Título Simulación Computacional del Crecimiento de Microorganismos Fotosintéticos en un Fotobiorreactor

Tipo de Producto Ponencia completa

Autores Maximiliano A. Bless y Axel E. Larreteguy

Publicado en: 1er Congreso Latinoamericano de Ingeniería, Paraná, Entre Ríos, Argentina

Código del Proyecto y Título del Proyecto

D16T01 - Desarrollo de Fotobiorreactores

Responsable del Proyecto

Maximiliano A. Bless

Línea

FC Fluidodinámica Computacional

Área Temática

ABI Alimento / Biotecnología / Bioinformática

Fecha

Septiembre 2017





SIMULACIÓN COMPUTACIONAL DEL CRECIMIENTO DE MICROORGANISMOS FOTOSINTÉTICOS EN UN FOTOBIORREACTOR

Maximiliano A. Bless^a y Axel E. Larreteguy^b

^aInstituto de Tecnología, Fundación UADE y CONICET, Lima 775, C.A.B.A, Argentina, mbless@uade.edu.ar, www.uade.edu.ar

^bInstituto de Tecnología, Fundación UADE, Lima 775, C.A.B.A, Argentina, alarreteguy@uade.edu.ar, www.uade.edu.ar

Resumen: Los fotobiorreactores son equipos que mantienen un ambiente biologicamente controlado para el crecimiento de organismos fotosintéticos. En este trabajo se presenta un modelo numérico simple para predecir la producción global de biomasa de un cultivo de *Spirulina platensis* en un fotobiorreactor tubular perfectamente agitado. El modelo considera tanto producción batch como continua. Se utilizaron ecuaciones para la absorción de la luz y el crecimiento de microalgas tomadas de la literatura. Los parámetros necesarios para la simulación se tomaron de un trabajo experimental de otros autores, y se compararon los resultados de nuestro modelo con sus mediciones. Los resultados arrojaron que este modelo simple puede predecir la producción de biomasa en el tiempo con buena precisión, siempre que el fotobiorreactor real esté bien agitado, es decir, que en todo momento la concentracion sea cercana a un valor uniforme.

Palabras clave: fotobiorreactor, fotosíntesis, producción de biomasa, simulación numérica 2000 AMS Subject Classification: 92D25 - 68U20

1. Introducción

Un biorreactor es un sistema que mantiene un ambiente biologicamente activo en donde se llevan a cabo procesos químicos que involucran un organismo o sustancia biológica. Entre los distintos biorreactores se encuentran aquellos en donde la luz es un componente fundamental. Los fotobiorreactores (FBRs) son dispositivos destinados al cultivo masivo de organismos fotosintéticos. Para ello mantienen un medio estable (temperatura, pH, baja concentración de O2) y proporcionan los nutrientes necesarios para el crecimiento, incluyendo la luz. Existen dos tipos de diseño opuestos. Los abiertos priman la economía aceptando un control pobre del entorno, mientras que los cerrados consiguen unas condiciones estrechamente controladas que permiten a los microorganismos crecer a una velocidad óptima a cambio de un mayor coste [4]. En la actualidad el conocimiento de los FBR es extenso, y se puede encontrar todo tipo de trabajos sobre distintas geometría, flujos hidrodinámicos, crecimiento de diferentes microorganismos, modelos matemáticos de cinética de crecimiento, modelos de transferencia de luz y otros temas relevantes. A pesar de ser una alternativa tentadora para producción de biocombustibles, ya que su biomasa se puede utilizar como materia prima, estas aplicaciones aún no son rentables a escala industrial. El motivo principal son los altos costos productivos que acarrean su cultivo, que en muchas oportunidades no pueden competir contra los precios de los combustibles fósiles. Por lo tanto, es de máxima prioridad poder identificar los pámentros que nos permiten un mayor rendimiento en producción de biomasa y transformarla en un proceso rentable para sistemas a escala industrial [4].

