PROYECTO FINAL DE INGENIERÍA

SIMULACIÓN COMPUTACIONAL DEL CRECIMIENTO DE MICROALGAS EN UN FOTOBIORREACTOR

Bless, Maximiliano Alejandro – LU 131104

Lic. en Biotecnología Conteri, Germán Daniel – LU 133378

Lic. en Biotecnología

Tutor: Ferrari Costa, Alejandro, UADE Co-Tutor: Larreteguy, Axel Eduardo, UADE

Marzo 3, 2016



UNIVERSIDAD ARGENTINA DE LA EMPRESA

FACULTAD DE INGENIERÌA Y CIENCIAS EXACTAS



Agradecimientos

En primer lugar, queremos agradecer a nuestros tutores Alejandro Ferrari Costa y Axel Larreteguy por su paciencia, dedicación y dirección. A pesar de nuestra incansable insistencia ellos pusieron de su empeño y sobre todo su valioso tiempo para que nosotros pudiéramos lograr este trabajo.

En segundo lugar, queremos agradecer a la gente del Laboratorio de Modelado y Simulación INTEC/UADE: Francisco Barceló y Pablo Carón, por la buena onda, predisposición y hacernos sentir bienvenidos siempre que necesitamos de los recursos del departamento, y por ayudarnos desinteresadamente con la resolución de algunos problemas puntuales en materia de programación y compilación.

Por último, queremos agradecer a Sofia Azzam, Celeste Colombo y a aquellas personas que nos ayudaron de forma indirecta, tanto con revisión, corrección y formato como con su atención para que pudiéramos trabajar más cómodos.



Resumen

En este trabajo se predijo la producción global de biomasa de un cultivo de Chlorella Vulgaris en un fotobiorreactor (FBR) de tipo columna mediante una simulación numérica utilizando un programa libre para realizar cálculos de este estilo, llamado GNU Octave. Se introdujo en el programa la ecuación principal de gobierno del crecimiento de microalgas descripta en Pruvost et al, 2009 junto con la ecuación Lambert-Beer. Considerando como óptimos todos los parámetros que afectan al crecimiento, se tomó como variable únicamente la intensidad de la luz. Los parámetros necesarios para la simulación como ser la geometría del FBR, concentración inicial del inóculo, intensidad de luz, propiedades relativas a la invección de gas y otros más, fueron tomados de un cultivo experimental realizado por Bitog et al, 2014. Los resultados arrojaron que nuestra simulación puede predecir la producción de biomasa con un error menor al 6%. Dado el hecho de que esta simulación sólo puede ser precisa si no existen zonas muertas dentro del FBR, es decir, que la probabilidad de cualquier célula de estar en cualquier lugar del FBR en cualquier momento es la misma para todas las células, se realizó una evaluación cualitativa de las condiciones de mezclado, utilizando la herramienta de dinámica de fluidos computacional (CFD) OpenFOAM para demostrar la homogeneidad del medio de cultivo.

Este programa de simulación surge como un poderoso recurso para predecir con considerable fidelidad la producción de biomasa esperada para cualquier cultivo de microalgas, dadas las condiciones arriba mencionadas.



Abstract

A numerical simulation using a high-level interpreted language (GNU Octave) was utilised to predict the biomass overall production of a *Chlorella Vulgaris* culture in a cylindrical column-type photobioreactor (PBR). The main equation governing the growth of microalgae taken from Pruvost *et al*, 2009 was input in the program along with the Lambert-Beer equation. Assuming all factors affecting the culture to be optimal, light intensity was set to be the only limiting condition. Necessary parameters for the simulation such as PBR geometry, initial concentration of microalgae, light intensity, gas input properties and such were taken from a practical culture done in Bitog *et al*, 2014. Results have shown that the simulation can predict biomass productivity with a deviation less than 6%. Given the fact that this simulation can only be precise if there are no dead zones inside the PBR (i.e. any cell has the same probability of being in any place of the PBR at any time), a qualitative assessment of the mixing conditions was performed, using the CFD tool OpenFOAM to demonstrate the homogeneity of the culture medium.

This simulation program arises as a powerful and useful device for predicting with considerable fidelity the expected biomass production of any microalgae culture, given the conditions mentioned above.



Contenidos

Agradecimientos	2
Resumen	3
Abstract	4
Contenidos	5
Introducción	7
Biorreactores	8
1 Biomasa	8
1.1 Factores que influyen en el crecimiento de las microalgas	10
1.1.1 Luz	10
1.1.2 Nutrientes	11
1.1.3 Temperatura	12
1.1.4 pH	13
1.1.5 mezclado	14
2 Biorreactores	15
3 Fotobiorreactores	16
3.1 Fotobiorreactores abiertos	16
3.1.1 Open ponds	16
3.1.2 Raceways	17
3.2 Fotobiorreactores cerrados	
3.2.1 Columnas	
3.2.2 Reactores planos	20
3.2.3 Reactores tubulares	21
3.2.4 Reactores airlift	21
3.3 Investigación de las complejidades en el escalado de fotobiorreactores	23
Modelado	
1 Descripción general	
2 Sistemas Dinámicos (Octave)	
3 CFD (OpenFOAM)	25
Actualidad	
Modelo de agitación perfecta	



SIMULACION COMPUTACIONAL DEL CRECIMIENTO DE MICROALGAS EN

UN FOTOBIORREACTOR Bless, Maximiliano Alejandro y Conteri, Germán Daniel

1 Presentación de ecuaciones
2 Aplicación de las ecuaciones
3 Composición del algoritmo34
4 Explicación del mezclado perfecto (suposiciones y justificaciones)
5 Generación de los gráficos
6 Validación e interpretación los gráficos
7 Capacidad de predicción46
7.1 Masa Inicial Modelo hidrodinámico CFD47
7.2 Intensidad inicial de la luz sobre la superficie del fotobiorreactor
7.3 Relación de aspecto
Modelo de agitación perfecta
1 Simulación con OpenFOAM51
2 Capacidad del solver
3 Modelo de turbulencia Lathouwers 199554
4 Ecuaciones de gobierno55
5 Funcionamiento del solver
6 Descripción del caso
7 Generación de la malla58
8 Condiciones de frontera60
9 Corriendo el programa y procesamiento de datos60
Conclusión
Trabajos futuros
Bibliografía
Anexos



Introducción

Microorganismos fotosintéticos tales como las microalgas y las cianobacterias tienen enorme potencial para la producción de biocombustibles. Sus principales ventajas son la utilización de la luz solar para una mayor productividad que las plantas superiores; consumo simultáneo de carbono inorgánico, resultando en un balance nulo de explotación de carbono y la posibilidad de producción en sistemas cerrados, ofreciendo numerosas ventajas como ser una producción controlada, intensiva, con un impacto ambiental considerablemente bajo (sin requerimiento de fertilizantes y con la posibilidad de recuperar y reutilizar el medio de cultivo). La elevada biodiversidad de las microalgas conlleva la posibilidad de producir un gran número de sustancias ricas en energía, tales como hidrógeno por fotólisis, lípidos para biodiesel o biokerosene y azúcares para fermentación de biomasa (metano).

Sin embargo, utilizar las microalgas para producción de biocombustibles presenta grandes desafíos, en particular la necesidad de establecer una planta de producción que sea escalable, eficiente en sus costos y sustentable. Este último punto implica, por supuesto, lograr un balance positivo de energía, lo cual no es algo sencillo si se consideran los numerosos pasos requeridos para obtener biocombustibles utilizables (producción, cosecha, y procesado de la biomasa). Durante varias décadas la producción a escala de biomasa ha probado ser factible, pero en ramas distintas que las de los biocombustibles. Es preciso concentrar esfuerzos en investigar y desarrollar los procesos para definir un sistema de producción que sea eficiente e integrado y que cumpla con las rigurosas especificaciones del mercado energético.

El cultivo de microalgas posee aspectos en común a todos los cultivos en biorreactores en general, tales como regulación térmica y de pH, procedimientos de nutrición, y mezclado para transferencia de masa y calor entre otros. En añadidura, un suministro de luz es vital para el crecimiento fotosintético, lo cual acarrea numerosas complicaciones, en particular el modo en que el cultivo recibirá la luz.

A diferencia de otros bioprocesos clásicos donde los tanques con su sistema de mezclado poseen geometrías estándar bien comprendidas, eficientes y prácticas, los sistemas de cultivo para microalgas son diversos, variando desde open ponds (sistemas abiertos) a tecnologías de fotobiorreactores (sistemas cerrados). Se brinda una detallada descripción de los distintos tipos en las siguientes secciones.



Haremos énfasis en la tecnología de fotobiorreactores (en adelante FBRs), dado que ofrecen diversas ventajas de especial interés para la producción de biocombustibles. Sin embargo, como es de esperar, conllevan mayores costos y procesos más complicados que los biorreactores, y es difícil escalarlos para producción masiva. Es imperativo contar con nuevos avances de ingeniería para poder concebir sistemas viables. Estudios recientes han mostrado nuevas perspectivas en cuanto a cómo sería posible obtener tales sistemas, especialmente al clarificar los parámetros que gobiernan la productividad de los FBRs y establecer bases de ingeniería para poder escalarlos.

El presente trabajo tiene como objetivo realizar una serie de modelos computacionales incrementales para reproducir el crecimiento de una microalga dentro de un FBR, tomando como referencia un cultivo experimental.

Biorreactores

1 Biomasa

La biomasa es la materia orgánica originada en un proceso biológico, espontáneo o provocado, utilizable como fuente de energía. En nuestro trabajo, la biomasa es el conjunto de microalgas dentro del FBR.

Las microalgas son microorganismos microscópicos (2-200 μ m) fotosintéticos, también son polifiléticos y eucariotas (excluyen, por tanto, las cianobacterias, que dejaron de considerarse auténticas algas al pasar al reino procariota) que pueden crecer de manera autotrófica o heterotrófica. En general son altamente eficientes en la fijación de CO₂ y utilización de la energía solar para producir biomasa. Están presentes en todos los cuerpos de agua, como lagos, mares y ríos, pero no están supeditados solo al agua. Se encuentran presentes en el suelo y la mayoría de los ambientes terrestres incluso en los más extremos, lo cual permite encontrarlas ampliamente distribuidas en la biósfera adaptadas a una gran cantidad de condiciones. Así como son ubicuos (es decir que están presentes en muchos ambientes), tienen una gran diversidad taxonómica. Para su desarrollo requieren de CO₂, nitrógeno, fósforo, potasio, magnesio y otros nutrientes menores como metales, los cuales son esenciales porque actúan como cofactor de enzimas esenciales del metabolismo de las microalgas.





Figura 1: Chlorella Vulgaris vista en microscopio. Fuente: acuisurperu.com

El interés primario del cultivo de microalgas surge a partir de su enorme capacidad para la producción de biocombustibles, como se puede observar en la tabla I. Esta es órdenes de magnitud superior a los cultivos convencionales, lo cual genera un buen prospecto para ser un gran participante en materia de bioenergía en el futuro.

Cultivo	Rendimiento de aceite (L/ha)
Maíz	127
Soja	446
Canola	1190
Jatrofa	1892
Coco	2689
Palma	5950
Microalga (con 70% de aceite en biomasa)	136900
Microalga (con 30% de aceite en biomasa)	58700

Tabla I: Comparación de fuentes para producción de biodiesel. Fuente: Chisti, 2007



En revisiones de Patil *et al.* (2008) y Chisti (2007), las microalgas parecieron ser la única fuente de biodiesel capaz de cumplir con la demanda global de combustibles para transporte, con el potencial para desplazar por complete el uso de combustibles fósiles. Bajo condiciones óptimas de cultivo, las microalgas acumulan típicamente entre un 30% y un 70% de su peso seco en hidrocarburos, y el alto contenido en aceites de algunas especies les permite producir hasta mil veces más aceite que los porotos de soja cultivados en la misma cantidad de superficie. (Kong *et al*, 2007).

1.1 Factores que influyen en el crecimiento de las microalgas

1.1.1 Luz

La intensidad de la luz es uno de los factores más importantes (si no el más) para el crecimiento fotosintético de las microalgas. Los sistemas de cultivos de microalgas pueden ser iluminados por luz artificial, luz solar o ambas. Entre los sistemas de cultivo de algas con iluminación natural con grandes áreas de iluminación se encuentran los estanques abiertos, los llamados platos planos o flat plates, los airlift tubulares o de tipo serpentín y los de tipo inclinado, entre otros (Chisti, 2007). Los sistemas de biorreactores empleados a nivel laboratorio son iluminados interna o externamente por luz artificial con lámparas fluorescentes y diodos emisores de luz (light emitting diodes, LED) entre otros.

Para que la luz artificial sea de utilidad en el proceso fotosintético de las microalgas, los fotones generados deben encontrarse a una longitud de onda de entre los 600 y 700 nm. Al comparar distintas fuentes de luz artificial, incluyendo luz fría fluorescente, lámparas incandescentes, halógenas, AllnGap II (fosfuro de indio, galio y aluminio, con una longitud de onda de 643 nm) y diodos emisores de luz (ligth emitting diodes, LED), se encontró que el LED del tipo AllnGap II son la fuente de luz más eficiente y económica para el crecimiento de microalgas (Kommareddy y Anderson, 2003).

La tasa específica de crecimiento de las microalgas depende de la intensidad de la luz, y se incrementa conforme ésta última aumenta. Cuando la tasa de crecimiento llega a su punto máximo, ésta disminuye con el incremento de la luz debido a la fotoinhibición (Bohne y Linden, 2002). Este patrón de crecimiento en relación con la intensidad de la luz se observa en la mayoría las especies de microalgas (Fábregas *et al*, 1998). Se ha reportado que la producción y acumulación de metabolitos de interés comercial se ve afectada por la

UADE

radiación de luz blanca en algas, hongos y bacterias (Martin, 2010). Sin embargo, la intensidad y el régimen de la iluminación varían con el género de microalga.

La fotoinhibición es un proceso dependiente del tiempo, en el cual ocurre un daño irreversible pocos minutos después de iniciado el estrés por luz, con un daño que excede el 50 % después de 10 o 20 minutos (Pulz, 2001). Sin embargo, se han encontrado pocas referencias disponibles acerca de la fotoadaptación, la inhibición por luz o efectos de saturación en fotobiorreactores.

1.1.2 Nutrientes

El CO₂ es la fuente de carbono más utilizada en cultivos de microalgas. Al consumirse el carbono, el oxígeno es producido por fotólisis del agua y este es diluido en el medio de cultivo (Molina *et al*, 1999). Puesto que las microalgas pueden vivir bajo altas concentraciones de dióxido de carbono, los gases de invernadero, el dióxido de nitrógeno y contaminantes en la atmósfera (a partir de diversas fuentes) pueden ser nutrientes suficientes para las microalgas (Van Beilen, 2010). Algunas especies como *Tetraselmis sp.*, *Chlamydomonas sp.*, y *Nannochloris sp.* necesitan una cantidad menor al 15 % de CO₂ para su crecimiento, mientras que especies como *Scenedesmus sp.* y *Cyanidium caldarium* toleran concentraciones desde un 80 hasta un 100% respectivamente (Ono y Cuello, 2003).

Las algas requieren nutrientes en disolución. Los nitratos y los fosfatos son dos nutrientes de importancia, al igual que el sodio y los silicatos (Dan-Telah *et al*, 2004). Existen varios medios de cultivo formulados disponibles pero los requerimientos son distintos para cada variedad de microalga. Por otra parte, se debe tomar en cuenta el objetivo del experimento para definir la composición del medio de cultivo. Por ejemplo, si la finalidad es una alta productividad de biomasa (g L-1), altas concentraciones de nitratos y fosfatos son esenciales para el crecimiento (García-Malea *et al*, 2006).

