



Implementación de un NMPC en la simulación de un proceso de fermentación alcohólica usando Pyomo

Leticia López-Zamora^{1*}, Osvaldo Illescas-Velázquez¹.

¹ División de Estudios de Posgrado e Investigación, Tecnológico Nacional de México/Instituto Tecnológico de Orizaba, Oriente 9 No. 852, Orizaba 94320, Veracruz, México.

*Autor de correspondencia: llopezz02@yahoo.com.mx

Recibido 19 de mayo de 2020; aceptado 18 de junio de 2020

RESUMEN

Para este trabajo, se realizó la simulación de un proceso fermentativo a partir de azúcares fermentables, considerando los balances de materia de las sustancias involucradas (sustrato, biomasa y producto) y el modelo de temperatura en la fermentación alcohólica. Estos modelos fueron modificados para reflejar la muerte celular del microorganismo por influencia de la temperatura y la respuesta del controlador al incremento de ésta. El sistema de ecuaciones resultante se resolvió utilizando el método de colocación ortogonal, incluido en la librería Pyomo, y el solver IPOPT en Python, logrando reproducir el comportamiento esperado en el proceso sin control, es decir, aumento de temperatura y una fase de muerte térmica. Una vez realizada la simulación, se implementó un controlador predictivo basado en modelo no-lineal (NMPC por sus siglas en inglés) sobre la temperatura (T); para esto se modificaron de nuevo los modelos del proceso y se agregó la función costo al problema de optimización, logrando que el controlador mantuviera la variable dentro de los rangos establecidos ($28^{\circ}\text{C} < T < 32^{\circ}\text{C}$) y con valores cercanos al punto de ajuste (30°C). Esto permitió el crecimiento del microorganismo y la generación de producto, logrando una concentración

final de etanol de 66.11 g/L.

PALABRAS CLAVE: Simulación, fermentación, NMPC, Pyomo.

ABSTRACT

In this work, a simulation of a fermentation process from fermentable sugars was carried out, considering mass balances of the involved substances (substrate, biomass, and product) and an alcoholic fermentation temperature model. These models were modified to simulate the thermal death phenomena, which occurs by temperature influence, and controller response due to increasing temperature. The differential equations system was then solved using the orthogonal collocation method, included in the Pyomo library, and the IPOPT solver in Python, managing to emulate the expected behavior of a non-controlled process, that is, increase on temperature and a thermal death phase. Once the simulation was carried out, a non-linear model predictive control (NMPC) was implemented on temperature (T) by modifying the process models again and adding a cost function to the optimization problem. This problem was then solved using Pyomo and IPOPT solver again, managing to maintain temperature in the established range ($28^{\circ}\text{C} < T < 32^{\circ}\text{C}$) and values near to setpoint (30°C). This allowed microorganism growth and product generation, and reaching a final ethanol concentration of 66.11 g/L.

KEY WORDS: Simulation, fermentation, NMPC, Pyomo.

INTRODUCCIÓN

Shuler y Kargi (2002) hablan acerca de la industria de la fermentación, y concluyen que el control de procesos es de suma importancia debido a que los microorganismos son sensibles al medio en el que se desarrollan, por lo que hay una variedad de factores que pueden inhibir su crecimiento, por ejemplo: la temperatura, el pH y la velocidad de agitación.

Ellos también mencionan que, en un ambiente controlado, los microorganismos son capaces de crecer y multiplicarse a una velocidad denominada tasa de crecimiento μ (h^{-1}) la cual depende de variables tales como concentración de sustrato y etanol producido, entre otras, pero cuando uno o más factores alcanzan valores críticos los microorganismos comienzan a morir a una velocidad denominada tasa de muerte k_D (h^{-1})

Van Uden (1984) establece que cuando la fase de muerte celular se debe a un aumento de temperatura en el medio, ésta puede representarse como una función de la temperatura (ecuación 1):

$$k_D = Ae^{(-E_D/RT)} \quad (1)$$

Por lo anterior, El Mansi et al., (2012) determinan que el control de la temperatura es una de las prioridades en

la industria de la fermentación, el cual se logra normalmente con un flujo de agua que pasa a través de una chaqueta que cubre al fermentador y aplicando algún esquema de control.

