

DIFUSIÓN DE SÓLIDOS Y CONVECCIÓN TÉRMICA EN EL MODELO DE SIMULACIÓN DE BIOREACTORES

R.A.Achilles¹, B.Bucki Wasserman², A.Pojmaevich³, I.Carroza³

UTN Confluencia, Rosas & Soufal, Neuquen, ARG Q8318EFG
ph/fax +54 (299) 496-3292 achilles@ieee.org

RESUMEN

La fermentación anaeróbica de residuos orgánicos por medio de bioreactores se ha tornado en una atractiva fuente de combustibles gaseosos aplicables a generación eléctrica y calefacción de bajo impacto ambiental, principalmente en países en vías de desarrollo en los que se registran millones de estos dispositivos en operación.

Consecuentemente se originó en la industria un gran interés en la búsqueda de modelos matemáticos aplicables a la optimización paramétrica del proceso y a su simulación.

Recientemente, en Argentina, fue logrado un refinamiento a metodologías típicas de optimización de la concentración de sustrato empleada a través de una Función de Filtro de Butterworth.

La difusión de sólidos en agua y la convección térmica en el seno de la solución, son incorporadas en este trabajo a la simulación del proceso a través de un modelo en elementos finitos del reactor. La representación no-adiabática de éste incorpora además las dinámicas de inyección de solución fresca, eyección de lodos, operación del serpentín calefactor, transitorios de expansión gaseosa (entre reactor y tanque de gas) y no-linealidades de la reacción.

El algoritmo, digitalmente implementado como un módulo del Analizador \Leftarrow SCS \Rightarrow , es ensayado con datos del prototipo de bioreactor de 64 metros cúbicos de UTN Confluencia. Se sugieren futuras mejoras al modelo.

Palabras Clave: Energía Renovable – Fermentación Anaeróbica – Biogas – Dinámica de Sistemas No-Lineales

INTRODUCCIÓN

Argumentos ambientales incluyendo el manejo de residuos y reciclado del Carbono determinaron, durante las últimas décadas, una nítida tendencia hacia el uso de bioenergía principalmente en países en vías de desarrollo (Taiganides, 1992).

Paralelamente, en la industria se desencadenó una etapa de experimentación y búsqueda de medios analíticos en pos de algoritmos aplicables a la optimización y simulación de la fermentación anaeróbica involucrada. En etapas preliminares el modelo de crecimiento bacteriano considerado fué la ecuación de Michaelis-Menten, una función monotónica de la concentración de sustrato de la solución (Michaelis y Menten, 1913; Achilles y Bucki, 1999). A posteriori fueron incorporados al proceso efectos inhibitorios de la reacción por variaciones de la concentración de sustrato, de la temperatura y acidez de la solución (Andrew, 1968; Topiwala y Sinclair, 1971; Rozzi, 1984; Bastin y Dochain, 1990; Angelidaki et al, 1993; Scenna et al, 1999). De todas las no-linealidades introducidas por estos efectos al algoritmo, la de mayor impacto sobre los resultados es la dependencia entre la constante de tiempo de reacción Tr y la concentración de sustrato de la solución S descripta por la Ley de Haldane (Bastin and Dochain, 1990; Achilles y Bucki, 2000) como:

$$Tr = (S/Ki + 1 + Ks/S)Tro, \quad (1)$$

donde Ks y Ki son las constantes de crecimiento e inhibición correspondientes a la combinación enzima-sustrato considerada, y Tro una constante de tiempo de referencia. A efectos de arribar a un modelo de optimización de la concentración de sustrato fue considerada, en una primera fase, una representación concentrada del bioreactor. De los diversos algoritmos ensayados, el más eficiente a tal propósito fue el basado en una Función de Filtro de Butterworth (Sydenham, 1982; Van Valkenburg, 1996; Achilles y Sierra, 2001) que, incluyendo adicionalmente las dinámicas de bombeo y estabilización térmica del reactor (Achilles y Bucki, 2002), exhibió un excelente nivel de coherencia con los niveles de concentración típicamente utilizados en la industria (ver Apéndice I).

