

SIMULACIÓN DE BIOREACTORES: REFINAMIENTOS AL MODELO DE DINÁMICA TÉRMICA

R.A.Achilles¹, B.Bucki Wasserman², A.Pojmaevich³, P.L.Chandía⁴

UTN Confluencia, P.Rotter s/n P.Huincul Neuquén,AR Q8318
 ph/fax +54 (299) 496-0510 achilles@ieee.org

RESUMEN - El artículo complementa un previo de refinamiento al modelo de dinámica sólida del programa de simulación de bioreactores de cuatro elementos finitos de UTN Confluencia. Una revisión a los coeficientes aplicados de transferencia de calor intraelemento y elemento-tierra es complementada con cambios a los criterios operativos del serpentín calefactor. El mecanismo de Lógica Difusa representativo del impacto de la variación de temperatura sobre el crecimiento bacteriano es reformulado en base a Funciones de Membresía de temperatura elemental. Adicionalmente, un análisis crítico de la conversión química Ácidos Grasos Volátiles→Metano identifica un mecanismo de autoregulación del *pH* de la solución durante la reacción permitiendo desestimar la consideración de su impacto sobre la velocidad de reacción. El ensayo con datos del prototipo de $64 m^3$ permite análisis comparativos.

Palabras Clave: Energía Renovable–Transferencia de Calor–Transferencia Sólida–Sistemas No-Lineales–Lógica Difusa.

INTRODUCCIÓN

La búsqueda de modelos de optimización y simulación de bioreactores anaeróbicos controlados por investigadores de UTN Confluencia se remonta a 1997, originándose en el manifiesto interés provincial en el desarrollo de esta fuente de energía alternativa para el abastecimiento energético a pobladores rurales dispersos de la cordillera andino-patagónica neuquina. Las condiciones climáticas extremas de esa región obligaron a la consideración de medios de control más sofisticados.

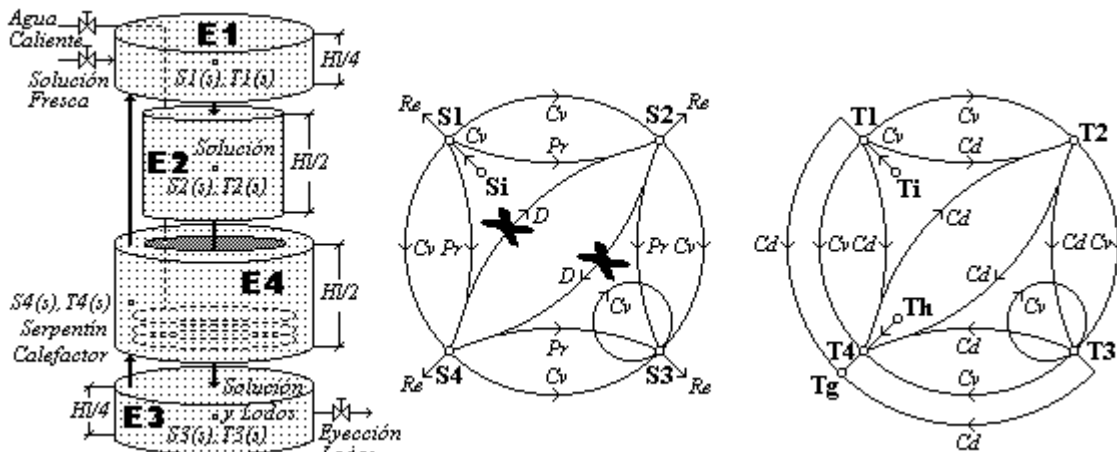


Fig. 1 - Red de Elementos Finitos de Solución, Diagramas de Interacción Dinámica Sólida y Térmica del Bioreactor

