Control y Optimización de Bioreactores

Clase 3

Salomé Martínez[1] Héctor Ramírez C.[1]

[1] DIM & CMM, Universidad de Chile, Santiago de Chile

Curso MA45C: Ecología Matemática 2010

Planificación

1. Introducción
2. Formulación del Problema de Tiempo Mínimo
3. Conclusiones

Bioreactores Semicontinuos

- Los bioreactores semicontinuos o secuenciales por lote (SBR en inglés) son usualmente utilizados en industrias biotecnológicas, principalmente en el tratamiento de aguas.
- Típicamente, un tanque es llenado con un *lodo activo* o micro-organismos capaces de degradar algún sustrato no deseado.
- El método consiste en secuencias de ciclos compuestos de tres fases:
  - Fase 1: llenar el bioreactor con el agua contaminada,
  - Fase 2: esperar que la concentración del sustrato decrezca hasta un nivel de concentración considerado bajo,
  - Fase 3: vaciar el agua "limpia" del bioreactor, dejando el lodo activo dentro.
- El tiempo necesario para realizar estos ciclos puede ser largo y tiene un impacto económico en el proceso total
- Manipular el flujo de entrada durante la fase de llenado tiene una clara influencia en la duración del proceso total (más precisamente en la duración de las fases 1 y 2 pues la fase 3 tiene un tiempo fijo)

Ecuaciones para un Bioreactor con *n* especies

Modelo Bioreactor Semicontinuo (SBR)

$$\begin{cases} \dot{x}_i = \mu_i(s)x_i - \dfrac{F}{v}x_i, \quad x_i(t_0) = y_i \quad (i = 1 \cdots n) \\ \dot{s} = -\displaystyle\sum_{j=1}^{n} \mu_j(s)x_j + \dfrac{F}{v}(s_{in} - s), \quad s(t_0) = z \\ \dot{v} = F, \quad v(t_0) = w \end{cases}$$

donde

- x_i: *concentración de la especie i en el tanque*
- s: *concentración del sustrato en el tanque*
- v: *volumen de agua presente en el tanque*
- $\mu_i(\cdot)$: *función de crecimiento de la especie i*
- F: *variable de control no negativa*
- s_{in}: *concentración constante en la entrada*
- $\xi = (y_1, \ldots, y_n, z, w) \in \mathcal{R}_+^n \times]0, s_{in}[\times]0, v_{\max}[$: *condiciones iniciales*
- $\mathcal{T} = \mathcal{R}_+^n \times]0, s_{out}] \times \{v_{\max}\}$: *conjunto objetivo para variables de estado*

Problema de Tiempo Mínimo

Problema de Control Optimo

$$\begin{cases} \dot{x}_i = \mu_i(s)x_i - \frac{F}{v}x_i, \quad x_i(t_0) = y_i \quad (i = 1 \cdots n) \\ \dot{s} = -\sum_{j=1}^{n} \mu_j(s)x_j + \frac{F}{v}(s_{in} - s), \quad s(t_0) = z \\ \dot{v} = F, \quad v(t_0) = w \end{cases}$$

Dada cualquier condición inicial $\xi = (y_1, \ldots, y_n, z, w)$, el objetivo es alcanzar el conjunto $\mathcal{T}$ en un tiempo mínimo, es decir

$$V(\xi) = \inf_{F(\cdot)} \left\{ t - t_0 \mid s^{\xi,F}(t) \leq s_{out} \ , \ v^{\xi,F}(t) = v_{\max} \right\} , \tag{1}$$

donde $s^{\xi,F}(\cdot)$, $v^{\xi,F}(\cdot)$ denotan soluciones del sistema anterior con condiciones iniciales ξ y control $F(\cdot)$

Controles Impulsionales

Permitiremos que $F(\cdot)$ sea impulsional, esto nos lleva a considerar medidas dF, que pueden descomponerse en una medida dt, y en una singularidad o parte "impulsiva":

$$dF(t) = u(t)dt + d\sigma$$

Cuando un 'impulso' $d\sigma$ ocurre en el tiempo t, el volumen v cambia bruscamente de $v^-(t)$ a $v^+(t)$, implicando un cambio en las concentraciones de x_i y s como sigue:

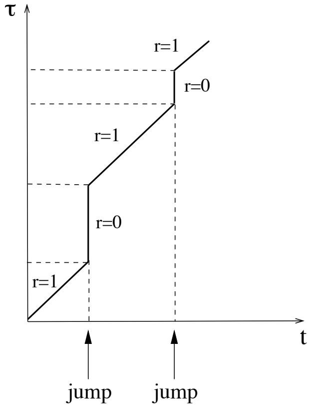
$$\left.\begin{aligned} x_i^+(t) &= x_i^-(t)\frac{v^-(t)}{v^+(t)} \\ s^+(t) &= s^-(t)\frac{v^-(t)}{v^+(t)} + s_{in}\left(1 - \frac{v^-(t)}{v^+(t)}\right) \end{aligned}\right\} \Leftrightarrow \left\{\begin{aligned} \frac{dx_i}{d\tau} &= -\frac{u}{v}x_i \\ \frac{ds}{d\tau} &= \frac{u}{v}(s_{in} - s) \end{aligned}\right.$$

de τ^- a τ^+ con cualquier control $u(\cdot)$ que satisface

$$\int_{\tau^-}^{\tau^+} u(\tau)d\tau = v^+(t) - v^-(t)\,.$$

Reparametrización del Tiempo

Así, las trayectorias del sistema pueden ser parametrizadas con un tiempo ficticio τ tal que $dt = r d\tau$, donde r es un control que toman los valores $r = 1$ cuando dF es regular en τ, y $r = 0$ cuando dF es impulsional:



