Modelos dinámicos basados en balance de masa

1

Vamos a considerar sistemas del tipo tanque agitado. Para un componente de concentración *C*

$$\frac{d(VC)}{dt} = F_{in}C_{in} - F_{out}C \pm Vr$$

$$V\frac{dC}{dt} + C\frac{dV}{dt} = F_{in}C_{in} - F_{out}C \pm Vr$$

$$V\frac{dC}{dt} + C(F_{in} - F_{out}) = F_{in}C_{in} - F_{out}C \pm Vr$$

$$\frac{dC}{dt} = \frac{F_{in}}{V}C_{in} - \frac{F_{in}}{V}C \pm r$$

$$\frac{dC}{dt} = DC_{in} - DC \pm r$$

2

Un modelo biológico simple: $S \rightarrow X$

Supongamos la velocidad de formación de nuevas células es proporcional a la cantidad de células; $r_X = \mu X$

Sea *Y* la relación entre la velocidad de formación de células y la velocidad de consumo de sustrato y asumamos que se mantiene constante.
Supongamos además que no hay células en la corriente de entrada.

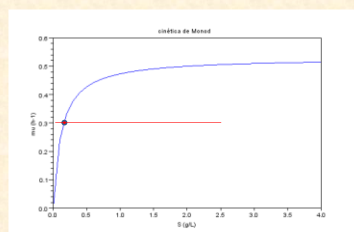
$$\frac{dX}{dt} = -DX + \mu X$$

$$\frac{dS}{dt} = DS_{in} - DS - \frac{1}{Y}\mu X$$

3

Tenemos muchas propuestas de leyes cinéticas. Supongamos se cumple la cinética de Monod:

$$\mu = \mu_m \frac{S}{K_s + S}$$



$$\frac{dX}{dt} = -DX + \mu X$$

$$\frac{dS}{dt} = DS_{in} - DS - \frac{1}{Y}\mu X$$

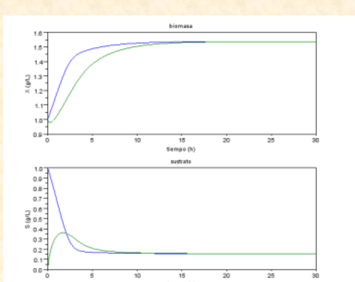
D = 0.3 h^{-1}
Sin = 4.0 g/L
Soluciones de estado estacionario:

Solución "trivial"
Xs = 0 g/L
Ss = 4.0 g/L

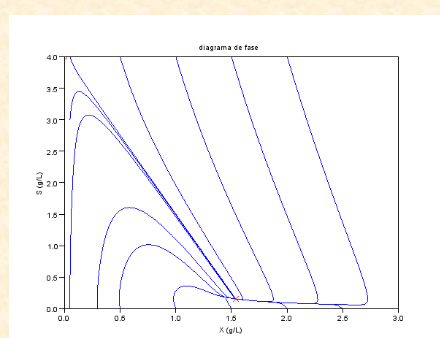
Otra solución
Xs = 1.5374 g/L
Ss = 0.1565 g/L

4

Trayectorias



5



6

Retomando el estudio de las soluciones de estado estacionario

$$0 = -D_s X_s + \mu_s X_s$$
$$0 = D_s S_{in,s} - D_s S_s - \frac{1}{Y}\mu_s X_s$$

Solución trivial ("washout"): *Xs* = 0 g/L , *Ss* = 4.0 g/L

La solución no trivial: de la primera ecuación $(\mu_s - D_s)X_s = 0 \Rightarrow \mu_s = D_s$

Sustituyendo en la segunda $X_s = Y\left(S_{in,s} - S_s\right)$

Y de $\mu_s = \dfrac{\mu_m S_s}{K_s + S_s}$ $\qquad S_s = \dfrac{K_s \mu_s}{\mu_m - \mu_s}$

Observemos que debe cumplirse $D_s < \dfrac{\mu_m S_{in,s}}{K_s + S_{in,s}}$

7

Estabilidad de los puntos de estado estacionario

$$\frac{dX}{dt} = -DX + \mu X$$
$$\frac{dS}{dt} = DS_{in} - DS - \frac{1}{Y}\mu X$$