Para inducir la producción de metabolitos y compuestos de interés comercial, la manipulación en la concentración de nitratos es una técnica común para simular un ambiente de estrés en la microalga. Esto sugiere que una alta relación de carbono nitrógeno (C/N) resulta ser eficiente para inducir la biosíntesis de astaxantina, un carotenoide de interés comercial (Chen y John, 1991; Chen y Chen, 2006). La limitación de nitrógeno en presencia de un exceso de fuentes orgánicas de carbono, como acetato y glucosa, ha sido efectiva en la producción de carotenoides en cultivos mixotróficos (Ip y Chen, 2005).



Por otra parte, la presencia de iones de fierro (Fe) y magnesio (Mg) en cultivos de microalgas también ha sido estudiada, un exceso de Fe estimula la acumulación de astaxantina en *Haematococcus pluvialis* (Harker *et al*, 1996). Fábregas *et al*, (1998) estudiaron la deficiencia de Mg y N en la acumulación de astaxantina en *Haematococcus pluvialis*, observando que con una deficiencia de Mg la densidad celular incrementa, mientras que con una deficiencia de N la acumulación de astaxantina se ve favorecida.

Debido a que casi el 50 % de la biomasa de microalgas se compone de carbono (Becker, 1994), este elemento es un componente importante para el crecimiento celular. Cuando se cultivan fotoautotróficamente, todas las microalgas utilizan las fuentes inorgánicas de carbono para sintetizar compuestos. A pesar de que las microalgas son capaces de utilizar el carbono inorgánico en diversas formas (CO₂, H₂CO₃, HCO³⁻), estudios detallados acerca de la influencia de la fuente de carbono en la productividad (biomasa) de las microalgas indican que, a pesar de que el HCO₃ es fácilmente absorbido por las células, ésta es una fuente de carbono pobre en comparación con el CO₂ (Martin, 2010). De hecho, es posible obtener una respuesta lineal en el carbono de la biomasa con el aporte de masa de carbono (que corresponde a una eficacia de prácticamente del 100 %) esto sólo sucede con entradas limitadas de carbono inorgánico y rangos estrechos de pH. Para los cultivos en microalgas se emplea aire enriquecido con CO₂ como aporte nutrimental.

1.1.3 Temperatura

La temperatura es uno de los factores ambientales más importantes que afectan el crecimiento y desarrollo de los organismo vivos. El crecimiento de algas depende también de la temperatura, por lo que se requiere conocer un valor óptimo para una tasa máxima de crecimiento. Los sistemas fotosintéticos siempre generan calor a causa de la ineficiencia de la fotosíntesis de convertir la energía luminosa a energía química (Bholase, 2004). La conversión teórica de la luz roja en energía química es de un 31 % y el 69 % restante se pierde como calor. Por ello, la cantidad de enfriamiento en un sistema de cultivo dependerá de la intensidad de la luz y de la concentración celular; sin embargo, el enfriamiento del reactor es sólo utilizado en sistemas cerrados (Andersen, 2005).

La temperatura también es importante para la disociación de las moléculas de carbono, haciéndolo disponible para la fotosíntesis (Kommareddy y Anderson, 2003). La temperatura influye en la respiración y fotorespiración de manera más marcada que en la

UADE

fotosíntesis. Sin embargo, si el CO_2 o la luz es un factor limitante para la fotosíntesis, la influencia de la temperatura resulta insignificante (Pulz, 2001). La temperatura óptima para el cultivo de microalgas se encuentra generalmente entre los 20 y 24 °C, no obstante, estas pueden variar dependiendo del medio de cultivo, la especie y la cepa utilizada. Comúnmente, los cultivos de microalgas toleran temperaturas de entre 16 y 27 °C, en donde a temperaturas menores a 16 °C disminuyen el crecimiento, mientras que una temperatura mayor a los 35 °C resulta ser letal para un gran número de especies (Mehlitz, 2009).

Los cambios en la temperatura también pueden causar alteraciones en muchas de las rutas metabólicas, incluyendo la biosíntesis de los carotenoides. Se han observado cambios en las características de *Chlorella zofingiensis* cuando se incrementó la temperatura, dando lugar a cambios en la eficiencia de absorción asociada a una variación en el tamaño celular y los niveles de pigmento (Martin, 2010). De acuerdo a Del Campo *et al*, (2004), la acumulación celular de luteína y astaxantina en *Muriellopsis sp.* aumenta cuando es crecida a una temperatura mayor a 33 °C, sin embargo el nivel volumétrico se incrementó hasta seis veces más cuando la temperatura fue de 28 °C. A mayores temperaturas de crecimiento, la división celular se altera pero no la síntesis de proteínas. También se ha demostrado que algunas algas aumentan la acumulación de carotenoides a una temperatura de 40 °C en comparación con la tasa obtenida a la temperatura óptima de crecimiento de 28 °C (Mosqueda-Cano y Gutiérrez-Corona, 1995).

1.1.4 pH

Las microalgas tienen diversos requerimientos de pH para su crecimiento. A niveles de pH alcalinos, la disponibilidad de CO_2 puede ser limitante para el crecimiento y la fotosíntesis de microalgas. El rango de pH para la mayoría de los cultivos de microalgas está entre 7 y 9, con un rango óptimo de 8.2 a 8.7. Un pH óptimo en el cultivo generalmente es mantenido gracias a la aeración con aire enriquecido con CO_2 . En el caso de los cultivos de alta densidad celular, la adición de dióxido de carbono corrige un incremento del pH, el cual puede llegar a un valor límite de 9 para el crecimiento de la microalga.

Algunos autores coinciden que el crecimiento de las microalgas es óptimo a un pH neutro de 7.5 (Martin, 2010). Por lo general, soluciones amortiguadoras son añadidas a los medios de cultivo con la finalidad de ajustar y mantener el pH del medio (Andersen, 2005). El pH se incrementa conforme la edad del cultivo es mayor, esto es debido a la acumulación de



minerales y a la oxidación de nutrimentos. Por lo tanto, es recomendado que el pH inicial del medio de cultivo se ajuste a 6.5 antes de ser inoculado (Martin, 2010). Estudios con *Chlorella vulgaris* han demostrado que pH extremos (alcalinización o acidificación del medio de cultivo) incrementan la producción de calor y las tasas de respiración, comportamiento contrario al observado con *Dunaliella maritima* (Alyabyev y col., 2011).

1.1.5 Mezclado

Para cualquier tipo de reactor usado en el cultivo de algas un mezclado eficiente debe ser proporcionado con el fin de producir una dispersión uniforme de las microalgas en el medio de cultivo, eliminando así los gradientes de concentración de luz, nutrimentos (entre ellos CO₂) y temperatura. Contreras-Flores *et al*, (2003) informaron que el principal problema en el cultivo de algas es el daño celular causado por el esfuerzo de corte. Se conoce que el exceso de la agitación mecánica es causa de turbulencia, lo que puede originar daños permanentes en la estructura celular afectando el crecimiento y la producción de metabolitos. Por lo contrario, una agitación insuficiente provocará sedimentación y muerte celular.

Se han realizado pocos estudios cuantitativos relacionados con el estrés hidrodinámico en cultivos de microalgas en fotobiorreactores del tipo airlift. El aumento de la tasa de crecimiento de algunas especies de microalgas cuando se incrementa la turbulencia es debida a la mejora del suministro de luz y CO₂. Sin embargo, a niveles mayores de turbulencia, el crecimiento se ve disminuido drásticamente, aumentando simultáneamente la velocidad superficial del gas causando un posible daño celular (Contreras-Flores *et al*, 2003).

Los sistemas de mezclas de gases o los sistemas de columnas de burbujeo causan menor daño celular que los sistemas de agitación mecánica. Esto únicamente para el caso de unidades de bombeo de aire, en donde la mezcla se logra por el flujo de líquido que se obtiene por la aspersión del aire al centro del tubo interno, disminuyendo la densidad celular del líquido provocando que este suba. El líquido fluye hacia abajo a través del tubo exterior, creando así una circulación natural. Aunque estos sistemas parecen causar un menor daño celular, no están exentos de un esfuerzo cortante causando daño celular en menor medida (Gudin y Chaumont, 1991). Barbosa *et al.* (2004), reportaron la formación de burbujas en el difusor como el factor principal que conduce a la muerte celular. Por último, se ha reportado el efecto de sombreado mutuo, el cual implica el movimiento celular continuo desde y hacia



las zonas de luz y oscuridad. Este efecto se considera esencial para garantizar la alta productividad de biomasa (Martin, 2010).

2 Biorreactores

Un biorreactor es un recipiente o sistema que mantiene un ambiente biológicamente activo. En algunos casos, un biorreactor es un recipiente en el que se lleva a cabo un proceso químico que involucra organismos o sustancias bioquímicamente activas derivadas de dichos organismos. Este proceso puede ser aeróbico o anaeróbio. Estos biorreactores son comúnmente cilíndricos, variando en tamaño desde algunos mililitros hasta metros cúbicos y son usualmente fabricados en acero inoxidable.

Un biorreactor puede ser también un dispositivo o sistema empleado para hacer crecer células o tejidos en operaciones de cultivo celular. Estos dispositivos se encuentran en desarrollo para su uso en ingeniería de tejidos.

En términos generales, un biorreactor busca mantener ciertas condiciones ambientales propicias (pH, temperatura, concentración de oxígeno, etcétera) al organismo o sustancia química que se cultiva.





Figura 2: Esquema de un biorreactor típico. Fuente: apuntesbiotecnologiageneral.blogspot.com

Los biorreactores utilizados para el cultivo de microorganismos fotosintéticos son aquellos que poseen algún tipo de iluminación artificial o que permiten el paso de la luz solar o ambos. Son llamados, por lo tanto, fotobiorreactores.

3 Fotobiorreactores

Dentro de la categoría fotobiorreactores, podemos dividirlos en dos grandes grupos, dependiendo de su grado de aislación con el medio ambiente: fotobiorreactores abiertos y cerrados. Luego de esta exploración, se brinda un comentario sobre las complejidades en el escalado de los fotobiorreactores.

3.1 Fotobiorreactores abiertos

En los FBRs abiertos el cultivo está en contacto con la atmósfera. Son instalaciones que intentan compensar con un bajo coste una baja productividad debida a un control poco estricto o inexistente de condiciones como el pH o la temperatura. Al estar abiertos son susceptibles a la invasión por otros microorganismos incluyendo microalgas, por lo que son especialmente adecuados para especies robustas y de rápido crecimiento.

Sin embargo, pese a estos inconvenientes, la mayoría de las microalgas producidas en el mundo provienen de este tipo de sistemas. Su gran ventaja es que es fácil y económico construirlos en grandes volúmenes incluso de cientos de metros cúbicos.

Existen dos tipos básicos de FBRs abiertos: "open ponds" que, como su nombre indican, son simples receptáculos del tamaño y forma adecuado; y los "raceways" que se asemejan a pistas de carreras, y además son capaces de suministrar agitación y mezclado, facilitando el intercambio de gases e incluso controlando el pH en cierta medida.

3.1.1 Open ponds

Son simples balsas de la forma y profundidad adecuada que se llenan de medio con los nutrientes adecuados y se dejan crecer. El proceso es, pues, muy económico y los costes de operación son muy bajos, pero la productividad por unidad de superficie y la concentración de biomasa son también muy bajas.

Las microalgas adecuadas para este tipo de FBRs son las extremófilas, las capaces de sobrevivir en condiciones extremas. Un ejemplo típico es la *Dunaliella salina*,



microalga halófila que crece en concentraciones salinas de hasta 100 g/L, lo que impide la proliferación de otras especies.



Figura 3: Imagen aérea de un open pond. Fuente: theautochannel.com

3.1.2 Raceways

Son dispositivos más sofisticados en el sentido de que proveen agitación y mezcla. También pueden suministrar CO_2 al cultivo de forma relativamente eficiente y con pocas pérdidas, lo que permite también un cierto control del pH.

El dispositivo de impulsión más común es la rueda de paletas o "paddle wheel", que consigue mantener el cultivo en suspensión y mezclado con un gasto de potencia de unos pocos watts por metro cúbico.



SIMULACION COMPUTACIONAL DEL CRECIMIENTO DE MICROALGAS EN UN FOTOBIORREACTOR Bless, Maximiliano Alejandro y Conteri, Germán Daniel



Figura 4: Un ejemplo de un raceway pond. Fuente: biodieselfromalgae2.weebly.com

3.2 Fotobiorreactores cerrados

Los fotobiorreactores cerrados se denominan así porque mantienen al cultivo totalmente aislado del medio ambiente exterior. Típicamente están equipados con sistemas de agitación, aireación, control del pH, intercambio del calor, adición de medio y CO₂. Estos dispositivos cerrados son muy especializados, a menudos diseñados específicamente para una especie concreta.

Entre los fotobiorreactores cerrados más difundidos se encuentran las columnas, los reactores planos y los reactores tubulares.

3.2.1 Columnas

Son fotobiorreactores cerrados que consisten en una columna de burbujeo de material transparente de diámetro d y altura H. Dentro de los fotobiorreactores cerrados, las columnas son fáciles de construir ya que su forma cilíndrica ayuda a distribuir la luz y soporta bien la presión en la base.



Son dispositivos sencillos ya que el burbujeo proporciona la mezcla del sistema, la retirada del O_2 y el aporte de CO_2 que se puede mezclar con la corriente de aireación.

Se han utilizado columnas con recirculación interna con el objeto de mejorar el flujo y prolongar el contacto de los gases, mejorando así la transferencia de materia.

Su principal problema es el escalado. Es difícil construirlas de gran volumen ya que al aumentar el diámetro, la disponibilidad de luz en el centro de la columna disminuye, lo cual produce zonas oscuras donde no se realiza fotosíntesis, disminuyendo la productividad. Tampoco es posible hacerlas muy altas ya que la presión en la base dificulta el burbujeo y causa estrés hidrodinámico, con la consiguiente muerte de las células.

Las columnas de burbujeo, por su posición vertical, tampoco son buenas captadoras de luz, especialmente a mediodía, que es precisamente cuando la radiación solar es máxima, problema que se podría solucionar construyendo columnas inclinadas. Sin embargo, esto es poco práctico ya que pierden muchas de sus ventajas: se pierde el mezclado homogéneo, y el costo de infraestructura para lograr la inclinación es muy alto.



Figura 5: Una fila de FBRs de tipo columna de burbujeo. Fuente: seao2.com



3.2.2 Reactores planos

Los reactores planos son similares a las columnas en su filosofía: combinan agitación e intercambio de materia en el mismo espacio en el que se capta la luz, pero intentan resolver algunos de los problemas de las columnas:

- El paso óptico se puede hacer tan delgado como se quiera.
- Es posible escalar el FBR incrementando su longitud, sin modificar la altura de líquido ni el paso óptimo.
- Pueden construirse de manera muy sencilla y económica: es suficiente un bastidor y un recubrimiento plástico.
- Se pueden construir inclinados y es posible orientarlos hacia el sol, para maximizar así la captación de luz y con ello la productividad.

En la práctica no es fácil construir FBRs planos demasiado largos por la dificultad que tiene esta geometría para soportar la presión hidrostática. Además, pese a que pueden inclinarse, siguen siendo dispositivos verticales (dependen del burbujeo) y son por lo tanto pobres captadores de luz en muchos momentos del día.



