



Centro de Investigación y de Estudios Avanzados
del Instituto Politécnico Nacional

Unidad Zacatenco

Departamento de Control Automático

CONTROL ÓPTIMO APLICADO A LA PRODUCCIÓN DE BIOMASA EN UN CULTIVO CONTINUO DE MICROORGANISMOS

Tesis que presenta

Irandi Gutiérrez Carmona

Para obtener el Grado de

Maestro en Ciencias

En la especialidad de

Control Automático

Director de Tesis

Dr. Jorge Torres Muñoz

México, D.F.

Noviembre, 2012

Agradecimientos

A mis abuelos

Por ser un ejemplo de entrega y de constancia.

A mis padres

Por su apoyo y paciencia incondicional.

A mis maestros

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología

Por la confianza y el apoyo económico a través de la beca de posgrado.

Resumen

En el presente trabajo se muestra una aportación al estudio de los biorreactores en modo de operación continua. El problema a resolver es el maximizar la producción de biomasa en un cultivo de micro algas, considerando como variables de control la intensidad luminosa incidente sobre el sistema o la razón de dilución, el control óptimo es hallado empleando herramientas tales como el Principio del Máximo de Pontryagin, y el principio de Optimalidad de Bellman con la ecuación de Hamilton-Jacobi-Bellman. El sistema físico fue modelado con la ecuación de Monod, usada ampliamente en sistemas biológicos; los resultados obtenidos fueron implementados en el laboratorio para el fin de su validación.

Abstract

In the present thesis, a contribution on bioreactors study is presented. The main problem is to maximize production of a micro algae culture; taking as only possible control variables incident light on the system or the dilution rate. Optimal Control is found employing tools as Pontryagin's Maximal Principle, Bellman Optimality Principle with the well known Hamilton-Jacobi-Bellman Equation. Physical system was represented using Monod equation, easily identified with biological systems; obtained results were implemented on the laboratory in order to validate them.

Índice general

1. Introducción	7
1.1. Motivación	7
1.2. Antecedentes	8
1.3. Justificación	9
1.4. Problemática	10
1.5. Objetivos:	10
1.5.1. Objetivos particulares	11
2. Modelo matemático	13
2.1. Bioreactor	13
2.2. Modelo del bioreactor	14
2.3. Razón de Crecimiento	16
2.3.1. Razón de crecimiento total	16
2.3.2. $\mu_I(u_I)$ -Razón de Crecimiento en base a Intensidad Luminosa .	17
2.3.3. $\mu_S(S(t))$ -Razón de Crecimiento en base al Sustrato	20
2.4. Modelo del bioreactor en fase continua	21
3. Planteamiento del Problema	23
3.1. Intensidad Lumínica	23

3.1.1.	Planteamiento General	24
3.1.2.	Sin foto inhibición	25
3.1.3.	Con foto inhibición	26
3.1.4.	Análisis por perturbaciones singulares	27
3.2.	Razón de Dilución	30
3.2.1.	Planteamiento General	31
3.2.2.	Análisis del Flujo Óptimo con Dinámica Completa	34
4.	Conceptos Básicos de Optimalidad	37
4.1.	Programación Dinámica y la ecuación Hamilton-Jacobi-Bellman (HJB)	37
4.1.1.	Principio de Optimalidad de Bellman (Any tail of an optimal trajectory is optimal too).	37
4.1.2.	Aplicación del principio de optimalidad a la toma de decisiones	39
4.2.	Ecuación HJB	41
4.2.1.	Diagrama de Flujo	46
5.	Control óptimo mediante Ecuación HJB	47
5.1.	Intensidad Luminosa	47
5.1.1.	Sistema Hamiltoniano	48
5.1.2.	Ecuación de Hamilton-Jacobi-Bellman	50
5.1.3.	Caso de estudio	51
5.2.	Razón de Dilución	58
5.2.1.	Sistema Hamiltoniano	58
5.2.2.	Ecuación de Hamilton-Jacobi-Bellman	61
5.2.3.	Caso de estudio	63
6.	Conclusiones	73

<i>ÍNDICE GENERAL</i>	3
A. Métodos experimentales	75
A.1. Preparación de medio Zarrouck Modificado	75
A.2. Relación absorbancia y células viables	76
A.3. Identificación de parámetros	77
A.4. Intensidad promedio	78
B. Control de Flujo de Entrada mediante bomba peristáltica	81

Índice de figuras

2.1. Bioreactor	15
2.2. Modelo PSF de Eilers y Peeters	17
3.1. Comportamiento cualitativo de $P(u_{Dcte})$	34
4.1. Trayectoria óptima a-e	38
4.2. Dos posibles trayectorias óptimas b-e	38
4.3. Trayectorias y costos admisibles desde b	39
4.4. Trayectorias óptimas desde c,d y e hasta el punto terminal f	40
4.5. Candidatos únicos para trayectoria óptima desde b hacia f	40
5.1. Función Valor $t_f = 1e3$ seg	53
5.2. Superficie de Control $t_f = 1e3$ seg	53
5.3. Superficie $G(t_{fixed}, x_2, u_I)$ y plano generado por $u_I^{opt}(t_{fixed})$	54
5.4. Error en la ecuación HJB $t_f = 1e3$ seg	55
5.5. Función Valor $t_f = 1e4$ seg	56
5.6. Superficie de Control $t_f = 1e4$ seg	56
5.7. Superficie $G(t_{fixed}, x_2, u_I)$ y plano generado por $u_I^{opt}(t_{fixed})$	57
5.8. Error en la ecuación HJB $t_f = 1e4$ seg	57

