

SIMULACIÓN DE BIOREACTORES: REFINAMIENTOS AL MODELO DE DINÁMICA DE SÓLIDOS

R.A.Achilles¹, J.Guala-Valverde², B.Bucki Wasserman³, A.Pojmaevich⁴

UTN Confluencia, Rosas & Soufal P.Huincul, AR Q8318EFG - Fundación J.Palacios, Alderete 285 Neuquén, AR Q8300BGI
 ph/fax +54 (299) 496-3292 achilles@ieee.org

RESUMEN - El presente artículo generaliza el análisis de la dinámica sólida de bioreactores anaeróbicos proponiendo refinamientos a un modelo de simulación en elementos finitos preexistente. Una componente de alto impacto sobre el fenómeno, la sedimentación, es incorporada al programa junto a un modelo de lógica difusa que representa la influencia de variaciones de temperatura y acidez de la solución sobre el crecimiento bacteriano. El ensayo de la implementación digital con datos del prototipo de 64 m³ de UTN Confluencia arroja cambios significativos en la simulación, focalizando la necesidad de estudio de fenómenos colaterales a los analizados, así como la de algunos ajustes operativos al reactor.

Palabras Clave: Energía Renovable – Fermentación Anaeróbica – Dinámica Sólida – Sistemas No-Lineales – Lógica Difusa

INTRODUCCIÓN

La utilización extendida de bioreactores como fuente de energía renovable de bajo impacto ambiental en países en desarrollo (Taiganides, 1992) ha generado un interés creciente en la provincia del Neuquén, con miras al abastecimiento de pobladores rurales dispersos localizados en inmediaciones de escuelas, estancias o puestos sanitarios sin opción de conexión al Sistema Eléctrico Transcomahue. La industria canalizó, consecuentemente, esfuerzos en la búsqueda de algoritmos de optimización de la operación, diseño y simulación de estos dispositivos. En sus comienzos, el trabajo conjunto de UTN Confluencia y Fundación Julio Palacios se concentró en la identificación de un modelo adecuado de crecimiento bacteriano (Andrew, 1968; Topiwala y Sinclair, 1971; Rozzi, 1984; Bastin y Dochain, 1990; Angelidaki et al, 1993; Scenna et al, 1999). Junto a la física básica de bombeo y estabilización térmica del reactor la representación seleccionada posibilitó formular un algoritmo de optimización de la concentración de sustrato de la solución utilizada (Achilles y Bucki, 2000) en base a la Función de Butterworth (Sydenham, 1982; Van Valkenburg, 1996; Achilles y Sierra, 2001; Achilles et al, 2003), que alcanzó un excelente nivel de coherencia con concentraciones típicamente usadas en la industria.

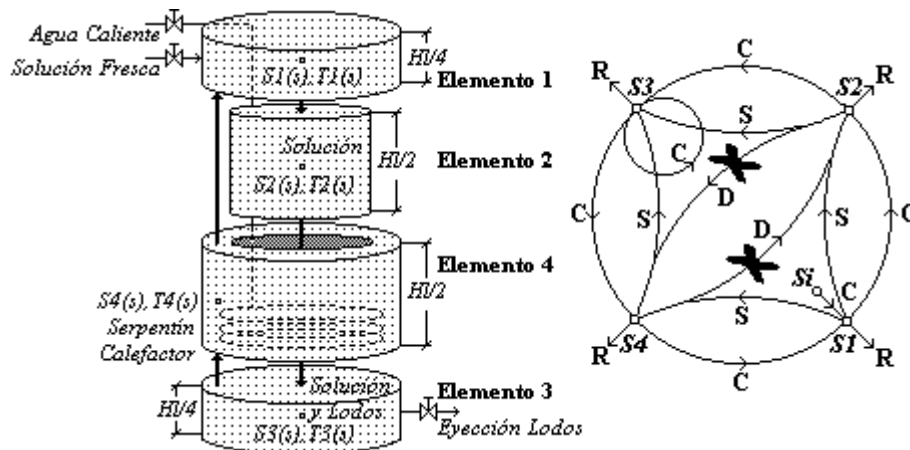


Fig. 1 - Estructura de Elementos Finitos y Diagrama de Transferencia Sólida Intraelemento