Figura 6: Una fila de reactores planos. Fuente: www.algaenergy.es



3.2.3 Reactores tubulares

Los FBRs tubulares son los más sofisticados y los más especializados, pero son también los más caros de construir. El diseño distingue dos partes: lazo y desgasificador:

El lazo es la parte en la que se lleva a cabo la captación de la energía solar. Se denomina "lazo" porque es un tubo dispuesto de alguna manera que proporcione una forma compacta, lo que requiere codos y curvas. El lazo está específicamente diseñado para la captación de la luz, sin tener que preocuparnos por los intercambios de calor o materia, lo que permite optimizar la productividad maximizando la eficiencia fotosintética.

El desgasificador es la parte en la que se lleva a cabo el intercambio de materia, especialmente la desorción de O_2 y los intercambios térmicos a través de cambiadores de calor que se pueden instalar al efecto.



Figura 7: Imagen de un FBR de tipo tubular. Fuente: en.wikipedia.org

3.2.4 Reactores Airlift

En esta categoría se incluyen las columnas de burbujeo que poseen recirculación, la cual es producida por el movimiento fluido de las fase gaseosa dispersa. Los reactores airlift están agitados neumáticamente y la circulación tiene lugar en un modelo cíclico definido a través de un conducto que divide el reactor en dos zonas: una de flujo



ascendente y una de flujo descendente. La zona de difusión de gas del aro, tiene mayor retención de gas que la zona relativamente libre de gas, dónde el flujo es descendente. La simplicidad de su diseño y construcción, los modelos de flujo bien definidos, bajos consumos de energía, bajos esfuerzos cortantes, buen mezclado y el funcionamiento aséptico, debido a la ausencia de agitador, son ventajas importantes de los reactores airlift para su aplicación en fermentaciones. La literatura reciente reporta resultados para la transferencia de masa en los reactores airlift con amplia variación y contradicción, debido a que los reactores y los procedimientos experimentales son diferentes.



Figura 8: Un esquema del funcionamiento de un FBR de tipo airlift. Fuente: technologyinscience.blogspot.com



3.3 Investigación de las complejidades en el escalado de fotobiorreactores

El escalado no es tan simple como incrementar el diámetro o la longitud del biorreactor. Al aumentar el diámetro, aumenta muy deprisa la proporción de volumen oscuro, disminuyendo la productividad. Las microalgas del centro quedan completamente opacadas por aquellas ubicadas en la periferia, con la consiguiente pérdida de capacidad fotosintética. Tampoco es posible hacerlas muy altas ya que la presión en la base dificulta el burbujeo y causa estrés hidrodinámico.

Como alternativa al incremento en la longitud del biorreactor, es posible adoptar la disposición de fotobiorreactor tubular. Al estar acostado se elimina el problema de la presión en la base, pero trae aparejado un costo enorme de fabricación y mantenimiento. Además, al tener un recorrido tan extenso, se forman gradientes de gases y sustratos, provocando que el cultivo no sea homogéneo, con la consiguiente disminución en la productividad.

Modelado

1 Descripción general

El modelado computacional es el uso de matemáticas, física e informática para estudiar el comportamiento de sistemas complejos mediante la simulación por computadora.

Un modelo computacional contiene numerosas variables que caracterizan el sistema bajo estudio. La simulación se realiza ajustando estas variables y observando cómo los cambios afectan los resultados pronosticados por el modelo. Los resultados de las simulaciones de modelos ayudan a los investigadores a hacer predicciones acerca de qué pasará en el sistema real que se está estudiando en respuesta a condiciones cambiantes. El modelado puede agilizar la investigación ya que permite que los científicos realicen miles de experimentos simulados por computadora a fin de identificar los experimentos físicos que con mayor probabilidad ayuden al investigador a encontrar la solución al problema bajo estudio.

Los sistemas que utilizaremos para desarrollar nuestro trabajo serán el GNU Octave para resolver las ecuaciones cinéticas de crecimiento fotosintético y la herramienta OpenFOAM para simular los flujos hidrodinámicos debido a la inyección de aire.



2 Sistemas Dinámicos (Octave)

Octave o GNU Octave es un programa libre para realizar cálculos numéricos. Es considerado el equivalente libre de MATLAB. Entre varias características que comparten, se puede destacar que ambos ofrecen un intérprete, permitiendo ejecutar órdenes en modo interactivo. Nótese que Octave no es un sistema de álgebra computacional, como lo es el software Maxima, sino que está orientado al análisis numérico.

Detalles técnicos:

- Octave está escrito en C++ usando la biblioteca STL.
- Tiene un intérprete de su propio lenguaje (de sintaxis casi idéntica a Matlab), y permite una ejecución interactiva o por lotes.
- Su lenguaje puede ser extendido con funciones y procedimientos, por medio de módulos dinámicos.
- Utiliza otros programas GNU para ofrecer al usuario la posibilidad de crear gráficos para luego imprimirlos o guardarlos (Grace).
- Dentro del lenguaje también se comporta como una consola de órdenes (shell). Esto permite listar contenidos de directorios, por ejemplo.
- Además de correr en plataformas Unix también lo hace en Windows.
- Puede cargar archivos con funciones de Matlab (reconocibles por la extensión .m).

El lenguaje Octave:

- La sintaxis es casi idéntica a la utilizada en MATLAB.
- Es un lenguaje interpretado.
- No permite pasar argumentos por referencia. Siempre son pasados por valor.
- No permite punteros.
- Se pueden generar scripts.
- Soporta gran parte de las funciones de la biblioteca estándar de C.
- Puede ser extendido para ofrecer compatibilidad con las llamadas al sistema UNIX.
- El lenguaje está pensado para trabajar con matrices, y provee mucha funcionalidad para trabajar con éstas.
- Soporta estructuras similares a los "struct"s de C.



• Al ser su licencia Licencia pública general de GNU, puede ser compartido y utilizado libremente.

3 CFD (Openfoam)

Entre los muchos modelos utilizados para predecir la hidrodinamia y otras características relacionadas en los PBRs y otros sistemas de flujo multifase, la dinámica de fluidos computacional (CFD) posee enorme potencial para aplicación a largo plazo. La herramienta que utilizaremos será OpenFOAM.

Como herramienta de simulación se adaptó para este problema una aplicación ya disponible en el paquete de código libre OpenFOAM (Copyright 2004-2010 OpenCFD Limited). OpenFOAM se basa en el método de volúmenes finitos (FVM, por sus siglas en inglés), que consiste en la resolución de las ecuaciones de conservación de masa, momento y energía, dentro de volúmenes de control determinados. A fin de resolver el comportamiento del fluido en un dominio mediante FVM, es necesario discretizar el problema. La discretización se realiza en 3 niveles: discretización espacial, discretización temporal, y discretización de las ecuaciones. La discretización espacial consiste en la división del dominio en un número finito de volúmenes de control, lo suficientemente pequeños como para representar el comportamiento del fluido en cada sector del reactor. En cuanto a la discretización temporal, para un problema de naturaleza transitoria, es necesario particionar el tiempo en "pasos temporales", períodos pequeños condicionados por un cociente entre la velocidad y el tamaño característico de los volúmenes de control, y resolver las ecuaciones para la totalidad del dominio espacial para cada paso temporal. Para discretizar las ecuaciones se utilizan diversos esquemas numéricos. OpenFOAM permite seleccionar diferentes esquemas para cada operador diferencial, ya sean derivadas temporales, divergencias o laplacianos.

OpenFOAM utiliza computadoras y técnicas numéricas para resolver problemas que involucran el movimiento de fluidos. A partir de esto, es posible construir un modelo computacional que represente un sistema o dispositivo, y al aplicar física de fluidos y química a este prototipo virtual, se pueden realizar predicciones de la dinámica de fluidos y otros fenómenos físicos relacionados. El OpenFOAM resuelve las ecuaciones de Navier-Stokes dentro de cada celda del dominio computacional, y es considerada una herramienta efectiva a la hora de complementar las limitaciones del trabajo de campo y experimentos de

UADE IN SIMULACION COMPUTACIONAL DEL CRECIMIENTO DE MICROALGAS EN UN FOTOBIORREACTOR Bless, Maximiliano Alejandro y Conteri, Germán Daniel

laboratorio, sin mencionar sus costos mínimos si la comparamos con estos últimos conceptos. OpenFOAM puede usarse para estudiar factores en los FBRs que influyen en los flujos hidrodinámicos, tales como velocidad superficial del gas, retención del gas, diámetro de burbujas, geometría de la columna, material antiespuma y presión entre otros.

Dado que predecir la hidrodinamia de las columnas de burbujas es muy difícil en la práctica, las corrientes del líquido también lo son. Estudios recientes demuestran que es posible estimar estos flujos hidrodinámicos con apreciable certeza utilizando simulaciones por CFD.

Actualmente la aplicación de CFD al diseño de los FBRs está ganando popularidad a medida que las computadoras mejoran sus capacidades y se vuelven más accesibles, permitiendo tiempos de procesamiento más cortos y la posibilidad de resolver las más intrincadas geometrías. Durante la última década numerosos trabajos de investigación tratando la aplicación de la CFD al diseño de reactores de columna de burbujas han sido publicados, debiendo este interés a los siguientes ítems: progreso en técnicas de medición que pueden ser aplicadas a flujos hidrodinámicos localizados dentro de las columnas de burbujas para proveer mediciones más precisas para testear la validez de las predicciones de la CFD; incremento en la potencia de las computadoras; avances en la calidad de los programas de CFD; métodos numéricos mejorados y mayor diversidad de modelos de turbulencia.

El motivo por el cual elegimos el OpenFOAM por sobre otras herramientas de CFD es por ser un programa de código libre, disponible entre los recursos de UADE, y por sobre todas las cosas, debido al extenso conocimiento y experiencia que posee el Laboratorio de Modelado y Simulación INTEC/UADE en su uso.

Actualidad

En muchos trabajos recientes se está abordando la problemática de obtener un sistema de cultivo donde la producción de biomasa sea la máxima posible, combinado con una gestión de costos eficiente. Para poder solventar este problema varios autores abordan esta problemática desde diferentes ángulos.

Muchas investigaciones enfocan sus esfuerzos en la elección de cepas y técnicas para obtener alto contenido lipídico (Pruvost et al 2009 y Pruvost et al 2011). La



estrategia de obtener de mayor cantidad de lípidos por célula se debe a que éste producto es el que se utiliza para la mayoría de productos finales (como por ejemplo biodiesel).

Otros autores aseguran que determinar la geometría ideal del FBR para cada microalga es crucial, ya que influirá en la forma que la luz llegue a la célula, y en el intercambio de masa que se efectúa con cada célula (Bitog *et al* 2014; van Baten *et al* 2003; Bannari *et al* 2011 y Ugwu *et al* 2008).

Otra variable, no menos importante, que afecta en gran medida al crecimiento de la biomasa es la iluminación. Debido a que los organismos fotosintéticos requieren de la luz para producir biomasa, es importante determinar cómo la misma llega a cada célula. Por lo tanto varios modelos de iluminación fueron propuestos con el fin de explicar los fenómenos que conlleva la atenuación de la luz (Béchet *et al* 2013; Pottier *et al* 2014 y Pegallapati *et al* 2014).

Otros trabajos apuntan a simular el mezclado por burbujas de aire para saber cómo influiría en los flujos hidrodinámicos. Este acercamiento permitiría predecir el grado de eficiencia en el cual las trasferencias de masa son realizadas a cada célula y si los fuerzas de mezclado influyen en la muerte celular.

A partir de la determinación de los flujos hidrodinámicos surgieron trabajos en los cuales se asegura que averiguar la trayectoria de las células podría brindar el historial a la exposición de la luz, factor principal en el crecimiento celular por fotosíntesis. Para esto se utilizó tecnología de seguimiento con isótopos radioactivos y simulaciones con trazadores para producir mapas de posiciones temporales (Luo *et al* 2011 y Husselmann *et al* 2013).

Por último, en la necesidad de poder predecir teóricamente la productividad de los fotobiorreactores, se han desarrollado ecuaciones de crecimiento fotosintéticas que tienen en cuenta rendimientos en los procesos moleculares que ocurren en las antenas fotosintéticas y en los fotosistemas (Takache *et at* 2009, Cornet *et al* 2009 y Pruvost *et al* 2011).



UN FOTOBIORREACTOR Bless, Maximiliano Alejandro y Conteri, Germán Daniel

Type of PBR	CFD	Focus of the study	Turbulence	Author
Cylindrical bubble column	FLUENT	Investigation of PBR for	<i>k</i> —ε	Seo et al. (2010)
Flat plate	FLUENT	Study on the destabilization	<i>k</i> –ε	Su et al. (2010)
Pipe type	FLUENT	Development of virtual PBR microalgae culture	_	Sato et al. (2010)
		turbulent flow and flashing effect		
Cylindrical bubble column	FLUENT	Assessment of turbulence	k — ϵ	Gimbun (2009)
Cylindrical bubble column	FLUENT	Large-sized PBR for production	<i>k</i> —ε	Bitog et al. (2009)
Torus reactor	FLUENT	Hydrodynamics in a square-sectioned torus reactor, mixing time	<i>k</i> –ω	Pramparo et al. (2008)
Cylindrical bubble column	FLUENT	Comparison of species	-	Yoo et al. (2008)
Rectangular bubble column	FLUENT	Drag force formulation to regime transitions	<i>k</i> —ε	Simonnet et al. (2008)
Cylindrical bubble column	FLUENT	Continuous phase viscosity, diameter and drag model	_	Santos et al. (2007) (2007)
Cylindrical bubble column	FLUENT	Use of VOF: effect of air	<i>k</i> –ε	Akhtar et al. (2007)
Rectangular bubble column	FLUENT	Radiation distribution in an externally illuminated PBR	RNG <i>k</i> –ε	Trujilio et al. (2007)
Cylindrical bubble column	FLUENT	Applicability of VOF model, hydrodynamics of flow	Standard <i>k</i> –ε	Akhtar et al. (2007) (2007)
Cylindrical bubble column	FLUENT	Mixing as affected by gas	<i>k</i> —ε	Rampure et al.
Cylindrical bubble column		Prediction of flow pattern 1D, 2D and 3D <i>k</i> - ϵ models	Standard <i>k</i> –ε	(2007) Ekambara et al. (2005)
Cylindrical bubble column	FLUENT	Gas-liquid-solid flow	<i>k</i> —ε	Glover and Generalis (2004)
Draft tube airlift reactor	FLUENT	Pressure drop to measure gas	-	Blazey et al. (2004)
Cylindrical bubble column	FLUENT	Bubble size distribution, axial	_	Mouza et al. (2004) (2004)
Jet-loop reactor	FLUENT	Hydrodynamics of flow, three phase system (gas_liquid_	Standard <i>k</i> –ε	Szafran and Kmiec
Airlift reactor	CFX 4 2	Hydrodynamics of flow	Standard k-E	Baten et al. (2003)
Fluidized bed	Modified	Hydrodynamics of flow with	-	Huilin et al. (2003)
Plate type	FLUENT	Hydrodynamics of flow and	RNG <i>k</i> –ε	Perner et al. (2003)
Cylindrical bubble column	CFX 4.2,	Scaling up with highly	Standard <i>k</i> –ε	Krisna and Baten
Cylindrical bubble column	CFX 4.3	Influence of superficial gas velocity, solid loading and geometry on liquid flow	Standard <i>k</i> −ε	Michele and Hempel (2002)
Cylindrical bubble column	CVD-2	Hydrodynamics of bubble	_	Li et al. (2000)
Cylindrical bubble column	CFX 4.2,	Three-phase Eulerian	Standard <i>k</i> –ε	Krisna et al. (2000)
Cylindrical bubble column Rectangular bubble column	FLUENT STABilize	Simulation of a two-phase Effect of aspect ratio of	ASMM -	Glover et al. (2000) Delnoij et al. (1999)
Rectangular bubble column	CFX 4.2	column on flow pattern The influence of turbulence	Standard <i>k</i> –ε	Pfleger et al. (1999)
Cylindrical bubble column	FLUENT	Drag force, Radial lift force basis of drift flux constants	-	Thakre and Joshi (1999)

Tabla II: Panorama de los últimos años respecto a investigaciones realizadas utilizando CFD.