5.9. Comportamiento cualitativo de $\phi(t, y)$	62
5.10. Función Valor $t_{fixed} = 0$ dias para Flujo	64
5.11. Superficie de Control $t_{fixed} = 0$ dias para Flujo	65
5.12. Error ecuación HJB $t_{fixed} = 0$ dias para Flujo	65
5.13. Esquema General del Bioreactor	66
5.14. Prototipo Físico de Bioreactor en Laboratorio	67
5.15. Crecimiento de la Biomasa (Real vs Estimada) bajo ambas políticas de control (Control fijo y Control Óptimo)	68
5.16. Concentración del Sustrato bajo ambas políticas de control (Control fijo y Control Óptimo)	69
5.17. Control ó Razón de Dilución vs Tiempo,(Control fijo y Control Óptimo) 70	
5.18. ϕ vs Tiempo; Trayectoria estimada de ϕ a lo largo de la trayectoria generada por el control óptimo.	71
5.19. Producción generada por control óptimo y control estático	72
5.20. Producción total generada por control óptimo y control estático	72
A.1. Curva de Crecimiento Típica para una población de microorganismos, mostrando la influencia de la variable medida (de Ref. [35]).	76
A.2. La gráfica Langmuir	78
A.3. Función Estimada vs Mediciones Reales	79
B.1. Esquema de Sistema de Tanque	82

Capítulo 1

Introducción

1.1. Motivación

La producción de microalgas esta hoy en día obteniendo un gran impacto en la industria, investigación y vida social; gracias a su importancia en el ciclo del carbono, grandes beneficios nutricionales, capacidad de producir aceites (bio-combustibles), pigmentos y su capacidad de remover contaminantes en aguas residuales [3], [4]. Porque una gran cantidad de células de microalgas son necesarias para desarrollar cualquiera de las actividades antes mencionadas, encontrar las condiciones óptimas bajo las cuales las microalgas maximizan su crecimiento es un tema principal analizado en múltiples disciplinas. Como muchos otros procesos industriales, sin importar las grandes ventajas que conlleva el cultivo de microalgas, su cultivo para uso industrial, comercial y de investigación se ha visto principalmente limitado por los costos y tiempos de producción, se hace entonces necesario el encontrar las condiciones óptimas de crecimiento que reduzcan costos y permitan así atraer inversión hacia este sector.

Se ha observado que la razón de crecimiento en microalgas es afectada por una gran cantidad de factores del medio (temperatura, pH, presión, luz, etc, ...); pero al igual que otros organismos foto-autótrofos, tanto la razón de crecimiento como el mantenimiento de las células, están principalmente determinados por la intensidad luminosa y la concentración de nutrientes en el medio [17], *i.e.* existen niveles óptimos de iluminación y concentración de nutrientes que maximizan el crecimiento de microalgas en un medio de cultivo, pero la carencia o exceso de éstos elementos reducirán el crecimiento hasta un punto de completa inhibición o muerte [1], [2].

El presente trabajo se enfoca en el estudio de la dinámica de crecimiento de la microalga *Spirulina Maxima* tanto en un cultivo por lote como en un cultivo continuo, controlando condiciones de iluminación, concentración inicial de nutrientes y flujos para hallar las condiciones óptimas del cultivo para maximizar la concentración de biomasa ponderando en lo posible el tiempo de operación con la energía suministrada al medio resultando de esta forma en el mejoramiento de la productividad del sistema.

1.2. Antecedentes

Se ha estudiado ampliamente el crecimiento de la microalga *Spirulina Máxima*; múltiples experimentos se han realizado para encontrar con base en propiedades biológicas (fisiológicas, metabólicas, enzimáticas, etc.) las condiciones óptimas para el crecimiento [7], [23]; y aunque estos experimentos no ofrecen ninguna explicación de la dinámica del proceso, permiten un buen primer acercamiento a las condiciones óptimas y brindan un buen punto para la comparación en futuros desarrollos. Para lograr un mayor entendimiento del proceso, se han desarrollado también una amplia variedad de modelos estructurados y modelos no estructurados [14], [21], en donde los primeros proponen una función arbitraria cuya dinámica se aproxime a la observada

durante la experimentación, mientras que los segundos requieren de un conocimiento muy profundo del proceso, pues aplicando principios de conservación de la materia así como velocidades de transición entre los distintos estados del sistema, dan una explicación profunda de la dinámica generando así, funciones generalmente muy complejas [2], [11].

De igual forma en muchos estudios se presentan condiciones que se asumen óptimas para el crecimiento de las microalgas, sin embargo estos resultados son obtenidos después de una sobre-simplificación de los modelos, inclusive se elimina gran parte de la dinámica del sistema, analizando solo instantes en los que se ha alcanzado algún grado de equilibrio (termodinámico, razón de crecimiento constante, razón de consumo de sustrato constante, etc.), y bajo otras condiciones que son difícilmente alcanzadas en la práctica.

1.3. Justificación

Por la complejidad de la dinámica de crecimiento de las microalgas, su análisis se ha visto limitado al estudio de la influencia de parámetros aislados en modelos relativamente sencillos; por tal motivo, los resultados obtenidos en laboratorio son generalmente poco representativos de aquellos vistos en las grandes áreas de producción o simplemente, no proveen técnicas que permitan su implementación.

Se hace necesario entonces, el poder calcular parámetros óptimos de crecimiento que puedan ser implementados de forma práctica, desde condiciones iniciales arbitrarias, permitiendo así un control óptimo en toda la ventana de observación del experimento y no solo en un pequeño intervalo del mismo.

1.4. Problemática

El crecimiento de las microalgas depende principalmente de la intensidad de luz y de la concentración de nutrientes; y a pesar de conocer las condiciones óptimas de estos dos parámetros, bajo consideraciones arbitrarias tales como un sistema que ha alcanzado el equilibrio de alguna forma, o eliminando otras variables que afecten el sistema (*i.e.* si se analiza el comportamiento al variar la intensidad lumínica, se considera de alguna manera que la concentración de sustrato no se modifica, de igual forma, si se analiza el comportamiento al variar la concentración de sustrato se infiere que la luz ni varía ni altera el comportamiento del sistema); por lo tanto, no existe ley de control alguna que relacione el comportamiento de ambos parámetros con la dinámica completa presente en un bioreactor continuo en donde es imposible mantener de forma individual cualquier concentración ya sea de sustrato o de biomasa constante.