Complementariamente, el desarrollo de un modelo no adiabático en elementos finitos del volumen líquido del reactor, permitió disponer de una herramienta para cotejar por medio de una simulación detallada los parámetros optimizados permitiendo su correlación con prototipos en consideración. Dicha representación, exhibida en Figura 1 junto al diagrama de transferencia sólida, refleja las condiciones de flujo convectivo de calor y sólidos entre elementos del volumen líquido del reactor. Durante la fase de carga se inyecta solución fresca al Elemento 1 y el Elemento 3 evacua los lodos del fondo, produciéndose una transferencia convectiva de sólidos (C) 1-2-3-4-1. El serpentín calefactor, alojado en la periferia del Elemento 4, compensa déficits de temperatura respecto a la nominal de funcionamiento. Tanto en carga como en reposo, la pérdida de sólidos volátiles por reacción (R) degrada la concentración de sustrato de los cuatro elementos representados.

1. Consultor, Doc. Investig. 2. Presidente FJP, Doc. Investig. 3. Director GESE, Doc. Investig. 4. Estud. Ing. Química

Mientras que la invarianza de constantes de tiempo de transferencia de calor no planteó dificultades a la implementación digital, la alinealidad de las constantes de tiempo de dinámica de sólidos y reacción obligó al recálculo de aquellas para cada elemento en cada intervalo de tiempo de la simulación. El programa de optimización de bioreactores implementado sobre tales bases dio lugar a una herramienta con enfoque diferente y un buen grado de complementariedad con modelos sustanciados recientemente (IWA Task Force for Mathematical Modelling of Anaerobic Digestion Processes, 2002).

Los mecanismos de sedimentación (S) y difusión (D) de sólidos activados con el reactor en reposo y no incluidos en el modelo hasta ahora, son incorporados al mismo en el presente artículo fundados en experimentación reciente. Asimismo la inhibición de la reacción producida por las variaciones de temperatura y acidez de la solución, no considerada previamente en la simulación, es también incorporada fundada en una formulación en lógica difusa de las constantes de tiempo de reacción.

MÉTODO DE ANÁLISIS

La Figura 2 exhibe las variaciones de concentración y temperatura registradas a lo largo de un ciclo operativo del prototipo de 64 m³ de UTN Confluencia con el modelo de simulación sin modificar. Mientras que el comportamiento térmico se considera adecuadamente representado (no obstante el excesivo descenso de temperatura del fondo por la baja temperatura exterior considerada), los Elementos 3 y 4 muestran una degradación irreal de concentración, probablemente originada en la omisión de la sedimentación del modelo. El crecimiento bacteriano promedio y producción de gas medidos para el caso representado y modelo utilizado fueron 2.39 pu/hora y 27.1 m³/dia.