Fuente: Bitog et al, 2011.



Cabe mencionar que la CFD se ha posicionado como una técnica viable para investigar y resolver problemas de ingeniería, y si es usada correctamente, provee resultados confiables a problemas complejos. (Celik, 1993). En lo concerniente al diseño de PBRs, los principios de ingeniería respecto a la distribución de luz, mezclado, flujos hidrodinámicos y distribución de gas ya han sido establecidos y están disponibles para ser utilizados en varias geometrías sensibles de ser llevadas a escala industrial. El escalado industrial con fines comerciales debería de ser siempre el criterio de diseño más importante. A pesar de que la relación entre flujos hidrodinámicos y transferencia de masa ha sido extensamente estudiada y correlacionada en biorreactores de cultivo heterotrófico, solo unos pocos estudios hacen referencia al cultivo fototrófico. Nosotros vemos entonces la necesidad de aportar un modelo computacional capaz de predecir la producción de un cultivo de microalgas, con la intención de asentar las bases para futuras investigaciones que pudiesen unir los conceptos de flujos hidrodinámicos y transferencia de masa con crecimiento de microorganismos fototróficos.

A partir de los trabajos actuales, se decidió que es importante poder desarollar herramientas para poder calcular la producción de biomasa. Para esto se utilizará la ecuación cinética de crecimiento fotosintética propuesta por Pruvost *et al* 2009 para resolverla (cuya simbología y demás detalles veremos más adelante):

$$r_{x} = \rho \bar{\varphi} \mathcal{A} - \mu_{s} C_{x} = \rho_{M} \frac{\kappa}{\kappa + G} \bar{\varphi} E_{a} G C_{x} - \mu_{s} C_{x}$$
(1)

Esta formulación ciertamente está simplificada, dado que las actividades de cloroplastos y mitocondrias no son independientes (Kliphuis, 2010). Sin embargo, ha demostrado ser suficiente en el caso de *Neochloris oleoabundans* y puede retenerse para aquellas especies de microalgas que presenten baja actividad respiratoria en presencia de luz.

Para validar dicha ecuación se utilizarán los datos experimentales del trabajo de Bitog 2014 para el crecimiento de *Chlorella vulgaris* y se evaluará si la ecuación (1) resuelta con Octave puede reproducir los valores de biomasa.

Por último se simularán con OpenFOAM los flujos hidrodinámicos producidos por la inyección de aire en el fotobiorreactor cilíndrico del trabajo de Bitog et al 2014 y se utilizará el trabajo para comparar si podemos reproducir la figura que produce la inyección de aire en el fotobiorreactor.



Modelo de agitación perfecta

A continuación, se explicará el origen y razonamiento de las ecuaciones que utilizaremos para realizar el cálculo numérico.

1 Presentación de ecuaciones

La concentración de biomasa puede obtenerse por un simple balance de masa en un fotobioreactor en donde su mezclado es perfecto (Pruvost 2009):

$$\frac{dCx}{dt} = \langle r_x \rangle \tag{2}$$

siendo Cx concentración de biomasa, t tiempo y $\langle r_x \rangle$ la tasa media de crecimiento volumétrica. Resolver esta ecuación (2) significa determinar la tasa media de crecimiento volumétrica. En condiciones limitadas por la luz, $\langle r_x \rangle$ está directamente relacionado con la luz que incide en el fotobiorreactor. Está estudiado que las microalgas absorben y dispersan la luz que ingresa, produciendo una distribución heterogénea de la luz dentro del cultivo (Pruvost 2011). Esto produce que haya una tasa local de crecimiento volumétrica r_x que tiene que ser promediada para obtener $\langle r_x \rangle$.

En el fotobiorreactor que proponemos, la atenuación de luz solo se produce unidimensionalmente debido a la disposición de tubos fluorescentes en posición vertical en todo el contorno del reactor, por lo que tendríamos que hacer una simple integración sobre la profundidad del cultivo R, es decir el radio del fotobiorreactor:

$$\langle r_{\chi} \rangle = \frac{1}{\pi R^2} \int_0^r r_{\chi} \, dR \tag{3}$$

siendo R el radio del fotobiorreactor.

Para poder resolver la integral se utilizará un modelo matemático para poder resolver r_x . Para eucariotas fotosintéticas como las microalgas, el crecimiento es el resultado del aumento de biomasa causado por la fotosíntesis producida en los cloroplastos (anabolismo) y la parcial degradación de la biomasa debido a la respiración mitocondrial (catabolismo) (Pruvost 2011). Entonces r_x se puede expresar de la siguiente manera:

$$r_x = r_{x,p} + r_{x,s} \tag{4}$$

Siendo $r_{x,p}$ la tasa local de crecimiento fotosintético y $r_{x,s}$ la tasa local de respiración.



La tasa local de crecimiento fotosintético pertenece al primer principio de transferencia de energía por excitación de electrones en la antena fotosintética hacia el centro de reacción, que después sigue al esquema en Z y termina en la síntesis de ATP y reducción de NADH₂ (Cornet y Dussap 2009):

$$r_{x,p} = \rho \bar{\varphi} \mathcal{A} \tag{5}$$

siendo \mathcal{A} la densidad local del irradiancia absorbida, $\overline{\phi}$ es el rendimiendo másico cuántico del esquema Z de fotosíntesis y ρ es la conversión fotónica en energía.

A nos permite describir la cantidad de fotones que recibirán los microorganismos localmente en cada punto del biorreactor según su distancia de la superficie, por lo que este término se puede describir como:

$$\mathcal{A} = E_a G C_{xm} \tag{6}$$

donde G es la irradiancia local, C_{xm} es la concentración de biomasa promedio y E_a es el coeficiente de absorción másico.

La parte disipativa de la absorción de la energía fotónica de la antena se encuentra representada por ρ . Este valor local decrece con la irradiancia local según una conveniente relación obtenida de las bases de una aproximación teórica a nivel cuántico de los mecanismos de transferencia de excitación en la antena:

$$\rho \cong \rho_M \frac{K}{K+G} \tag{7}$$

en donde ρ_M es el valor máximo de la conversión de fotones obtenida cuando el sistema opera en condiciones termodinámicas óptimas y K es la irradiancia en donde se llega a la mitad de la saturación de conversión de fotones.

 $\overline{\phi}$ es una constante media en el tiempo que nos indica la eficiencia del fotosistema para convertir los fotones en biomasa.

Por lo tanto la ecuación (5) planteada anteriormente se puede expresar de la siguiente manera:

$$r_{x,p} = \rho_M \frac{\kappa}{\kappa+G} \bar{\varphi} E_a G C_x \tag{8}$$

El segundo término de la ecuación (4) se compone de la siguiente manera:

$$r_{x,s} = -\mu_s C_{xm} \tag{9}$$

donde μ_s es la tasa específica de respiración celular. Como el proceso de respiración consume biomasa este término es negativo y a mayor concentración este término empieza a tener más relevancia.

SIMULACION COMPUTACIONAL DEL CRECIMIENTO DE MICROALGAS EN UADE UN FOTOBIORREACTOR Bless, Maximiliano Alejandro y Conteri, Germán Daniel

Para extender el modelo, el campo de irradiancia tiene que ser provisto. Este dato depende de la geometría del fotobiorreactor, de la fuente de la luz y de las propiedades ópticas de las células. El fotobiorreactor propuesto solo cumple con la hipótesis de "atenuación unidimensional", donde la atenuación ocurre mayormente de forma perpendicular a la superficie de iluminación, es decir a la profundidad del cultivo. Para calcular la intensidad de la luz en cada posición G, se utilizó el modelo de Beer-Lambert: $G = I_o e^{-E_a C_{xm} r}$

donde I_o es la cantidad de fotones por unidades de tiempo que pasan por la superficie del fotobiorreactor yr es la distancia de la superficie de exposición de la luz hasta la posición en donde se encuentra la célula.

2 Aplicación de las ecuaciones

Uno de los problemas en que incursiona la industria de productos a base de cultivo de microalgas es la predicción de la productividad. En muchos casos el escalado del crecimiento no cumple con las expectativas de las compañías, dejando en el olvido grandes oportunidades de negocios.

En este trabajo se propone un programa que resuelva la ecuación cinética de crecimiento fotosintético de Chlorella vulgaris, utilizando el método de Euler explícito para resolver la ecuación. Tanto en matemáticas como en computación, el método de Euler es un procedimiento de integración numérica para resolver ecuaciones diferenciales ordinarias a partir de un valor inicial dado. Se ha elegido este modelo por ser el más sencillo de los métodos numéricos, de esta manera es como diseñamos algoritmos para simular el crecimiento de la biomasa.

La idea es pensar que la curva de producción de biomasa es desconocida en un principio aunque su punto de comienzo (el inóculo inicial que nombraremos B0) es conocido. Entonces, si se efectúa la integración de la ecuación (8) en el punto B0 se puede computar la pendiente de la curva en ese punto y por lo tanto la recta tangente a la curva.

Ahora, dando un pequeño paso sobre dicha recta, podemos elegir un nuevo punto, llamado B1 y suponer que dicho punto pertenece a la curva. Si seguimos el mismo razonamiento aplicado anteriormente y volvemos a calcular la pendiente de la recta tangente a la curva en el punto B1, luego de varios pasos tendremos formada una curva poligonal B0-B1-B2-B3... En general esta curva que obtenemos al aplicar el método no diverge lejos de la

(10)



curva original. El error entre ambas curvas se puede minimizar si se dan pasos temporales muy pequeños al avanzar sobre la recta tangente a la curva.

El modelo de crecimiento tiene otra variable en cuenta, la intensidad de luz. Como se discutió anteriormente, en un fotobiorreactor en donde la concentración de la masa tiene un gran efecto en la absorción de la luz, ésta disminuye unidimensionalmente a medida que atraviesa el fotobiorreactor, según la ecuación Lambert-Beer.

Lo primero que hará el programa es calcular la intensidad de luz que recibirá cada toroide en tiempo inicial. Para esto se discretiza el biorreactor en 10 toroides de espesor 0.0091 m según la figura 9:



Figura 9: Imagen de la discretización del fotobiorreactor. Fuente propia.

Una vez calculada la intensidad lumínica de cada toroide, se procede al cálculo de la tasa de crecimiento local a la intensidad lumínica recibida en cada toroide. En este momento el programa suma la concentración de la biomasa producida en tiempo 0 y se promedia en todo el biorreactor produciendo C_{xm} . Con C_{xm} se procede a calcular la intensidad lumínica que recibe cada toroide en el paso temporal siguiente, se calcula la biomasa



producida en cada toroide y se vuelve a calcular una nueva C_{xm} para este tiempo. Esta iteración prosigue hasta que se cumplen 9 días de cultivo o 193 ciclos.

3 Composición del algoritmo

Octave es un sistema numérico que interpreta los datos de la extensión .m. Nuestro algoritmo se encuentra en el archivo simpleRadial que se encuentra en el anexo 1.

A continuación se expondrá la estructura del algoritmo y las constantes que utiliza el Octave para los cálculos. El documento consta de las siguientes secciones:

% Ritmo de crecimiento de biomasa:

En esta sección solamente se muestran las constantes propias de la ecuación. Las constantes fueron obtenidas del trabajo de Pruvost, 2011.

% Reactor

Acá podemos visualizar las medidas geométricas de nuestro fotobiorreactor. El fotobiorreactor pertenece al del trabajo de Bitog 2014.



Figura 10: Geometría del fotobiorreactor. Fuente: Bitog et al, 2014.



% Intensidad lumínica

La ecuación utiliza intensidad lumínica a nivel cuántico, por lo tanto se mide en cantidad de fotones emitidos por los tubos fluorescentes y una ecuación para convertir de Watts a flujo de fotones es necesaria. Primero se calcula la cantidad de Watt por superficie según el trabajo de Bitog 2014, tabla 5e. Para convertir la irradiancia de fotones utilizamos una ecuación obtenida de la bibliografía (ver sección "bibliografía").

% Discretization

En esta sección se describen los pasos temporales, cantidad de pasos temporales y el tiempo total del cultivo. También se describen los pasos espaciales sobre el radio, posición media de cada toroide, radio interno y radio externo y volumen de cada toroide. De esta manera discretizamos el fotobioreactor radialmente manteniendo constante la altura. Esto nos permite calcular la concentración de biomasa para cierto tiempo para cada uno de los 10 toroides.

% Matrices de almacenamiento de datos

Según el método de Euler para calcular el paso siguiente se necesitan los datos del paso inmediatamente anterior. Estos valores son almacenados en matrices de diferentes tamaños. A continuación se detallan estas matrices:

Nombre matriz	Utilidad
Cx= zeros(npasos,nceldas)	se guardan las concentraciones acumuladas de biomasa para
	cada toroide para cierto tiempo
G = zeros(npasos,nceldas)	se guarda la intensidad de luz para cada toroide para cada
	tiempo
C _{xm} =zeros(npasos,1)	se almacena la concentración promedio acumulada del
	bioreactor para cada tiempo

Tabla III: Descripción de las matrices en el algoritmo simpleradial.m. Fuente propia.

Las siguientes matrices fueron generadas solamente para la confección de gráficos:



SIMULACION COMPUTACIONAL DEL CRECIMIENTO DE MICROALGAS EN

UN FOTOBIORREACTOR Bless, Maximiliano Alejandro y Conteri, Germán Daniel

Nombre matriz	Utilidad
masa=zeros(npasos,1)	almacena la masa de biomasa acumulada en el bioreactor para cada
	tiempo
t = zeros(npasos, 1)	se guardan los tiempos utilizados

Tabla IV: Descripción de las matrices para gráficos. Fuente propia.

% Inicialización del loop temporal

En esta sección del algoritmo se detallan las condiciones iniciales. Se describen la concentración promedio inicial para cada celda radial según el trabajo de Bitog 2014, intensidad inicial para cada tubo, tiempo inicial, etc.

% Loop temporal

Desde acá se genera la iteración desde el paso n=2 hasta 193 pasos. Primero se calcula la intensidad de luz para el tiempo en el paso 2. Después se calcula la concentración de biomasa que se generó del paso anterior (paso 1) al actual (paso 2) y se suma la concentración del paso anterior (paso 1).

Después se calcula el tiempo actual (del paso 2), masa del biorreactor, concentración promedio, y después la concentración de cada celda en este momento (paso 2). Es importante destacar que para este método se requiere suponer que la concentración de biomasa producida en un tiempo dado se mezclará instantáneamente por partes iguales en el biorreactor evitando gradiente de concentraciones.

% Generación de gráficos

En esta sección es donde se codifica para la generación de los gráficos. Se generó un código para realizar 2 gráficos con 2 abscisas (t vs C_{xm} ; t vs masa) y un gráfico con 3 abscisas (t vs r vs G).

