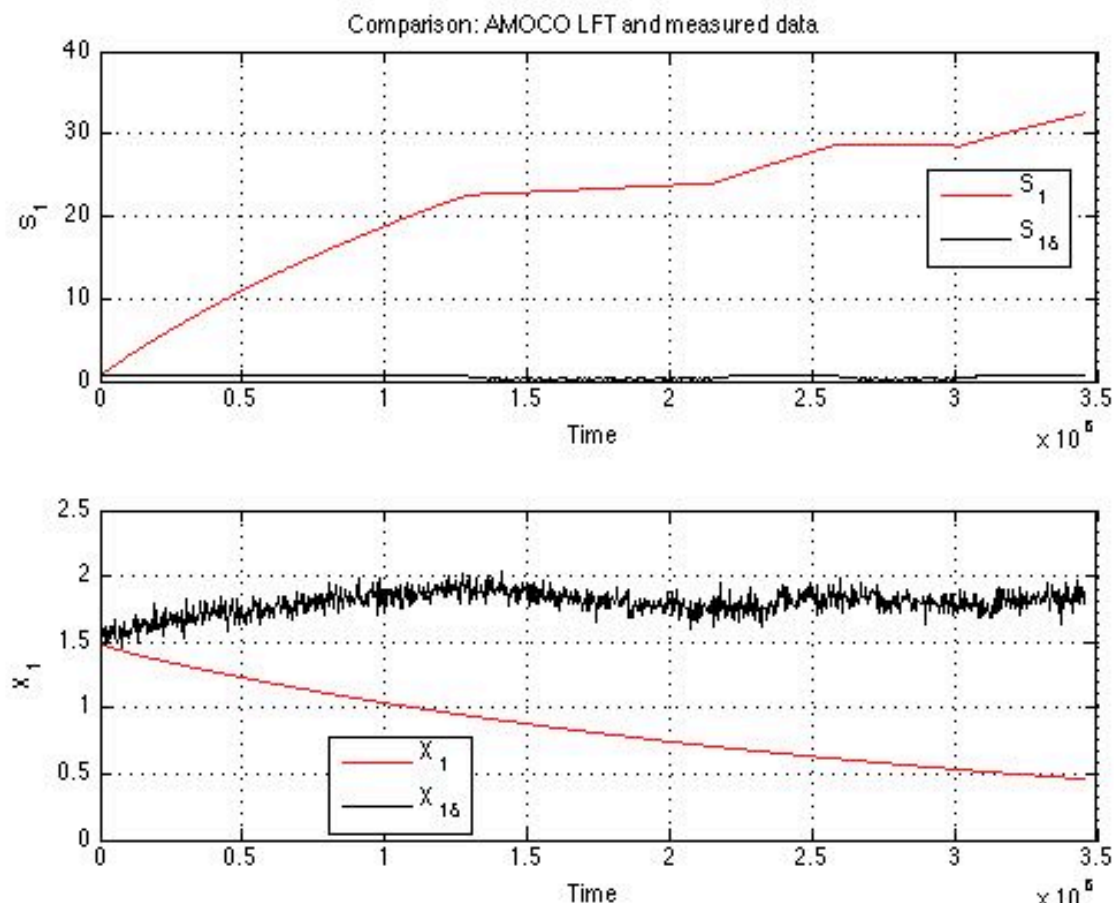


Figura 4.7 – Confronto AMOCO LFT e dati misurati: S_I e X_I

Osservando la Figura 4.7 si nota che, avendo ipotizzato un modello AMOCO con parametri tarati per substrati difficilmente digeribili, il substrato S_I viene lentamente digerito dai batteri associati X_I . Per questo motivo il substrato modellato S_I si accumula nel reattore (curva rossa del grafico superiore) e i batteri modellati X_I (curva rossa del grafico inferiore) si muovono verso il punto di equilibrio dettato dalla poca quantità di substrato che riescono a digerire. Osservando le linee nere, sia del grafico superiore che di quello inferiore, si nota che non c'è nessuna correlazione fra il sistema misurato e quello modellato.

Osservando la Figura 4.8 si nota come gli effetti del primo anello della catena biologica fungono da collo di bottiglia per il secondo anello della catena biologica. Infatti, l'andamento del substrato modellato S_2 e della biomassa modellata X_2 (curve rosse), non riescono a cogliere la dinamica del sistema misurato (curve nere) siccome si adattano alla dinamica lenta dell'anello a monte. Osservando le linee nere, dei due grafici di Figura 4.8, si nota che non c'è nessuna correlazione fra il sistema misurato e quello modellato.