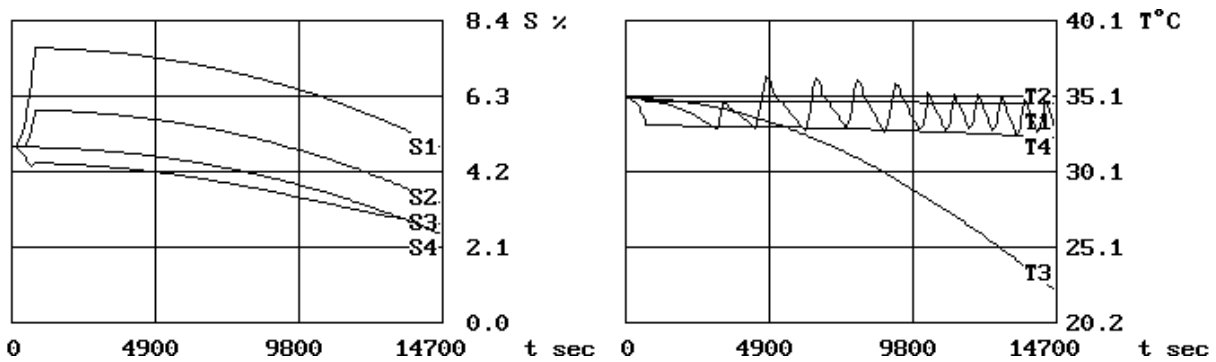


Fig.2 - Concentraciones y Temperaturas Elementales del Modelo de Simulación sin Modificar

En la práctica, el Elemento 1 de la Figura 1 sedimenta sobre los Elementos 2 y 4, y éstos sobre el 3, produciéndose la difusión sólida preponderantemente entre los Elementos 2 y 4. Se diagramaron ensayos de laboratorio que permitieron determinar tamaño y velocidad promedio de las partículas sedimentadas, habilitando así el procedimiento de cálculo de las constantes de tiempo asociadas al fenómeno. Se llevaron a cabo ensayos de sedimentación en probetas de 0.4 m de altura, conteniendo solución de sustrato humedecido y mezclado en diferentes concentraciones. Se midieron tiempos totales en el rango de los 24 min hasta llegar a la separación de fases. La constante de tiempo asociada, de un cuarto de esa magnitud, resultó de 380 s. La igualación, a velocidad constante, de la fuerza de fricción definida por el Teorema de Stokes con el peso menos el empuje hidrostático sobre la partícula sedimentada puede escribirse:

$$6\pi \eta_{H_2O} r v = (4/3)(\gamma_{SUS} - \gamma_{H_2O}) \pi r^3 g \quad (1)$$

donde γ_{SUS} es la densidad del sustrato humedecido, γ_{H_2O} y η_{H_2O} la densidad y la viscosidad del agua, r y v el radio y la velocidad de la partícula, y g la aceleración de la gravedad. Considerando la distancia media de sedimentación $dm = 0.2$ m entre centro de gravedad y fondo de la probeta utilizada, el radio de la partícula puede determinarse como:

$$r = \{(9/2)[\eta_{H_2O}/(\gamma_{SUS} - \gamma_{H_2O})g](dm/T)\}^{1/2} = \{(9/2)[7.2 \text{ E-4Ns/m}^2/(10\text{Kg/m}^3 \cdot 9.81\text{m/s}^2)](0.2\text{m}/380 \text{ s})\}^{1/2} = 1.32 \text{ E-4 m} \quad (2)$$

Y las velocidades de los tres modos de transferencia sólida para una difusividad intraelemento $D_{ij} = 8.0 \text{ E-11 m}^2/\text{s}$ (Treybal, 1973), la dispersión operativa de concentraciones 7.35-4.90 %, la condición de flujo laminar $Re = 2000$, la distancia intraelemento $d_{ij} = 1.42$ m y el diámetro del Elemento 2 $D_2 = 3.07$ m para el caso analizado, resultan:

$$\text{Convección: } v_c = (\eta_{H_2O}/\gamma_{SUS})(Re/D_2) = 4.64 \text{ E-4 m/s} \quad (3)$$

$$\text{Sedimentación: } v_s = (2/9)[(\gamma_{SUS} - \gamma_{H_2O})g/\eta_{H_2O}] \cdot r^2 = 5.28 \text{ E-4 m/s} \quad (4)$$

$$\text{Difusión: } v_d = (D_{ij}/d_{ij})[(S_i + S_j)/(S_i - S_j)] \text{Exp}[-(S_i^2 + S_j^2)/2S_i S_j] = 9.53 \text{ E-11 m/s} \quad (5)$$

Determinándose -en términos del desplazamiento de partículas sólidas- un dominio de la convección y la sedimentación sobre la difusión en un rango superior a 10^6 , claramente fuera del límite de precisión de la representación. Este último fenómeno fue, en consecuencias, eliminado del modelo de dinámica sólida presentado.