En la actualidad, no existe un control que pueda ser considerado como óptimo, pues en ninguno se considera la dinámica completa del crecimiento de la microalga, ni el tiempo de duración del experimento.

Así, el **planteamiento general** es el de analizar y diseñar una ley de control que bajo un horizonte de observación finito, sea capaz de maximizar la productividad de un bioreactor continuo de un cultivo de *Spirulina Maxima*, en base a la intensidad lumínica incidente en el bioreactor como la concentración de sustrato.

1.5. Objetivos:

Diseño de una estrategia de control óptimo que permita obtener un crecimiento máximo de microorganismos mediante la regulación de la intensidad luminosa (luz

blanca) y un flujo de entrada de solución nutritiva.

1.5.1. Objetivos particulares

O1.- Estudio y comprensión del proceso biotecnológico del crecimiento celular de un cultivo de microalgas y propuesta de un modelo tipo Monod y un funcional de costo que permita obtener un máximo en productividad.

O2.- Recopilación bibliográfica de teoría de control óptimo.

O3.- Diseño de una estrategia de control óptimo que permita obtener un crecimiento de máximo de microorganismos mediante la regulación de la intensidad luminosa.

O4.- Diseño de una estrategia de control óptimo que permita obtener un crecimiento de máximo de microorganismos mediante la regulación de la razón de dilución de un bioreactor.

O5.- Validación experimental de la estrategia de control óptimo en un bioreactor continuo.

Capítulo 2

Modelo matemático

En este capítulo se describe la dinámica del procesos de crecimiento en términos generales. Se discute el significado físico de los parámetros con la finalidad de que el lector se familiarice con el mismo, así como su interpretación en proceso real. Así como un primer enfoque de optimización del sistema.

2.1. Bioreactor

Un bioreactor es un sistema regulado biológicamente activo donde se lleva a cabo un proceso químico o bioquímico que involucra organismos vivos o sustancias biológicamente activas derivadas de los organismos presentes en el proceso. Este proceso puede ser aeróbico o anaeróbico y un número grande de procesos de tratamientos biotecnológicos se llevan a cabo en este tipo de sistemas. Básicamente, se busca mantener la regulación del pH, la temperatura, concentración del oxígeno, iluminación y dióxido de carbono que aseguren condiciones óptimas de operación del bioreactor. Los modos de funcionamiento de bioreactores se caracterizan generalmente por el

intercambio de líquidos, es decir, por el tipo de alimentación de sustrato del reactor.

Se distinguen tres tipos de bioreactores principalmente.

a) El modo discontinuo: La totalidad de los elementos o nutrientes necesarios para el crecimiento biológico son introducidos al comienzo de la reacción, no existe aportación alguna durante la reacción, por lo que se mantiene un volumen constante. Las únicas acciones posibles del operador son modificar las variables del entorno (pH, temperatura, velocidad de agitación, aeración).

b) El modo semi-continuo: Se distingue del primero por aportar los elementos nutritivos en cuanto a las necesidades identificadas del micro-organismo. A partir de un volumen inicial previamente inoculado, el reactor es alimentado por un flujo controlado.

c) El modo continuo: Caracterizado por un volumen de reacción constante, se somete un flujo de salida igual al flujo de entrada. A menudo operado en lazo abierto, ya que permite estudiar los fenómenos transitorios, las características de un organismo durante largos períodos de crecimiento, problemas de optimización; también permite producciones importantes en los reactores de tamaño pequeño.

2.2. Modelo del bioreactor

Una de las maneras más adecuadas para generar un modelo biológico global, es realizar un balance global de materia y energía, es decir que la acumulación de materia es igual a la generación de la misma sustraída del consumo de energía en el proceso de crecimiento celular, que se representa por las ecuaciones diferenciales

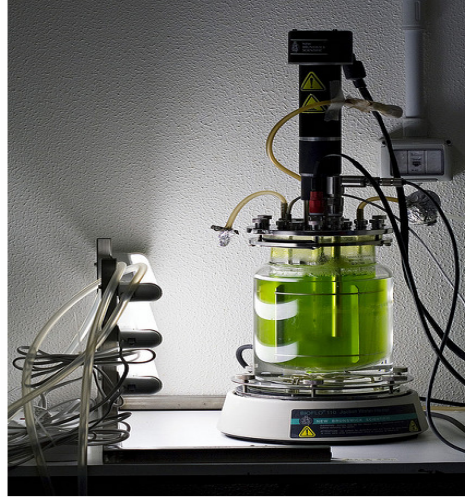


Figura 2.1: Bioreactor

ordinarias siguientes:

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt}V(t) X(t) &= r(\cdot) V(t) - Q(t)_{out} X(t) \\
 \frac{d}{dt}V(t) S(t) &= -Y r(\cdot) V(t) + Q_{in} S_{in} - Q_{out} S \\
 \frac{d}{dt}V(t) &= Q_{in} - Q_{out}
 \end{aligned} \tag{2.1}$$

en las que, X representa la concentración de micro-organismos (g/l), X es la concentración de sustrato (g/l), V el volumen en reacción (l), Q_{in} el flujo de alimentación (l/h), Q_{out} el flujo de salida (g/l) y S_{in} la concentración de sustrato en la alimentación (g/l). $r(\cdot)$ representa la velocidad de crecimiento del microorganismo (g/h), Y el coeficiente que representan respectivamente el rendimiento de consumo y de producción; a partir de de éste momento y para facilitar un futuro desarrollo práctico, X representará la absorbancia registrada en el espectrofotómetro, detalles de porque se puede reemplazar en nuestro caso de estudio a la concentración de micro-organismos es detallado en el Apéndice A.