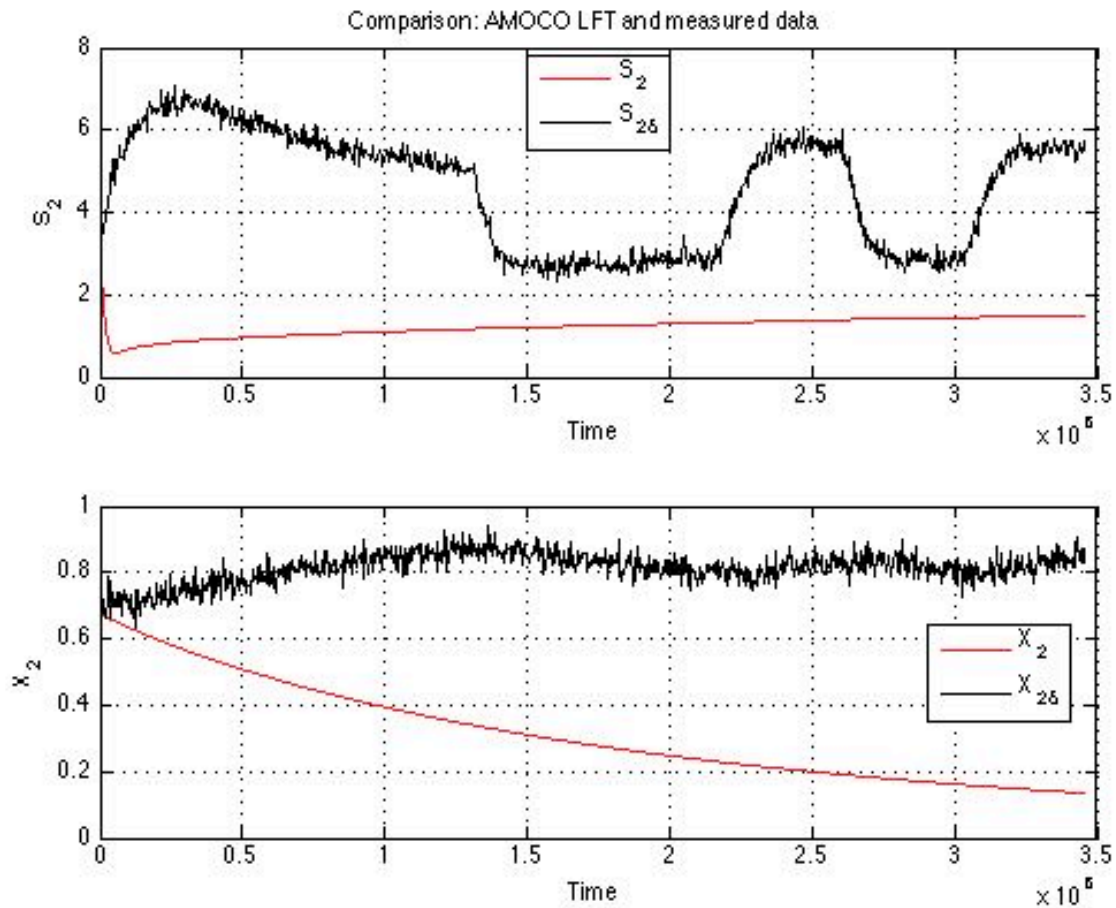


Figura 4.8 Confronto AMOCO LFT e dati misurati: S_2 e X_2

È chiara la necessità d'identificare i parametri per il modello AMOCO LFT e trovare il loro valore ottimo rispetto ai dati misurati.

Il valore dei parametri ottimi, ottenuti dopo il processo d'identificazione, sono riportati in Tabella 14. Come ci si aspettava i valori di $\mu_{1max,OTT}$, $K_{S1,OTT}$, $\mu_{2max,OTT}$ e $K_{S2,OTT}$ si discostano poco dal loro valore iniziale (al massimo $K_{S2,OTT}$ si sposta del 35%) invece, sempre come ipotizzato, $\mu_{1max,OTT}$ si attesta quasi all'estremo destro del suo intervallo di confidenza (che si ricorda essere 0.25).

Parametro		Valore ottimo	Valore iniziale
$\mu_{1max,OTT}$	$[1/d]$	0.2011	0.025
$K_{S1,OTT}$	$[d/m^3]$	0.9763	1.096
$\mu_{2max,OTT}$	$[1/d]$	0.2443	0.2
$K_{S2,OTT}$	$[d/m^3]$	9.1735	6.86

Tabella 14 - Parametri ottimi AMOCO LFT

Simulando il sistema AMOCO LFT con i parametri ottimi e confrontandolo con i dati misurati dal modello ADM1 si ottiene la Figura 4.9, che riporta sull'asse delle ascisse il tempo di simulazione e sull'asse delle ordinate il valore della concentrazione dei substrati e delle biomasse della catena biologica del modello AMOCO.

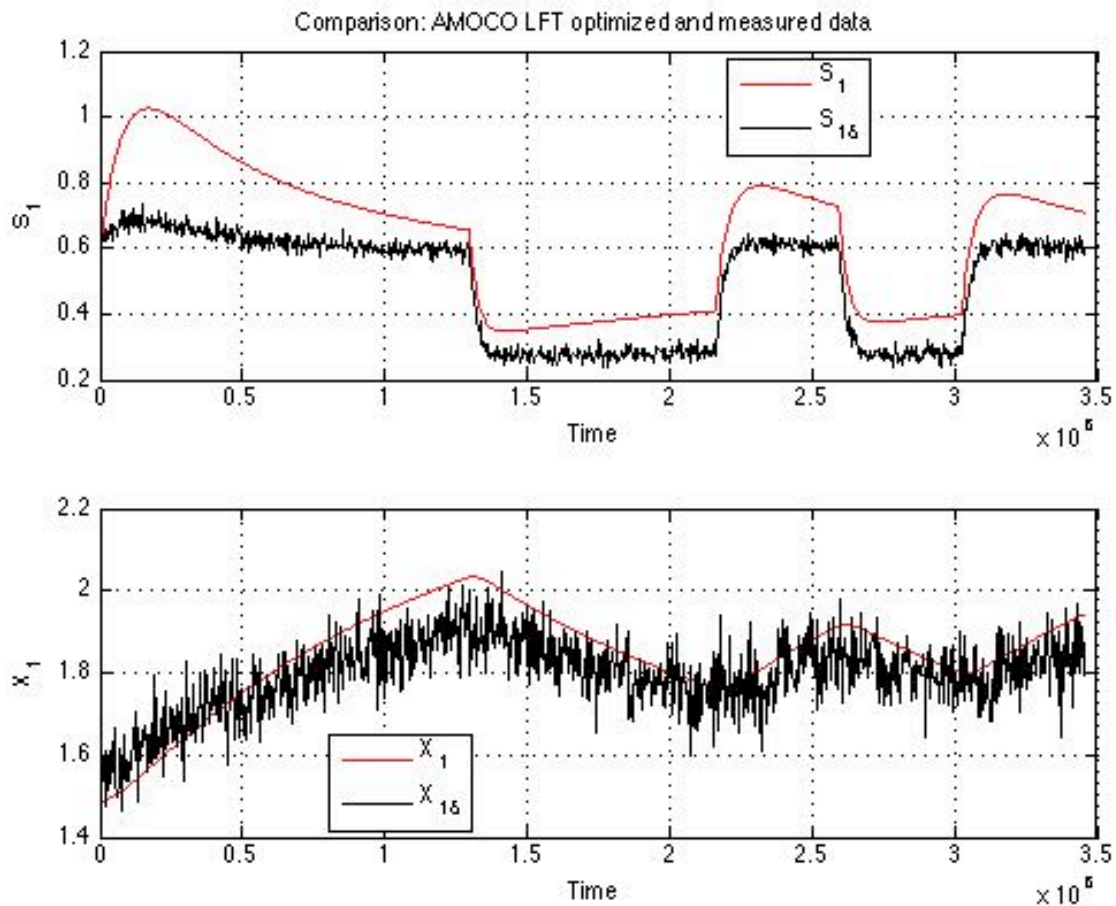


Figura 4.9 - Confronto AMOCO LFT ottimizzato e dati misurati: S_1 e X_1

Osservando la Figura 4.9 si nota che il primo anello della catena biologica del modello AMOCO LFT con i parametri ottimizzati (curva rossa) riesce a seguire il modello misurato (curva nera) in maniera coerente ai limiti di prestazione del modello AMOCO. In questo caso l'andamento della digestione del substrato S_1 e la crescita dei batteri X_1 rispecchiano gli andamenti dei dati misurati a meno di un errore.