Grüne y Panek (2017) describen al control predictivo basado en modelo no-lineal (NMPC por sus siglas en inglés) como un método basado en optimización para el control de sistemas no lineales, es muy popular y utilizado en la industria para lograr un control óptimo de sistemas multivariados con restricciones.

Uno de los métodos más utilizados en la discretización del NMPC es la colocación ortogonal, para lo cual se puede utilizar algún software o lenguaje enfocado a optimización, como la librería Pyomo. Hart et al. (2017) reportan que esta librería soporta la formulación y análisis de modelos matemáticos para optimización compleja dentro de Python.

Esta investigación demostró la eficiencia de un controlador NMPC, aplicado a la industria fermentativa y la utilidad de los lenguajes enfocados a optimización, como Pyomo.

MATERIALES Y MÉTODOS

Partida (2017) llevó a cabo dos fermentaciones por lotes utilizando la levadura *saccharomyces cerevisiae* y azúcares fermentables de sorgo dulce como sustrato, con concentraciones iniciales de 165.88 g/L y 187.8 g/L respectivamente, obteniendo productividades de 2.16 g/L h y 1.83 g/L h, a partir de dicha investigación se determinaron los parámetros cinéticos de un modelo de crecimiento (ecuación 2):

$$\mu = 0.28 \left(\frac{s}{86.56+s} \right) \left(1 - \frac{P}{85.7} \right) \left(1 - \frac{X}{56.2} \right) \quad (2)$$

Posteriormente se programaron los modelos del proceso para reflejar el comportamiento de temperatura sin control y el efecto de ésta sobre la concentración de biomasa. Las ecuaciones 3-5 muestran los balances de materia de biomasa, sustrato y producto propuestos por Shuler y Kargi (2002):

$$\frac{dX}{dt} = \left(\mu_{max} \frac{S}{S+K_s} - A e^{(-E_D/RT)} \right) \left(1 - \frac{X}{X_c} \right) \left(1 - \frac{P}{P_c} \right) X \quad (3)$$

$$\frac{dS}{dt} = \left(\mu_{max} \frac{S}{S+K_s} - A e^{(-E_D/RT)} \right) \left(1 - \frac{X}{X_c} \right) \left(1 - \frac{P}{P_c} \right) \frac{X}{Y_{X/S}} \quad (4)$$

$$\frac{dP}{dt} = Y_{P/X} * \mu_{max} \frac{S}{S+K_s} \left(1 - \frac{X}{X_c} \right) \left(1 - \frac{P}{P_c} \right) X \quad (5)$$

Gee y Ramirez (1988) proponen un modelo de temperatura de fermentación, el cual se utilizó para esta simulación, y que se muestra en la ecuación 6:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{1}{\rho C_p} \left[\Delta H_S \frac{dS}{dt} \right] \quad (6)$$

Donde: X_c es la concentración crítica de biomasa ($g L^{-1}$) a la cual el crecimiento será nulo, P_c es la concentración crítica de producto ($g L^{-1}$) a la cual el crecimiento será nulo, μ_{max} es la tasa de crecimiento máxima (h^{-1}), K_s es la constante de velocidad media ($g L^{-1}$), $Y_{X/S}$ es el rendimiento biomasa-sustrato y $Y_{P/X}$ es el rendimiento producto-biomasa. A es el factor pre exponencial (h^{-1}), E_D es la energía de activación de la tasa de muerte celular ($KJ mol^{-1}$), R es la constante de los gases ($KJ mol^{-1} K^{-1}$) y T es la temperatura (K); mientras que C_p es la capacidad calorífica de la mezcla ($KJ Kg^{-1} °C^{-1}$). De esta forma, Teja (1983) establece que el C_p puede calcularse con la ecuación 7:

$$C_p = x_A C_{pA} + x_G C_{pG} \quad (7)$$

Donde x_A y x_G son las fracciones másicas de agua y glucosa en la mezcla, respectivamente, y C_{PA} y C_{PG} son las capacidades caloríficas del agua y glucosa; ρ es la densidad de la mezcla del jugo de sorgo y ΔH_p es a entalpía de reacción (KJ mol^{-1}).