4 Explicación del mezclado perfecto (suposiciones y justificaciones):

Para la implementación de esta ecuación se toma que la única variable es la intensidad de luz. Las demás variables como: pH, temperatura, intercambio gaseoso, nutrientes, rpm, etc; se mantienen en toda la simulación como los valores óptimos para el crecimiento de la especie. De esta manera suponemos que cada microalga tiene la misma probabilidad de estar en cualquier parte del fotobiorreactor en cualquier momento dado así


como de recibir la misma cantidad de luz, nutrientes e intercambiar gases, y se considera también que los flujos hidrodinámicos son los óptimos para su crecimiento. Por consiguiente nos enfocaremos en la única variable: incidencia de la luz.

5 Generación de los gráficos

A la hora de visualizar resultados, resulta práctico e imprescindible que en toda investigación se pueda utilizar gráficos para mostrar las ideas de una forma más clara, ya que es más sencillo identificar tendencias en una figura que una tabla de resultados. El programa Octave dispone de un variado conjunto de funciones útiles para la creación de gráficos en dos y tres dimensiones.

Para la siguiente parte del trabajo se generaron dos gráficos en dos dimensiones y uno en tres dimensiones.

Para dibujar gráficos de dos dimensiones, Octave dispone de la orden plot(x,y), donde x e y son dos vectores de la misma dimensión que representan las coordenadas de las abscisas y ordenadas de los datos a representar, respectivamente. Se representarán dos gráficos: concentración media acumulada en función tiempo y biomasa media acumulada en función tiempo. En el primer gráfico se analizará cómo evoluciona la concentración media acumulada (y) durante el periodo de cultivo (x) que serán 8 días. En el segundo gráfico se evaluará la cantidad de biomasa que se produce (y) en el mismo periodo de tiempo (x).

Octave también nos da la posibilidad de crear imágenes tridimensionales. Para este trabajo solo se creará un gráfico con superficie. El fin de crear una superficie tridimensional es analizar cómo disminuye la intensidad de la luz *G* a medida que entra en el radio *r* del fotobiorreactor en un periodo *t* de 9 días. Para lograr esto hay que generar la función z = f(x, y) que representa una superficie en un sistema de coordenadas *xyz*. *x* es el tiempo en [d]; *y* la masa en [m] y *z* la intensidad de luz en fotones [muMolhv/m2s]. Antes de realizar la representación, es necesario crear una malla de puntos en el plano *xy* (tiempo y masa) para calcula el valor de *z* (intensidad) en cada uno de ellos. Para ello, Octave dispone de la función meshgrid. La sintaxis de esta orden es: [*X*, *Y*] = meshgrid(*x*,*y*) donde *x* e *y* son vectores con los valores de esta variables. *X* es una matriz en la que el vector *x* se copia en cada una de sus filas, e *Y* es una matriz en la que el vector *y* se copia en cada una de sus columnas. De esta forma, podemos trabajar con las matrices *X* e *Y* para obtener una matriz *Z* en términos de la función representada.



6 Validación e interpretación los gráficos

Como se expuso anteriormente, para la validación del algoritmo creado en este trabajo en la plataforma Octave, se utilizaron los datos experimentales del trabajo de Bitog 2014. En la segunda parte del trabajo citado se lleva a cabo el cultivo de *Chlorella vulgaris* en un fotobiorreactor configurado de manera tal que todas las condiciones son óptimas, como se plantea para el fotobioreactor de este PFI. Si bien el fotobiorreactor modificado de Bitog contiene una mejora en la base del mismo, ésta solo afecta a los flujos hidrodinámicos mejorando su eficiencia, su volumen control no varía. Por tal motivo se considera que este fotobiorreactor modificado por Bitog es suficiente para validar nuestro modelo propuesto.

Bitog con su fotobiorreactor mejorado ha conseguido concentraciones de biomasa en los días 7, 8 y 9 de 11.17, 11.55 y 11.96 gL-1 respectivamente. En nuestras primeras simulaciones hemos conseguido los siguientes valores según la Tabla V:

Tiempo [d]	Concentración Bitog 2014 [g/L]	Concentración algoritmo Octave [kg/m3]	
7	11,17	3,310	
8	11,55	3,320	
9	11,96	3,326	

Tabla V: Comparación de concentraciones finales entre trabajo de Bitog y nuestro algortimopara predicción del crecimiento. Fuente propia.

Como se podrá apreciar en la Tabla V, el logaritmo con los datos de la bibliografía dan una pobre predicción en la producción de biomasa en los últimos 3 días. Se puede ver que los valores difieren cerca de un 70%, impidiendo que este algoritmo pueda ser empleado para lo que buscamos en este trabajo.

A continuación de muestran los gráficos producidos por el programa:





Figura 11: Concentración biomasa acumulada [kgm-3] en función del tiempo [d]. Fuente propia

En la figura 11 podemos visualizar cómo la concentración de biomasa se va acumulando durante un período total de 9 días. Se puede observar que durante los primeros 2 días hay un crecimiento casi lineal, luego comienza a disminuir y llega a un estado estacionario o plateau entre los días 4-6. Este comportamiento no replica el ciclo de vida esperado para todo cultivo de microorganismos unicelulares.

Como explicamos anteriormente el único limitante en nuestro sistema de cultivo es la disponibilidad de luz para cada célula. Según la ecuación de Lambert-Beer la atenuación de la luz se debe a la profundidad del biorreactor (es decir, su radio) y a la concentración de biomasa. Analizando la figura 11 vemos que cuando el sistema produjo cerca de 3 kg/m3 la producción llega a un plateau. Esto se debe a que el sistema llegó a una concentración crítica que evita que la luz pueda seguir avanzando más profundo para seguir estimulando el crecimento. Según la tabla IV el fotobiorreactor de Bitog produjo 11,96 kg/m3el día 9, por o tanto nuestro algoritmo está sobreestimando el efecto de dispersión de la luz.

Si se revisa la ecuación 10 de Lambert-Beer podemos ver que el único término que habla del efecto de dispersión de la luz es *Ea*. Este término nos indica la cantidad de luz

UADE 🛞

que recibirá cada punto según la composición del medio. Como expuso Cornet *et al* 2009, la ecuación 10 sirve como una aproximación inicial, pero no tiene en cuenta el efecto de dispersión y reflexión de la luz debido a los pigmentos de los cloroplastos. De esta manera el autor propone otra ecuación para calcular la intensidad de la luz para cada punto a una cierta concentración. En este PFI lo que se realizó para superar este problema es analizar la influencia que tiene el factor *Ea* solo en la ecuación de Lambert-Beer y no en la ecuación 8, ya que en la bibliografía observamos que esta ecuación dio excelentes resultados.

A mayor valor *Ea*, menor será la concentración de biomasa que el sistema requerirá para llegar su plateau. Por lo tanto la absorbancia deberá ser menor a la actual. Para esto se agregó a la ecuación 10 un factor de corrección denominado f_c : $G = I_0 e^{-E_a f_c C_{xm} r}$ (11)

El nuevo factor debe ser un valor que oscile entre 0 y 1, de manera que disminuya la influencia de la absorbancia en la ecuación 10. El nuevo valor de f_c será 10/36, que surge de una iteración de factores hecha para que el valor de E_a , sea el requerido para que el plateau de la concentración sea alcanzado a valores de entre 6 y 8 días (tal y como en el experimento de Bitog), en vez de entre 4 y 6 días como surgió de nuestro algoritmo inicial. Con la ecuación 10 y el nuevo término f_c se realiza un nuevo algoritmo y se confecciona el siguiente gráfico en donde comparamos las curvas de producción de biomasa con los datos iniciales de la bibliografía y con la incorporación del factor de corrección:





Figura 12: Comparación de la producción de biomasa con los valores iniciales de la bibliografía y con el factor de corrección. Fuente propia.

En la segunda simulación se han conseguido para los días 7, 8 y 9 valores similares a los expuestos en el trabajo de Bitog: 11.784, 11,879 y 11,932 kgm-3. Se detallan en la tabla VI los valores del cultivo de Bitog contra los calculados con el factor de corrección y su variación:

Tiempo [d]	Concentración Bitog 2014 [g/L]	Concentración algoritmo Octave [kg/m3]	Variación [%]
7	11,17	11,784	5,50%
8	11,55	11,879	2,85%
9	11,96	11,932	0,23%

Tabla VI: Comparación de concentraciones finales entre trabajo de Bitog y nuestro algortimo con el factor de corrección para predicción del crecimiento. Fuente propia.

Como se podrá visualizar el algoritmo predijo de manera exitosa los resultados prácticos del experimento de Bitog 2014, obteniendo en los últimos tres días de cultivo una variación promedio de 2,86%. Esto nos da la certeza de que el algoritmo tiene gran poder de



predicción en concentraciones finales cuando solamente se toma como variable la intensidad de luz.

A continuación se exponen los gráficos generados:



Figura 13: Concentración biomasa acumulada [kgm-3] en función del tiempo [d]. Fuente propia

En la figura 13 podemos visualizar cómo la concentración de biomasa se va acumulando durante un período total de 8 días. Se puede observar que durante los primeros tres días hay un crecimiento casi lineal, luego comienza a disminuir y llega a un estado estacionario o plateau entre los días 6-7. Este comportamiento replica el ciclo de vida esperado para todo cultivo de microorganismos unicelulares.





Figura 14: Acumulación de masa [kg] en función del tiempo [d]. Fuente propia.

En la figura 14 se analiza cómo la biomasa aumenta durante el periodo de 8 días. Al no haber una variación en el volumen de cultivo se espera el mismo comportamiento que en la figura 13.





Figura 15: Comparación de 3 variables: G[muMolhv/m2s], r[m] y t[d]. Fuente propia.

En la figura 15 podemos apreciar cómo el radio del FBR y el tiempo transcurrido influyen en la intensidad de la luz recibida. Como expone la ecuación de Lambert-Beer, la intensidad de la luz disminuye exponencialmente a medida que va atravesando el seno del fotobiorreactor. Esto se debe a las propiedades absortivas y refractantes de las células con respecto a la luz, es decir que a medida que la luz atraviesa el cultivo, parte de la luz es absorbida o refractada hacia otra dirección.

El color azul oscuro del gráfico anterior se debe a la enorme cantidad de pasos temporales calculados en total, debido a la forma de discretización del algoritmo. En este gráfico se encuentran 193 valores diferentes de intensidad de luz para los diez toroides a los que se les calculó su intensidad de luz.

Podemos entonces visualizar cómo la luz es rápidamente atenuada antes de penetrar dos centímetros en un corto momento (cerca del día 2). De esta información se puede apreciar la incapacidad de la luz de penetrar e iluminar un gran volumen dentro del FBR, con la consiguiente merma en la producción.



Otro análisis importante a tener en cuenta es la comparación del gráfico representado en la figura 13 (generado por el Octave) con el gráfico generado por Bitog. Los mismos se muestran a continuación:



Figura 16: Comparación entre gráficos creados por Octave (arriba) y el experimento práctico llevado a cabo por Bitog. Fuente propia (gráfico superior) y Bitog 2014 (inferior).



Observando dichos gráficos podemos encontrar diferencias cualitativas sutiles. En el gráfico superior podemos ver que el crecimiento de las algas es lineal hasta el día tres aprox. mientras que en el experimento de Bitog (gráfico inferior de la figura 15) se puede ver que durante los primeros cuatro días hay una fase de latencia o lag. Esta diferencia podría deberse a al poco poder predictivo que tiene el algoritmo de ajustarse a la etapa de adaptación de las microalgas. En esta fase los organismos se están adaptando al nuevo medio ambiente y necesitan activar su maquinaria metabólica para poder dividirse activamente. Esto no es tenido en cuenta por nuestro algoritmo.

Además se puede observar que en el segundo gráfico la concentración de biomasa a partir del día siete comienza a disminuir lentamente cuando en el gráfico superior hay un crecimiento positivo pero muy poco pronunciado.

Esta discrepancia en los últimos días entre ambos gráficos es debido a la fase de declinación o muerte. Se alcanza esta fase cuando la muerte celular supera la tasa de mitosis. Una de las razones por la cual sucede podría ser por el agotamiento de los nutrientes o acumulación de toxinas. En el modelo de Bitog se asegura que se cultivan las algas satisfaciendo todas las variables de crecimiento, por lo cual el cultivo pasa por una etapa de escasez de nutrientes llegando a la fase de declinación y disminuyendo la biomasa. Otro motivo podría ser que haya un término en la ecuación cinética del crecimiento fotosintético que no pueda predecir la muerte celular. Podemos concluir que el término de mantenimiento celular propio de nuestra ecuación de crecimiento no influye lo suficiente a grandes cantidades de biomasa para que haya una producción negativa.

7 Capacidad de predicción

Para evaluar una de las utilidades y ventajas que nos proporciona el algoritmo de cinética de crecimiento fototrópica se eligieron tres variables: masa inicial del inóculo, intensidad inicial de la luz sobre la superficie del fotobiorreactor y la relación de aspecto (manteniendo constante el volumen del biorreactor pero modificando su radio y altura). Se realizará una variación de cada valor en un 10% y se graficarán los resultados para su posterior análisis. En cada gráfico encontraremos tres líneas: la línea roja punteada corresponde al valor original, la línea azul representa una disminución de la variable en un 10% y la línea verde representa un aumento de un 10%.



7.1 Masa Inicial:



Figura 17: Representación de la variación en la masa inicial del inóculo. Fuente propia.

Masa inicial	Concentración biomasa [kgm-3]	Variación con valor inicial
		[%]
-10%	11,874	-0,0421%
Inicial	11,879	-
+10%	11,884	+0,0421%

Tabla VII: Valores de la variación en la masa inicial del inóculo. Fuente propia.

En la figura 17 se puede observar cómo las curvas correspondientes a -10% (verde) y a +10% (azul) convergen después del día 6 con la curva correspondiente a la masa inicial (roja), es decir que el comportamiento de la cinética de crecimiento cuando variamos un 10% la masa inicial no produce cambios significativos con respecto al perfil inicial. En la tabla VII podemos interpretar que para una variación del 10% de la masa inicial, la biomasa final varió menos del 1%. Por lo tanto podemos concluir que la masa inicial del inóculo no tiene gran influencia en la producción final de biomasa. Esto podría deberse a que, si bien se



comenzó el cultivo con una ventaja de un 10% más de biomasa, esto ocasiona que se llegue más rápidamente a un mayor volumen oscuro del biorreactor, es decir, que el paso óptico de la luz se opaque más rápido que con una menor concentración inicial, con la consiguiente merma en la capacidad fotosintética de las microalgas. Esto produciría la compensación que estamos viendo en el gráfico. El mismo razonamiento es aplicable a la inversa para el inóculo reducido en un 10%.





Concentración biomasa "Cxm" en el tiempo "t"

Figura 18: Representación de la variación en la intensidad de la fuente lumínica. Fuente

propia.0

Intensidad	Concentración biomasa [kgm-3]	Variación con valor inicial [%]
-10%	11,644	-1,9783%
Inicial	11,879	-
+10%	12,092	+1,7931%

Tabla VIII: Valores de la variación en la intensidad lumínica inicial. Fuente propia.