Por otra parte, el decaimiento del crecimiento bacteriano por fluctuaciones de temperatura es modelado típicamente por leyes del tipo Arrhenius (Topiwala y Sinclair, 1971; Bastin y Dochain, 1990), y el debido al efecto acidificante de la reacción por funciones experimentales (Rozzi, 1984). Las Tablas I y II a continuación, exhiben tasas de inhibición de crecimiento bacteriano determinadas por esas leyes para rangos esperados de variación paramétrica. En cada caso, en base a la desviación del óptimo (1.000) se calculó la varianza -sumatoria de los cuadrados de las desviaciones- y con ésta la desviación estándar posibilitando el modelado de la reacción en lógica difusa (Terano et al, 1994) en base a una campana de Gauss, función que guarda el mayor grado de semejanza con las leyes descriptas.

Tabla I - Inhibición del Crecimiento por Temperatura

| $\Delta T^{\circ}C$ | Crecim. | Desv. $^{\circ}C$ | Varianza $^{\circ}C^2$ | σ $^{\circ}C$ |
|---------------------|---------|-------------------|------------------------|----------------------|
| 0 | 1.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| ± 1 | 0.974 | 0.026 | 1.35E-3 | 0.037 |
| ± 2 | 0.947 | 0.053 | 6.97E-3 | 0.083 |
| ± 3 | 0.895 | 0.105 | 0.029 | 0.170 |
| ± 4 | 0.842 | 0.158 | 0.079 | 0.281 |
| ± 5 | 0.737 | 0.263 | 0.217 | 0.446 |

Tabla II - Inhibición del Crecimiento por Acidez

| ΔpH | Crecim. | Desviación | Varianza | σpH |
|-------------|---------|------------|----------|-------------|
| 0 | 1.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| ± 0.1 | 0.988 | 0.012 | 2.88E-4 | 0.017 |
| ± 0.2 | 0.951 | 0.049 | 5.09E-3 | 0.071 |
| ± 0.3 | 0.891 | 0.109 | 2.88E-2 | 0.170 |
| ± 0.4 | 0.809 | 0.191 | 0.102 | 0.319 |
| ± 0.5 | 0.707 | 0.293 | 0.274 | 0.523 |

La varianza combinada de ambos efectos es la suma de las individuales, resultando la desviación estándar neta:

$$\sigma = (\sigma^2 + \sigma pH^2)^{1/2} \quad (6)$$

La constante de tiempo de reacción de cada elemento Tr es recalculada -en cada intervalo de tiempo- en base a la concentración de sustrato S del elemento, las constantes de crecimiento e inhibición aplicables Ks y Ki y una constante de referencia $Tr0$, con la Ley de Haldane (Bastin and Dochain, 1990; Achilles y Bucki, 2000; Achilles et al, 2003) como:

$$Tr = (S/Ki + 1 + Ks/S)Tr0 \quad (7)$$

y la alteración de esta constante por fluctuaciones de temperatura y acidez de la solución es establecida a partir de un generador de números aleatorios que, para cada elemento e intervalo de tiempo, define la probabilidad de ocurrencia $f(Tr)$ de un nivel de fluctuación paramétrica dado para una distribución gaussiana normal (Ash, 1993). La reducción correspondiente de crecimiento bacteriano se refleja en la constante de tiempo de reacción incrementada según:

$$Tr' = Tr + \{-2\sigma^2 \ln[(2\pi)^{1/2}\sigma f(Tr)]\}^{1/2} \quad (8)$$

IMPLEMENTACIÓN DIGITAL

El modelo de sedimentación descrito, junto a la representación del impacto de variaciones de temperatura y acidez de la solución sobre el crecimiento bacteriano fueron incorporados al Simulador de Bioreactores $\Leftarrow SCS \Rightarrow$, una imagen ejecutable FORTRAN que por medio de unas cuarenta variables de estado resuelve en elementos finitos y tiempo discreto las dinámicas de transmisión de calor, transporte sólido, reacción y expansión de gases del dispositivo en base a una integración por el Método de Runge-Kutta (Kutta, 1901). La Figura 3 exhibe el Diagrama de Señal de Dinámica de Sólidos modificado -en correspondencia con el diagrama de transferencia intraelemento arriba descrito- en el que se indica la rutina de lógica difusa (FL) aplicada a la reacción (Mason, 1956; Dorf, 1967; Achilles et al, 2003).

