

MA4703 Control Óptimo: Teoría y Laboratorio. Semestre Primavera 2019

Profesor: Héctor Ramírez C. Auxiliares: Emilio Molina, Rolando Rogers

## Proyecto de investigación: Maximización de la producción de Biogas

**Descripción:** El objetivo de este proyecto es analizar un modelo basado en la dinámica de un quimiostato compuesto por 2 especies de microorganismo y 2 sustratos de los cuales se alimentan, y maximizar la producción de biogas a partir de la dilución en un cierto período de tiempo. Para ello se debe describir y resolver un problema de control óptimo, obteniéndose una política óptima de control basada en el principio del máximo de Pontryagin y/o basada en las ecuaciones de Hamilton-Jacobi-Bellman. Se deben entregar desarrollos analíticos y numéricos del problema.

**Introducción:** Un bioreactor se puede describir de manera general como un recipiente con una apertura para la entrada del flujo de material estéril y una salida para el flujo resultante del proceso (microorganismos, estéril o nutriente, desechos, etc.). Un quimiostato es un tipo especial de biorreactor cuya característica principal su modo de funcionamiento continuo donde la tasas de entrada y salida de flujo son iguales.

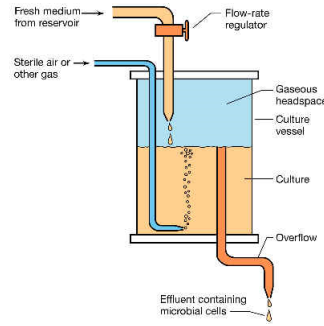
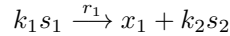


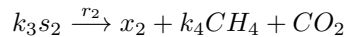
Figura 1: Esquema de un quimiostato

La digestión anaeróbica es un proceso biológico complejo que se utiliza en el tratamiento de aguas residuales para eliminar compuestos orgánicos del agua. En este proceso, los compuestos orgánicos son degradados en biogás (compuesto principalmente por dióxido de carbono y metano) por diferentes poblaciones de microorganismos y este biogás puede ser utilizado como fuente de energía, reduciendo el costo energético del tratamiento de aguas residuales.

Consideremos un quimiostato alimentado con una dilución de un tipo de sustrato (materia orgánica) en un medio acuoso. Dentro del reactor se cultiva 2 poblaciones de microorganismos: la primera, denotado  $x_1$ , se alimenta de la materia orgánica  $s_1$  y produce ácidos grasos volátiles  $s_2$  (con tasa de reacción  $r_1$ )



Después, una segunda población de microorganismos  $x_2$  transforman estos ácidos en biogás (con tasa de reacción  $r_2$ )



donde  $k_1, k_2, k_3, k_4$  son coeficientes de rendimiento.

Las variaciones de las concentraciones de biomasa de los microorganismos y la concentración de los sustratos en el tiempo se obtienen mediante un balance de masa (ver [4]). Llamando  $s_{in,1}$  a la concentración de sustrato  $s_1$  de entrada,  $\mu_i(s)$  a la función de crecimiento de los microorganismos  $x_i$  ( $i = 1, 2$ ), y  $D$  a la tasa de dilución, las

ecuaciones de estado generales que gobiernan la dinámica del modelo son [6]

$$\begin{aligned}\dot{s}_1 &= D(s_{\text{in},1} - s_1) - k_1\mu_1(s_1)x_1 \\ \dot{x}_1 &= -Dx_1 + \mu_1(s_1)x_1 \\ \dot{s}_2 &= -Ds_2 + k_2\mu_2(s_1)x_1 - k_3\mu(s_2)x_2 \\ \dot{x}_2 &= -Dx_2 + \mu_2(s_2)x_2\end{aligned}$$