El caso de una especie

Sistema con $n = 1$

$$\begin{cases} \dfrac{dx}{d\tau} = r\mu(s)x - \dfrac{u}{v}x \\ \dfrac{ds}{d\tau} = -r\mu(s)x + \dfrac{u}{v}(s_{in} - s) \\ \dfrac{dv}{d\tau} = u. \end{cases}$$

- μ *creciente* $\Rightarrow$
  1. *Realizar inmediatamente un impulso hasta llenar el bioreactor*
  2. *esperar*
- μ *creciente-decreciente* $\Rightarrow$
  1. *Llegar al nivel máximo (con un impulso o esperando)*
  2. *mantenerse en este nivel hasta que el bioreactor este lleno*
  3. *esperar*

El caso de dos especies

Sistema con $n = 2$

$$\begin{cases} \dfrac{dx_i}{d\tau} = r\mu_i(s)x_i - \dfrac{u}{v}x_i \qquad i = 1,2 \\ \dfrac{ds}{d\tau} = -r(\mu_1(s)x_1 + \mu_2(s)x_2) + \dfrac{u}{v}(s_{in} - s) \\ \dfrac{dv}{d\tau} = u. \end{cases}$$

μ_1, μ_2 crecientes implican dos posibles soluciones:

(1) *Realizar inmediatamente un impulso hasta llenar el bioreactor*

(2) *esperar*

o bien

(1) *alcanzar algún nivel especifico del sustrato (con un impulso o esperando)*

(2) *mantenerse en este nivel hasta que el bioreactor este lleno*

(3) *esperar*

El caso de dos especies

Sistema con $n = 2$

$$\left\{ \begin{array}{l} \dfrac{dx_i}{d\tau} = r\mu_i(s)x_i - \dfrac{u}{v}x_i \qquad i = 1,2 \\ \dfrac{ds}{d\tau} = -r(\mu_1(s)x_1 + \mu_2(s)x_2) + \dfrac{u}{v}(s_{in} - s) \\ \dfrac{dv}{d\tau} = u. \end{array} \right.$$

μ_1, μ_2 *crecientes y* $\mu_1 \leq \mu_2$ *implican*

(1) *Realizar inmediatamente un impulso hasta llenar el bioreactor*

(2) *esperar*

Algunos comentarios

- Para controles medibles y $n = 1$ estos rsultados fueron obtenidos por Moreno (1999)
- Estas estrategias son normalmente usadas
- Herramientas matemáticas requeridas por nosotros fueron: Principio del Mínimo de Pontryagin y ecuaciones de Hamilton-Jacobi-Bellman

Esperar puede ser una estrategia optima...

Ejemplo

Consideremos

$$\mu_1(s) = 5\sqrt{s}, \quad \mu_2(s) = s^2,$$

y los valores $s_{out} = 0.1$ *y* $s_{in} = 5$

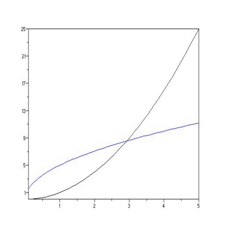


Figure: Gráfico de las dos funciones de crecimiento

Esperar puede ser una estrategia optima....

Ejemplo

Para las condiciones iniciales $v_{\max} = 10$, $y_1 = 1$, $z = 3$ *y* $w = 1$, *hemos calculado el posible* s^* *para diferentes valores de* y_2.

Table:

y_2	$T(IOI)$	s^*	$T(SA(s^*))$	*ganancia*
0	2.320765	NO es óptimo	–	–
10^{-4}	2.126756	1.678	1.973976	7%
10^{-3}	1.700494	1.97	1.515415	11%
10^{-2}	1.186231	2.46	1.101530	7%
0.05	0.867009	3.05	0.842255	3%
0.1	0.746446	3.34	0.739046	1%
0.5	0.522361	NO es óptimo	–	–

Conclusiones

- La comprensión del funcionamiento de los bioreactores permite mejorar una numerosa gama de problemas industriales, en particular el tratamiento de aguas
- En esta clase hemos caracterizado la gestión optima (en términos de tiempo mínimo) para el tratamiento de aguas con un bioreactor SBR con una y dos especies
- El último ejemplo muestra que en presencia de pequeñas poblaciones de una especie que es más eficiente para pequeñas concentraciones de sustrato, la estrategia que consiste en alcanzar un cierto nivel de sustrato y esperar puede ser mejor que la de llenado rápido con un impulso inmediato
- Creemos que este resultamos puede tener un impacto en aplicaciones biotecnológicas
- Existen numerosas variantes del problema estudiado aquí que tienen un fuerte impacto industrial. **Hay espacio para nueva investigación aplicada!**

Bibliografía

J. Moreno
Optimal control of bioreactors for the wastewater treatment.

Optimal Control, Applications and Methods, 20, pp. 145–164, 1999.

P. Gajardo, H. Ramírez C., A. Rapaport
Minimal Time SBRs with Bounded and Impulse Controls for One or More Species.
SIAM Journal on Control & Optimization, 47 (6), pp. 2827–2856, 2008.

H.L. Smith and P. Waltman.
The Theory of the Chemostat.
Cambridge University Press, 1995.