Además, X es necesaria para la velocidad de crecimiento del micro-organismo, se tiene que $r(\cdot) = \mu(\cdot) X$, así de (2.1) se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} V(t) X(t) &= \mu(\cdot, I) V(t) X(t) - Q_{out} X(t) \\ \frac{d}{dt} V(t) S(t) &= -Y \mu(\cdot, I) V(t) X(t) + Q_{in} S_{in}(t) - Q_{out} S(t) \\ \frac{d}{dt} V(t) &= Q_{in} - Q_{out} \end{aligned} \quad (2.2)$$

Donde $\mu(\cdot, I)$ es tasa específica de crecimiento que depende fuertemente de las condiciones de operación (temperatura, pH, Intensidad lumínica, etc...), del medio de reacción (concentración de compuestos de carbono, nitrógeno, fosfatos, sales minerales, oxígenos, etc...), en el presente trabajo se reportara la tasa específica de crecimiento en función solo del sustrato y de la intensidad luminosa. Dadas las restricciones físicas de nuestro sistema, los controles admisibles (y únicas variables que podemos libremente modificar) son

$$u_I = I; \quad u_D = Q_{in}$$

A continuación se analizan los resultados que se encuentran en la literatura sobre estas dos variables

2.3. Razón de Crecimiento

2.3.1. Razón de crecimiento total

Se ha planteado que la razón de crecimiento $\mu(\cdot)$ depende principalmente de las concentraciones de sustrato y la intensidad lumínica, es decir

$$\mu(\cdot, u_I) = \mu(S(t), u_I)$$

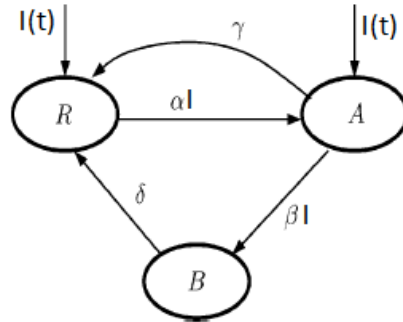


Figura 2.2: Modelo PSF de Eilers y Peeters

la intensidad lumínica ha sido considerada y por lo tanto, estudiada como un sustrato no acumulable, por lo tanto, tomando la forma de la ecuación de Michaelis-Menten con respecto a S e I , se obtiene

$$\mu(S(t), u_I) = \mu_S(S(t)) \mu_I(u_I) \quad (2.3)$$

es decir, la razón de crecimiento total puede ser vista como el producto entre la razón de crecimiento en función de la luz y la razón de crecimiento en función del sustrato.

2.3.2. $\mu_I(u_I)$ -Razón de Crecimiento en base a Intensidad Lumínica

El crecimiento de las microalgas es un proceso biológicamente complicado, uno de los enfoques más aceptados por su simplicidad y por arrojar excelentes resultados experimentales es el modelo de la planta fotosintética.

Modelo Planta Fotosintética

A continuación, se describe el modelo dinámico de la relación entre la intensidad de luz y la fotosíntesis, el modelo describe el proceso fotosintético y aquellos conectados con la foto-inhibición y la recuperación desde la foto-inhibición. La planta Foto-sintética (PSF por sus siglas en inglés) mostrado en la Figura 2.2, fue desarrollado por Peeters y Eilers en [21].

El modelo PSF consiste en exactamente tres estados en las que la célula de la microalga puede estar, interpretados como fracciones molares de las células de microalgas en un estado de reposo (R), en un estado activado (A) y en un estado inhibido (B), además se asume a la luz como única fuente de energía en un medio ideal (*i.e.* no existe inhibición por exceso o deficiencia en los nutrientes). Sean entonces los estados del sistema definidos como

$$\bar{x}(t) = \begin{bmatrix} A(t) \\ B(t) \\ R(t) \end{bmatrix}; \quad (2.4)$$

donde

$$A(t) + B(t) + R(t) = 1; \quad \forall t \quad (2.5)$$

es decir, la suma de las fracciones molares de células debe en todo momento ser igual a la totalidad de las células. Las ecuaciones en espacio estado de la PSF son

$$\frac{d}{dt}\bar{x}(t) = \begin{bmatrix} -\gamma & 0 & 0 \\ 0 & -\delta & 0 \\ \gamma & \delta & 0 \end{bmatrix} \bar{x}(t) + u_I \begin{bmatrix} -\beta & 0 & \alpha \\ \beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\alpha \end{bmatrix} \bar{x}(t); \quad (2.6)$$

Donde α , δ and γ son constantes de transferencia del modelo PSF, u_I es una entrada escalar que representa la intensidad luminosa que satisface la restricción

$$0 \leq u_I \leq u_I^+.$$

Muchos autores, *e.g.* Eilers and Peeters [21], Zonneveld [32], Han [33], restringen su análisis a la solución en estado estacionario, cuando una intensidad constante es mantenida el tiempo suficiente de tal forma que los estados del modelo PSF no cambien mas. Tomando en cuenta la restricción (2.5), para la solución en estado estacionario del modelo PSF, se obtiene

$$\begin{aligned} A_{ss} &= \frac{\delta \alpha u_I}{\alpha \beta u_I^2 + \delta (\alpha + \beta) u_I + \gamma \delta} \\ R_{ss} &= \frac{\delta (\gamma + \beta u_I)}{\alpha \beta u_I^2 + \delta (\alpha + \beta) u_I + \gamma \delta} \end{aligned} \quad (2.7)$$

En [21], la razón de producción de oxígeno fotosintético (razón específica de crecimiento $\mu_I(u_I)$) es proporcional (mediante una constante κ) a la transición entre el estado activado y el estado en reposo, *i.e.*

$$\mu_I(u_I) = \kappa \gamma A_{ss} = \frac{\kappa \delta \gamma \alpha u_I}{\alpha \beta u_I^2 + \delta (\alpha + \beta) u_I + \gamma \delta}$$