El modelo concentrado de optimización operativa oportunamente desarrollado fue complementado con una representación no adiabática en cuatro elementos finitos (E1-E2-E3-E4) del volumen líquido del reactor que permitió verificar la evolución de la concentración de sustrato y temperatura a lo largo de un ciclo operativo del dispositivo. Mientras que la dinámica sólida se caracterizara como un fenómeno unidireccional desde elementos superiores hacia los inferiores gobernado por la acción convectiva de bombeo de solución fresca y lodos (Cv), la precipitación de sólidos (Pr) y el desprendimiento de componentes volátiles por la reacción (Re), la dinámica térmica se caracterizó por un reflujo ascendente por paredes del reactor por conducción (Cd) y convección térmica natural y forzada (Cv), esta última sustentada en el bombeo de solución y a la operación del serpentín calefactor (Achilles et al, 2003; Achilles et al, 2004). Dada la despreciable velocidad de partículas en la difusión (D) frente a otras formas de dinámica sólida la misma fue eliminada del modelo que, por otro lado, representó el impacto de las variaciones de temperatura y *pH* sobre la reacción (Bastin y Dochain, 1990; Terano et al, 1994) en base a un algoritmo de lógica difusa.

La red de elementos finitos considerada y los respectivos diagramas de interacción se ilustran en la Figura 1. El programa de simulación, además de permitir la verificación de diseños emergentes del programa de optimización (Sydenham, 1982; Van

1. Director GEFA, Doc.Investig. 2. Director GESE, Doc.Investig. 3. Estud.Ing.Química 4. Estud.Ing.Electrónica

Valkenburg, 1960; Achilles y Sierra, 2001) dio lugar a una herramienta con un enfoque diferente y un buen grado de complementariedad con modelos de reciente sustanciación (IWA Task Force for MMADP, 2002).

METODOLOGÍA

Los Diagramas de Señal de Dinámica de Sólidos (en el que puede observarse la unidireccionalidad $E1 \rightarrow E2 \rightarrow E3$ y $E1 \rightarrow E4 \rightarrow E3$ válida en condición de bombeo o estacionaria) y de Transferencia Térmica (caracterizado por el reflujo convectivo $E1 \rightarrow E2 \rightarrow E3 \rightarrow E4 \rightarrow E1$), son exhibidos en la Figura 2 (Mason, 1956). En adición a los coeficientes

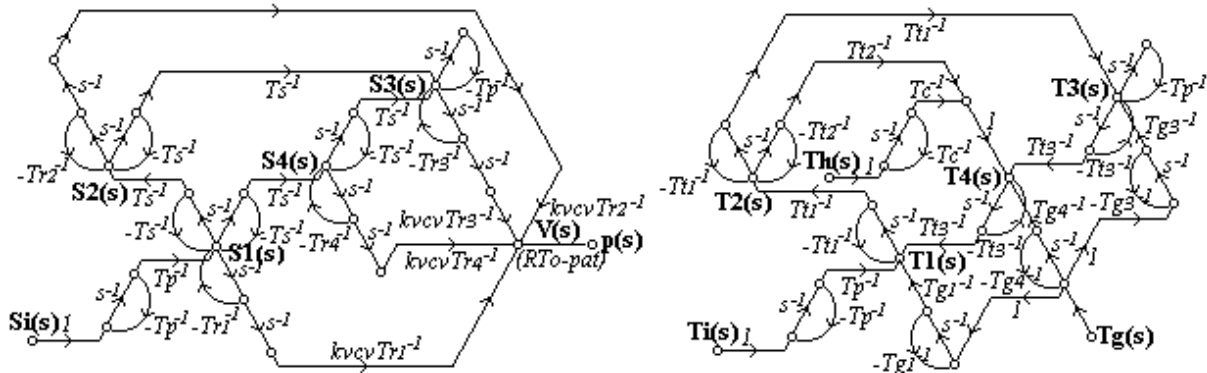


Fig. 2 - Diagramas de Señal de Transporte Sólido y Transferencia de Calor Intraelemento del Bioreactor

indicados que afectan mayormente la reacción (proporción de sólidos volátiles, factor de crecimiento bacteriano, etc.), las siguientes constantes de tiempo participan de los respectivos procesos:

- Tp y Tc : operaciones de bombeo y del serpentín calefactor,
- Ts : convección sólida durante bombeo y precipitación en ausencia del mismo,
- $Tr1$, $Tr2$, $Tr3$ y $Tr4$: dinámicas elementales de reacción,
- $Tt1$, $Tt2$ y $Tt3$: transferencias 1 \rightarrow 2 y 2 \rightarrow 3, 2 \rightarrow 4 y 3 \rightarrow 4 y 4 \rightarrow 1 de calor intraelemento,
- $Tg1$, $Tg3$ y $Tg4$: pérdida de calor de Elementos $E1$, $E3$ y $E4$ al medio externo ($E2$, ubicado en el núcleo del volumen líquido del reactor, no participa del fenómeno).