En este caso, cuando se varía solamente la intensidad inicial de la luz sobre la superficie del biorreactor, se puede apreciar que existe mayor variación comparando con los resultados de la variación de masa inicial expuestos en la tabla VII, aunque sigue siendo un porcentaje bajo (2%). Por lo tanto arribamos a la misma conclusión que en el análisis anterior: si se aumenta la intensidad lumínica inicial no genera un aumento significativo en la biomasa final. Esto podría deberse a la gran influencia que tiene el apantallamiento de la biomasa con respecto al paso de la luz. Este factor es tan importante que un aumento o disminución del 10% en la intensidad inicial no influirá proporcionalmente en la producción de biomasa final.

7.3 Relación de aspecto:



Figura 19: Representación de las variación en la relación de aspecto. Fuente propia.



Relación de aspecto	Concentración biomasa	Variación con valor
(modificación de r)	[kgm-3]	inicial [%]
-10% (r=0.0833m ;h=1.2963m)	12,931	+8,8560%
Inicial (r=0.0925m; h=1.050m)	11,879	-
+10% (r=0.1018m ;h=0.8677m)	10,997	-7,4249%

Tabla IX: Valores de la variación en la relación de aspecto. Fuente propia.

En la variación de la relación de aspecto lo que se realizó fue reducir y aumentar en un 10% el radio del fotobiorreactor, pero manteniendo su volumen constante, por lo que el valor de la altura aumentó y disminuyó, respectivamente.

Como se puede ver, una reducción del 10% del radio produjo un aumento aproximadamente del 9% en concentración de biomasa; y el aumento del radio produjo una disminución aproximada del 7,5%. Esto se debe al efecto explicado en la ecuación de Beer-Lambert. La productividad de los fotobiorreactores es muy sensible a la geometría y la extensión de su radio. Al achicarse el radio (y crecer su altura), una gran porción de biomasa queda ahora iluminada, contribuyendo al crecimiento fotosintético. La exacerbación de este caso se da en los FBRs de tipo tubular explicados en secciones anteriores. Es comprensible su enorme productividad dado su reducido radio. A partir de este análisis podemos detectar que el fotobiorreactor propuesto por Bitog puede seguir siendo mejorado, ya que al reducir el radio se aprovecharía mejor la luz emitida por la fuente. Cabe añadir que antes de realizar cualquier modificación geométrica se debe analizar si los flujos hidrodinámicos siguen siendo los óptimos para el cultivo de *Chlorella vulgaris*.

El caso opuesto se da al agrandar el radio del FBR, es decir, al ensancharlo y reducir su altura. Ahora la luz sólo ilumina a una pequeña porción de la biomasa, mayor cantidad de microalgas se encuentran a oscuras y no pueden contribuir al crecimiento fotosintético.

En resumen, el factor clave en esta simulación es la relación radio del FBR/altura del FBR. Si esta relación es grande, es decir, si el radio es grande y la altura es chica, el FBR será menos eficiente. Si por otro lado, la relación es chica, es decir, si el radio es pequeño pero la altura es grande, se obtendrán grandes productividades.



Modelo hidrodinámico CFD

1 Simulación con OpenFOAM

A partir del trabajo de Bitog 2014 se utilizó la mecánica de fluidos computacional, en este caso OpenFOAM, para analizar el aire inyectado en el fotobiorreactor (figura 12).

OpenFOAM utiliza métodos numéricos y algoritmos para resolver y analizar problemas sobre el flujo de aire y agua. El objetivo de esta simulación es demostrar la utilización de esta herramienta para el análisis de los fluidos en un biorreactor.

Para este análisis se tomó el fotobiorreactor como un sistema compuesto de dos fases, agua y aire, considerándose al alga como parte de la fase continua durante la simulación por tener las mismas propiedades físicas que el agua a los efectos de esta simulación (densidad, solubilidad, propiedades de floculación, etc). OpenFOAM está constituido por varias partes, una de ellas es el solver (resolver en inglés), que es la aplicación de la librería de C++ que se encarga de resolver un problema específico en el continuo mecánico (guía OpenFoam). El solver utilizado fue el twoPhaseEulerFoam.

OpenFOAM es un paquete de software CFD de código abierto escrito en C ++. La ejecución de OpenFOAM generalmente se produce a través de archivos de texto y comandos de estilo UNIX. Un sistema operativo Linux es necesario para ejecutar OpenFOAM. La estructura caso de OpenFOAM para nuestro modelo puede ser presentado como:





Figura 20: Estructura caso de OpenFOAM para nuestro modelo. Fuente propia.

Como se representa en la figura 20, cada caso se guarda como un directorio, y debe contener al menos los tres directorios: 0, constant y system. En el directorio constante se encuentran propiedades de los materiales, la turbulencia, propiedades e información de malla. En el directorio del system se encuentran controles de soluciones, esquemas de discretización y controles de paso. En el directorio 0 se encuentran todas las condiciones iniciales del flujo inicial relevante para el solver y las condiciones de contorno se establecen para cada campo



en este directorio. A medida que se va resolviendo el caso, la nueva información creada para cada tiempo es guardada en sus propios directorios. Estos directorios muestran los datos de los flujos actualizados.

La explicación de cómo funciona el solver para nuestro caso se extrajo mayormente de la página openfoamwiki.net (2015).

El solver twoPhaseEulerFoam es una aplicación que resuelve las ecuaciones que involucran dos fases usando la metodología de dos fluidos de Euler-Euler, adecuado para calcular los flujos de gas-líquido dispersados. En el enfoque de Euler-Euler de dos fluidos, las fases se tratan como un continuo interpenetrante, que son capaces del intercambio de propiedades, como momento, energía y masa.

2 Capacidad del solver

El solver twoPhaseEulerFoam implementa las ecuaciones de dos fases para la simulación de flujos gas-líquido.

- El modelo se somete a los siguientes supuestos:
- Fases son incompresibles
- El diámetro de partícula fase dispersa (aire) es constante
- El flujo es isotérmico
- El intercambio de momento sólo se contabiliza con las ecuaciones de transporte de momento

Las principales características del solver son los siguientes:

- Capacidad para resolver los flujos dispersos en dos fases que tiene alto ratio de densidad (alta diferencia de densidad entre ambas fases)
- El algoritmo de solución es robusto, capaz de lidiar con la separación de flujo completa
- Contiene la función de modelado de turbulencia a través funciones de pared estándar y del modelo k-épsilon (modelos de turbulencia), el cual se describe a continuación.

El solver twoPhaseEulerFoam actualmente tiene las siguientes limitaciones:

- Sólo una fase dispersa y una fase continua pueden ser utilizados.
- No es posible contabilizar para múltiples fases dispersas (es decir, representar una distribución de diámetro de la fase dispersa)



- El diámetro de las partículas que constituyen la fase dispersa se supone que es constante. Agregación, fenómenos de rotura y coalescencia no se contabilizan.
- El coeficiente de arrastre se calcula como un promedio de los coeficientes de arrastre evaluado para cada fase teniendo en cuenta las fracciones de cada fase. No hay disponibles otros modelos de arrastre
- La interacción entre las fases ocurre sólo a través del término de intercambio de momento correspondiente a las ecuaciones de momento:
 - 1. No es posible modelar la transferencia de calor entre las fases
 - 2. No es posible modelar la transferencia de masa entre las fases
 - 3. No hay modelo de reacción química está disponible

3 Modelo de turbulencia Lathouwers 1995:

El solver twoPhaseEulerFoam utiliza varios modelos k- ϵ de turbulencia. Para nuestro trabajo se eligió el modelo de turbulencia k- ϵ de Lahey porque es el que mejor se adecua a sistemas en donde la fracción de cada fase es muy alta. La ecuación que describe las fluctuaciones por turbulencia son las siguientes:

Energía cinética turbulenta k1:

$$\frac{\partial \alpha_1 \rho_1 k_1}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla} \cdot (\alpha_1 \rho_1 \vec{u}_1 k_1) = \left(\boldsymbol{\nabla} \cdot \alpha_1 \frac{\mu_1^t}{\sigma_{k_1}} \boldsymbol{\nabla} k_1 \right) + \Pi_{k_1} + \Pi_{k_1}^i$$
(12)

Tasa de disipación ε:

$$\frac{\partial \alpha_1 \rho_1 \varepsilon}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla} \cdot (\alpha_1 \rho_1 \vec{u}_1 \varepsilon) = \left(\boldsymbol{\nabla} \cdot \alpha_1 \frac{\mu_1^t}{\sigma_{\varepsilon}} \boldsymbol{\nabla} k_1 \right) + \Pi_{\varepsilon} + \Pi_{\varepsilon}^i$$
(13)

Los términos Π_{ϵ} y Π_{k_1} denotan los términos la producción monofásica ordinaria y disipación. Los términos $\Pi^i_{k_1}$ y Π^i_{ϵ} incluyen los efectos de interferencia en la turbulencia de la fase transportadora.

El modelo de Lahey expresa la dispersión turbulenta de la siguiente manera:

$C_{td}\rho_1(k_1+k_{B1})\nabla \alpha_2$

Esta ecuación denota una relación isotrópica en las fases dispersas y continuas que produce una igual dispersión en todas las direcciones.

La siguiente ecuación explica el flujo alrededor de una burbuja en un flujo no homogéneo teniendo rotación:

$$\vec{I}_{2} = A_{d}(\vec{u}_{1} - \vec{u}_{2}) - \alpha_{2}C_{am}\rho_{1}\left(\frac{D_{2}\vec{u}_{2}}{Dt} - \frac{D_{1}\vec{u}_{1}}{Dt}\right) - \alpha_{2}C_{1}\rho_{1}(\vec{u}_{s} \times (\nabla \times \vec{u}_{1}))$$
(15)

(14)



Esta ecuación expone la sumatoria linear de la fuerza de arrastre, masa virtual y fuerza de sustentación.

Ad es dado como:

$$A_d = \frac{3}{4} \frac{\alpha_d \rho_c}{d_b} C_d |\vec{v}_s| \tag{16}$$

donde C_d es dado como:

$$C_d = \frac{^{24}}{_{Re}}(1 + 0.15Re^{0.687}) \tag{17}$$

Tomando en cuenta que el coeficiente de masa virtual es igual al coeficiente de sustentación conduce a un sistema objetivo de ecuaciones. El modelo de Lahey utiliza la expresión de flujo potencia para la diferencia de presión interfacial (pk-pl,i):

$$p_1 - p_{1,i} = +C_p \rho_1 |\vec{u}_s|^2 \tag{18}$$

Este término se abandona en la ecuación de momento de la fase gaseosa por su baja densidad.

La turbulencia inducida por las burbujas está compuesta por la rotación del líquido alrededor de las burbujas y por el movimiento rotacional de la estela de las burbujas. En el caso donde las esferas no interaccionan con el flujo, el término de stress se lee de la siguiente manera:

$$T_{(BI)} = -\frac{1}{20} \left(3|\vec{u}_{s}|^{2} \bar{I} + \vec{u}_{s} \vec{u}_{s} \right)$$
(19)

donde:

$$\vec{u}_s = \vec{u}_c - \vec{u}_d \tag{20}$$

4 Ecuaciones de gobierno:

En este modelo de dos fluidos, las ecuaciones de continuidad y de momento son respuestas para cada fase presentes en el sistema. Estas ecuaciones se pueden derivar promediando condicionalmente la ecuación para un flujo monofásico. Las ecuaciones de continuidad para cada fase ϕ tiene la forma:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_{\varphi} \rho_{\varphi}) + \nabla \cdot (\alpha_{\varphi} \rho_{\varphi} U_{\varphi}) = 0$$
(21)

Donde $\alpha \phi$ es la fracción de fase de la fase ϕ . $\rho \phi$ es la densidad del material que constituye la misma fase, y $U\phi$ es la velocidad de fase ϕ . La ecuación de momento de la fase es:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\alpha_{\varphi} \rho_{\varphi} U_{\varphi} \right) + \nabla \cdot \left(\alpha_{\varphi} \rho_{\varphi} U_{\varphi} U_{\varphi} \right) + \nabla \alpha_{\varphi} \tau_{\varphi} + \nabla \left(\alpha_{\varphi} R_{\varphi} \right) = \alpha_{\varphi} \nabla p + \alpha_{\varphi} \rho_{\varphi} g + M_{\varphi}$$
(22)



Donde M_{ϕ} es el tensor tensión de la fase laminar, que se presume ser newtoniana; R_{ϕ} es el tensor tensión de la fase Reynolds y M_{ϕ} es el término cambio de momento. El tensor tensión laminar se define, para cada fase, como:

$$\tau_{\varphi} = -\rho_{\varphi} v_{\varphi} \left[\nabla U_{\varphi} + \nabla^T U_{\varphi} \right] + \frac{2}{3} \rho_{\varphi} v_{\varphi} \left(\nabla \cdot U_{\varphi} \right) I$$
(23)

Donde v_{ϕ} es la viscosidad cinemática molecular de la fase ϕ constituyente del fluido, e I es la matriz identidad. La fase tensor tensión de Reynolds viene dada por:

$$R_{\varphi} = -\rho_{\varphi} v_{\varphi,t} \left[\nabla U_{\varphi} + \nabla^T U_{\varphi} \right] + \frac{2}{3} \rho_{\varphi} v_{\varphi,t} \left(\nabla \cdot U_{\varphi} \right) I + \frac{2}{3} \rho_{\varphi} k_{\varphi} I$$
(24)

Donde k_{φ} es la fase de la energía cinética turbulenta. En twoPhaseEulerFoam, la energía cinética turbulenta se supone idéntica para ambas de las fases presentes en el sistema. $v_{\varphi,t}$ es la fase de la viscosidad turbulenta cinemática, definido como :

$$\nu_{\varphi,t} = C_{\mu} \frac{k_{\varphi}^2}{\varepsilon_{\varphi}} \tag{25}$$

 C_{μ} es una constante, y ϵ_{ϕ} es la tasa de disipación turbulenta de la fase. La viscosidad efectiva de la fase es calculada como la suma de viscosidad molecular y la viscosidad de la fase turbulenta.

El término de intercambio de momento puede descomponerse como una contribución de la fuerza de arrastre, de la fuerza de sustentación y de la fuerza masa virtual:

$$v_{\varphi,eff} = v_{\varphi} + v_{\varphi,t} \tag{26}$$

Los términos se modelan según Weller (2005). El término de arrastre se describe como:

$$M_{a,drag} = \frac{3}{4} \alpha_G \alpha_L \left(\alpha_L \frac{c_{D,G}\rho_L}{d_G} + \alpha_G \frac{c_{D,L}\rho_{GL}}{d_L} \right) |U_r| U_r$$
(27)

Donde d_G y d_L son el diámetro de partícula de fase, $U_r = U_G - U_L$ es el vector velocidad relativa, y $C_{D,G}$ y $C_{D,L}$ son los coeficientes de resistencia calculados con respecto a cada fase, de acuerdo con :

$$C_{D,\varphi} = \frac{24}{Re_{\varphi}} \left(1 - 0.15 Re_{\varphi}^{0.687} \right) \tag{28}$$

El modelo de arrastre está codificado en el solver twoPhaseOpenFoam, y ninguna constante puede ser seleccionar por el usuario.

Se tiene que establecer el coeficiente de sustentación, C₁.