Ahora, si introducimos las variables

$$a = \frac{\beta}{\kappa \delta \gamma}, \quad b = \frac{(\alpha + \beta)}{\kappa \gamma \alpha}, \quad c = \frac{1}{\kappa \alpha}$$

donde claramente a , b , c son constantes no negativas, el resultado es

$$\mu_I(u_I) = \frac{u_I}{a u_I^2 + b u_I + c} \quad (2.8)$$

Esta ecuación para la razón de crecimiento propuesta por Peeters and Eilers, aunque también puede ser entendida como una ecuación de tipo Haldane, o en caso de que no se presente foto-inhibición (*i.e.* $\beta = 0$), (2.8) se simplifica a una ecuación del tipo Monod en la que $\mu_I(u_I)$ se vuelve una función acotada y estrictamente creciente; definiendo

$$\mu_{\text{máx},I} := \kappa\gamma, \quad K_I := \frac{\gamma}{\alpha}$$

se obtiene la bien conocida ecuación de Monod

$$\mu_I(u_I) = \frac{\mu_{\text{máx},I}u_I}{K_I + u_I} \quad (2.9)$$

2.3.3. $\mu_S(S(t))$ -Razón de Crecimiento en base al Sustrato

Aunque existe una gran variedad de modelos que tratan de caracterizar el crecimiento de las microalgas bajo distintas concentraciones de nutrientes [11], en el presente trabajo se tomara en cuenta únicamente el conocido como modelo de Monod, ya que en anteriores estudios [4], [6], [9]; se ha encontrado que el crecimiento de la microalga *Spirulina Máxima* (una de las microalgas estudiadas en el presente trabajo) se describe correctamente con dicho modelo, es decir

$$\mu_S(S(t)) = \frac{\mu_{\text{máx},S}S(t)}{k_S + S(t)} \quad (2.10)$$

Finalmente, bajo el enfoque propuesto en (2.3), si consideramos (2.10) y (2.9), podremos obtener

$$\mu(S(t), u_I) = \mu_I(u_I) \mu_S(S(t)) = \mu_{\text{máx}} \frac{S(t)}{k_S + S(t)} \frac{u_I}{k_I + u_I}$$

donde $\mu_{\text{máx}} := \mu_{\text{máx},S} \mu_{\text{máx},I}$.

2.4. Modelo del bioreactor en fase continua

El presente trabajo se dedicará exclusivamente a un bioreactor operando en fase continua; analicemos brevemente el balance de materia para el bioreactor, es decir, si consideramos en (2.2) que

$$\begin{aligned}
 Q &= Q_{out} = Q_{in} \\
 \implies \frac{d}{dt}V(t) &= 0 \\
 \implies V(t) &= V
 \end{aligned} \tag{2.11}$$

definiendo $\frac{Q}{V} = D$, y definiendo de nueva cuenta el control u_D como

$$u_D := D$$

se tiene

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt}X(t) &= \mu(S(t), u_I)X(t) - u_D X(t) \\
 \frac{d}{dt}S(t) &= -Y\mu(S(t), u_I)X(t) + u_D(S_{in} - S(t))
 \end{aligned} \tag{2.12}$$

con $\mu(S(t), u_I)$ definida como en (2.3).

Capítulo 3

Planteamiento del Problema

3.1. Intensidad Lumínica

La intensidad luminosa puede ser cuantificada como la cantidad de fotones por metro cuadrado por segundo que sirven como fuente de energía para el proceso fotosintético de plantas o ciertos microorganismos; aunque muchos autores marcan una diferencia muy explícita entre la luz incidente en la pared de un bioreactor y la luz promedio que asimilan las microalgas, en el presente trabajo no se hará ninguna distinción importante y se considerará únicamente el término u_I refiriéndose a la luz promedio, para conocer mas detalles, referirse al Apéndice A.

Se analizarán tres enfoques que se consideran principales, un sistema sin foto inhibición, un sistema con foto inhibición y el análisis del sistema reducido mediante perturbaciones singulares con foto inhibición.

3.1.1. Planteamiento General

Afirmación 1 *Para maximizar la biomasa considerando como única fuente de energía la intensidad luminosa, es necesario maximizar la razón de crecimiento $\mu_I(u_I)$; i.e.*

$$\boxed{\max_{u_I \in [0, u_I^+]} \{\mu_I(u_I)\} \implies \max \{x(t)\}} \quad (3.1)$$

Prueba 1 *Consideremos la concentración en el flujo de entrada S_{in} en (2.12) lo suficientemente grande para satisfacer la condición $S(t) \gg K_s$, esta consideración permite tener*

$$\mu_S(S(t)) = \frac{\mu_{\max, S} S(t)}{K_S + S(t)} \approx \mu_{\max, S}$$

y nos podemos enfocar en el modelo reducido del crecimiento.

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} X(t) &= \mu_I(u_I) X(t) - D(t) X(t); & X(t_0) &= X_0 > 0 \\ &= (\mu_I(u_I) - D(t)) X(t) \end{aligned} \quad (3.2)$$

aquí la dinámica del sustrato no es importante, pues solo es importante mantener $S(t) \gg K_s$ y esto se logrará invariablemente con S_{in} lo suficientemente grande. Claramente

$$\begin{aligned} X(t) &= X_0 \exp \left[\int (\mu_I(u_I) - D(t)) dt \right] \\ &= X_0 \exp \left[\int \mu_I(u_I) dt \right] \exp \left[- \int D(t) dt \right] \end{aligned}$$

Se busca el máximo de la biomasa sujeto a la restricción de la intensidad luminosa, esto es equivalente a encontrar

$$\max_{u_I \in [0, u_I^+]} \left\{ X_0 \exp \left[\int \mu_I(u_I) dt \right] \exp \left[- \int D(t) dt \right] \right\}$$

por lo tanto es suficiente

$$\therefore \max_{u_I \in [0, u_I^+]} \left\{ \exp \left[\int \mu_I(u_I) dt \right] \right\}$$

y por ser $\exp[\cdot]$ una función monótona estrictamente creciente tal que

$$\begin{aligned} \exp \left[\int \mu_I(u_I') dt \right] < \exp \left[\int \mu_I(u_I'') dt \right] &\iff \int \mu_I(u_I') dt < \int \mu_I(u_I'') dt \iff \\ &\iff \mu_I(u_I') < \mu_I(u_I'') \end{aligned}$$

se tiene finalmente

$$\max_{u_I \in [0, u_I^+]} \{ \mu_I(u_I) \} \implies \max \{ x(t) \} \blacksquare$$