Sistema no lineal

linealizamos $\Rightarrow$

$$\dot{\mathbf{z}} = \mathbf{A}\mathbf{z} + \mathbf{B}\mathbf{u}$$
$$\mathbf{y} = \mathbf{C}\mathbf{z}$$

donde

$$z_1 = X - X_s \qquad z_2 = S - S_s \qquad u_1 = D - D_s \qquad u_2 = S_{in} - S_{in,s}$$

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \mu_s - D_s & X_s \mu'_s \\ -\dfrac{\mu_s}{Y} & -D_s - \dfrac{X_s \mu'_s}{Y} \end{bmatrix} \qquad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} -X_s & 0 \\ S_{in} - S_{in,s} & D_s \end{bmatrix} \qquad \mathbf{C} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Los valores propios de **A** deben ser negativos

$$\det(\lambda \mathbf{I} - \mathbf{A}) = \lambda^2 - \mathrm{tr}(\mathbf{A})\lambda + \det(\mathbf{A}) = 0 \qquad \mathrm{tr}(\mathbf{A}) < 0 \qquad \det(\mathbf{A}) > 0$$

$$\mu'_s = \frac{\partial \mu_s}{\partial S_s} = \frac{\mu_m K_s}{(K_s + S_s)^2}$$

$$\mathrm{tr}(\mathbf{A}) = (\mu_s - D_s) - D_s - \frac{\mu'_s X_s}{Y}$$
$$\det(\mathbf{A}) = -(\mu_s - D_s)\left(D_s + \frac{\mu'_s X_s}{Y}\right) + \frac{\mu'_s \mu_s X_s}{Y}$$

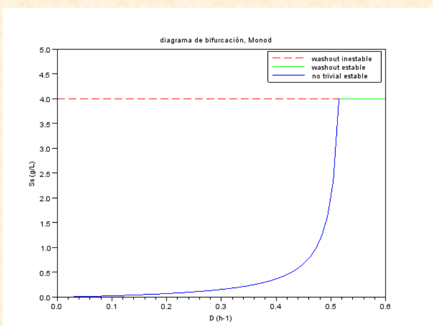
Para el wash out: $S_s = S_{in,s}$ y $X_s = 0$

$$\mu_s - D_s - D_s < 0 \qquad -(\mu_s - D_s)D_s > 0 \Rightarrow D_s > \mu_s \Rightarrow D_s > \frac{\mu_m S_{in,s}}{K_s + S_{in,s}}$$

Para la solución no trivial: $D_s = \mu_s$

$$-D_s - \frac{\mu'_s X_s}{Y} < 0 \qquad \frac{\mu'_s \mu_s X_s}{Y} > 0 \Rightarrow \mu'_s > 0 \Rightarrow$$ Siempre estable

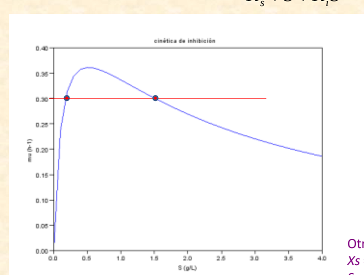
8



9

Tenemos muchas propuestas de leyes cinéticas. Supongamos se cumple la cinética de inhibición:

$$\mu = \mu_m \frac{S}{K_s + S + K_i S^2}$$



$$\frac{dX}{dt} = -DX + \mu X$$
$$\frac{dS}{dt} = DS_{in} - DS - \frac{1}{Y}\mu X$$

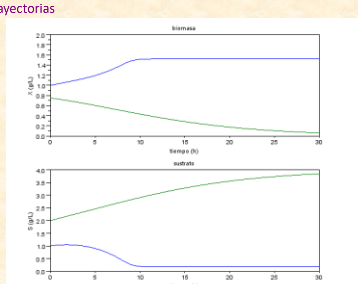
D = 0.3 h^{-1}
Sin = 4.0 g/L
Soluciones de estado estacionario:

Solución "trivial"
Xs = 0 g/L
Ss = 4.0 g/L

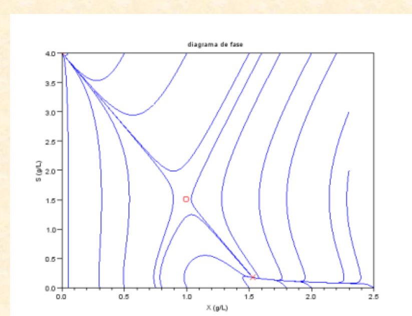
Otras 2 soluciones
Xs = 0.9951 g/L *Xs* = 1.5302 g/L
Ss = 1.5123 g/L *Ss* = 0.1745 g/L