En este trabajo se desarrolla, programa, y prueba un modelo de crecimiento de biomasa en un fotobiorreactor cerrado. En las siguientes secciones se presenta la teoría en la que se basa el modelo, la forma de discretizar las ecuaciones, y los resultados obtenidos, junto con la comparación contra resultados experimentales de otros autores.

2. MODELO MATEMÁTICO

Consideremos un biorreactor con volumen total de líquido V_L del cual un volumen de trabajo $V_I \leq V_L$ se encuentra iluminado. En su modo de funcionamiento continuo, ingresa un caudal q de agua pura, y egresa

el mismo caudal, pero con una concentración másica de biomasa de salida que notaremos C_{xo} . En su modo de funcionamiento batch, por el contrario, q=0.

Planteando la ecuación de balance de biomasa en el volumen V_L , la tasa de crecimiento de la concentración másica media se puede expresar como [7]

$$\dot{\overline{C}}_x = \frac{1}{V_L} \left[\int_{V_I} \dot{C}_x(\mathbf{r}) dV - q C_{xo} \right], \tag{1}$$

donde $\dot{C}_x(\mathbf{r})$ es la tasa de crecimiento local de la biomasa en el punto \mathbf{r} , la cual puede modelarse como dependiente de la concentración local y de la intensidad de la luz incidente en ese punto, es decir

$$\dot{C}_x(\mathbf{r}) = \rho \bar{\phi} E a G(\mathbf{r}) C_x(\mathbf{r}),$$
 (2)

donde ρ es la eficiencia en la conversión de energía a masa, $\bar{\phi}$ el rendimiento másico-cuántico del esquema Z de fotosíntesis, Ea el coeficiente de absorción másico y $G(\mathbf{r})$ la irradiancia local [2].

Este modelo responde a la transferencia de energía por excitación de electrones de la antena fotosintética hacia el centro de reacción, que después sigue al esquema Z de fotosíntesis y termina en la síntesis de adenosín trisfosfato (ATP) y la versión reducida de nicotin adenin dinucletidoreducción (NADH), que desempeñan un rol fundamental en la producción de biomasa [2]. 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 relación obtenida de las bases de una aproximación teórica a nivel cuántico de los mecanismos de transferencia de excitación en la antena, que se expresa como

$$\rho(G) = \rho_M \frac{K}{K + G'},\tag{3}$$

donde K representa la constante de irradiancia para la cual se saturan la mitad de las antenas fotosintéticas y ρ_M denota el rendimiento máximo para la conversión fotónica [2].

Combinando las ecuaciones (2) y (3), la tasa de crecimiento local queda expresada como

$$\dot{C}_x(\mathbf{r}) = \rho_M \frac{K}{K+G} \bar{\phi} EaG(\mathbf{r}) C_x(\mathbf{r}). \tag{4}$$

Ahora recurriremos a la hipótesis de que el biorreactor está perfectamente mezclado. Es decir, que el proceso de convección, ayudado por la dispersión turbulenta, no permite que la concentración local se aleje apreciablemente del valor de la media. Matemáticamente, podemos expresar esto modificando la última ecuación, para obtener

$$\dot{C}_x(\mathbf{r}) = \rho_M \frac{K}{K + G(\mathbf{r})} \bar{\phi} EaG(\mathbf{r}) \overline{C_x}.$$
 (5)

Finalmente, para cerrar el modelo, necesitamos calcular el campo de irradiancia $G(\mathbf{r})$. Este depende de la geometría del fotobiorreactor, de las características de las fuentes de luz y de las propiedades ópticas de las células. La hipótesis de "atenuación unidimensional" propone que ella ocurre mayormente de forma perpendicular a la superficie de iluminación, y depende del espesor de cultivo entre una dada posición y la fuente de luz. Un modelo posible es el de Beer-Lambert [5], que bajo la hipótesis ya formulada de mezclado perfecto se expresaría como

$$G(\mathbf{r}) = I_0 e^{-Ea\overline{C_x}d(\mathbf{r})},\tag{6}$$

donde I_0 es el flujo de la intensidad lumínica en la superficie iluminada y $d(\mathbf{r})$ el espesor de cultivo entre el punto y la superficie iluminada.