Monod alrededor del año 1950 planteó que la tasa de crecimiento depende no solo de la concentración de microorganismos, sino también de la concentración de sustrato. Se acepta que la conversión de sustratos solubles se rige por las ecuaciones de Monod o Haldane. Monod describió esta relación en forma similar a la propuesta por Michaelis-Menten para la interacción enzima-sustrato en la que hay saturación con respecto al sustrato, en la forma

$$\mu(s) = \mu_{\max} \frac{s}{s + K_S},$$

donde  $\mu_{\max}$  representa la tasa máxima de crecimiento y  $K_S$  es la constante de Michaelis-Menten (o tasa de saturación media). De manera similar, las ecuaciones usadas para modelar el comportamiento inhibitorio del crecimiento con respecto al sustrato son aquellas de la cinemática enzimática conocidas como la ley de Haldane dada por

$$\mu(s) = \bar{\mu} \frac{s}{s + K_S + s^2/K_I},$$

donde  $K_I$  representa una constante de inhibición.

Debido a la muy baja solubilidad del metano, se descuida la concentración de metano disuelto y se supone que el metano producido sale directamente del bioreactor con un flujo proporcional a la velocidad de reacción :  $q_M = k_4\mu_2(s_2)x_2$ .

Si consideramos la tasa de dilución  $D$  como una variable de control  $D = D(t) \in [0, D_{\max}]$ , el sistema biomasa-sustratos definido anteriormente (suponiendo la concentración de sustrato de entrada  $s_{\text{in},1}$  constante), es un sistema de ecuaciones diferenciales no lineal controlado afín en el control. Se desea estudiar el problema de maximizar la producción de biogas del quimiostato en un período de tiempo determinado  $T > 0$ , o sea,

$$\max_{D(\cdot)} \int_0^T \mu_2(s_2(t))x_2(t)dt.$$

**Objetivos:** La idea es utilizar las herramientas teóricas y numéricas de control óptimo estudiadas en el curso para analizar un problema del área de bioprocesos. **Se le otorga cierta libertad a la hora de plantear el problema y en el formato del informe. Sin embargo, debe guiarse por la pauta siguiente que entrega los criterios mínimos a ser evaluados.**

- Analizar cualitativamente la dinámica del sistema anterior para distintas concentraciones del sustrato de entrada  $s_{\text{in}}$ ,  $D$ , y funciones de crecimiento Monod y Haldane (acotamiento de soluciones, existencia de puntos de equilibrio, estabilidad local y global, etc.) y entregar simulaciones.
- Investigar sobre distintas cinéticas de crecimiento de microorganismos utilizadas en literatura (por ejemplo, Monod, Haldane, Contois, etc.). Estudiar los fenómenos de limitación e inhibición y cómo estos afectan a las distintas funciones de crecimiento.
- Estudiar la estabilización del sistema (sin restricciones en el control) hacia algún punto de referencia deseado  $(x_2^{\text{ref}}, s_2^{\text{ref}})$ . Para ello, estudiar la estabilización del sistema linealizado mediante algún control feedback lineal, controles feedback no lineales, etc.
- Plantear el problema de la maximización de la producción de biogas como un problema de control óptimo (describir el conjunto de controles admisibles, el conjunto objetivo, el Hamiltoniano del problema, las ecuaciones de los estados adjuntos y obtener las condiciones de transversalidad) y resolverlo mediante el uso del Principio del Máximo de Pontryagin (PMP).
- Describir la función valor y las ecuaciones de HJB del problema de control óptimo y resolver la ecuación de HJB de forma numérica (o analíticamente de ser posible).

## Referencias

- [1] H. T. Banks, Modeling and Control in the Biomedical Sciences, Lecture Notes in Biomathematics, Vol. 6, Springer-Verlag, Heidelberg, 1975.
- [2] J. Monod, La technique de la culture continue: Theorie et applications, Ann. Inst. Pasteur, Lille, 79 (1950), 390–410.
- [3] A. Novick and L. Szilard, Description of the Chemostat, Science, 112 (1950) 715–716.
- [4] H. L. Smith and P. Waltman, The theory of the chemostat: Dynamics of microbial competition, Cambridge University Press, 1995.
- [5] E. Trélat, Contrôle optimal : théorie & applications, Vuibert, Collection "Mathématiques Concrètes", 2005.
- [6] O. Bernard et al. Dynamical model development and parameter identification for an anaerobic wastewater treatment process. Biotechnology and bioengineering 75.4 (2001): 424-438.