Mientras que la invarianza de Tp , Tc , Ts (precipitación), $Tt1-3$ y $Tg1-4$ no planteó dificultades a la implementación digital del modelo en una imagen ejecutable FORTRAN, el Simulador de Bioreactores \Leftarrow SCS \Rightarrow , la alinealidad de las constantes de tiempo Ts (convección sólida) y $Tr1-4$ obligó a su recálculo en cada intervalo de tiempo de la simulación.

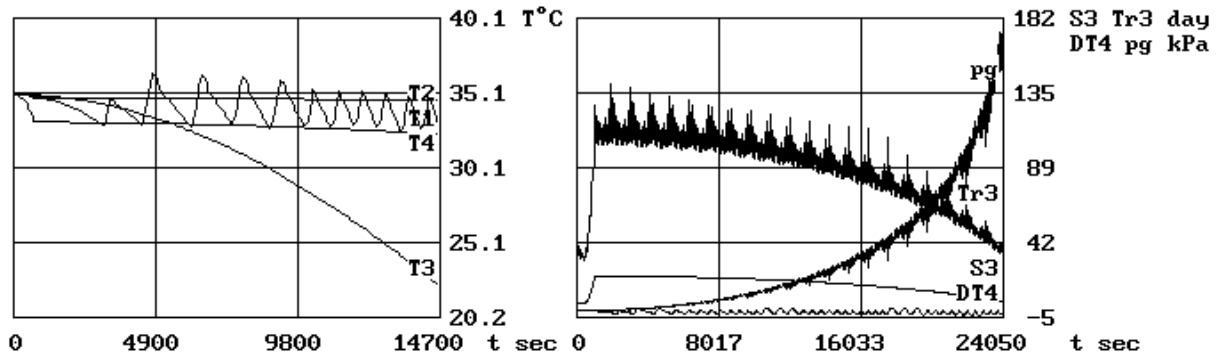


Fig. 3 - Temperaturas Elementales, Concentración, T(reacción) y Presión de Gas del Modelo sin Modificar

La Figura 3 exhibe las variaciones de temperatura de los cuatro elementos de solución líquida a lo largo de un ciclo operativo del prototipo de 64 m³ con que fue ensayado el modelo de simulación anterior (Achilles et al, 2003). Los refinamiento propuestos a éste en el presente trabajo surgen de la observación de estos comportamientos:

- La degradación de la temperatura $T3$ por debajo de la tolerancia operativa del reactor, en contraste con la marcada estabilidad de las temperaturas $T1$ y $T2$. Si bien es esperable una inestabilidad térmica más marcada del elemento $E3$ (inferior) por su mayor distancia de la influencia del serpentín calefactor y mayor exposición a pérdidas de calor al medio, lo observado pone en tela de juicio la referencia $T4$ considerada para operación del serpentín calefactor, y fundamentalmente el coeficiente de transmisión de calor por conducción $k(H_2O)=0.63 W/m \cdot K$ utilizado en aquella representación.
- El excesivo número de 11 operaciones del serpentín calefactor -sin utilizar en plenitud el rango de $\pm 3^\circ C$ adoptado en aquel caso- en algo más de cuatro horas de simulación, no obstante su robusto dimensionamiento (conducto de 1" de diámetro, 500m de longitud y $k=140 W/m^2 K$).

- c. El probable impacto adicional sobre $Tr3$ de considerar sólo materiales tradicionales, $k(\text{concreto})=0.7W/m\cdot K$, sin aislación térmica para un reactor de ese volumen en temperatura ambiente extrema.

Para corregir las anomalías observadas, el modelo fue aplicado al reactor previamente estudiado de 64 m^3 , con un coeficiente combinado de transmisión de conducción/convección intraelemento, un diseño de serpentín calefactor más compacto y una aislación térmica más apta para la baja temperatura de suelo (Telgopor o Poliestireno).