Las ecuaciones acopladas (1), (5) y (6) forman entonces nuestro modelo matemático, y nos permiten calcular los campos de irradiancia y de tasa de crecimiento local, y con ellos la tasa media de crecimiento, que integrada en el tiempo nos dará la evolución de la biomasa dentro del reactor.

3. Modelo numérico

Consideremos el caso particular de un fotobiorreactor perfectamente mezclado de forma arbitraria, en donde la zona iluminada tiene la forma de un cilíndro de altura total H y radio R, con una fuente de luz distribuida uniformemente sobre toda la superficie lateral del cilindro (superficie iluminada).

Utilizando coordenadas cilíndricas $\mathbf{r}=(r,\theta,z)$ con z alineado con el eje del volumen iluminado, el campo de irradiancia tendrá entonces simetría de revolución, y será independiente de z. Debido a lo anterior, la tasa local de crecimiento también será un campo que depende sólo de r, ya que queda expresado como

$$G(r) = I_0 e^{-Ea\overline{C_x}(R-r)}. (7)$$

Como consecuencia, la tasa local de crecimiento también se simplifica a

$$\dot{C}_x(r) = \rho_M \frac{K}{K + G(r)} \bar{\phi} EaG(r) \overline{C_x}.$$
 (8)

Finalmente, la tasa media de crecimiento de biomasa se puede calcular entonces como

$$\dot{\overline{C}}_{x} = \frac{1}{V_{L}} \left[2\pi H \int_{0}^{R} \rho_{M} \frac{K}{K + G(r)} \bar{\phi} EaG(r) \overline{C}_{x} r dr - q \overline{C}_{x} \right], \tag{9}$$

con G(r) dado por la ecuación (7) y donde de acuerdo a la hipótesis de mezclado perfecto, la concentración de salida es $C_{xo} = \overline{C_x}$.

Una forma simple de resolver en forma numérica el problema es discretizar el espacio dividiendo el cilindro iluminado en N_c celdas en forma de cilindro hueco de espesor R/N_c y altura H y utilizar un esquema de Euler (1er orden explícito) para discretizar el tiempo en N_t intervalos Δt . De esta forma, la evolución temporal de la concentración media al tiempo $t^{n+1} = (n+1)\Delta t$ se puede aproximar por

$$\overline{C_x}^{n+1} = \overline{C_x}^n + \Delta t \frac{\dot{C_x}^n}{C_x} \tag{10}$$

donde

$$\frac{\dot{\overline{C}_x}^n}{\overline{C}_x^n} = \frac{1}{V_L} \left[2\pi H \sum_{k=1:N_c} \rho_M \frac{K}{K + G^n(r_k)} \bar{\phi} EaG^n(r_k) \overline{C}_x^n \left(\frac{r_{k+}^2 - r_{k-}^2}{2} \right) - q^n \overline{C}_x^n \right]$$
(11)

y r_{k-} , r_k , r_{k+} son respectivamente los radios interno, central, y externo de la celda k.

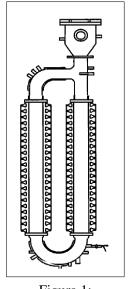
4. MÉTODOS Y RESULTADOS

En este trabajo se propone un algoritmo que resuelve la ecuación cinética de crecimiento fotosintético para *Spirulina platensis*. Tomamos como referencia trabajo de *Vernerey et al.* [1] en donde se cultivaron durante 388 *horas* esta especie, en una una primera etapa bajo la modalidad batch y después a bajo la modalidad continuo. En la figura 1 podemos observar el FBR, de $V_L = 82,4\ l$, compuesto por 2 cilindros de altura $H = 1,7\ m$ de radio $R = 0,075\ m$. El V_I se tomó como si ambos cilindros iluminados estuvieran uno arrriba del otro. La superficie es, en la primera etapa, iluminada con un irradiancia I_0w equivalente a 95 $W\ m^{-2}$ y después, en $t = 168\ h$, fue aumentada a 133 $W\ m^{-2}$, con un caudal de entrada y salida de $q = 0,5768\ l\ h^{-1}$. El inóculo inicial $\overline{Cx}(0)$ fue de $0,12916\ g\ l^{-1}$.