Osservando la Figura 4.10, che mostra sempre il confronto fra dati misurati e modello ottimo simulato, si nota che il secondo anello della catena biologica del modello AMOCO LFT con i parametri ottimizzati (curva rossa) riesce a seguire il modello misurato (curva nera) in maniera

molto più fedele. Grazie a ciò è possibile calcolare in maniera fedele la produzione di metano (che si basa sull'andamento di X_2) e un'eventuale destabilizzazione del reattore da acidità (che si basa sull'accumulo di S_2 nel reattore).

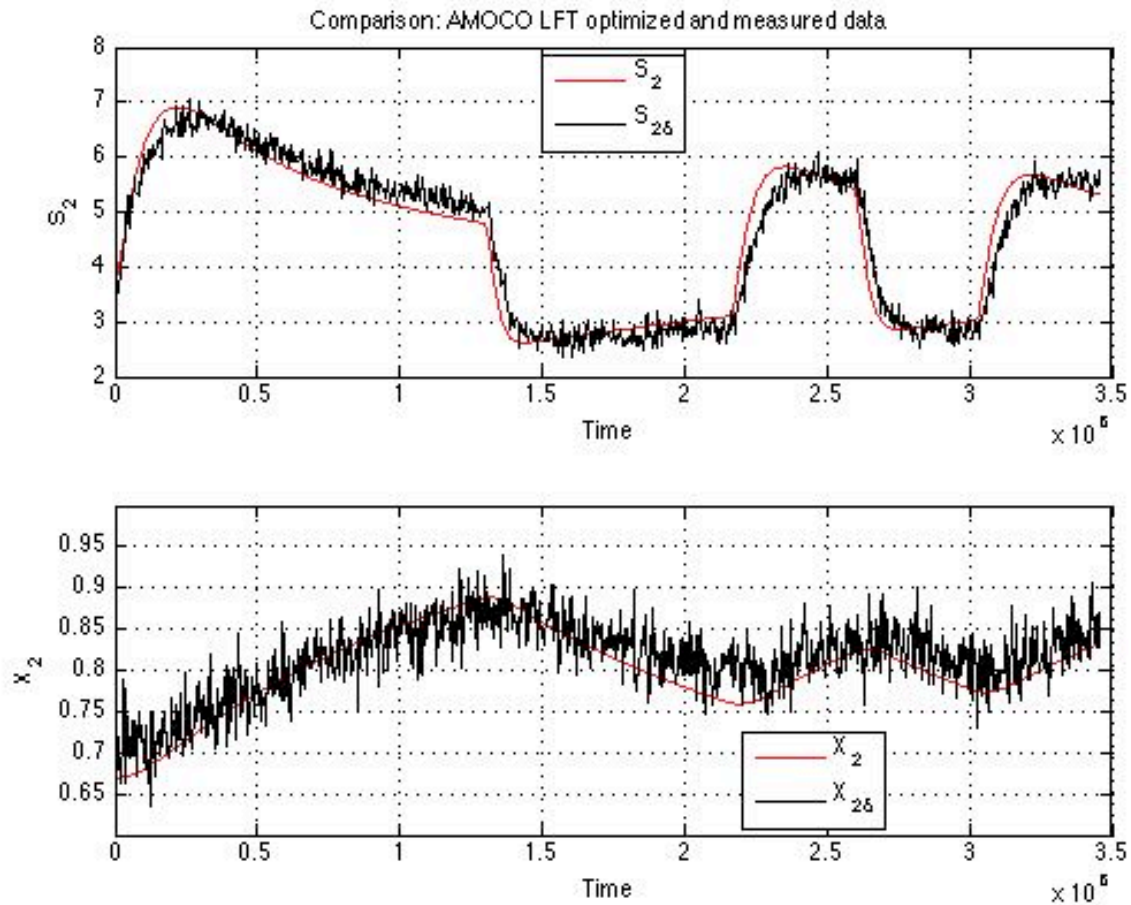


Figura 4.10 - Confronto AMOCO LFT ottimizzato e dati misurati: S_2 e X_2

In Figura 4.11 è mostrata la traiettoria compiuta dai quattro parametri da identificare durante il processo d'identificazione, cioè il valore normalizzato dei parametri in funzione della r -esima iterazione dell'algoritmo di ottimizzazione. Dalla Figura 4.11 si può notare che l'ottimo è raggiunto in 12 passi di ottimizzazione.