3.1.2. Sin foto inhibición

Como se analizó en el capítulo anterior, para el problema sin fotoinhibición, el máximo de biomasa se encuentra entonces al maximizar la expresión (2.9), es decir

$$\mu_I(u_I) = \frac{\mu_{\max} u_I}{K_I + u_I}$$

Afirmación 2 Si $u_I \in [0, u_I^+]$ & $\mu_I(u_I)$ definida como en (2.9), se tiene que

$$\boxed{\max_{u_I \in [0, u_I^+]} \mu_I(u_I) = \mu_I(u_I^+)} \quad (3.3)$$

Prueba 2 Se tiene que

$$\frac{d}{du_I} \mu_I(u_I) = \frac{d}{du_I} \left(\frac{\mu_{\max} u_I}{K_I + u_I} \right) = \frac{\mu_{\max} K_I}{(K_I + u_I)^2} > 0 \quad \forall u_I \in [0, u_I^+]$$

por lo tanto $\mu_I(u_I) = \frac{\mu_{\max, I} u_I}{K_I + u_I}$ es una función estrictamente creciente, por lo tanto

$$\frac{\mu_{\max} u_I^+}{K_I + u_I^+} > \frac{\mu_{\max} u_I}{K_I + u_I} \quad \forall u_I \in [0, u_I^+]$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \quad \max_{u_I \in [0, u_I^+]} \left\{ \frac{\mu_{\max} u_I}{K_I + u_I} \right\} &= \frac{\mu_{\max} u_I^+}{K_I + u_I^+} \dots \\ \max_{u_I \in [0, u_I^+]} \mu_I(u_I) &= \mu_I(u_I^+) \blacksquare \end{aligned}$$

Por lo tanto para sistema sin fotoinhibición es suficiente aplicar $u_I = u_I^+$, para asegurar máxima producción.

3.1.3. Con foto inhibición

Considerando nuevamente (3.1), ahora con $\mu_I(u_I)$ acorde al sistema tipo Haldane en (2.8), se tiene

$$\mu_I(u_I) = \frac{u_I}{au_I^2 + bu_I + c}$$

donde se puede observar que a bajas intensidades, bI y aI^2 pueden ser despreciadas y así, la razón de producción incrementa casi de forma lineal con la intensidad luminosa, mientras que a altas intensidades aI^2 domina y entonces la razón de productividad es inversamente proporcional a la intensidad.

Afirmación 3 Si $u_I \in [0, u_I^+]$ & $\mu_I(u_I)$ definida como en (2.8), se tiene que

$$\boxed{\max_{u_I \in [0, u_I^+]} \mu_I(u_I) = \mu_I(u_I^{opt})} \quad (3.4)$$

donde

$$\boxed{u_I^{opt} = \min \left\{ \sqrt{\frac{c}{a}}, u_I^+ \right\}} \quad (3.5)$$

Prueba 3 Es claro que nos encontramos con un problema de optimización estático,

entonces

$$\frac{d}{du_I} \mu_I(u_I) = \frac{d}{du_I} \left(\frac{u_I}{au_I^2 + bu_I + c} \right) \quad (3.6)$$

$$\Rightarrow \frac{-au_I^2 + c}{(au_I^2 + bu_I + c)^2} \Big|_{u_I = \sqrt{\frac{c}{a}}} = 0 \quad (3.7)$$

y ahora es fácil verificar que

$$\frac{\partial^2}{\partial u_I^2} \left(\frac{u_I}{au_I^2 + bu_I + c} \right) \Big|_{u_I = \sqrt{\frac{c}{a}}} < 0 \quad (3.8)$$

se vuelve claro que si $\sqrt{\frac{c}{a}} < u_I^+$ (los sistemas físicos de iluminación se consideran siempre con esta capacidad), se satisface el control antes presentado; en el caso general, se tiene

$$u_I^{opt} = \min \left\{ \sqrt{\frac{c}{a}}, u_I^+ \right\} \quad (3.9)$$

y se satisfacen las condiciones para tener un máximo global. ■

Y maximizaremos la concentración de biomasa $X(t)$ para $\forall t$ aplicando este control óptimo. Estos casos hasta ahora son los mas sencillos, ahora presentaremos un enfoque distinto.

3.1.4. Análisis por perturbaciones singulares

En ésta sección se presenta un enfoque distinto en la optimización de la intensidad luminosa, dado que el crecimiento de las microalgas es afectado por dinámicas lentas y rápidas, mostraremos un control óptimo basado en el bien conocido modelo reducido. De la ecuación (2.4), el sistema reducido

$$x(t) = \begin{bmatrix} A(t) \\ B(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \end{bmatrix} \quad (3.10)$$

donde $A(t)$ y $B(t)$ siguen representando las fracciones molares de células en estado activado e inhibido respectivamente

$$\frac{d}{dt}x(t) = \begin{bmatrix} -\gamma & 0 \\ 0 & -\delta \end{bmatrix} x(t) + u_I \begin{bmatrix} -(\alpha + \beta) & -\alpha \\ \beta & 0 \end{bmatrix} x(t) + u_I \begin{bmatrix} \alpha \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3.11)$$

es obtenido después de substituir (2.5) en (2.6). Es conocido [21]-[34], que la razón de crecimiento específico, es proporcional al promedio de la integral del estado activado [15]; por lo tanto se hace claro que el índice de desempeño a ser maximizado es el promedio específico de crecimiento en un intervalo de tiempo fijo $[t_0, t_f] \subset \mathfrak{R}^+ \cup \{0\}$ con $t_0 < t_f$ definido como

$$\mu_I = \kappa\gamma (t_f - t_0)^{-1} \int_{t_0}^{t_f} x_1(t) dt \quad (3.12)$$