Comparando el coeficiente de conducción previamente utilizado $k(H_2O)=0.63\text{ W/m}\cdot K$ con un coeficiente convectivo mínimo $h(H_2O)_{\text{min}}=50\text{ W/m}^2K$ (Incropera y DeWitt, 1996), la transmisión de calor equivalente por metro cuadrado de aquel para la distancia típica intraelemento $x_{12}=1.12\text{ m}$ resulta:

$$h(H_2O)_{\text{eq}} = 0.63\text{ W/m}\cdot K / 1.12\text{ m} = 0.56\text{ W/m}^2K = 0.0108\text{ }h(H_2O)_{\text{min}}, \quad (1)$$

es decir, menos del 1.1% del calor transmitido mínimamente por convección. Considerando, previo a la obtención de resultados experimentales sobre el prototipo, la combinación de un nueve por ciento de convección con un 91% de conducción, el coeficiente resultaría:

$$h(H_2O)_{\text{comb}} = 0.09 \cdot 50\text{ W/m}^2K + 0.91 \cdot 0.56\text{ W/m}^2K = 5.0\text{ W/m}^2K. \quad (2)$$

Este coeficiente combinado de transmisión se consideró en el presente trabajo, además de una aislación térmica externa del reactor de Poliestireno ($k=0.027\text{ W/m}\cdot K$) de 6" de espesor, duplicada en el fondo del dispositivo.

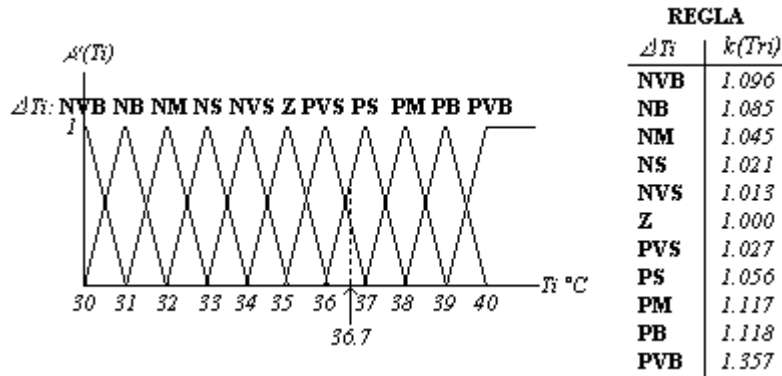


Fig. 4 - Función de Membresía y Regla del Impacto Difuso $\Delta Ti \rightarrow Tri$

Por otra parte, la evolución de la constante de tiempo de reacción $Tr3$ exhibe, en la Figura 3, inestabilidades instantáneas de hasta el 20 % originadas en el mecanismo de generación aleatoria de la probabilidad de ocurrencia de los apartamientos ΔT y ΔpH respecto a temperatura y acidez nominales. Con relación al impacto del pH sobre el crecimiento bacteriano, cabe acotar que los ácidos grasos volátiles (AGV) participan activamente en la disminución de la acidez de la solución. Si las bacterias metanogénicas no son suficientemente rápidas en convertir la totalidad de AGV en Metano, parte de la conversión es efectuada por las acetogénicas a costa de una disminución del pH de la solución. Aún en ese caso, existe un mecanismo adicional de autocontrol por el buffer químico:



Consecuentemente con el ut supra análisis, el impacto de variaciones de acidez de la solución sobre la velocidad de reacción fue eliminado del modelo conservándose sólo el asociado a fluctuaciones de temperatura. Para el modelado de estas últimas, el algoritmo estocástico en uso fue reemplazado por uno de Funciones de Membresía, que en casos de sistemas no lineales variables en el tiempo aporta un control rápido y robusto (Sousa y Bose, 1994). Para generar las mismas se consideraron desde variaciones negativas muy grandes (**NVB**) hasta variaciones positivas muy grandes (**PVB**) de temperatura elemental en correspondencia con la tolerancia máxima típica de temperatura nominal de $\pm 5^\circ C$. La Regla del impacto de cada nivel de variación sobre la respectiva constante de tiempo de reacción (exhibida en la Figura 4) fue extraída de leyes del tipo de la de Arrhenius (Topiwala y Sinclair, 1971; Bastin y Dochain, 1990). Para una temperatura elemental no exacta como la indicada, $Ti=36.7^\circ C$, el impacto es calculado en base al Grado de Membresía de las Funciones **PVS** y **PS** adyacentes al correspondiente apartamiento de temperatura $\Delta Ti=1.7^\circ C$, según:

$$k(Tri) = [\Delta Ti - \Delta T(\text{PVS})] \cdot k(\text{PS}) - [\Delta Ti - \Delta T(\text{PS})] \cdot k(\text{PVS}) = (1.7 - 1.0) \cdot 1.056 - (1.7 - 2.0) \cdot 1.027 = 1.047, \quad (4)$$

aplicado como factor de corrección de la constante de tiempo de reacción calculada en base a la Ley de Haldane con la concentración de sustrato elemental y los factores de crecimiento e inhibición correspondientes a la combinación enzima-sustrato adoptada (Achilles et al, 2004).

DISCUSIÓN DE RESULTADOS

Los datos del prototipo utilizado para ensayar las rutinas incorporadas al programa fueron: Volumen (reactor): 64 m^3 ; Sustrato: Excremento de Chivo, Sólidos Volátiles: 28% ; Concentración: $6.20\text{-}4.15 \%$; Factores de Crecimiento e Inhibición: 0.4 y 0.9 mmol/l ; Temperaturas: Reactor: $35 \pm 3^\circ\text{C}$; Solución Fresca: 32°C ; Agua Caliente: 60°C ; Suelo: 10°C ; Diámetro (serpentin calefactor y tubería de gas): 2.54 cm , k (serpentin): $140 \text{ W/m}^2\text{C}$, Longitud (serpentin): 500 y 200 m ; Número de Reynolds (bombeo): 2000 . Espesor (aislación térmica): $10''$ (concreto engrosado), $5''$ (Poliestireno).

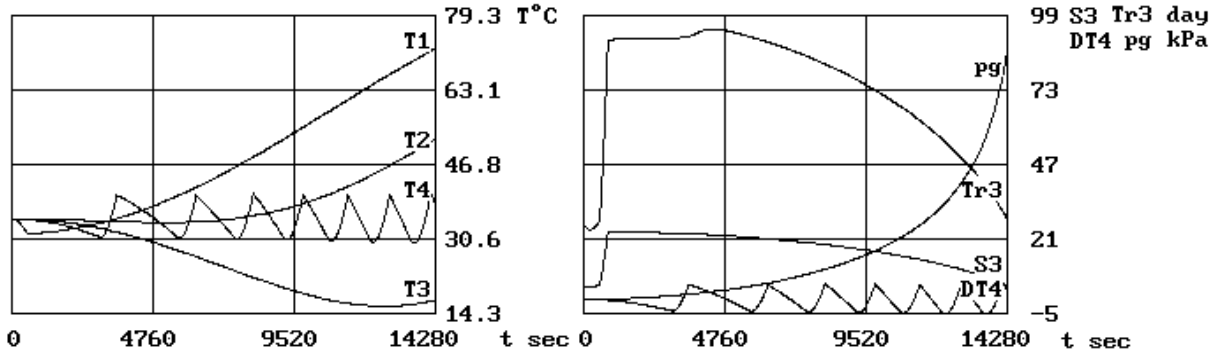


Fig. 5 - Id. id. Figura 3, Coeficiente de Transmisión de Calor Mixto, Paredes de Concreto de $10''$, Serpentin de 500 m , Reacción en Lógica Difusa con Funciones de Membresía