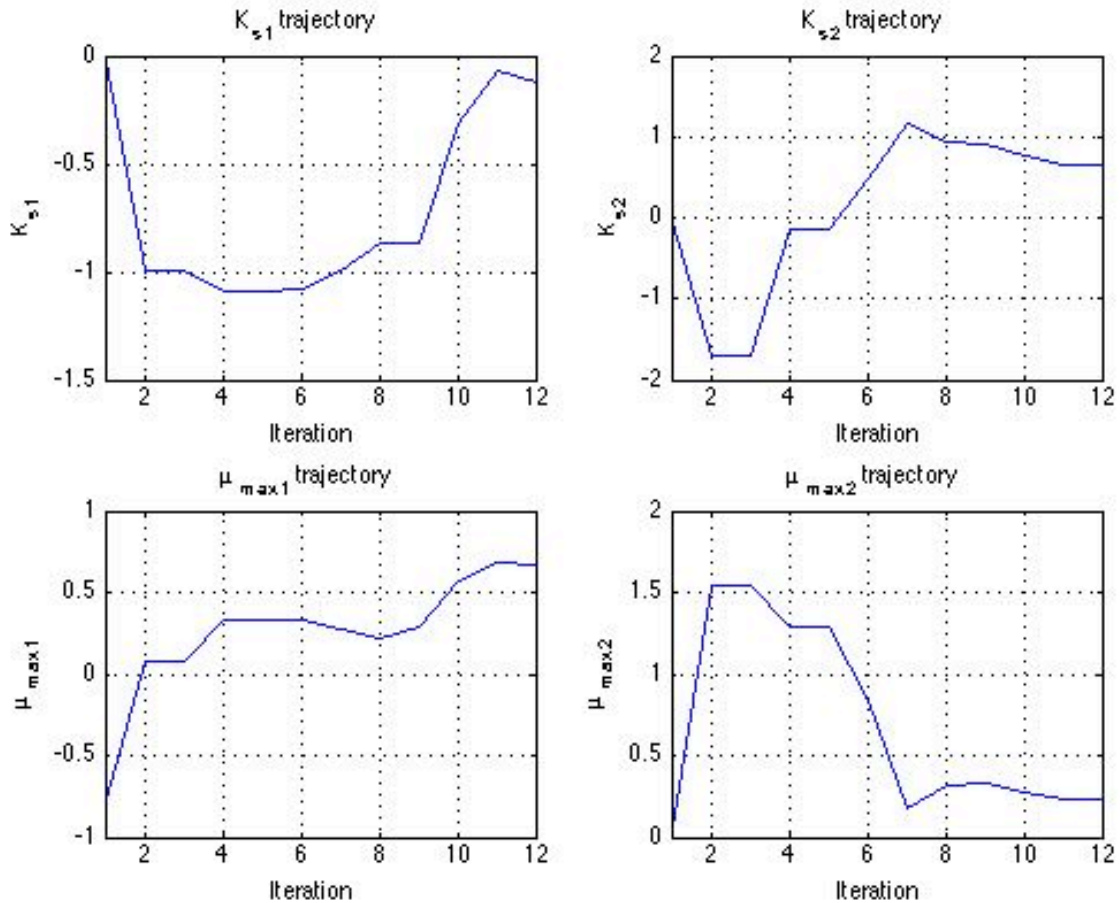


Figura 4.11 – Traiettoria normalizzata dei parametri da identificare

In Figura 4.12 sono riportati gli spettri degli errori di simulazione ($e_1(t) = X_2(t) - X_2\delta(t)$, $e_2(t) = S_2(t) - S_2\delta(t)$, $e_3(t) = X_1(t) - X_1\delta(t)$ e $e_4(t) = S_1(t) - S_1\delta(t)$) nella banda di frequenza 0Hz-500Hz, si nota come questi approssimino lo spettro di un rumore bianco gaussiano (a meno della colorazione dello spettro a 0Hz dovuto a un errore di guadagno statico del modello ottimizzato). Ciò conferma nuovamente che l'algoritmo di ottimizzazione utilizzato per l'identificazione dei parametri non noti del modello AMOCO attraverso le misure di un modello più dettagliato di digestione anaerobica ADM1 ha dato un esito soddisfacente ma che può essere migliorato.

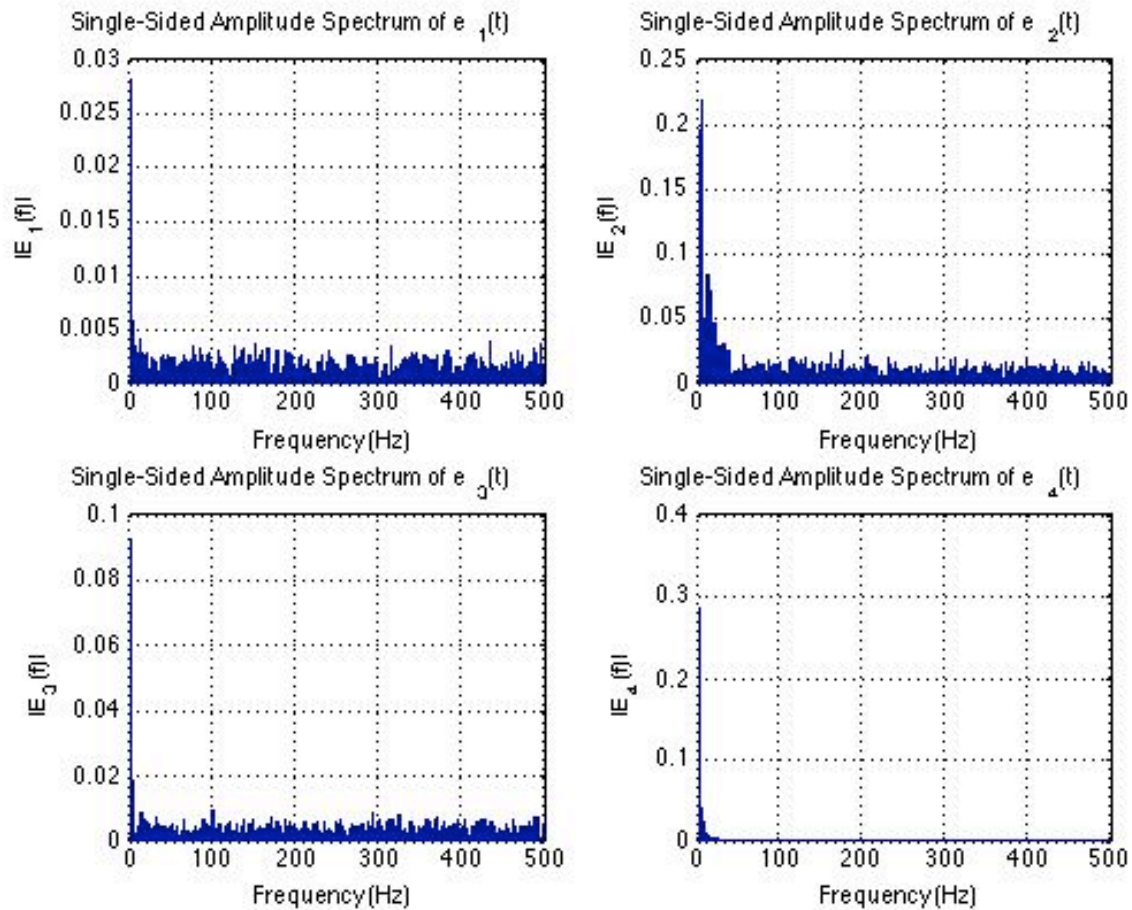


Figura 4.12 – Spettro degli errori di simulazione

Identificazione a 6 parametri non noti: μ_{1max} , K_{S1} , μ_{2max} , K_{S2} , c_1 e c_2

Al fine di migliorare i risultati di ottimizzazione è stata portata a termine nuovamente la procedura d'identificazione considerando non noti anche i coefficienti dei fattori correttivi c_1 e c_2 . Simulando il modello AMOCO con i parametri ottimi e confrontandolo con le misure dell'ADM1 si ottengono gli andamenti riportati in Figura 4.13. Si nota che c'è un miglioramento della capacità di approssimazione del modello AMOCO rispetto al caso dell'identificazione a 4 parametri.