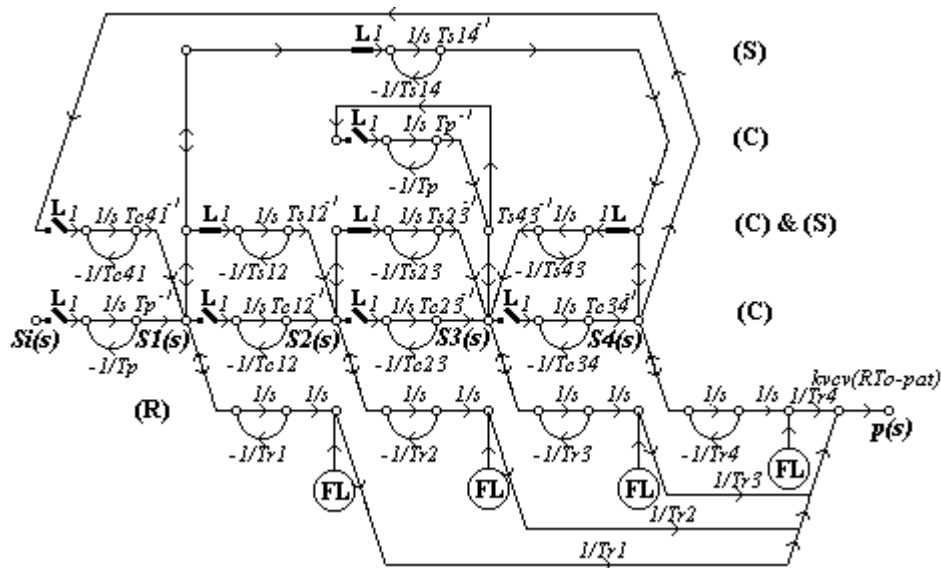


Fig.3 - Diagrama de Señal Modificado de Dinámica de Sólidos

En el diagrama se identificaron los loops de control de flujo convectivo (C), sedimentación (S) y reacción (R).

Los datos del prototipo utilizado para ensayar las rutinas incorporadas al programa fueron: Volumen (reactor): 64 m^3 ; Espesor (pared reactor): 12.8 cm ; Material: *Concreto*; Sólidos Volátiles: 28% ; Concentración de Sustrato: $7.35 - 4.90 \%$; Parámetros de Crecimiento e Inhibición: $K_s: 0.4 \text{ mmol/l}$; $K_i: 0.9 \text{ mmol/l}$; Temperaturas: Reactor: $35 \pm 3^\circ\text{C}$; Solución Fresca: 25°C ; Agua Caliente: 60°C ; Suelo: 10°C ; pH: 7.0 ± 0.3 ; Diámetro (serpentín calefactor y tubería de gas): 2.54 cm , Longitud (serpentín calefactor): 500 m , k (serpentín calefactor): $140 \text{ W/m}^2\text{C}$; Número de Reynolds (bombeo): 2000 .



Fig.4 - Concentraciones Elementales del Modelo de Simulación Modificado

Mientras que la Figura 4 muestra la evolución de las magnitudes instantáneas de concentración de sustrato de los cuatro elementos con las modificaciones implementadas al modelo, la Figura 5 exhibe el efecto sobre constante de tiempo de reacción $Tr3$ y presión de gas del modelado de la reacción en lógica difusa. El máximo intervalo de tiempo permitido por el programa de simulación modificado para los datos indicados fue de 50 s en lugar de los 280 s del programa sin modificar. Esto surge de que la mínima constante de tiempo establecida para el programa original por el paralelo de loop de bombeo (de constante de tiempo 3506 s para los datos ensayados) y serpentín calefactor (de constante de tiempo 2293 s), se modifica ahora a la determinada por el paralelo del loop de sedimentación (de constante de tiempo menor) con el del serpentín calefactor.