Aquí κ es un parámetro adimensional del modelo PSF. Con fines comparativos, definamos ahora el control normalizado

$$u_I^* := \frac{u_I}{u_{I,ss}^{opt}} \quad (3.13)$$

donde $u_{I,ss}^{opt}$ denota el control obtenido en (3.9) y definamos como nuevos parámetros q_i ; $i = 1, \dots, 5$

$$\begin{aligned} q_1 &:= \sqrt{\frac{\gamma\delta}{\alpha\beta}}, & q_2 &:= \frac{1}{\alpha + \beta} \sqrt{\frac{\alpha\beta\gamma}{\delta}}; \\ q_3 &:= \kappa\gamma \sqrt{\frac{\alpha\delta}{\beta\gamma}}, & q_4 &:= \alpha q_1, & q_5 &:= \beta/\alpha \end{aligned}$$

El modelo reparametrizado queda como

$$\frac{1}{q_4} \frac{d}{dt} x(t) = - \begin{bmatrix} q_2(1+q_5) & 0 \\ 0 & \frac{q_5}{q_2(1+q_5)} \end{bmatrix} x(t) +$$

$$-u_I^* \begin{bmatrix} (1+q_5) & 1 \\ -q_5 & 0 \end{bmatrix} x(t) + u_I^* \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3.14)$$

$$\mu_I = q_2 q_3 (1+q_5) (t_f - t_0)^{-1} \int_{t_0}^{t_f} x_1(t) dt \quad (3.15)$$

La razón para introducir esta reparametrización es para que el papel de cada nuevo parámetro sea mas claramente visible, las unidades de q_1 corresponde a la intensidad luminosa ($\mu E m^{-2} s^{-1}$) y coinciden con el control óptimo en el estado estacionario de la PSF; q_2, q_5 son adimensionales; q_3, q_4 están en s^{-1} . Más aún, q_4 influye sobre la dinámica como una constante de escalamiento, mientras que q_5 es generalmente un parámetro muy pequeño ($q_5 \approx 10^{-4}$). Finalmente, para separar la dinámica más rápida de la mas lenta, debe ser notado que los coeficientes del lado derecho de la segunda fila en (3.14) son mucho más pequeños que aquellos de la primera fila por la presencia del término q_5 . Después de reemplazar la parte izquierda de la ecuación más rápida con cero, llegamos al siguiente modelo reducido

$$x_1(t) = \frac{u_I^* (1 - x_2(t))}{(u_I^* + q_2) (1 + q_5)} \quad (3.16)$$

$$\frac{d}{dt} x_2(t) = -\frac{q_4 q_5 x_2(t)}{q_2 (1 + q_5)} + \frac{q_4 q_5 (1 - x_2(t)) u_I^{*2}}{(u_I^* + q_2) (1 + q_5)} \quad (3.17)$$

En [1] se muestra que tan bien es la aproximación del modelo reducido al modelo no reducido. Considere además

$$M := q_4 q_5 (1 + q_5)^{-1}, \quad N := q_2$$

Podemos definir claramente el problema de control óptimo. Sea entonces **el costo de desempeño a minimizar**

$$\boxed{J = -\int_0^{t_f} (1 - x_2(t)) g(u_I) dt \rightarrow \text{mín} \quad u_I \in [0, u_I^+]} \quad (3.18)$$

Sujeto a **la dinámica del sistema** no lineal

$$\boxed{\frac{d}{dt} x_2(t) = -P x_2(t) + (1 - x_2(t)) h(u_I); \quad x_2 \in [0, 1]} \quad (3.19)$$

donde se tiene

$$g(u_I) = \frac{u_I}{u_I + N} \geq 0; \quad h(u_I) = \frac{u_I^2}{u_I + N} M \geq 0; \quad P = \frac{M}{N} > 0; \quad T \text{ fija}$$

Producto de substituir $x_1(t)$ de (3.16) en la ecuación (3.15), en donde por simplicidad se substituyó $u_I^*(t) = u_I(t)$. Es fácil verificar

$$\begin{aligned} x_2(t) = 0 &\implies \frac{d}{dt} x_2(t) \geq 0 \\ x_2(t) = 1 &\implies \frac{d}{dt} x_2(t) \leq 0 \end{aligned}$$

por lo tanto (3.19) siempre se satisface.

3.2. Razón de Dilución

En la operación de un bioreactor continuo, el aspecto más importante es optimizar la producción de algún metabolito o del propio microorganismo, en los sistemas continuos, esta producción es la cantidad del metabolito o biomasa en el flujo de salida.

3.2.1. Planteamiento General

La producción de un bioreactor operando en modo continuo, esta definida como

$$P(X(t), u_D) = X(t) u_D; \quad u_D \in [0, u_D^+] \quad (3.20)$$

En donde el producto $X(t) u_D$ está dado en $[g/h]$, y es la cantidad de gramos por unidad de tiempo que podemos extraer de un bioreactor continuo en su modo normal de operación. Considere el sistema (2.12), en donde $\mu_I(u_I)$ esta propuesto como una función de saturación tipo Monod, ya conocemos que la intensidad luminosa óptima esta en la frontera (*i.e.* $u_I = u_I^+$); y al ser esta una entrada constante, en la dinámica del sistema solo aparecerá el crecimiento en función del sustrato; definiendo

$$y(t) := \begin{bmatrix} X(t) \\ S(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1(t) \\ y_2(t) \end{bmatrix}$$

se tiene

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} y_1(t) &= \mu_S(y_2(t)) y_1(t) - y_1(t) u_D & y_1(0) &= y_{1,0}; \quad y_2(0) = y_{2,0}; \\ \frac{d}{dt} y_2(t) &= -Y \mu_S(y_2(t)) y_1 + (S_{in} - y_2(t)) u_D \end{aligned} \quad (3.21)$$

donde

$$\mu_S(y_2(t)) = \frac{\mu_{\text{máx}} y_2(t)}{K_s + y_2(t)}$$

De la ecuación (3.21), es claro ver la dinámica entre biomasa, sustrato y razón de dilución esta íntimamente relacionada; consideremos como primer enfoque un control constante y busquemos la optimización estática del problema. Sea entonces:

$$u_D = u_{Dcte}$$

Afirmación 4 *Al aplicar un control constante u_{Dcte} , el sistema alcanza un punto de equilibrio asintóticamente estable.*