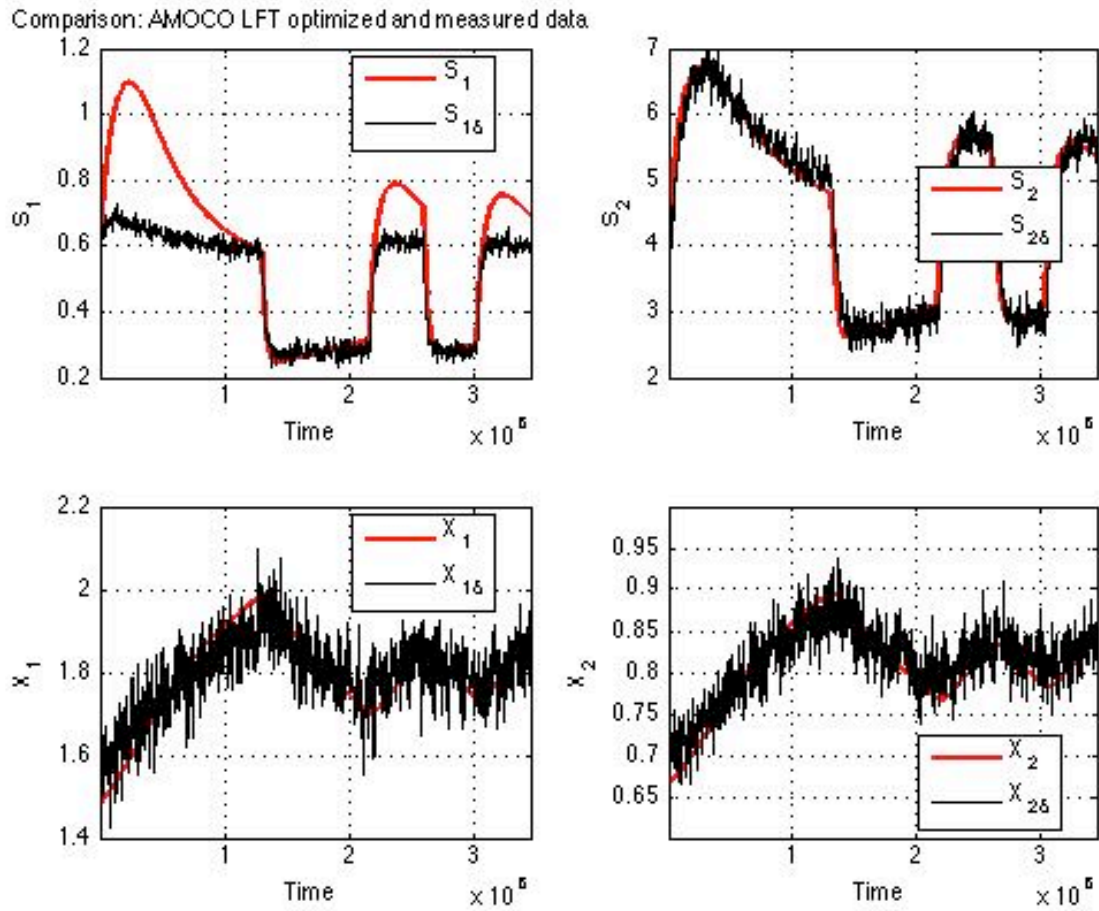


Figura 4.13 –Confronto AMOCO LFT ottimizzato a 6 parametri e dati misurati

Si è però verificato un notevole incremento del tempo di simulazione durante il processo d'identificazione (e quindi anche del tempo complessivo di ottimizzazione). Dato che il problema d'identificazione è sempre lo stesso, si suppone che ci siano alcuni valori dei parametri, adottati nei passi di ottimizzazione, che rendono il problema molto stiff. Si suppone quindi che i parametri in alcuni passi di ottimizzazione si allontanino troppo da valori sensati e dato che nell'aggiornamento dei parametri è coinvolta l'inversa dell'Hessiano (vedi (4.8)) si è supposto che questo sia dovuto a un mal condizionamento dello stesso. Infatti, confrontando la storia del numero di condizionamento dell'Hessiano nel processo d'identificazione a 4 parametri con quella a 6 parametri si nota che quest'ultima ha valori tipicamente più elevati rispetto alla prima (vedi Figura 4.14).

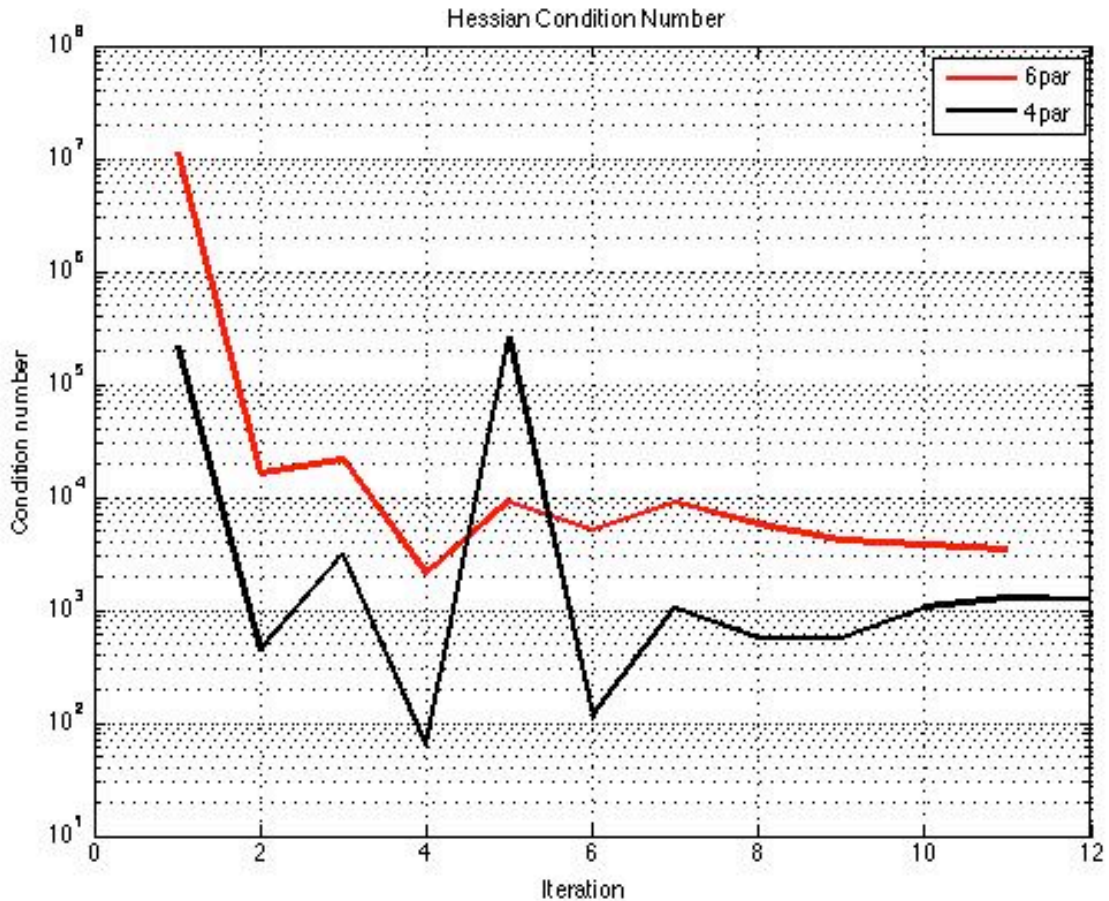


Figura 4.14 – Confronto numero di condizionamento Hessiano a 4 e 6 parametri

Ciò significa che l'Hessiano, aumentando il numero di parametri da identificare, diventa sempre più mal condizionato e sposta molto i parametri anche a seguito di piccole variazioni del gradiente.