En la tabla 1 se muestra un resumen de los valores de los parámetros utilizados para esta sección.

El sistema de ecuaciones se programó con el software libre Python 3.7, utilizando el compilador *Spyder* y la librería *Pyomo*; se utilizó, además el método de colocación ortogonal y el solver IPOPT. Los resultados se graficaron utilizando la librería *Matplotlib*.

Tabla 1. Parámetros utilizados para la simulación de muerte térmica.

Parámetro	Valor	Fuente
μ_{\max} (h^{-1})	0.28	Calculado
K_s (g L^{-1})	86.55	Calculado
Y_{xs}	0.025	
Y_{ps}	0.48	
X_0 (g L^{-1})	0.74	Partida (2017)
S_0 (g L^{-1})	165.88	
P_0 (g L^{-1})	0	
T_0 ($^{\circ}\text{C}$)	23	
X_c (g L^{-1})	56.2	Rivera et al., (2013)

P_c (g L^{-1})	85.7	
ρ (Kg m^{-3})	1050	Wu et al., (2015)
C_p ($\text{KJ Kg}^{-1} \text{ }^{\circ}\text{C}^{-1}$)	3.67	Teja (1983)
A (KJ/mol)	177700	Felix et al., (2014)
ΔH_s (KJ mol^{-1})	-91.2	Gee y Ramirez, (1988):
E_D (KJ mol^{-1})	1.44×10^{28}	Phisalaphong et al., (2006)
R ($\text{KJ mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$)	8.314	Van Uden (1984)

Para la implementación del controlador NMPC, se realizó una modificación al modelo de temperatura considerando el efecto de la tasa de enfriamiento u , como se muestra en la ecuación 8 (Gee y Ramirez, 1988):

$$\frac{dT}{dt} = \frac{1}{\rho C_p} \left[\Delta H_s \frac{dS}{dt} - u(T - T_c) \right] \quad (8)$$

La tasa de enfriamiento u ($\text{KJ/h m}^3 \text{ }^{\circ}\text{C}$) es la variable manipulable y T_c es la temperatura de enfriamiento que tendrá un valor de $24 \text{ }^{\circ}\text{C}$. El controlador se trata como un problema de optimización que tendrá como objetivo la función costo de un controlador NMPC, propuesto Puigjaner y Heyen (2007); este se muestra en la ecuación 9:

$$J = \sum_{j=1}^N [T(k+j) - T_s(k+j)]^2 + \sum_{j=1}^{N_u} \Delta u(\kappa + j - 1)^2 \quad (9)$$

El objetivo del controlador es mantener la temperatura al setpoint T_s , que tendrá un valor de 30°C dentro de un intervalo de $28\text{--}32^\circ\text{C}$. El problema de optimización queda definido como se muestra a continuación:

$$\min J[T(k), u(k)]$$

$$\frac{dy}{dt} = f[y(k), u(k)]$$

$$h[y(k), u(k)] = 0$$

$$g[y(k), u(k)] \geq 0$$

$$0 \leq u \leq 1000$$

$$28 \leq T \leq 32$$

Para esta sección, se añadió el componente *objective* para incluir la función objetivo y las restricciones con el componente *constraints*. Los resultados fueron extraídos y graficados de nuevo con la librería Matplotlib.

RESULTADOS

En la figura 1 se muestra el comportamiento de la temperatura de fermentación en la simulación sin acciones de control:

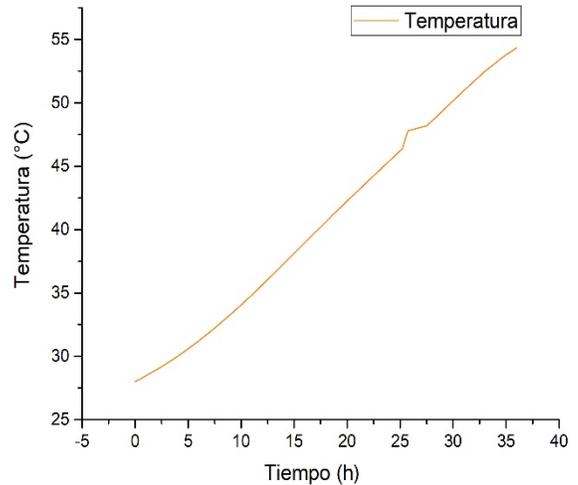


Figura 1. Temperatura del proceso fermentativo sin control

La temperatura comienza a elevarse conforme el proceso avanza, un comportamiento esperado debido a que la fermentación es un proceso exotérmico y no existen acciones de control, alcanzando valores más allá de la temperatura a la cual comienza la muerte térmica. En la figura 2 se muestra la concentración de biomasa durante la simulación sin control.