MÉTODO DE ANÁLISIS

En el modelo concentrado del reactor la producción de biogas $Vg(s)$ puede ser caracterizada, en términos de la concentración de sustrato $S(s)$ de la solución y la constante de tiempo de la reacción $Tr(s)$, por la transformada de Laplace

1. Consultor, Doc. Invest. UTN 2. Director GESE, Doc. Invest. UTN 3. Estud. Ing. Quim. UTN, Becario GESE

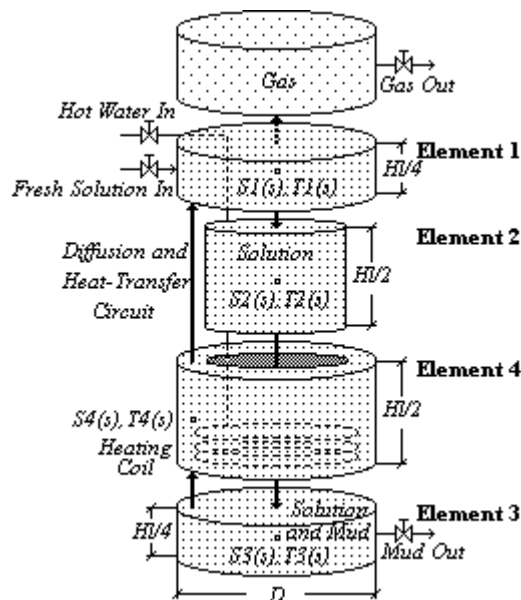


Fig.1 – Estructura de Elementos Finitos del Bioreactor: El Elemento 1 Incorpora la Dinámica de Alimentación de Solución Fresca, El Elemento 2 el Flujo Descendente de Solución -Típicamente Rica y a Baja Temperatura- y el Elemento 3 la Dinámica de Eyección de Barros. Durante la Activación del Serpentín Calefactor el Elemento 4 está Afectado por un Flujo Ascendente de Solución Pobre a Alta Temperatura

de la exponencial logarítmica creciente $vg = kv \cdot cv \cdot S(1 - e^{-t/T_r})$:

$$Vg(s) = kv \cdot cv \cdot S(s) / \{s[1 + sTr(s)]\}, \quad (2)$$

donde cv es el contenido de sólidos volátiles del sustrato, kv un multiplicador dependiente del tipo de bacteria determinado por la temperatura operativa del reactor, y la constante de tiempo de reacción exhibe –por vigencia de la Ley de Haldane- una dependencia no-lineal con la concentración de sustrato. Otras constantes de tiempo –invariantes- contempladas en ese modelo preliminar fueron la de bombeo de solución fresca y lodos Tp , la del serpentín calefactor Tc y la de expansión de gases entre domo del reactor y depósito de gas Tg .

La Figura 1 exhibe la estructura de volumen líquido total del reactor discretizada en cuatro elementos finitos que permiten desarrollar las dinámicas de difusión sólida y convección térmica no consideradas en el modelo previo.

Identificando la concentración de sustrato de la solución fresca como $Si(s)$ y el volumen y la presión del gas producido como $Vg(s)$ y $p(s)$, el Diagrama de Señal (Mason, 1956; Dorf, 1967) de Figura 2 incorpora la difusión de sólidos a la dinámica de reacción de la representación discreta del reactor (Achilles y Bucki, 2000; Achilles y Bucki, 2002). La difusión sólida entre dos elementos i y j (1-2, 2-3, 3-4 y 4-1) en contacto sobre el tracto circulatorio de solución, habilitada durante bombeo o recirculación por las llaves indicadas en el diagrama, incide sobre las concentraciones individuales $Si(s)$ y $Sj(s)$ de cada uno a través de la constante de tiempo de difusión $Tdij$ calculada a partir de la difusividad Dij entre

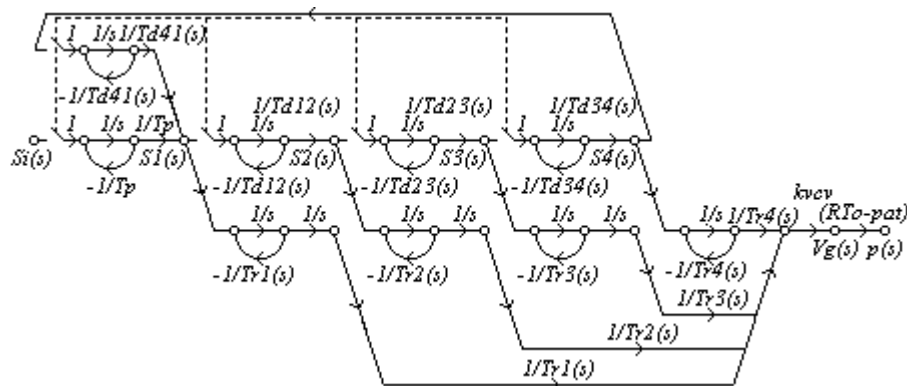


Fig.2 – Dinámica de Difusión de Sólidos del Modelo de Bioreactor en Elementos Finitos