La causa dell'aumento numero di condizionamento è imputabile a una riduzione della condizione di persistente eccitazione del sistema, cioè aumentando il numero di parametri da identificare, a parità d'ingressi forniti e uscite misurate, si procede verso una situazione in cui il contenuto armonico degli ingressi diventa sempre meno sufficiente a eccitare il sistema in base al numero di parametri da identificare oppure che il numero di uscite misurate è sempre meno sufficiente. Per questo motivo, appare una scelta sensata trovare un set di parametri ottimo da identificare, anziché aumentare il grado d'incertezza dei parametri del modello.

Osservando la Figura 4.15, che mostra la traiettoria dei parametri normalizzati durante l'identificazione, si vede che il parametro che più si sposta dal valore iniziale (in termini assoluti e non normalizzati) è il μ_{lmax} , quindi si può ipotizzare che il set di parametri ottimo per

l'identificazione siano i parametri della cinetica del primo anello (μ_{1max} e K_{s1}) e i coefficienti dei fattori correttivi.

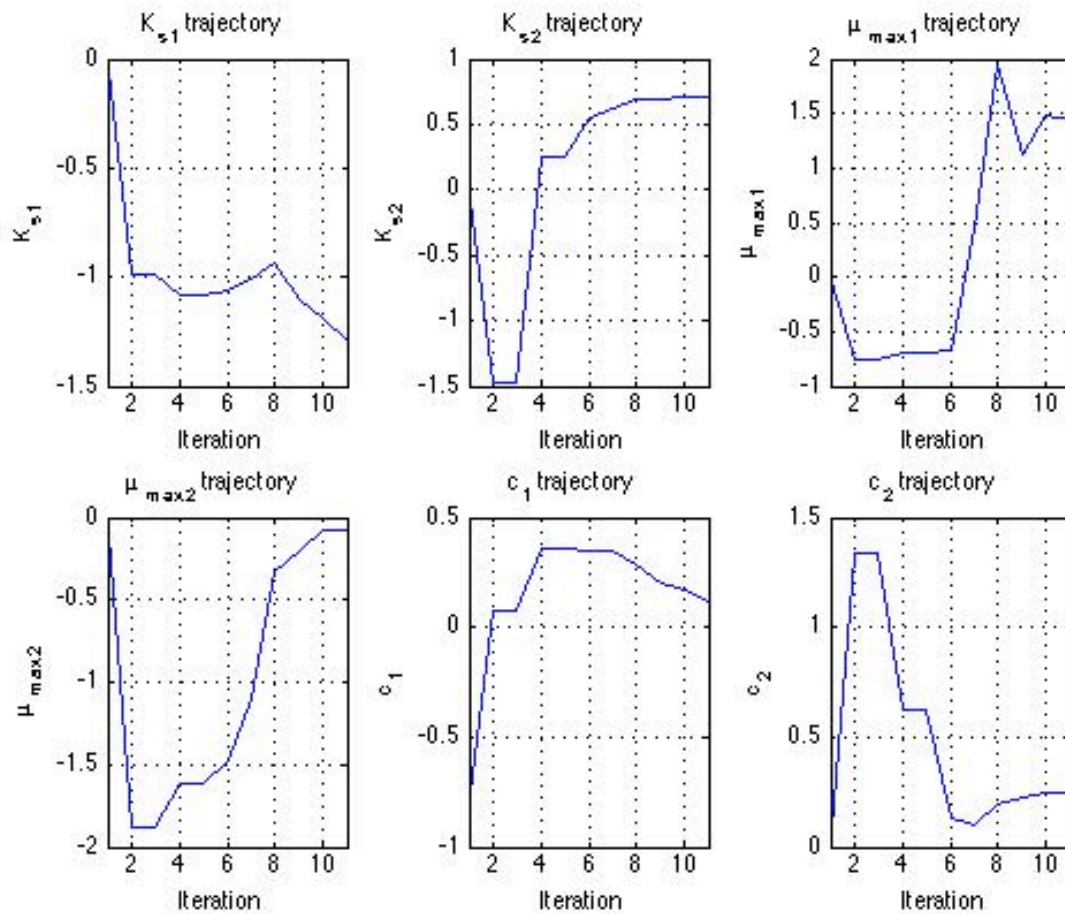


Figura 4.15 - Traiettoria normalizzata dei parametri da identificare

Identificazione a 4 parametri non noti: μ_{1max} , K_{S1} , c_1 e c_2

Portando a termine la procedura d'identificazione con il set di parametri ottimo (μ_{1max} , K_{S1} , c_1 e c_2), simulando il modello AMOCO ottimizzato e confrontandolo con le misure dell'ADM1 si ottiene la Figura 4.16.