10

Trayectorias



11



12

Retomando el estudio de las soluciones de estado estacionario

$$0 = -D_s X_s + \mu_s X_s$$
$$0 = D_s S_{in,s} - D_s S_s - \frac{1}{Y}\mu_s X_s$$

Solución trivial ("washout"): *Xs* = 0 g/L , *Ss* = 4.0 g/L

La solución no trivial: de la primera ecuación $\mu_s = D_s$

Sustituyendo en la segunda $X_s = Y\left(S_{in,s} - S_s\right)$

Y de $\mu_s = \dfrac{\mu_m S_s}{K_s + S_s + K_i S^2}$

$$S_s = \frac{-\left(1-\frac{\mu_m}{D_s}\right) \pm \sqrt{\left(1-\frac{\mu_m}{D_s}\right)^2 - 4K_i K_s}}{2K_i}$$

Observemos que debe cumplirse

$$\left(1-\frac{\mu_m}{D_s}\right)^2 > 4K_i K_s \qquad \Rightarrow \left(1-\frac{\mu_m}{D_s}\right) < -\sqrt{4K_i K_s} \qquad D_s < \frac{\mu_m}{1+2\sqrt{K_i K_s}}$$
$$\mu_m > D_s$$

13

Estabilidad de los puntos de estado estacionario

$$\frac{dX}{dt} = -DX + \mu X$$
$$\frac{dS}{dt} = DS_{in} - DS - \frac{1}{Y}\mu X$$

Sistema no lineal

linealizamos

$$\dot{\mathbf{z}} = \mathbf{Az} + \mathbf{Bu}$$
$$\mathbf{y} = \mathbf{Cz}$$

donde

$$z_1 = X - X_s \qquad z_2 = S - S_s \qquad u_1 = D - D_s \qquad u_2 = S_{in} - S_{in,s}$$

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \mu_s - D_s & X_s \mu'_s \\ -\frac{\mu_s}{Y} & -D_s - \frac{X_s \mu'_s}{Y} \end{bmatrix} \qquad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} -X_s & 0 \\ S_{in} - S_{in,s} & D_s \end{bmatrix} \qquad \mathbf{C} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Los valores propios de **A** deben ser negativos

$$\det(\lambda\mathbf{I} - \mathbf{A}) = \lambda^2 - \mathrm{tr}(\mathbf{A})\lambda + \det(\mathbf{A}) = 0 \qquad \mathrm{tr}(\mathbf{A}) < 0 \qquad \det(\mathbf{A}) > 0$$

$$\mathrm{tr}(\mathbf{A}) = (\mu_s - D_s) - D_s - \frac{\mu'_s X_s}{Y}$$

$$\det(\mathbf{A}) = -(\mu_s - D_s)\left(D_s + \frac{\mu'_s X_s}{Y}\right) + \frac{\mu'_s \mu_s X_s}{Y}$$

$$\mu'_s = \frac{\partial \mu_s}{\partial S_s} = \frac{\mu_m\left(K_s - K_i S_s^{\,2}\right)}{\left(K_s + S_s + K_i S_s^{\,2}\right)^2}$$

Para el wash out: $S_s = S_{in,s}$ y $X_s = 0$

$$\mu_s - D_s - D_s < 0 \qquad -(\mu_s - D_s)D_s > 0 \quad \Rightarrow D_s > \mu_s \quad \Rightarrow D_s > \frac{\mu_m S_{in,s}}{K_s + S_{in,s} + K_i S_{in,s}^{\,2}}$$

Para las soluciones no triviales: $D_s = \mu_s$

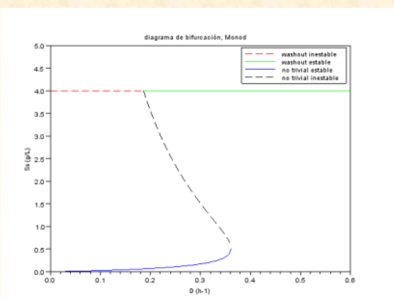
$$-D_s - \frac{\mu'_s X_s}{Y} < 0 \qquad \frac{\mu'_s \mu_s X_s}{Y} > 0 \quad \Rightarrow \mu'_s > 0 \quad \Rightarrow S_s = \frac{\left(\frac{\mu_m}{D_s} - 1\right) - \sqrt{\left(1-\frac{\mu_m}{D_s}\right)^2 - 4K_i K_s}}{2K_i}$$