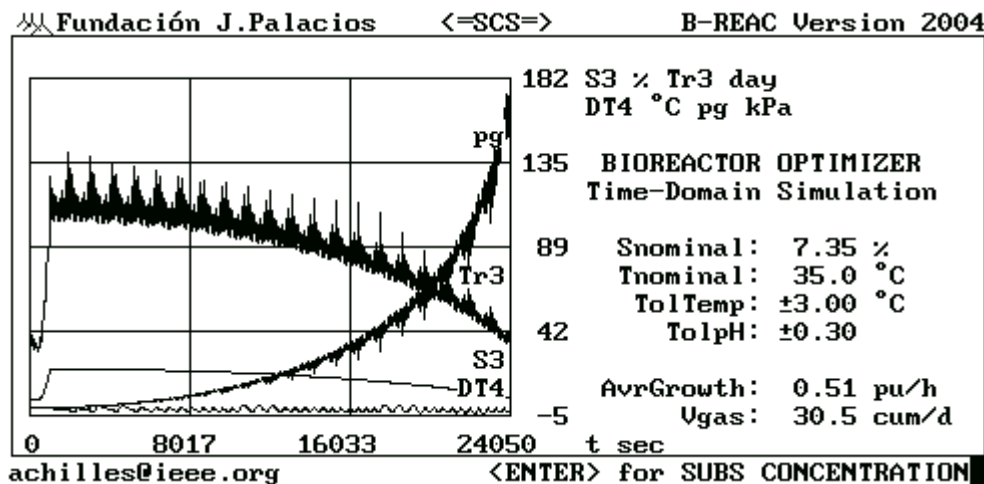


Fig.5 - Efecto del Modelo en Lógica Difusa de la Reacción sobre $Tr3$ y la Presión de Gas

CONCLUSIONES

Para permitir comparaciones con el modelo de simulación sin modificar, se adoptó la misma concentración nominal de sustrato de aquél (7.35%) en el ensayo de las modificaciones. Luego de la fase inicial de bombeo (800 s), en contraposición con el empobrecimiento de concentración de Elementos 3 y 4 registrado para el modelo sin modificar, la sedimentación opera en este caso enriqueciendo la concentración del Elemento 3 a más del triple de la nominal elegida a costa de los demás, los que participan solo marginalmente en la reacción (1600 s). A partir de ese instante, y hasta el final del ciclo, continúa la fermentación anaeróbica de sólidos remanentes en el Elemento 3 hasta que éste alcanza el nivel de concentración mínima nominal de 4.90% (24600 s).

El cambio de dinámica sólida -además de la reducción apreciable impuesta al intervalo de tiempo de integración- produjo una apreciable baja de la tasa de crecimiento bacteriano de 2.39 a 0.51 pu/hora por las variaciones de concentración elemental

originadas por la introducción de la sedimentación en el modelo, incrementándose la producción de 27.1 a 30.5 m³/día. Se agudiza, en este caso, la consideración de dos medidas correctivas: (a): el control de temperatura del Elemento 3 y (b): la recirculación del contenido líquido del reactor un número suficiente de veces a lo largo del ciclo operativo de modo de reestablecer una concentración elemental homogénea próxima al óptimo de 7.35 %; ambas estableciendo un incremento en la tasa de crecimiento bacteriano efectivo.