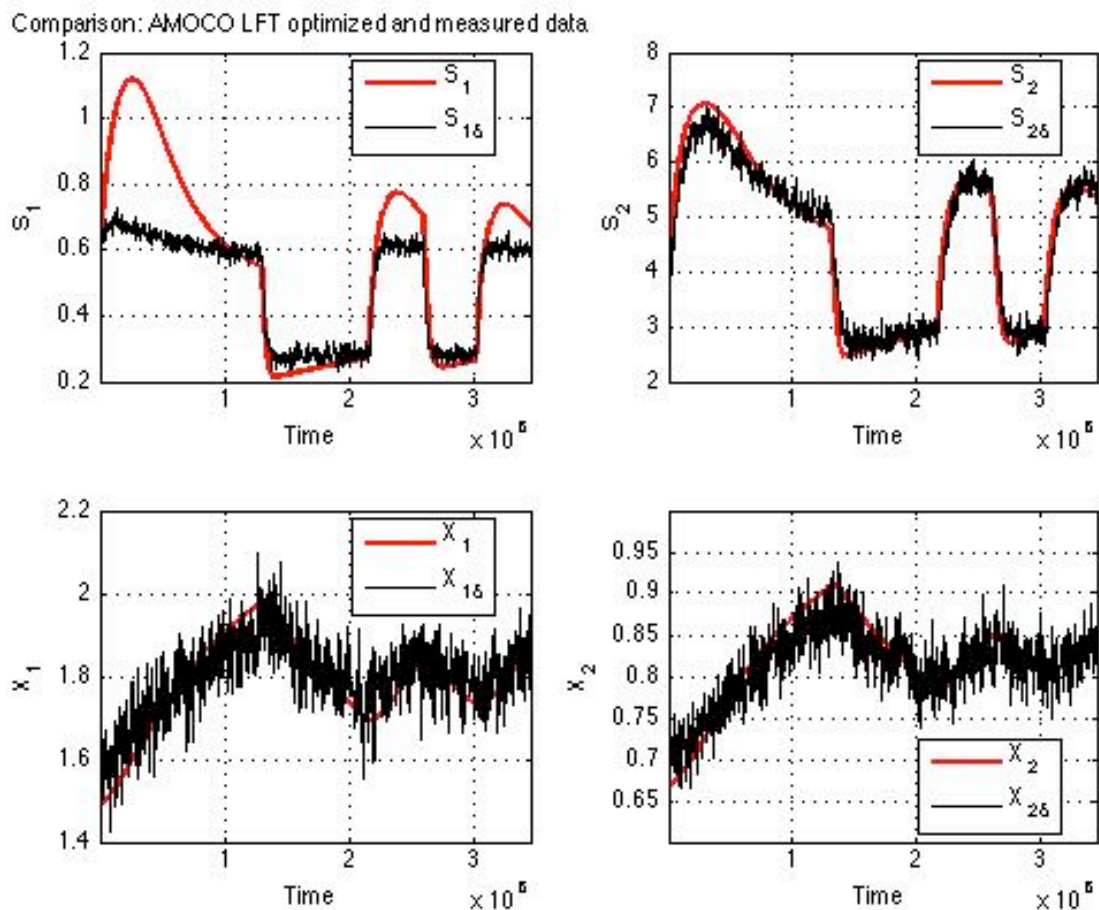


Figura 4.16 - Confronto AMOCO LFT ottimizzato a 4 parametri (con set ottimo) e dati misurati

Si può notare che in questo caso si ottiene un'approssimazione migliore di quella ottenuta utilizzando il set non ottimo a 4 parametri e molto vicina a quella ottenuta nel caso a 6 parametri. Si può quindi affermare che è stata mantenuta una buona precisione di approssimazione delle misure rispetto al caso più dispendioso dal punto di vista computazionale pur mantenendo, tramite μ_{1max} , una diagnostica del cambio d'influente. Il valore dei parametri ottimi, ottenuti dopo il processo d'identificazione, sono riportati in Tabella 15.

Parametro		Valore ottimo	Valore iniziale
$\mu_{1max,OTT}$	$[1/d]$	0.1292	0.025
$K_{S1,OTT}$	$[d/m^3]$	0.2953	1.096
$C_{1,OTT}$	$[-]$	0.1897	0.1
$C_{2,OTT}$	$[-]$	0.1094	0.1

Tabella 15 - Parametri ottimi AMOCO LFT (set 4 parametri ottimo)

5. Conclusioni

Durante il lavoro di tesi sono stati studiati i modelli di digestione anaerobica AMOCO e ADM1. Attraverso un'analisi orientata al controllo è stato semplificato, preservandone la sua espressività, il modello ADM1 ottenendo il modello ADMS. Quest'ultimo, rispetto al modello ADM1, presenta un numero inferiore di equazioni differenziali (si passa da 35 a 21) e un numero minore di parametri (si passa da 96 a 55).

È stato studiato come ottenere la rappresentazione LFT di un generico modello acausale e questa è stata applicata al modello AMOCO, ottenendo l'AMOCO LFT.

È stato studiato il metodo d'identificazione dei parametri per massima verosimiglianza, tramite ciò è stato possibile realizzare un algoritmo d'identificazione dei parametri non noti di un modello in forma LFT. Fornendo all'algoritmo il modello da identificare in forma LFT e la misura delle uscite del sistema fisico, questo dà come uscita i parametri del modello da identificare tali da minimizzare l'errore di simulazione fra il modello e il sistema misurato. Infine l'algoritmo d'identificazione è stato testato sul modello AMOCO ottenendo degli ottimi risultati.

Nell'ottica del controllo di un sistema di digestione anaerobica l'algoritmo d'identificazione dovrà essere testato sul modello ADMS. Inoltre, in questo caso, poiché l'algoritmo si è rivelato particolarmente dispendioso dal punto di vista computazionale, si dovranno compiere degli sforzi per individuare il set ottimo di parametri da identificare.

j	Component →	i	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	Rate (r _j , g COD.L ⁻¹ .d ⁻¹)
			X _c	X _{ch}	X _{gr}	X _i	X _{su}	X _{aa}	X _{ba}	X _{ca}	X _{pro}	X _{ac}	X _{h2}	X _i	$k_{de} \cdot X_c$
1	Disintegration		-1	$f_{ch,sc}$	$f_{gr,sc}$	$f_{i,sc}$									$k_{hy,gr} \cdot X_{gr}$
2	Hydrolysis Carbohydrates			-1											$k_{hy,gr} \cdot X_{ch}$
3	Hydrolysis of Proteins														$k_{hy,gr} \cdot X_{gr}$
4	Hydrolysis of Lipids														$k_{hy,gr} \cdot X_i$
5	Uptake of Sugars						Y _{su}								$k_{m, su} \cdot \frac{S_{su}}{K_S + S}$ · X _{su} · I _i
6	Uptake of Amino Acids							Y _{aa}							$k_{m, aa} \cdot \frac{S_{aa}}{K_S + S_{aa}}$ · X _{aa} · I _i
7	Uptake of LCFA								Y _{ba}						$k_{m, fa} \cdot \frac{S_{ba}}{K_S + S_{fa}}$ · X _{ba} · I ₂
8	Uptake of Valerate									Y _{ca}					$k_{m, ca} \cdot \frac{S_{va}}{K_S + S_{va}}$ · X _{ca} · $\frac{I}{1 + S_{bu}/S_{va}}$ · I ₂
9	Uptake of Butyrate									Y _{ca}					$k_{m, ca} \cdot \frac{S_{bu}}{K_S + S_{bu}}$ · X _{ca} · $\frac{I}{1 + S_{va}/S_{bu}}$ · I ₂
10	Uptake of Propionate										Y _{pro}				$k_{m, pr} \cdot \frac{S_{pro}}{K_S + S_{pro}}$ · X _{pro} · I ₂
11	Uptake of Acetate											Y _{ac}			$k_{m, ac} \cdot \frac{S_{ac}}{K_S + S_{ac}}$ · X _{ac} · I ₃
12	Uptake of Hydrogen												Y _{h2}		$k_{m, h2} \cdot \frac{S_{h2}}{K_S + S_{h2}}$ · X _{h2} · I ₄
13	Decay of X _{su}		1				-1								$k_{de, su} \cdot X_{su}$
14	Decay of X _{aa}		1					-1							$k_{de, aa} \cdot X_{aa}$
15	Decay of X _{ba}		1						-1						$k_{de, ba} \cdot X_{ba}$
16	Decay of X _{ca}		1							-1					$k_{de, ca} \cdot X_{ca}$
17	Decay of X _{pro}		1								-1				$k_{de, pro} \cdot X_{pro}$
18	Decay of X _{ac}		1									-1			$k_{de, ac} \cdot X_{ac}$
19	Decay of X _{h2}		1										-1		$k_{de, h2} \cdot X_{h2}$
				Composites											
				Carbohydrates											
				Proteins											
				Lipids											
				Sugar degraders											
				Amino acid degraders											
				LCFA degraders											
				Valerate and butyrate degraders											
				Propionate degraders											
				Acetate degraders											
				Hydrogen degraders											
				Particulate inerts											