La Figura 5 muestra la evolución de las cuatro temperaturas elementales, la concentración de sustrato $S3$, la constante de tiempo de reacción $Tr3$ y la presión de gas pg a lo largo de un ciclo operativo del reactor con un coeficiente combinado de conducción-convexión de calor y el esquema de Lógica Difusa con Funciones de Membresía implementados en el modelo. En este caso se mantuvo la longitud del serpentin calefactor en 500 m y consideraron paredes de concreto engrosado ($10''$). Puede observarse que el coeficiente combinado de conducción/convexión de calor pone de manifiesto, además de una mayor inestabilidad de temperaturas elementales ($15\text{-}71^\circ\text{C}$ en contraste con $22\text{-}36^\circ\text{C}$ de la Figura 3), la extensión de la influencia calefactora del serpentin de $E4$ a los otros elementos (incluido $E3$) dada la inflexión ascendente mostrada por $T3$ antes del final del ciclo. Previo a ese punto, la constante de tiempo de reacción de ese elemento, $Tr3$ denota una inflexión en el punto de descenso de $T3$ por debajo del límite de la Función de Membresía de $\Delta T = -5^\circ\text{C}$. El serpentin calefactor continúa mostrando una excesiva tasa de operación de casi dos operaciones horarias.

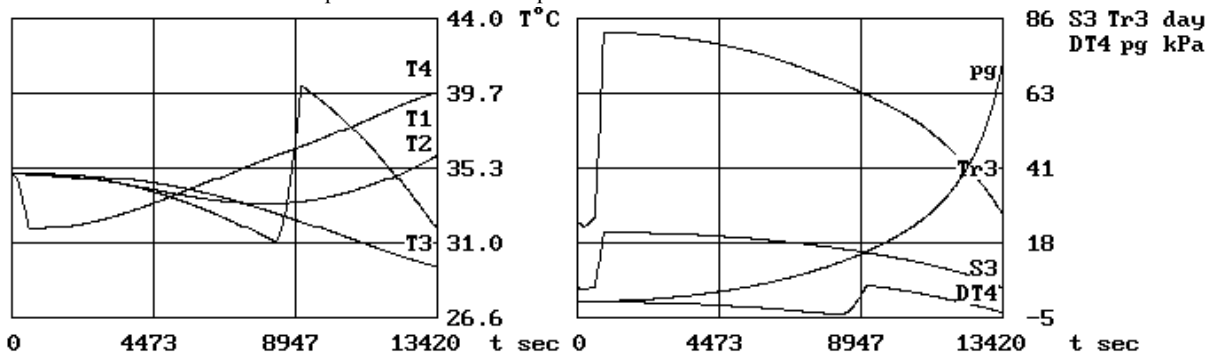


Fig. 6 - Id. id. Figura 5, Aislación Térmica de Poliestireno de $6''$ Duplicada en el Fondo del Reactor, Serpentin de 200 m

El intercambio térmico entre elementos con el coeficiente combinado de conducción/convexión de calor $0.91/0.09$ parece en principio adecuado para el volumen de reactor y número de elementos finitos en consideración. La estabilización térmica del caso estudiado puede formularse a partir de variables asociadas al dimensionamiento del serpentin calefactor y a la aislación térmica exterior del bioreactor.

Con tal propósito, en una simulación complementaria a la anterior se adoptaron los criterios de:

- Reducir la pérdida de calor al medio y estabilizar temperaturas elementales por adopción de una aislación externa de Poliestireno,
- Disminuir la frecuencia de operaciones del serpentin calefactor ampliando la tolerancia de temperatura a la máxima $35 \pm 5^\circ\text{C}$ y reduciendo su longitud por debajo del cincuenta por ciento.

La Figura 6 exhibe el comportamiento de las variables supervisadas al aplicar una aislación térmica exterior de Poliestireno ($h = 0.027 \text{ W/m}\cdot\text{K}$) en combinación con un serpentin de $1''$ de diámetro y 200 m de longitud. La combinación de estos parámetros con la mayor tolerancia térmica (perfectamente aceptable para las bacterias mezófilas en consideración) de $\pm 5^\circ\text{C}$ dio lugar a la única operación del serpentin pasadas las dos horas y media de carga del dispositivo manteniéndose todas las temperaturas dentro del rango $29.6\text{-}40.0^\circ\text{C}$ compatible con la tolerancia especificada de $\pm 5\%$. Puede observarse la eliminación de la inflexión en la gráfica de la constante de tiempo de reacción $Tr3$. La concentración de sustrato óptima se redujo de 6.95 a 6.20% respecto al caso anterior debido a la reducción de constante de tiempo por acortamiento del serpentin

calefactor, no obstante ello el crecimiento bacteriano creció, gracias a la estabilización térmica, de 1.10 a 1.21 pu/hora. El volumen sufrió una reducción proporcional a la disminución de concentración de 24.5 a 22.1 m³/dia. El intervalo de tiempo de simulación fue, en todos los casos, 50 s.