Los parámetro del modelo $(K, \rho_M, \bar{\phi} \text{ y } Ea)$ fueron tomados del trabajo [2] y variados dentro de su rango de error hasta obtener un buen ajuste de los datos experimentales.

Para poder resolver la ecuación 11 se utilizó el modelo de Euler. Después de los análisis de sensibilidad aplicados al modelo se decidió utilizar un $\Delta t=1~h$ y se simuló el crecimiento durante 388 hotas. La discreción espacial fue de $N_c=100$. Todo esto fue programado en GNU Octave [8].

En la figura 2 podemos ver la evolución del crecimiento de la biomasa del algoritmo en comparación con el los valores de las muesta para ciertos tiempos del trabajo experimental [1].



2.5

2 Concentracion biomasa modelo matematico
Concentracion biomasa Vermerey

0.5

0.5

0.5

0.7

100

200

100

300

400

Figura 1: Fotobiorreactor

Figura 2: Comparación de la evolución de la biomasa

Las variaciones de la figura 2 después de $t=168\ h$ se debe a que los cambios en el cultivo producen una especie de adaptación intramolecular que estos microorganismos sufren y que el modelo no puede reproducir. Se hicieron los análisis de sensibilidad en la discretización tanto temporal como espacial, condiciones iniciales y parámetros del modelo dando como conclusión que los valores utilizados son los adecuados para el modelo.

5. Conclusión

Se implementó un simulador simple de predicción de crecimiento fotosintético en un fotobiorreactor prefectamente agitado. El simulador utiliza modelos parciales de crecimiento e iluminación tomados de la literatura. La comparación contra resultados experimentales de otros autores en el caso de *Spirulina platensis* demostr la capacidad del simulador. Está herramienta validada proporcionará una alternativa para analizar in silico el crecimiento y de esta manera ayudar a la confección de fotobiorreatores que maximicen la producción de esta clase de microorganismos.

AGRADECIMIENTOS

Se agradece a CONICET y a la Fundación UADE por el otorgamiento de la beca y al proyecto A17T03.

REFERENCIAS

- [1] A. VERNEREY, J. ALBIOL, C. LASSEUR, AND F GDIA, Scale-Up and Design of a Pilot-Plant Photobioreactor for the Continuous Culture of Spirulina platensis, Biotechnol. Prog. 2001, pp 431-438.
- [2] J-F. CORNET, AND C-G DUSSAP, A Simple and Reliable Formula for Assessment of Maximum Volumetric Productivity in Photobioreactor, Biotechnol. Prog., 2009, Vol. 25, pp 424-435.
- [3] G. Q. CHEN AND F. CHEN, Growing phototrophic cells without light. Biotechnology Letters 28, 2006, pp 607616.
- [4] Y. CHISTI, Biodiesel from microalgae, Biotechnology Advances 25 (2007), pp 94306.
- [5] J. PRUVOST, *Cultivation of Algae in Photobioreactor for Biodiesel Production*, Biofuels: Alternative Feedstocks and Conversion Processes, 2011, Chapter 19, pp 439-464.
- [6] H. TAKACHE, G. CHRISTOPHE, J.F. PRUVOST,, Experimental and theoretical assessment of maximum productivities for the micro-algae Chlamydomonas reinhardtii in two differents geometries of photobioreactor, Biotechnol. Prog. 26, 2010, pp 431-440.
- [7] P.M. DORAN, Bioprocess Engineering Principles, Chapter 12, Elservier (2013), pp 599-688.
- [8] JOHN W. EATON, DAVID BATEMAN, SØREN HAUBERG, AND RIK WEHBRING, GNU Octave version 4.2.0 manual: a high-level interactive language for numerical computations, http://www.gnu.org/software/octave/doc/interpreter, 2016.