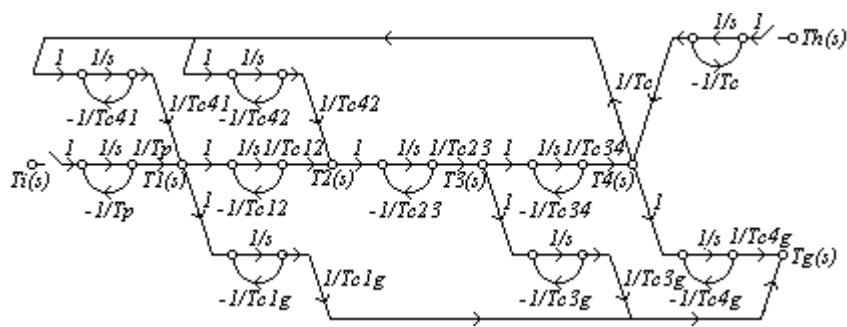


Fig.3 – Dinámica de Transferencia de Calor del Modelo de Bioreactor en Elementos Finitos

ellos. Esta última puede ser determinada a partir de la expresión (Treybal, 1973):

$$D_{ij} = [(N_i + N_j) \cdot dij / (S_i + S_j)] \cdot \text{Exp}\{[N_i / (N_i + N_j) - S_j / (S_i + S_j)] / [N_i / (N_i + N_j) - S_i / (S_i + S_j)]\}, \quad (3)$$

donde S_i, S_j son las respectivas concentraciones de sólidos y dij la longitud del canal de circulación entre centros de gravedad de los elementos. Los flujos volumétricos por unidad de área transversal N_i y N_j pueden ser expresados en términos de la velocidad media de circulación vm , la densidad γ y el peso molecular M de la solución alojada en cada elemento, resultando proporcionales a las respectivas concentraciones:

$$N_i = vmi \cdot \gamma / M_i \equiv vmi \cdot S_i; \quad N_j = vmj \cdot \gamma / M_j \equiv vmj \cdot S_j. \quad (4)$$

Con estas expresiones para N_i y N_j sustituidas en ecuación (3) y la velocidad media de circulación—dada la conservación del área transversal a lo largo de la trayectoria líquida— asumida constante en correspondencia con un régimen laminar de número de Reynolds igual a 2000 Re en el interior del reactor, la difusividad y constante de tiempo de difusión entre los elementos i y j pueden escribirse:

$$D_{ij} = [vm \cdot dij \cdot (S_i - S_j) / (S_i + S_j)] \cdot \text{Exp}[(S_i^2 + S_j^2) / (2S_i S_j)]; \quad (5)$$

$$T_{dij} = dij^2 / D_{ij} = \{dij (S_i + S_j) / [vm \cdot (S_i - S_j)]\} \cdot \text{Exp}[-(S_i^2 + S_j^2) / (2S_i S_j)], \quad (6)$$

lo que agrega otra alinealidad—adicional a la dominante de constantes de tiempo de reacción $Tr1(s), Tr2(s), \dots$ — al proceso.

En oposición a lo anterior, la transferencia de calor entre solución fresca ingresada al reactor y el Elemento 1, la pérdida de calor de los Elementos 1, 3 y 4 hacia el suelo y la transferencia entre serpentín calefactor y Elemento 4, representados en el Diagrama de Señal de Figura 3, se manifiestan como procesos completamente lineales. Las temperaturas individuales de cada elemento son determinadas a partir de: (a): la temperatura de la solución fresca $T_i(s) \rightarrow T1(s)$ inyectada al reactor; (b): la temperatura de agua caliente $Th(s) \rightarrow T4(s)$ circulante por el serpentín calefactor; (c): la temperatura del suelo $Tg(s) \rightarrow T1(s), T3(s), T4(s)$, donde está enterrado el reactor y (d): la interacción térmica entre los cuatro elementos. Mientras que la influencia de $Tg(s)$ se establece en forma continua, las de $T_i(s)$ y $Th(s)$ están restringidas por llaves habilitadas por, respectivamente, las operaciones de bombeo y calefacción. La escasa influencia de la variación de acidez sobre la reacción (Topiwala y Sinclair, 1971), motivó que la misma no fuera considerada en la simulación.