CONCLUSIONES

Los avances del presente trabajo se consideran relevantes dentro de la limitación estructural de adoptar el mínimo de cuatro elementos finitos de solución líquida para representar las dinámicas de transferencia sólida y de calor del bioreactor.

Tres caminos quedan insinuados para la continuidad del desarrollo del modelo matemático de este dispositivo al que el futuro le depara sin duda un mayor protagonismo en países hoy con abundantes recursos de energía no renovable:

- Continuar un desarrollo de tipo tentativo, sin incrementar el número de elementos finitos, perfeccionando coeficientes de transferencia sólida y de calor intraelemento sobre bases experimentales precarias en laboratorios de universidades,
- Continuar un desarrollo de tipo tentativo, incrementando el número de elementos finitos, perfeccionando y procurando generalizar coeficientes de transferencia sólida y de calor intraelemento sobre las bases del análisis de la interacción dinámica sólidos↔líquidos↔temperatura y experimentación precaria en laboratorios de universidades,
- Discontinuar todo desarrollo de modelos matemáticos sofisticados hasta que se verifique la implementación y un tiempo de operación suficiente de un número de prototipos y/o unidades operativas que sirvan más efectivamente a aquel propósito.

En ellos, inevitablemente, el nexo entre método científico y desarrollo sustentable se ve inmerso en el paradigma de países en vías de desarrollo con alguna abundancia actual de combustibles fósiles al que no escapa Argentina. Con miras a la continuidad de trabajos sobre el modelo hasta aquí desarrollado, resultaría instrumental que los esquemas de supervisión de futuros bioreactores a implementar en el país contemplen las variables de estado definidas aquí como críticas.

REFERENCIAS

- 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, 6.07-6.12.
- Achilles R., Guala-Valverde J., Bucki Wasserman B. y Pojmaevich A. (2004). Simulación de Bioreactores: Refinamientos al Modelo de Dinámica de Sólidos, Publicación AERMA 8, 8.13-8.17.
- Bastin G. y Dochain D. (1990). On-line Estimation and Adaptive Control of Bioreactors, 1st Ed., 1-82, Elsevier, New York.
- Terano T., Asai K. y Sugeno M. (1994). Applied Fuzzy Systems. 2^a Ed., Academic Press, United Kingdom.
- 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.
- 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.
- Mason S. (1956). Feedback Theory: Further Properties of Signal Flow Graphs, Proceedings IRE 44, 7, 920-926.
- Incropera F. y DeWitt D. (1996). Introduction to Heat Transfer, 3rd Ed., John Wiley and Sons, New York.
- Sousa G.C.D. y Bose B.K. (1994). A Fuzzy Set Theory Based Control of a Phase-Controlled Converter DC Machine Drive, IEEE Transactions on Industrial Applications, 30, 34-44.
- Topiwala H. y Sinclair C. (1971). Temperature Relationship in Continuous Culture, Biotechnology and Bioengineering 13, 795-813.

ABSTRACT - This article complements a previous one where refinements to the solid-transportation dynamics of the four-finite-element bioreactor simulation model of Confluencia Tech were proposed. A revision of the applied intraelement and element-to-ground heat-transfer coefficients is complemented with changes to the heating-coil operating criteria. A reformulation of the fuzzy-logic mechanism modeling the influence of temperature variations on bacterial growth is carried out based on Membership Functions for the elementary temperatures. Besides, a critical analysis of the Volatile Greasy Acids→Metane chemical conversion identifies a self-regulating mechanism of the solution's acidity during reaction, allowing dismiss its influence on reaction speed. Tests with the 64 m³ reactor prototype data allow comparative analyses.

Keywords: Renewable Energy – Heat Transfer – Solid-Transfer – Non-linear Systems – Fuzzy Logic