El término fuerza de masa virtual se evalúa como:



$$M_{\varphi,\nu m} = \alpha_G \alpha_L C_{\nu m} \rho_L \left(\frac{dU_L}{dt} \Big|_L - \frac{dU_G}{dt} \Big|_G \right)$$

(29)

Se tiene que establecer la fuerza de masas virtual, C

5 Funcionamiento del solver

Para la solución numérica de la ecuación de dos fases se utiliza un algoritmo de segregación en base al procedimiento PISO extendido a los flujos bifásicos (Oliveira e Issa, 2003). Las ecuaciones de momento son manipuladas para estabilizar el sistema de ecuaciones en los límites del rango de fracciones de volumen para evitar singularidades. Para obtener más información sobre la aplicación y la metodología numérica de twoPhaseEulerFoam se remite al lector a openfoamwiki.net (2012), que se basa en Oliveira e Issa (2003), Rusche (2002) y Weller (2005). El procedimiento de solución adoptada en el solver se puede resumir de la siguiente manera:

- 1. Resuelve las ecuaciones de continuidad de fase
- 2. Actualización de elevación, arrastre y coeficientes de masas virtuales
- 3. Construir la matriz ecuación de momento
- 4. Predecir los campos de velocidad de fase, sin tener en cuenta el gradiente de presión en este escenario
- 5. Resolver la ecuación de presión
- Corregir las velocidades con el nuevo campo de presión, y actualizar las fracciones de fase
- 7. Resuelve las ecuaciones de transporte para las cantidades de turbulencia

6 Descripción del caso

El caso de simulaciones de dinámica de fluidos computacional será el mismo fotobiorreactor al que se le ideó el algoritmo con Octave para la predicción de rendimiento en la biomasa. Utilizaremos OpenFOAM para simular los flujos líquido-gas producidos por la inyección de gas en el fondo del biorreactor. Para llevarlo a cabo se creó con el programa GMSH el dominio del fotobiorreactor en donde en la parte central del fondo del cilindro se inyecta aire (Fase dispersa) en el agua (fase continua). Por el alto costo computacional que supone simular un caso en 3D, se optó por simular en 2D. Suponiendo que el fotobiorreactor tiene mezclado perfecto, los flujos hidrodinámico no cambian al efectuar una rotación en torno a un eje fijo longitudinal ubicado en el centro del cilindro. Bajo esta premisa (simetría



de revolución) se simulará una porción de 5° y después se utilizará una propiedad del OpenFOAM para crear un fotobiorreactor con un corte longitudinal rotando la imagen simulada en 360°. Este corte puede visualizarse en la figura 21.

7 Generación de la malla

Para la generación de la malla se utilizó GMSH. GMSH es un software para generar mallados bidimensionales y tridimensionales automáticamente. GMSH está escrito en C++ y es multiplataforma (Unix/Linux, Mac OS X, Windows).

El generador presenta cuatro módulos: geométrico, mallador, solver y postprocesado. El módulo geométrico (de diseño), permite dibujar visualmente una figura aunque con capacidades limitadas, a pesar de poder definirlas paramétricamente. El módulo de mallado se apoya en las definiciones geométricas (incluidas la longitudes características) para crear mallados en una, dos y tres dimensiones, con elementos de formas varias (líneas, triángulos, tetraedros, prismas, hexaedros y pirámides) y eligiendo el tipo de algoritmo de mallado. El módulo solver (de resolución) implica la llamada a ciertos sistemas externos con los que interactuan (al momento programadas por el usuario). El módulo de postprocesado (ligado a la visualización) incluye gran número de operaciones diferenciales, vectoriales, herramientas para trabajar con números complejos y funcionalidades para extraer datos de las distribuciones de datos de entrada.

Como se mencionó anteriormente, por el alto costo computacional que generaría simular usando el diseño del fotobiorreactor en tres dimensiones del paper de Bitog 2014, generamos un triángulo según la siguiente imagen:





Figura 21: Vista del mallado del FBR. Fuente propia.

El punto de donde surgen los ejes de coordenadas corresponden al centro del fondo del reactor. La línea que parte desde este punto hacia arriba es el eje de rotación de la imagen. El eje y denota la altura del fotobiorreactor, que es de 1040 mm, y el eje x corresponde al radio, que es 82,5 mm. Sobre el eje y podemos ver que las dos superficies fueron unidas en el canto formando un ángulo de 5°.La malla está generada por 20 bloques en el eje x y 200 bloques sobre el eje y. Sobre el eje z solo se generó 1 celda de ancho ya que es el eje en donde se genera la simetría de revolución. Esto proporciona una malla de 4000 celdas, siendo lo suficientemente discreta para poder simular los flujos con mínimos errores y singularidades.



8 Condiciones de frontera:

Para nuestra simulación se utilizó el ejemplo (llamado bubbleColumn) que OpenFOAM ofrece para los usuarios. A partir de este caso se generó la geometría en donde se calcularon los flujos, se definieron los bordes como el ingreso del gas, la salida del aire, las paredes y el eje de simetría.

En la carpeta 0 se configuraron las condiciones iniciales del sistema. Para más información por favor referir al anexo.

En la carpeta constant se configura la geometría a simular, las propiedades de las fases, la gravedad, las propiedades termofísicas como turbulencia tanto del agua como del aire.

Por último, en la carpeta system se especifican el volumen del agua en nuestro diseño, los esquemas de discretización, los pasos temporales y el control de los solvers, tolerancias y algoritmos utilizados.

Para más información sobre las configuraciones utilizadas pueden revisarse los directorios en el apéndice.

9 Corriendo el programa y procesamiento de datos

El código se ejecuta escribiendo twoPhaseEulerFoam en la terminal de OpenSUSE.

Una vez terminado el procesamiento de la simulación se utiliza el complemento ParaView para procesamiento de los resultados. Las imágines y animaciones son producidas en este programa. ParaView es un programa de código abierto utilizado para la visualización, y está dirigido por escribir PARAFOAM en la ventana de terminal.

Las siguientes imágenes fueron creadas con ParaView en donde sólo se seleccionaron los parámetros referidos al aire inyectado en la base del fotobiorreactor.



SIMULACION COMPUTACIONAL DEL CRECIMIENTO DE MICROALGAS EN

UN FOTOBIORREACTOR Bless, Maximiliano Alejandro y Conteri, Germán Daniel



Figura 22: Fracción del aire. Fuente propia.

En las figuras 22 y 23 podemos visualizar rectángulos con sus escalas. Estos rectángulos corresponden a la geometría creada y explicada anteriormente. Como se detalla en el margen superior, estas imágenes fueron tomadas a los 120 segundos de comenzada la corrida. En la figura de la izquierda de la figura 22 podemos observar la fracción de aire que es inyectada en el biorreactor lleno de agua. Esta imagen nos muestra la fracción instantánea de cada fase. En la figura de la derecha también podemos observar la fracción de cada fase representando el promedio desde el comienzo hasta los 120 segundos. Estas imágenes nos permiten identificar zonas con alta y baja concentración de aire, donde se hace el mayor intercambio gaseoso entre la fase dispersa y las microalgas.



A continuación se muestran dos figuras en donde representan la velocidad del aire pero solamente su componente sobre el eje y:



Figura 23: Velocidad vertical del aire. Fuente propia.

La imagen de la izquierda representa la velocidad instantánea para el tiempo 120 segundos y la imagen de la derecha corresponde a un promedio de la velocidad del aire en el eje y. Como es de esperarse tenemos un movimiento ascendente en el costado izquierdo de las figuras pero con una tendencia a disminuir su velocidad. También podemos visualizar que la zona con azul oscuro corresponde al aire desplazándose pero en dirección contraria al flujo de de aire inyectado. En estas dos imágenes se puede ver que en el borde derecho el aire de la superficie del biorreactor ingresa al medio, por lo que hay que suponer que los gases sobre la superficie tienden a entrar en el seno del fotobiorreactor.



SIMULACION COMPUTACIONAL DEL CRECIMIENTO DE MICROALGAS EN

UN FOTOBIORREACTOR Bless, Maximiliano Alejandro y Conteri, Germán Daniel



Figura 24: Simulación de corte transversal de fotobiorreactor con su "pluma". Fuente propia.

En la figura 24 los colores denotan la fracción aire en el sistema, siendo más rojo totalmente la fase aire y azul la fase agua.

A partir de la simetría de revolución se extrapoló la geometría simulada a 180° y se obtuvo un fotobiorreactor con corte transversal. En este gráfico se representa la fracción instantánea de cada fase. Se puede notar que la inyección de aire en una columna de agua tiene "forma de pluma".





Figura 25: Velocidades del aire inyectado en el experimento práctico. Fuente: Bitog 2014.

La imagen simulada en la figura 24 tiene un patrón similar a la pluma de la imagen que corresponde a 0.10vvm y PIV de la figura 25. Si bien no realizamos un análisis más extenso para validar la simulación de la figura 24, podemos ver que los resultados comparten el mismo patrón. En un principio, nuestra simulación quedaría validada cualitativamente.

Por último, compaginamos un trazador de particular al solver twoPhaseEulerFoam. Esta aplicación permite hacer un seguimiento de una partícula generada en un momento y lugar dados, y trazar con una línea su recorrido durante el tiempo que se requiera.







Diez partículas fueron colocadas en el tiempo inicial a 10cm del ingreso del aire y sus trayectorias fueron calculadas durante 120 segundos. Sus trayectorias fueron trazadas en la figura 26. Aunque diez partículas no representan una población madura a los siete días, se eligió simular este número por su bajo costo computacional. Podemos observar que la mayoría de las células recorren extensamente el FBR, y que no hay muchas zonas muertas donde los flujos hidrodinámicos retengan por mucho tiempo a las microalgas. El recorrido es el esperado, surgiendo desde el sitio de inyección del aire, subiendo rápidamente, interactuando algún tiempo en la interfase, y luego bajando por el costado del FBR para luego comenzar de nuevo el ciclo. Como se presumió para la figura 23, hay zonas donde tanto el aire como el agua son arrastradas hacia abajo. Este efecto es muy importante ya que colabora con el mezclado interno del fotobiorreactor y permite que todas las microalgas puedan estar cerca de la superficie de incidencia de la luz, colaborando con el crecimiento fotosintético.



Conclusión

En nuestro proyecto final de investigación definimos lo que es la biomasa, nos enfocamos en las microalgas, y comentamos los nutrientes y factores que influyen en su crecimiento. Identificamos que entre las variables, la luz es la más importante a tener en cuenta a la hora de evaluar el rendimiento para cultivos de interés comercial. Esta se ve influenciada por la geometría del fotobiorreactor, dado que la intensidad de la luz en cada punto disminuye considerablemente a medida que ésta penetra en el biorreactor, dependiendo de la concentración de la biomasa. Se evaluaron los diferentes fotobiorreactores que se utilizan hoy en día, listando sus ventajas y desventajas. Consideramos que los fotobiorreactores más prometedores son los reactores de columna y también los airlift por su preciso control en las variables y maximización en el crecimiento de la biomasa. Se describió el problema del proceso de escalado debido a los flujos hidrodinámicos y la disponibilidad de la luz.

Para poder predecir y analizar todos los fenómenos que acontecen en un fotobiorreactor cerrado, durante la última década se implementaron las simulaciones en la dinámica de fluidos computacionales. Esta resultó ser una herramienta práctica, barata, poderosa y conveniente dadas las actualizaciones en los modelos matemáticos de los flujos hidrodinámicos que se publican cada año.

Con el programa Octave y la ecuación (1) se generó un algoritmo que predijo con considerable fidelidad la productividad final del cultivo en el fotobiorreactor propuesto en el trabajo de Bitog *et al* 2014. Este algoritmo solamente es aplicable cuando las variables, a excepción de las luz, son las óptimas para el crecimiento de *Chlorella vulgaris*. Por último se realizó una simulación por CFD de la inyección de aire en un fotobiorreactor para demostrar el potencial que tiene este programa en la simulación de los flujos que gobiernan el fotobiorreactor.

Para trabajos futuros en la aplicación de ecuaciones de crecimiento fotosintético se recomienda utilizar otros modelos de incidencia de la luz en vez de la simple ecuación de Beer-Lambert (Pottier *et al*, 2005). Esta ecuación utiliza de una manera muy simple el fenómeno de dispersión de la luz generada por las células. Según ciertos trabajos (Pottier *et al*, 2005) es recomendable un complemento de esta ecuación para condiciones de atenuación de luz por microalgas, sobre todo al tener en cuenta iluminación solar.



Por último, nos hubiera gustado poder simular los flujos hidrodinámicos del fotobiorreactor con el cono en la base para poder evaluar con OpenFOAM si el sistema llega a un estado estacionario y analizar los movimientos del agua y el aire dentro del biorreactor.

Trabajos futuros

Si bien nuestro algoritmo predice exitosamente la producción de microalgas para un cultivo relativamente simple con ciertas condiciones dadas, esto no siempre es el caso en la práctica. Los flujos hidrodinámicos no siempre son homogéneos, los nutrientes no siempre son los suficientes, y no siempre el pH o temperatura son los ideales, entre otros factores que pudieran ser limitantes. Para estos casos, ciertamente sería útil que el algoritmo de predicción pudiera tenerlos en cuenta. Para esto haría falta extensa investigación, desarrollo de nuevas ecuaciones y su posterior acoplamiento con las ya existentes.

Un posible resultado de lo anterior mencionado sería de gran valor para la industria del biodiesel. Dado que las microalgas acumulan lípidos en su interior cuando detectan una ausencia de nitrógeno en el medio, con las ecuaciones que tengan en cuenta este fenómeno podría predecirse esta acumulación de lípidos, prediciendo en última instancia la productividad de biolípidos de un cultivo.

En materia de iluminación, nuestro modelo aplica para iluminación artificial unidimensional. Solo tiene en cuenta el paso de la luz en la trayectoria normal al FBR. Si se quisiera iluminar nuestro FBR con el sol, el algoritmo pierde efectividad. Entonces, una posible mejora sería que el algoritmo tuviera en cuenta el ángulo de incidencia de la fuente luminosa, así como también la parte difusa de la luz dentro del FBR resultante de una iluminación muy brillante como la del sol, fenómeno que no tenemos en cuenta en nuestro modelo dado que la iluminación por tubos fluorescentes es comparativamente mucho más baja que la solar, su aporte se considera despreciable (Pruvost 2011).

Según varias investigaciones, un factor que puede mermar la producción es la muerte celular causada por esfuerzos de corte dentro del biorreactor. Estos se producen mayormente en la zona de inyección de gas y en la interfase líquido-gas de la superficie del FBR (Bannari *et al*, 2011; Chen *et al*, 2010; Pruvost 2011). Nuestro modelo no tiene en cuenta esta posible merma, la cual podría ser significativa si el flujo de gas inyectado es demasiado fuerte.



La investigación en el cultivo de microalgas aún se encuentra en sus comienzos. Dentro de cada objetivo económico, como ser la producción de biodiesel por ejemplo, no se ha encontrado aún una combinación de parámetros que pudiera cumplir con todos los requerimientos para que el cultivo sea eficiente y viable económicamente. Por lo tanto, es imperioso seguir estudiando las distintas posibilidades hasta dar con aquellas que demuestren ser las correctas.

Bibliografía

Alyabyev, A., Andreyeva, I., Rachimova, G. 2011 Influence of pH shift and salting on the energetics of microalgae Chlorella vulgaris and Dunaliella maritime. Journal of Thermal Analysis and Calorimetry 104: p201–207.

Andersen, R., 2005 Algal Culturing Techniques. USA. Elsevier. Cap 1: p1-12

Bannari, R., Bannari, A., Selma, B., Proulx, P. 2011 Mass transfer and shear in an airlift bioreactor: Using a mathematical model to improve reactor design and performance. Chemical Engineering Science Volume 66, Issue 10, 15 May 2011, p2057–2067

Barbosa, M. J., Hadiyanto, H., Wijffels, R. H. 2004 Overcoming shear stress of microalgae cultures in sparged photobioreactors. Biotechnology and Bioengineering 85: p78-85.