IMPLEMENTACIÓN DIGITAL

Cuarenta variables de estado fueron aplicadas en total para resolver las integraciones $(1/s)$ de las Figuras 2 y 3 en tiempo discreto, en base al Método de Runge-Kutta (Kutta, 1901).

Con el propósito de ensayar concentraciones de sustrato emergentes del estudio de optimización, la simulación de un ciclo de funcionamiento del bioreactor—implementada por medio de una imagen ejecutable FORTRAN— fue incorporada a continuación del preexistente Programa $\Leftarrow SCS \Rightarrow$ U-Bio. De este modo los resultados de la optimización posibilitan al usuario la selección de la concentración de sustrato y temperatura de solución fresca a ensayar, además de la temperatura del suelo (donde se encuentra enterrado el reactor) y el intervalo de tiempo de integración.

Los datos del reactor prototipo de UTN Confluencia aplicados a ensayo del programa fueron: *Volumen (reactor):* 64 m³; *Espesor (pared reactor):* 12.8 cm, *Material:* Concreto; *Sólidos Volátiles:* cv: 28 %, *Parámetros de Crecimiento e Inhibición:* *Ks:* 0.4 mmol/l; *Ki:* 0.9 mmol/l; *T(reactor):* 35 ± 3°C, *T(solución fresca):* 25°C; *Diámetro(serpentín calefactor y tubería de gas):* 2.54 cm, *Longitud(serpentín calefactor):* 500 m, *k(serpentín calefactor):* 140 W/m²°C, *T(agua caliente):* 60°C, *T(suelo):* 10°C; *# de Reynolds(reactor):* 2000; *Intervalo(tiempo):* 280 s. El estudio de optimización para estos datos arrojó las siguientes constantes de tiempo fijas: *Tp (bombeo):* 3506 s, *Tc(serpentín*

```

BACTERIA GROWTH-RATE OPTIMIZER
-----
Substrate Constants          Time Constants
Growth      Inhibition      Solution Heating      Gas
.400 mmol/l .900 mmol/l    Pumping      Coil      Expansion
3506 s      2293 s      4.8 s
-----
Parameter          Haldane          L-Frequencies      M-Frequencies
-----
S Concent Inhb          1.52 %          1.52 %          3.70 %
S Concent Temp & pH Inhb 3.02 %          3.02 %          7.35 %
Reaction Time Constant  14.10 d         14.10 d         22.98 d
-----
achilles@ieee.org          <ENTER> for Discrete-Time Runge-Kutta Study

SELECT T-INTERVAL NOT HIGHER THAN 287 SECONDS
280
ENTER SOLUTION NOMINAL S-CONCENTRATION (%) & TEMPERATURE, GROUND TEMP (°C)
7.35,25,10
SOLUTION-FEEDING CIRCUIT ACTIVATED AT 560. SEC
SOLUTION-FEEDING CIRCUIT DEACTIVATED AT 1680. SEC
HEATING-COIL CIRCUIT ACTIVATED AT 5600. SEC
HEATING-COIL CIRCUIT DEACTIVATED AT 7000. SEC
-----
HEATING-COIL CIRCUIT ACTIVATED AT 20720. SEC
HEATING-COIL CIRCUIT DEACTIVATED AT 22120. SEC
HEATING-COIL CIRCUIT ACTIVATED AT 22960. SEC
PRESS <ENTER> FOR GRAPHICS

```

Fig.4 – Pantalla de Optimización, Datos y Salida Alfanumérica de la Simulación

calefactor): 2293 s y T_g (expansión del gas): 4.8 s. La concentración óptima de 7.35 % emergente de este análisis para frecuencias intermedias, una temperatura de la solución de alimentación de 25°, una temperatura de suelo de 10° y un intervalo de tiempo de 280 s, fueron adoptados para la simulación desarrollada (ver Figura 4). Mientras que la salida alfanumérica de la simulación en Figura 4 indica los intervalos de operación de bombas de alimentación y eyección de lodos y del serpentín calefactor durante la simulación, la salida gráfica en QBASIC de Figura 5 exhibe la evolución de las magnitudes instantáneas de la concentración de sustrato (S), constante de tiempo de reacción (Tr), variación de temperatura (δT) y presión de gas (p) a lo largo de un ciclo operativo del reactor. El crecimiento bacteriano en por unidad/hora y la producción diaria de gas en m^3 , calculados durante el ciclo simulado, son indicados en la salida gráfica.