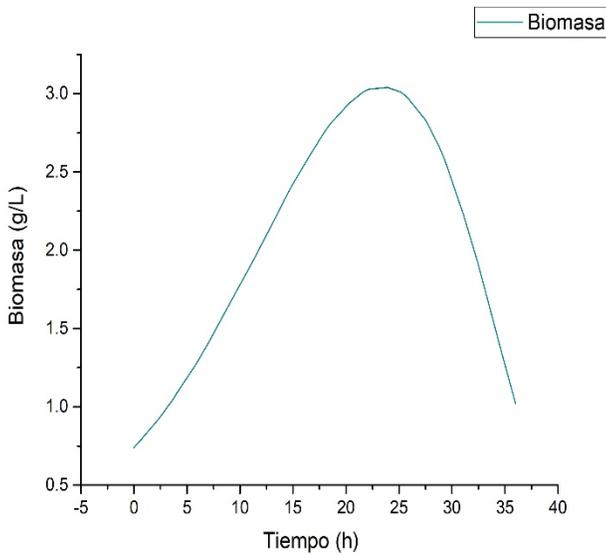


Figura 2. Biomasa durante el proceso de fermentación sin control

Debido a que la temperatura sobrepasa los límites recomendados, el crecimiento de biomasa se verá inhibido. La etapa de crecimiento logarítmico se mantiene hasta 1 h con 20 min., después de la cual comienza la etapa de desaceleración, que dura hasta aproximadamente la hora 24. Es durante esta etapa que se alcanza la concentración máxima de biomasa en la simulación: 3.04 g/L; pero después de esta comienza la etapa de muerte celular.

A fin de controlar la temperatura del proceso de fermentación, se implementó el controlador manipulando la tasa de enfriamiento (figura 3). En esta gráfica se observan los valores que toma la variable

manipulable para lograr mantener la temperatura en los rangos deseados. Durante todo el proceso, los valores se mantienen dentro de los límites establecidos. Se observa que el controlador mantiene la temperatura dentro de los rangos deseados durante todo el proceso, con una desviación estándar de referencia de 0.8%. La mayor temperatura alcanzada fue de 30.46° C y la menor (después de que el proceso llegara a fase estacionaria) fue de 29.83° C.

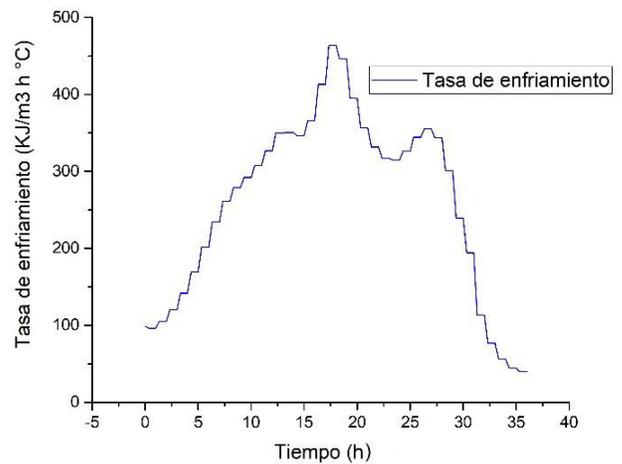


Figura 3. Tasa de enfriamiento durante el proceso de fermentación controlado

En la figura 4 se muestra el comportamiento de la temperatura debido a las acciones de control:

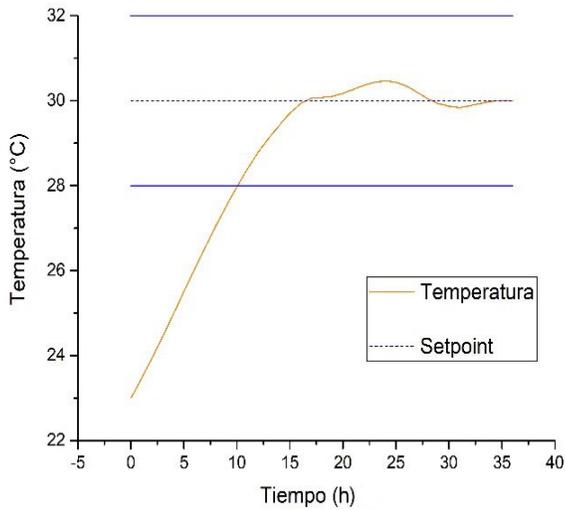


Figura 4. Perfil de temperatura, con la implementación del NMPC en el proceso de fermentación

A pesar de que existieron variaciones en la temperatura, no existe un efecto negativo significativo sobre el crecimiento de biomasa, como se muestra en la figura 5:

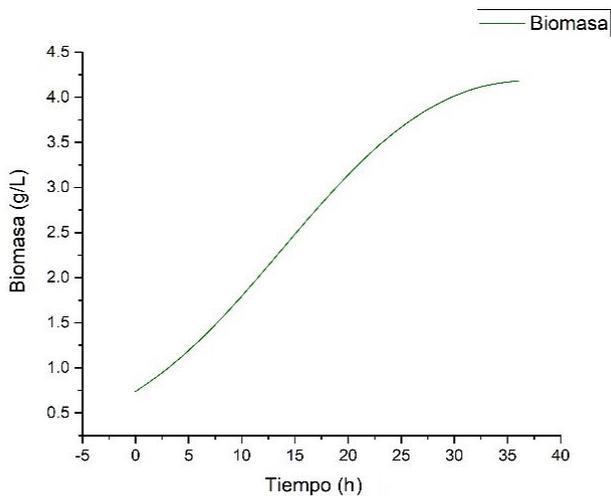


Figura 5. Biomasa con la implementación del NMPC

A diferencia de la simulación realizada sin acciones de control, el crecimiento del microorganismo sucedió sin efecto de inhibición, alcanzando un estado estable, con una concentración final de biomasa de 4.17 g/L, mientras que el controlador evitó el comienzo de la fase de muerte en la simulación. En la figura 6 se muestra la cantidad de biomasa muerta en ambos procesos:

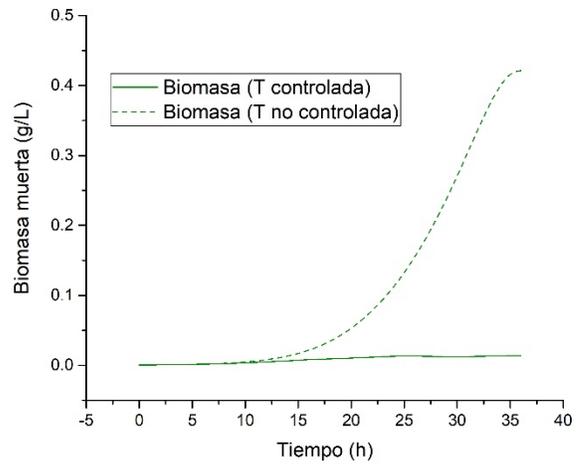


Figura 6. Comparación de biomasa muerta entre simulaciones con control y sin control

Se observa que, en el proceso controlado, la cantidad de biomasa muerta es mucho menor, permitiendo que los azúcares fermentables se consumieran en un 98.07%, obteniéndose una producción de etanol de superior a los 60 g/L, como se muestra en la figura 7:

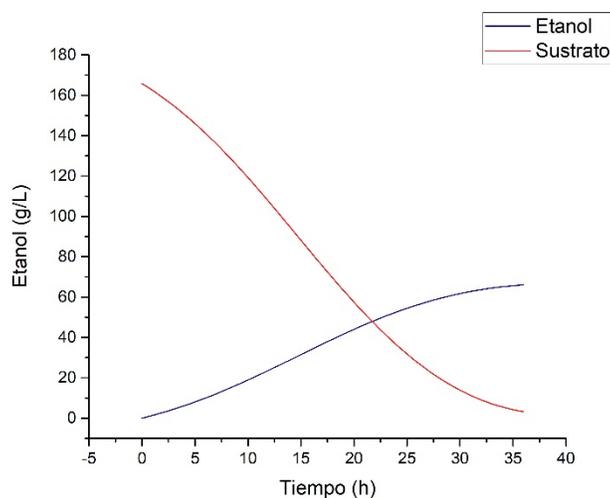


Figura 7. Consumo de sustrato y generación de etanol en el proceso

La concentración final de etanol fue de 66.11 g/L, lo que resulta en una productividad de 1.83 g/L h, un valor igual al obtenido experimentalmente por Partida (2017).

CONCLUSIONES

Los modelos propuestos para la simulación de muerte térmica representaron correctamente el comportamiento de la temperatura y el efecto que tendría sobre la biomasa; si la temperatura alcanza los 50° C, la población de microorganismo comienza a descender. Por lo tanto, el uso de la librería Pyomo resultó útil en la resolución de ecuaciones diferenciales.

Respecto a la implementación del NMPC, el controlador demostró ser muy eficiente, manteniendo

la temperatura en los rangos establecidos, con una desviación estándar de referencia de 0.8%, lo que permitió simular adecuadamente la productividad del proceso fermentativo. El método de colocación ortogonal de la librería Pyomo es útil también para resolver problemas de optimización y el uso de esquemas de control predictivo.

BIBLIOGRAFÍA

- El-Mansi, E. M. T., Nielsen, J., Mousdale, D., Carlson, R. P. (Eds.). (2018). *Fermentation microbiology and biotechnology*. CRC press.
- Felix, E., Clara, O., Vincent, A. O. (2014). Thermodynamic characterization of *Saccharomyces cerevisiae* catalyzed fermentation of cane sugar. *Open Journal of Physical Chemistry* 10(1), 21-15.
- Gee, D. A., Ramirez, W. F. (1988). Optimal temperature control for batch beer fermentation. *Biotechnology and bioengineering* 31(3), 224-234.
- Grüne, L., Pannek, J. (2017). *Nonlinear model predictive control*. Springer, Cham.

- Hart, W. E., Laird, C. D., Watson, J. P., Woodruff, D. L., Hackebeitl, G. A., Nicholson, B. L., Siirola, J. D. (2017). *Pyomo-optimization modeling in python 67*. Berlin: Springer.
- Partida, G. 2017. *Producción de etanol a partir de jugo y bagazo de sorgo dulce (Sorghum bicolor (L.) Moench) mejorado genéticamente*. (Tesis doctoral). Instituto Tecnológico Veracruz. Veracruz, Veracruz, México.
- Phisalaphong, M., Srirattana, N., Tanthapanichakoon, W. (2006). Mathematical modeling to investigate temperature effect on kinetic parameters of ethanol fermentation. *Biochemical engineering journal* 28(1), 36-43.
- Puigjaner, L., Heyen, G. (Eds.). (2007). *Computer Aided Process and Product Engineering (CAPE)*. John Wiley & Sons.
- Rivera, E. C., Yamakawaa, C. K., Garciaa, M. H., Geraldoa, V. C., Rossella, C. E., Filhob, R. M., Bonomia, A. (2013). A procedure for estimation of fermentation kinetic parameters in fed-batch bioethanol production process with cell recycle. *Chemical Engineering* 32, 1369-1374.
- Shuler, M. L., Kargi, F. (2002) *Bioprocess Engineering: Basic Concepts*. Estados Unidos: Prentice Hall.
- Teja, A. S. (1983). Simple method for the calculation of heat capacities of liquid mixtures. *Journal of chemical and engineering data* 28(1), 83-85.
- Van Uden, N. (1984). Temperature profiles of yeasts. *Adv Microb Physiol* 25, 195-251.
- Wu, X., Staggenborg, S., Wang, D. (2015). Stabilization of sweet sorghum juice for long-term storage. *Transactions of the ASABE* 58(1), 169-175.