estable

$$S_s = \frac{\left(\frac{\mu_m}{D_s} - 1\right) + \sqrt{\left(1-\frac{\mu_m}{D_s}\right)^2 - 4K_i K_s}}{2K_i}$$

inestable

14



15

OTROS MODELOS

Por ejemplo, sobre el modelo anterior agregar los procesos de decaimiento celular y de mantenimiento:

$$X \rightarrow X_d \qquad S + X \rightarrow X$$

$$\frac{dX}{dt} = -DX + \mu X - bX$$
$$\frac{dS}{dt} = DS_{in} - DS - \frac{1}{Y}\mu X - m_s X$$

Otros incluyen la dinámica de Productos (líquidos y gaseosos)

$$\frac{dP}{dt} = -DP - Q + \nu X$$

En algún caso, por ejemplo cuando el producto es metano, relativamente poco soluble, se suele considerar en una primera instancia la concentración en el líquido despreciable *(P ≈ 0)*.

Si la formación de producto está asociada al crecimiento: $\nu = Y_P \mu$

Pero en algunos casos (p.ej. fermentación láctica) hay un término independiente del crecimiento: $\nu = Y_P \mu + \eta$

16

Para los procesos aerobios hay que considerar la dinámica del oxígeno:

$$S + S_O \rightarrow X$$

$$\frac{dS_O}{dt} = DS_{O,in} - DS_O + OTR - OUR$$

El consumo de oxígeno depende del crecimiento de la biomasa:

$$OUR = \frac{1}{Y_{O_2}}\mu X \qquad Y_{O_2} = \frac{Y}{1-Y}$$

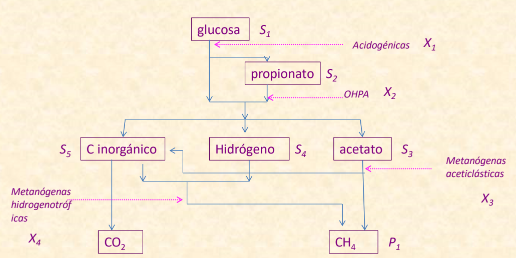
Normalmente se agrega un término para tener en cuenta el metabolismo endógeno y entonces

$$OUR = \frac{1}{Y_{O_2}}\mu X + b_{O_2} X$$

La transferencia de oxígeno se expresa: $OTR = k_L a\left(S_O^* - S_O\right)$

17

Digestión Anaerobia: modelo de 4 poblaciones



$$S_1 \rightarrow X_1 + S_2 + S_3 + S_4 + S_5$$
$$S_2 \rightarrow X_2 + S_3 + S_4 + S_5$$
$$S_3 \rightarrow X_3 + S_5 + P_1$$
$$S_4 + S_5 \rightarrow X_4 + P_1$$

18

Balances en un CSTR:

$$\frac{dX_1}{dt} = \mu_1 X_1 - DX_1$$

$$\frac{dX_2}{dt} = \mu_2 X_2 - DX_2$$

$$\frac{dX_3}{dt} = \mu_3 X_3 - DX_3$$

$$\frac{dX_4}{dt} = \mu_4 X_4 - DX_4$$

$$\frac{dS_1}{dt} = -\frac{1}{Y_{11}} \mu_1 X_1 + DS_{1,in} - DS_1$$

$$\frac{dS_2}{dt} = Y_{21}\mu_1 X_1 - \frac{1}{Y_{22}} \mu_2 X_2 - DS_2$$

$$\frac{dS_3}{dt} = Y_{31}\mu_1 X_1 + Y_{32}\mu_2 X_2 - \frac{1}{Y_{33}} \mu_3 X_3 - DS_3$$

$$\frac{dS_4}{dt} = Y_{41}\mu_1 X_1 + Y_{42}\mu_2 X_2 - \frac{1}{Y_{44}} \mu_4 X_4 - DS_4 - Q_1$$

$$\frac{dS_5}{dt} = Y_{51}\mu_1 X_1 + Y_{52}\mu_2 X_2 + Y_{53}\mu_3 X_3 - \frac{1}{Y_{54}} \mu_4 X_4 - DS_4 - Q_2$$

$$\frac{dP_1}{dt} = Y_{03}\mu_3 X_3 + Y_{04}\mu_4 X_4 - DP_1 - Q_3$$

19