CONCLUSIONES

La concentración de sustrato emergente del estudio de optimización (para frecuencias intermedias con inhibición por temperatura y pH) de 7.35 % fue adoptada para ensayo de la simulación. La salida gráfica de la simulación de Figura 5 ilustra las amplias variaciones de constante de tiempo de reacción, en rangos superiores al 25 %, para las fluctuaciones de concentración en el rango del 30 % producidas por el reemplazo de un volumen de un tercio del volumen líquido total de lodos (Elemento 3) por uno similar de solución fresca (Elemento 1) durante un ciclo operativo del reactor. Puede observarse asimismo un incremento de la presión en el tanque de gas de unos 800 kPa y el correcto funcionamiento del serpentín calefactor dentro del rango de $\pm 3^\circ C$ especificado.

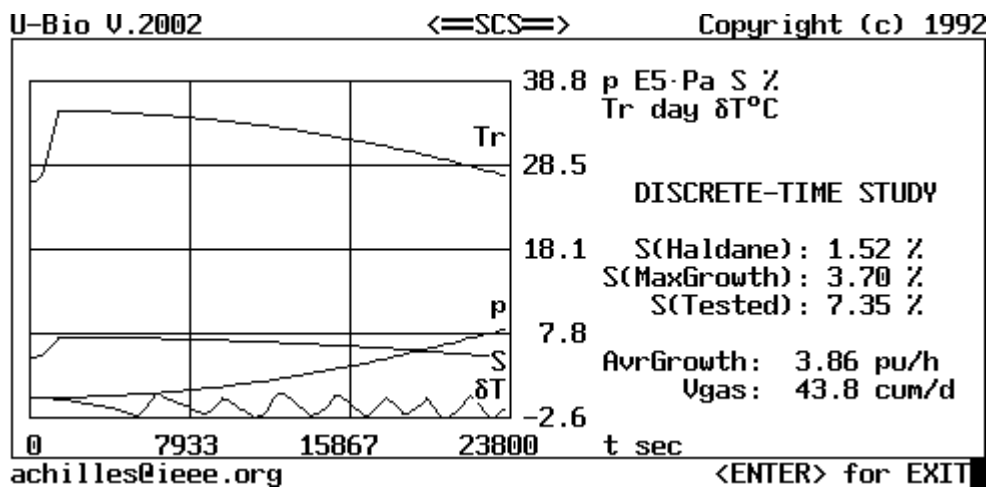


Fig.5 –Gráfica de la Simulación

Se prevé trabajo futuro en relación al modelo en elementos finitos del reactor: por una parte existen planes para incorporar la representación de la difusión del gas producido en la solución y su impacto negativo sobre concentración de sustrato y por ende de producción de gas. Asimismo se planea incorporar un algoritmo representativo de la precipitación de sólidos, un

fenómeno identificado experimentalmente como ejerciendo un impacto de importancia en reactores no provistos de medios de mezclado de la solución. Por otro lado se ha diseñado una serie de trabajos experimentales en laboratorio tendientes a la discriminación de las proporciones de sólidos solubles y no solubles, así como las de compuestos orgánicos fermentables, no fermentables e inorgánicos del sustrato empleado, con miras a la investigación de las dinámicas particulares de estos componentes. Sin duda, la herramienta introducida en el presente trabajo permitirá la formulación y cotejo de los respectivos algoritmos involucrados.