De la comparación del Simulador \Leftarrow SCS \Rightarrow con el Modelo ADM1 de la International Water Association (IWA Task Force for Mathematical Modelling of Anaerobic Digestion Processes, 2002) surge, para el programa argentino, (a): su mayor especificidad a bioreactores y menor generalidad; (b): su menor énfasis en modelado químico y microbiológico y mayor detalle en representación física del reactor; (c): su disponibilidad de un algoritmo de optimización de concentración de sustrato; (d): su capacidad -ahora instalada- de modelado estocástico de efectos inhibitorios de la reacción; y (e): su autosuficiencia de procesamiento matemático y gráfico, no requiriendo el uso de rutinas separadas de resolución de ecuaciones diferenciales.

El trabajo futuro previsto en relación al modelo incluye, además de la programación de medidas correctivas identificadas al uso de bioreactores, experimentación tendiente al modelado del impacto sobre la producción de gas de la difusión gas-líquido y de la costra sobrenadante al volumen líquido producida durante el proceso. Dicho trabajo experimental, junto a una revisión más detallada del Modelo ADM1, permitirá además discriminar proporciones de compuestos orgánicos fermentables del sustrato de los no fermentables e inorgánicos, con miras a dilucidar sus dinámicas individuales.

AGRADECIMIENTO

Son profundamente agradecidos los comentarios al modelo difuso de reacción recibidos del Dr. Enrique A. Sierra, Director de UTN Confluencia y del Grupo de Estudios de Sistemas Inteligentes de la Institución.

REFERENCIAS

- Taiganides E. (1992). Pig Waste Management and Recycling - The Singapore Experience, 1^a Ed., IDRC, Canada.
- 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). Modelling and Control of Anaerobic Digestion Processes, *IEEE Transactions on Instrumentation, Measurements and Control* **6**, 3, 153-159.
- Bastin G. y Dochain D. (1990). On-line Estimation and Adaptive Control of Bioreactors, 1st Ed., 1-82, Elsevier, New York.
- 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.
- 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.
- Sydenham P. (1982). Handbook of Measurement Sciences, 1^a Ed., John Wiley and Sons, New York.
- Van Valkenburg M. (1960). Modern Network Synthesis, 1^a Ed., John Wiley and Sons, New York.
- Achilles R. y Sierra E. (2001). Diseño Solar Pasivo Óptimo de Construcciones: Un Modelo Preliminar, *Publicación AERMA* **5**, 8.49-8.54.
- Achilles R., Bucki Wasserman, B., Pojmaevich A. y Carroza I. (2003). Difusión de Sólidos y Convección Térmica en el Modelo de Simulación de Bioreactores, *Publicación AERMA* **7**, 1, 6.07-6.12.
- IWA Task Force for Mathematical Modelling of Anaerobic Digestion Processes (2002). Anaerobic Digestion Model N°1 (ADM1), Scientific and Technical Report N° 13, IWA Publishing, London.
- Treybal R. (1973). Operaciones con Transferencia de Masa, 1^a Ed., 22-23, Editorial H.A.S.A., Buenos Aires.
- Terano T., Asai K. y Sugeno M. (1994). Applied Fuzzy Systems. 2^a Ed., Academic Press, United Kingdom.
- Ash C. (1993). The Probability Tutoring Book, 1^a Ed., 127-136, IEEE Press, New York.
- Kutta W. (1901). Beitrag zur Naeherungsweise Integration Totaler Differentialgleichungen, *Zeitschrift Mathematik und Physik* **46**, 435-453.
- 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., New York.

ABSTRACT - The article introduces a full analysis of anaerobic-bioreactor solid-transportation dynamics. Two-fold refinements to an existing finite-element simulation model are proposed. Sedimentation, a phenomenon exhibiting a high degree of impact on the process is introduced in the program jointly with a fuzzy-logic routine representing the influence on bacterial growth of temperature and acidity variations. Significant changes in the simulation are observed from tests carried out on the modified software with the Confluencia Tech University 64 m³ prototype data. The need of studying collateral phenomena as well as some corrective measures to be taken on reactor operation, are stressed by the software's tests.

Keywords: Renewable Energy – Anaerobic Fermentation – Solid-Transportation Dynamics – Non-linear Systems – Fuzzy Logic