Figura 6.2 Matrice di Petersen ADM1: biomasse

6.2 Descrizione a gusci di un modello

Il modello in linguaggio Modelica può contenere equazioni non lineari che coinvolgono anche parametri incerti (cioè da identificare). Questo porta l'algoritmo, presentato nel paragrafo 3.1.3, al fallimento poiché inserirà erroneamente le equazioni non lineari nei parametri incerti nel blocco Θ che invece deve contenere esclusivamente le funzioni non lineari nei parametri noti. Nella maggior parte dei casi è però possibile trattare questo inconveniente semplicemente definendo delle nuove variabili ausiliarie. Si prenda come esempio il seguente modello:

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{\omega} = \frac{r}{J} F_a - \frac{1}{J} T \\ \dot{v} = \frac{1}{M} F_a \\ F_a = c_1 (1 - e^{-c_2 S}) - c_3 S \\ S = \frac{r\omega - v}{r\omega} \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} u = T \\ \text{dove: } x = \begin{bmatrix} \omega \\ v \end{bmatrix} \\ y = \begin{bmatrix} F_a \\ S \end{bmatrix} \end{array} \quad (6.1)$$

Si supponga di volere identificare i parametri c_1 , c_2 e c_3 nella terza equazione di (6.1) dove si può notare che la dipendenza da c_2 non è lineare. In questo caso l'algoritmo per trovare la forma LFT del modello (6.1) fallirebbe, ma definendo le variabili ausiliare F_{a0} , F_{a1} , F_{a2} e F_{a3} si può riscrivere il modello come:

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{\omega} = \frac{r}{J} F_a - \frac{1}{J} T \\ \dot{v} = \frac{1}{M} F_a \\ F_a = F_{a1} + F_{a2} \\ F_{a1} = c_1 F_{a0} \\ F_{a0} = (1 - e^{F_{a3}}) \\ F_{a3} = -c_2 S \\ F_{a2} = -c_3 S \\ S = \frac{r\omega - v}{r\omega} \end{array} \right. \quad (6.2)$$

Si può notare che il modello (6.2) è lineare nei parametri incogniti e quindi potrà essere manipolato in maniera opportuna dalla procedura descritta nel paragrafo 3.1.3 per trovare la rappresentazione LFT.

7. Bibliografia

- [1] V. Gualzeri, “Quel biometano che aspetta nei campi”, Repubblica.it, 2012
- [2] A. Allegrini, E. Ficara, “Anaerobic digestion modeling: a comparison between ADM1 and AMOCO”, Politecnico di Milano , 2010
- [3] E. Ficara, S.Hassam, A. Allegrini, A. Leva, F. Malpei, G. Ferretti, “Anaerobic digestion models: a comparative study”, Politecnico di Milano 2010
- [4] O. Bernard, Z. Hadj-Saddok, D. Dochain, A. Genovesi, J. Steyer, “Dynamical Model Development and Parameter Identification for an Anaerobic Wastewater Treatment Process”, Biotechnology and Bioengineering, 2001
- [5] Bastone D.J., Keller J., Angelidaki I., Kalyuzhnyi S.V., Pavlostathis S.G., Rozzi A., Sanders W.T.M., Siegrist H. and Vavilin V.A., “The IWA Anaerobic Digestion Model No.1 (ADM1)”, Water Science & Technology, 2002
- [6] Rosen C., Vrecko D., Gernaey K.V., Pons M.N. and Jeppsson U., “Implementing ADM1 for plant-wide benchmark simulations in Matlab/Simulink”, Water Science & Technology, 2006
- [7] F. Dionida, C.Romani, F. Casella, M.Lovera, “Integrated modelling and parameter estimation: an LFT-Modelica approach”, 2011
- [8] F. Blumensaat, J. Keller, “Modelling of two-stage anaerobic digestion using the IWA Anaerobic Digestion Model No. 1 (ADM1)”, Elsevier, 2003
- [9] V. Gualzeri, “Kyoto compie l’ultimo anno per l’Italia multe in arrivo”, Repubblica.it, 2012
- [10] United Nation Statistic Division, “Carbon dioxide emissions (CO2), thousand metric tons of CO2 (CDIAC)”, <http://mdgs.un.org/unsd/mdg/SeriesDetail.aspx?srid=749&crd=>
- [11] The encyclopedia of alternative energy and sustainable living , “Anaerobic digestion”, http://www.daviddarling.info/encyclopedia/A/AE_anaerobic_digestion.html
- [12] L. Lee, K. Poola, “Identification of Linear Parameter-Varyng Systems Using Nonlinear Programming”, ASME, 1999
- [13] S.E. Mattsson, G. Söderlind, “Index reduction in differential algebraic equations using dummy derivates”, SIAM Journal on Scientific Computing, 14(3):677-692, 1993
- [14] L. S. Duff, J.K. Reid, “An implementation of Tarjan’s algorithm for the block triangularization of a matrix”, ACM Transactions on Mathematical Software, 4(2):137-147, 1978

- [15] S. Hecker, A. Varga, J. F. Magni, “Enhanced LFR-toolbox for Matlab”, Aerospace Science and Technology, 2005
- [16] V. Klein, E. A. Morelli, “Aircraft system identification: theory and practice”, America Institute of Aeronautics and Astronautics, 2006