APENDICE I: MODELO DE OPTIMIZACIÓN DE CONCENTRACIÓN DE SUSTRATO

El volumen de gas producido por un escalón de concentración de sustrato $S(s) = S/s$ aplicado al modelo concentrado del reactor (Achilles y Bucki, 2000; Achilles y Bucki, 2002) puede ser derivado del diagrama de señal exhibido en Figura A1, eliminando realimentaciones de constantes de tiempo menores como las de expansión de gas, como:

$$Vg(s) = \frac{kv \cdot cv [s(Tp+Tc) + 1]}{s^4 Tp(Tp+Tc)Tr(s) + s^3 [Tp(Tp+Tc) + (2Tp+Tc) \cdot Tr(s)] + s^2 [2Tp+Tc+Tr(s)] + s} S \quad (a1)$$

donde la concentración que optimiza la tasa de crecimiento bacteriano puede ser formulada a partir de la condición de cancelación de la primera derivada de esta ecuación $\delta Vg(s)/\delta Sop=0$, en la que la no-linealidad de la reacción es sorteada postulando tal cálculo para el par Sop , $Trop$ óptimo. Denominando $V^0(s)$ al numerador de $\delta Vg(s)/\delta Sop$, las componentes de la respuesta en frecuencia de esta expresión en orden creciente pueden ser definidas a partir de una serie construida con las sucesivas derivadas $V^0(s)$, $V^1(s)$, $V^2(s)$,... respecto a s (Hurwitz, 1895; Davidson, 1966; Dorf, 1967):

$$V_{2q} = \sum_{k=0}^{2q} (-1)^{k+q} \frac{V^k(0) V^{2q-k}(0)}{k!(2q-k)!} \quad \text{con } q = 1, 2, 3, \dots \quad (a2)$$

La nulificación de cada una de las diferentes componentes V_{2q} da lugar a ecuaciones en que los pares óptimos Sop , $Trop$ quedan expresados en función de los coeficientes y constantes de tiempo remanentes del proceso. Expresando $Trop$ en función de Sop en base a la Ley de Haldane –ecuación (1)- las respectivas ecuaciones de concentración óptima resultan:

$$V_0: \quad Sop = 0 \quad (a3)$$

$$V_2: \quad Sop^2 + 4Ks(Tro^2/D_2)Sop + 4Ks^2(Tro^2/D_2) = 0 \quad \text{donde } D_2 = (2Tp+Tc+Tro)^2 - (Tp+Tc)(Tp+Tro) - TpTro \quad (a4)$$

$$V_4: \quad Sop^2 + Ks\{[4(2Tp+Tc)[(Tp+Tc)(Tp+Tro)+TpTro] - Tp(Tp+Tc)(2Tp+Tc+Tro)]/D_4\}Sop + \\ + 2Ks^2\{[2(2Tp+Tc)^2 - Tp(Tp+Tc)]Tro^2/D_4\} = 0 \quad (a5)$$

$$\text{donde } D_4 = [Tp(Tp+Tc) + (2Tp+Tc)Tro]^2 - Tp(Tp+Tc)(2Tp+Tc+Tro)Tro$$

De esta manera, el proceso linealizado es asimilado a una Función de Filtro Pasa-Bajo de Butterworth (Sydenham, 1982; Van Valkenburg, 1996; Achilles and Sierra, 2001) que permite, a través de su requerimiento de respuesta pasabanda plana el cálculo, en este caso de concentraciones óptimas, en términos de los coeficientes de la ecuación característica del sistema (características del sustrato, constantes de tiempo, etc.).

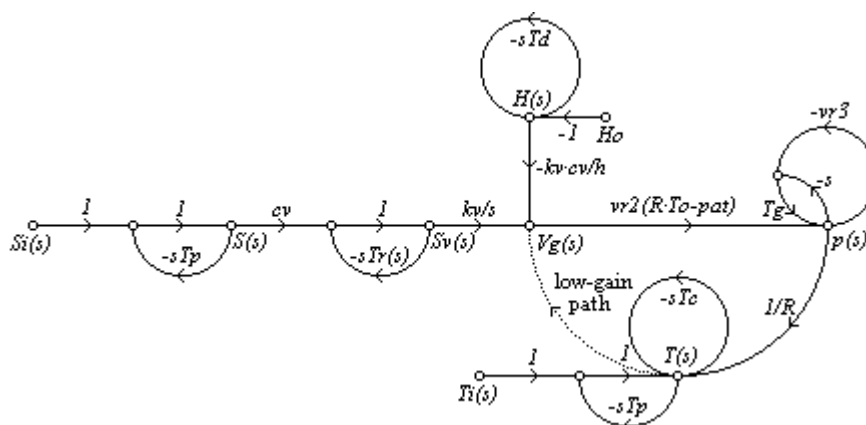


Fig.A1 – Diagrama de Señal del Bioreactor Concentrado

AGRADECIMIENTO

El invaluable asesoramiento en cinética química recibido de Jorge Guala-Valverde, Director del Grupo de Investigación sobre Física Básica de UTN Confluencia, es agradecido.