Béchet, Q., Shilton, A., Guieysse, G., 2013 Modeling the effects of light and temperature on algae growth: State of the art and critical assessment for productivity prediction during outdoor cultivation. Biotechnology Advances Volume 31, Issue 8, December 2013, p1648–1663

Bhosale, P., 2004 Environmental and cultural stimulants in the production of carotenoids from microorganisms. Applied Microbiology and Biotechnology 63: p351–361.

Bitog, J. P., Lee, I. -B., Lee, C-G, Kim, K.-S, Hwang, H.-S, Hong, S.-W, Seo, I.-H., Kwon, K.-S., Mostafa, E. 2011 Application of computational fluid dynamics for modeling and designing photobioreactors for microalgae production: A review. Computers and Electronics in Agriculture Volume 76, Issue 2, May2011, p131–147

Bitog, J., Lee, L., Oh, H., Hond, S., Seo, I., Kwon, K. 2014 Optimised hydrodynamic parameters for the design of photobioreactors using computational fluid dynamics and experimental validation. Biosystems Engineering Volume 122, Jun2014, p42–61

Bohne, F., Linden, H., 2002 Regulation of carotenoid biosynthesis genes in response to light in Chlamydomonas reinhardtii. Biochimica et Biophysic Acta 1579: p26–34.

Buwa, V. V., Ranade, V. V. Dynamics of gas–liquid flow in a rectangular bubble column: experiments and single/multi-group CFD simulations. Chemical Engineering Science Volume 57, Issues 22–23, Nov-Dic2002, p4715–4736

Chen, Chun-Yen, Yeh, Kuei-Ling, Aisyah, Rifka, Lee, Duu-Jong, Chang, Jo-Shu 2010 Cultivation, photobioreactor design and harvesting of microalgae for biodiesel production: A critical review. Bioresource Technology Volume 102, Issue 1, January 2011, p71–81



Chen, F., John, M. R., 1991 Effect of C/N ratio and aeration on the fatty acid composition of heterotrotrophic Chlorella sorokiniana. Journal of Applied Phycology 3: p203–209

Chen, G. Q., Chen, F., 2006 Growing phototrophic cells without light. Biotechnology Letters 28: p607–616

Chisti, Y., 2007 Biodiesel from microalgae. Biotechnology Advances 25: p94–306.

Contreras-Flores, C., Peña-Castro, J. M., Flores-Cotera, L. B., 2003. Avances en el diseño conceptual de fotobiorreactores para el cultivo de microalgas. Interciencia 8: p450-456

Cornet, Jean-François 2009. Calculation of optimal design and ideal productivities of volumetrically. Chemical Engineering Science Volume 65, Issue 2, 16 January 2010, Pages 985–998

Corzo, S. F., Damián, S. M., Ramajo, D., Nigro, M. N. 2012 Numerical simulation of bubbly two-phase flow using eulerian-eulerian model. Mecánica Computacional Vol XXXI, págs. 85-112

Dan Telah, D., Sintov, A., Cohen, E., 2004 The effect of salt stress on the production of canthaxanthin and astaxanthin by Chlorella zofingiensis grown under limited light intensity. World Journal of Microbiology and Biotechnology 20: p483–486.

Facultad de Ciencias Astronómicas y Geofísicas [en línea] © 2009 < http://catedras.fcaglp.unlp.edu.ar/ >

García-Camachoa, F., Sánchez-Miróna, A., Molina-Grimaa, E., Camacho-Rubiob, F., Merchuckc, J.C. 2012. A mechanistic model of photosynthesis in microalgae including photoacclimation dynamics. Journal of Theoretical Biology VOL. 304, Pages 1-15

GNU Octave [en línea] © 1998-2015 [consulta 15 ene 2016] < https://www.gnu.org >

Hulatt, Chris J., Thomas, David N. 2011 Energy efficiency of an outdoor microalgal photobioreactor sited at mid-temperate latitude. Bioresource Technology Volume 102, Issue 12, June 2011, p6687–6695

Husselmann, A. V., Hawick, K. A. 2013 Simulating Growth Kinetics in a Data-Parallel 3D Lattice Photobioreactor. Modelling and Simulation in Engineering Volume 2013 p1-11

IIMYOI [en línea] © 2005 [consulta 12 ene 2016] < http://iimyo.forja.rediris.es >

Imamoglu, E., Demirel, Z., Dalay, M. K. 2015 Process optimization and modeling for the cultivation of Nannochloropsis sp. and Tetraselmis striata via response surface methodology. Journal of Phycology Volume 51, Issue 3, June2015, p442–453

Jones, Sarah M.J., Harrison, Susan T.L. 2014 Aeration energy requirements for lipid production by Scenedesmus sp. in airlift bioreactors. Algal Research Volume 5, July 2014, Pages 249–257

Joshi, J.B. Computational flow modelling and design of bubble column reactors. Chemical Engineering Science Volume 56, Issues 21–22, November 2001, p5893–5933

Kong, B., Vigil, R. D. 2014 Simulation of photosynthetically active radiation distribution in algal photobioreactors using a multidimensional spectral radiation model. Bioresource Technology Volume 158, April 2014, p141–148



Li, M., Hu, D., Liu, H. 2014 Photobioreactor with ideal light–dark cycle designed and built from mathematical modeling and CFD simulation. Ecological Engineering Volume 73, December 2014, p162–167

Luo, H., Al-Dahhan, M. H. 2010 Verification and validation of CFD simulations for local flow dynamics in a draft tube airlift bioreactor. Chemical Engineering Science Volume 66, Issue 5, 01Mar2011, p907–923

Luo, H., Al-Dahhan, M.H. 2008 Local characteristics of hydrodynamics in draft tube airlift bioreactor. Chemical Engineering Science Volume 63, Issue 11, June 2008, p3057–3068

Martíneza, Ma.E., Camachob, F., Jiméneza, J.M., Espínolab J.B. 1996 Influence of light intensity on the kinetic and yield parameters of Chlorella pyrenoidosa mixotrophic growth. Process Biochemistry Volume 32, Issue 2, February 1997, p93–98

Massart, A., Mirisola, A., Lupant, D., Thomas, D., Hantson, A.-L. 2014 Experimental characterization and numerical simulation of the hydrodynamics in an airlift photobioreactor for microalgae cultures. Algal Research Volume 6, Part B, October 2014, p210–217

Oliveira, J. P., Issar, R. I. 2003 Numerical aspects of an algorithm for Eulerian simulation of two-phase flows. International Journal for Numerical Methods in Fluids, 43, p1177-1198.

OpenFOAM [en línea] © 2004-2016 [consulta 15 ene 2016] < http://www.openfoam.com >

OpenFOAM Wiki [en línea] © 2015 [consulta 10 ene 2016] < https://openfoamwiki.net/index.php/Main_Page >

Papáček, Š., Matonoha, C., Štumbauer, V., Štys, D., 2011 Modelling and simulation of photosynthetic microorganism growth: random walk vs. finite difference method. Mathematics and Computers in Simulation Volume 82, Issue 10, June 2012, p2022–2032

Pegallapati, A. K., Arudchelvam, Y., Nirmalakhandan, Dungan, B., Holguin, F. O., Schaub, T. 2013 Evaluation of internally illuminated photobioreactor for improving energy ratio. Journal of Bioscience and Bioengineering Volume 117, Issue 1, January 2014, p92–98

Pegallapati, A. K., Arudchelvam, Y., Nirmalakhandan, N. 2012 Energy-efficient photobioreactor configuration for algal biomass production. Bioresource Technology 126 (2012) 266–273

Pegallapati, A. K., Nirmalakhandan, N. 2012 Internally illuminated photobioreactor for algal cultivation under carbon dioxide-supplementation: Performance evaluation. Renewable Energy Volume 56, August 2013, Pages 129–135

Perner-Nochta, I., Posten, C. 2007 Simulations of light intensity variation in photobioreactors. Journal of Biotechnology Volume 131, Issue 3, 15 September 2007, p276–285

Pottier , L, Pruvost, J., Deremetz, J., Cornet, J., Legrand J., Dussap, C.G. 2005. A fully predictive model for one-dimensional light attenuation by Chlamydomonas reinhardtii in a torus photobioreactor. BIOTECHNOLOGY AND BIOENGINEERING, VOL. 91, NO. 5, Pages 569-580

Pruvost, J. Cultivation of Algae in Photobioreactors for Biodiesel Production. En PANDEY, A. et al, Biofuels, Alternative feedstocks and conversion processes. Estados Unidos: California, 2011, p439-



Pruvost, J., Van Vooren, G., Cogne, G., Legrand, J. 2009 Investigation of biomass and lipids production with Neochloris oleoabundans in photobioreactor. Bioresource Technology Volume 100, Issue 23, December 2009, Pages 5988–5995

Pruvost, J., Van Vooren, G., Le Gouic, B., Couzinet-Mossion, A., Legrand, J. 2010 Systematic investigation of biomass and lipid productivity by microalgae in photobioreactors for biodiesel application. Bioresource Technology Volume 102, Issue 1, January 2011, p150– 158

Rusche, H. 2002 Computational fluid dynamics of dispersed two-phase flows at high phase fractions. Ph.D thesis, Imperial College of Science, Technology and Medicine, London. P112

Sánchez Mirón, A., Cerón García, M.-C., García Camacho, F., Molina Grima, E., Chisti, Y. 2004 Mixing in Bubble Column and Airlift Reactors. Chemical Engineering Research and Design Volume 82, Issue 10, October 2004, p1367–1374

Sforza, E., Bertucco, A., Morosinotto, T., Giacometti, G. M., Photobioreactors for microalgal growth and oil production with Nannochloropsis salina: From lab-scale experiments to large-scale design. Chemical Engineering Research and Design Volume 90, Issue 9, September 2012, p1151–1158

Singh, R.N., Sharma, Shaishav 2012 Development of suitable photobioreactor for algae production – A review. Renewable and Sustainable Energy Reviews Volume 16, Issue 4, May 2012, p2347–2353

Solheim, Martin Hagenes. CFD study of gas-liquid flow from a subsea gas release. Tesis (Risk Management/Offshore Safety) Noruega : University of Stavanger, 2013. p100

Soman, A., Shastri, Y. 2014 Optimization of novel photobioreactor design using computational fluid dynamics. Applied Energy Volume 140, 15 February 2015, p246–255

Takache, H., Christophe, G., Cornet, F., Pruvost, J. 2009 Experimental and Theoretical Assessment of Maximum Productivities for the Microalgae Chlamydomonas reinhardtii in Two Different Geometries of Photobioreactors. Biotechnol. Prog., 2010, Vol. 26, No. 2

Tobajasa, M., García-Calvoa, E., Siegelb, M.H., Apitzc, S.E. 1999 Hydrodynamics and mass transfer prediction in a three-phase airlift reactor for marine sediment biotreatment . Chemical Engineering Science Volume 54, Issue 21, November 1999, p5347–5354

Ugwu, C. U., Aoyagi, Hi., Uchiyama, H., 2007 Photobioreactors for mass cultivation of algae. Bioresource Technology Volume 99, Issue 10, July 2008, Pages 4021–4028

Ugwu, C.U., Aoyagi, H., Uchiyama H. 2007 Photobioreactors for mass cultivation of algae. Bioresource Technology Volume 99, Issue 10, July 2008, p4021–4028

Van Baten, J.M., Ellenberger, J., Krishna, R. 2002 Hydrodynamics of internal air-lift reactors: experiments versus CFD simulations. Chemical Engineering and Processing: Process Intensification Volume 42, Issue 10, October 2003, p733–742

Wua, Xiaoxi, Merchuk, Jose C. 2001. A model integrating fuid dynamics in photosynthesis and photoinhibition processes. Chemical Engineering Science Volume 56, Issue 11, June 2001, Pages 3527–3538



Anexos

clear

% Ritmo de crecimiento de biomasa rhom = 0.8;K = 90; phi = 1.83e-9; mus = 5e-3/3600;Ea = 360; a = rhom*K*phi*Ea; masa0 = 0.056449 * 0.9;

% Reactor R = (0.185/2);H = 1.050;vol=pi*R^2*H;

% Intensidad lumínica lm=(400+700)/2; I0w=((20*28)/(2*pi*R*H)); lamparas de 28 cada una I0e=I0w*lm*0.836*10^-2; por tiempo. fc=10/36;

% Discretizacion dt=60*60; tf=9*3600*24; npasos=tf/dt+1; nceldas=10; dr=R/nceldas; r = [dr/2:dr:R];ri= [0:dr:R-dr]; re=[dr:dr:R];vceldas=H*pi*(re.^2-ri.^2);

%Matrices de almacenamiento de datos Cx= zeros(npasos,nceldas); G = zeros(npasos,nceldas); t = zeros(npasos, 1);Cxm=zeros(npasos,1); masa=zeros(npasos,1);

% Inicialización del loop temporal Cx(1,:) = masa0/vol;masa(1)=Cx(1,:)*vceldas';Cxm(1) = masa(1)/vol;t(1) = 0; $G(1,:) = I0e^{exp(-Ea^{fc}Cxm(1).*(R-r))};$

% Loop temporal for n=2:npasos $G(n,:) = I0e^{exp(-Ea^{fc}Cxm(n-1).*(R-r))};$ %Irradiacion para este paso temporal $Cx(n,:) = Cx(n-1,:) + dt^{*}(a^{*}G(n,:)./(K+G(n,:))-mus).^{*}Cx(n-1,:);$ %Método de Euler explícito t(n) = t(n-1) + dt;masa(n) = Cx(n,:)*vceldas';Cxm(n) = masa(n)/vol;Cx(n,:)=Cxm(n);% mezclado end

%[] %[muMolhv/m2s] %[kg/muMolhv] %[1/s] %[m2/kg]

%[kg] masa inicial del inóculo de microalgas.

%*[m] radio del fotobiorreactor %*[m] altura del fotobiorreactor %[m3] volumen del fotobiorreactor

%longitud de onda promedio del espectro visible [nm] %[W/m2] intensidad lumínica en wats por superficie; hay 20

%[muMolhv/m2s] intensidad lumínica en fotonoes por superficie

% factor de corrección de la absorvancia específica del medio

%paso temporal cada 1 hora % dominio temporal 9 dias %número de intervalos %número de celdas radiales %paso espacial %posición media de cada celdas radiales %radio interno de cada celda radial %radio externo de cada celda radial % volumen de celdas en donde se calculará la biomasa

%concentracion inicial


"Dia7" Cxm(169) "Dia8" Cxm(193) "Dia9" Cxm(217)

% t = 0:tf/10:tf;%G = 1:G(193)/10:G(193)

%Generación de gráficos figure(1); hold off %semilogy(t,Cx) plot(t/(3600*24),Cxm,'b','markersize',2) title('Concentración biomasa "Cxm" en el tiempo "t"') xlabel('t[d]') ylabel('Cxm[kg/m3]')

figure(2); %semilogy(t,masa) plot(t/(3600*24),masa) title('Acumulación de masa "m" en el tiempo "t"') xlabel('t[d]') ylabel('m[kg]')

figure(3) [x,y]=meshgrid(t/(3600*24),r); surf(x,y,G') title('Intensidad "G" vs radio "r" vs tiempo "t"') xlabel('t[d]') ylabel('r[m]') zlabel('G[muMolhv/m2s]')

Anexo 1: Algoritmo de crecimiento fotosintético generado por el Octave