REFERENCIAS

- Taiganides E. (1992). Pig Waste Management and Recycling - The Singapore Experience, IDRC, Canada.
- Michaelis L. y Menten M. (1913). Die Kinetik der Invertinwirkung, *Biochemische Zeitschrift* **49**, 334-369.
- Achilles R. y Bucki Wasserman B. (1999). Biogas Reactor Fermentation Dynamics, *Annals CNEA-UNSAM School of Energy Studies*.
- Bastin G. y Dochain D. (1990). On-line Estimation and Adaptive Control of Bioreactors, 1st Ed., 1-82, Elsevier, New York.
- Achilles R. y Bucki Wasserman B. (2000). Bioreactores: Optimización de la Reacción Inhibida, *Publicación AERMA* **4-2**, 6.07-6.12.
- Andrew J. (1968). A Mathematical Model for the Continuous Culture of Microorganisms Utilizing Inhibiting Substrates, *Biotechnology and Bioengineering* **10**, 707-723.
- Topiwala H. y Sinclair C. (1971). Temperature Relationship in Continuous Culture, *Biotechnology and Bioengineering* **13**, 795-813.
- Rozzi A. (1984). Modeling and Control of Anaerobic Digestion Processes, *IEEE Transactions on Instrumentation, Measurements and Control* **6**, 3, 153-159.
- Angelidaki I. et al (1993). A Mathematical Model for Dynamic Simulation of Anaerobic Digestion of Complex Substrates: Focusing on Ammonia Inhibition, *Biotechnology and Bioengineering* **42**, 159-166.
- Scenna N. et al (1999). Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos, 1st Ed., 697-739, UTN-Munro Editora, Buenos Aires.
- Sydenham P. (1982). Handbook of Measurement Sciences, John Wiley and Sons.
- Van Valkenburg M. (1996). Modern Network Synthesis, John Wiley and Sons.
- Achilles R. y Sierra E. (2001). Diseño Solar Pasivo Óptimo de Construcciones: Un Modelo Preliminar, *Publicación AERMA* **5**, 8.49-8.54.
- Achilles R. y Bucki Wasserman B. (2002). Optimized Biogas Reactor Dynamics Increase Renewable Energy Competitiveness, *Annals CIGRE-IGU International Symposium on Gas and Electricity Networks* **B**, 33-36.
- Mason S. (1956). Feedback Theory: Further Properties of Signal Flow Graphs, *Proceedings IRE* **44**, 7, 920-926.
- Dorf R. (1967). Modern Control Systems Addison-Wesley Publishing Co.
- Treybal R. (1973). Operaciones con Transferencia de Masa, 1^a Ed., 22-23, Editorial H.A.S.A.
- Kutta W. (1901). Beitrag zur Naeherungsweise Integration Totaler Differentialgleichungen, *Zeitschrift Mathematik und Physik* **46**, 435-453.

ABSTRACT

Anaerobic fermentation of organic waste in bioreactors has become an attractive source of gaseous fuels applicable to low-environmental-impact electric generation and heating, mainly in developing countries where records are of millions of these devices in operation. As a consequence a great deal of interest came about in the industry in search of mathematical models applicable to both, the process' parametric optimization and its simulation. A refinement to typical methodologies applied to define the reactor's solution optimum substrate concentration was recently attained in Argentina by means of an algorithm based on a Butterworth Filter Function. Solid diffusion in water and thermal convection are introduced in this article to the process' simulation by means of a finite-element reactor model. The reactor's non-adiabatic model includes besides fresh-solution-injection and mud-ejection dynamics, heating-coil operation, gas expansion transients (among the reactor's top and the gas tank) as well as the reaction's non-linearities. The digital implementation of the algorithm as a module of the \Leftarrow SCS \Rightarrow Analyzer is tested with the Confluencia Tech University 64 cubic-meter reactor-prototype data. Future model improvements are suggested.

Keywords: Renewable Energy, Anaerobic Fermentation, Biogas, Non-linear System Dynamics