Prueba 4 *En el punto de equilibrio se tiene*

$$\frac{d}{dt}y_1(t) = \frac{d}{dt}y_2(t) = 0 \implies \begin{bmatrix} y_1(t) \\ y_2(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_{1ss} \\ y_{2ss} \end{bmatrix}$$

sustituyendo estos valores en (3.21), obtenemos

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\mu_{\max}y_{2ss}}{K_s + y_{2ss}}y_{1ss} - u_{Dcte}y_{1ss} \\ 0 &= -Y \frac{\mu_{\max}y_{2ss}}{K_s + y_{2ss}}y_{1ss} + u_{Dcte}(S_{in} - y_{2ss}) \end{aligned} \quad (3.22)$$

y los valores en estado estacionario están definidos como

$$\begin{aligned} y_{1ss} &= Y^{-1} \left(S_{in} - \frac{K_s u_{Dcte}}{\mu_{\max} - u_{Dcte}} \right) \\ y_{2ss} &= \frac{K_s u_{Dcte}}{\mu_{\max} - u_{Dcte}} \end{aligned} \quad (3.23)$$

Aquí podemos establecer una primera restricción en cuanto al flujo óptimo, dado que y_{1ss} representa la absorbancia (magnitud física), necesariamente $y_{1ss} \geq 0$, y se debe respetar entonces

$$0 \leq u_{Dcte} \leq \frac{S_{in}\mu_{\max}}{(K_s + S_{in})} \quad (3.24)$$

en caso contrario, se entrará en una condición en la que después de un tiempo suficiente habrán sido removidas todas las células de microalgas, es conocida esta situación como condición de lavado del bioreactor; mas aún, en la práctica se acostumbra tener $S_{in} \gg K_s$ y la restricción anterior se transforma solo a

$$0 \leq u_{Dcte} < \mu_{\max} \quad (3.25)$$

Linealizando alrededor de $(y_{1_{ss}}, y_{2_{ss}})$, se obtiene

$$\frac{d}{dt}y(t) = \begin{bmatrix} 0 & \frac{(\mu_{\text{máx}} - u_{Dcte})^2}{K_s \mu_{\text{máx}}} y_{1_{ss}} \\ -Y u_{Dcte} & -Y \frac{(\mu_{\text{máx}} - u_{Dcte})^2}{K_s \mu_{\text{máx}}} y_{1_{ss}} - u_{Dcte} \end{bmatrix} y(t) \quad (3.26)$$

Es fácil verificar que los valores característicos de este sistema son reales negativos por lo tanto tenemos que el equilibrio $(y_{1_{ss}}, y_{2_{ss}})$ es asintóticamente estable, i.e. perturbaciones pequeñas producirán trayectorias de estado que tenderán asintóticamente al equilibrio. ■

Con esto (3.20), en el estado estacionario será

$$\begin{aligned} P(y_{1_{ss}}(u_{Dcte}), u_{Dcte}) &= P(u_{Dcte}) \\ &= Y^{-1} \left(S_{in} - \frac{K_s u_{Dcte}}{\mu_{\text{máx}} - u_{Dcte}} \right) u_{Dcte} \end{aligned} \quad (3.27)$$

Afirmación 5 Si la productividad de un bioreactor $P(u_{Dcte})$ esta definida como (3.27), se tiene que

$$\boxed{\max_{u_D \in [0, u_D^+]} \{P(u_{Dcte})\} = P(u_{Dcte}^{opt})} \quad (3.28)$$

donde

$$\boxed{u_{Dcte}^{opt} = \min \left\{ \mu_{\text{máx}} \left(1 - \sqrt{\frac{K_s}{K_s + S_{in}}} \right), u_D^+ \right\}} \quad (3.29)$$

Prueba 5 Este es un problema de optimización estático, la función $P(u_{Dcte})$ es concava (Ver Figura 3.1), por lo tanto

$$\begin{aligned} \frac{d}{du_{Dcte}} P(u_{Dcte}) &= \frac{d}{du_{Dcte}} Y^{-1} \left(S_{in} - \frac{K_s u_{Dcte}}{\mu_{\text{máx}} - u_{Dcte}} \right) u_{Dcte} \\ &= Y^{-1} \left(S_{in} - \frac{2K_s u_{Dcte} \mu_{\text{máx}} - K_s u_{Dcte}^2}{(\mu_{\text{máx}} - u_{Dcte})^2} \right) \therefore \\ &= \frac{d}{du_{Dcte}} P(u_{Dcte}) \Big|_{u_{Dcte} = \mu_{\text{máx}} \left(1 - \sqrt{\frac{K_s}{K_s + S_{in}}} \right)} = 0 \end{aligned}$$

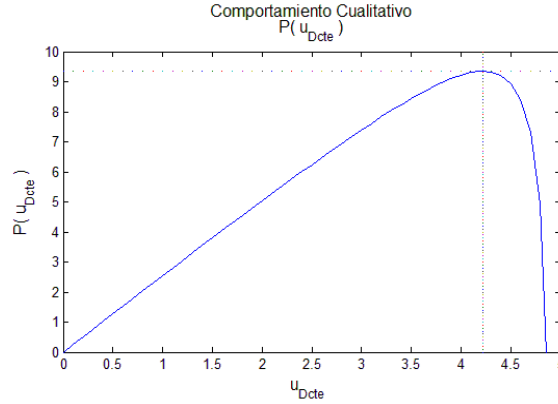


Figura 3.1: Comportamiento cualitativo de $P(u_{Dcte})$

y ahora, sin olvidar la restricción $D_{cte} < \mu_{\text{máx}}$, es inmediato verificar

$$\frac{d^2}{du_{Dcte}^2} P(D_{cte}) = -2K_s \frac{(\mu_{\text{máx}} - u_{Dcte})^3 + u_{Dcte} (2\mu_{\text{máx}} - u_{Dcte}) (\mu_{\text{máx}} - u_{Dcte})}{(\mu_{\text{máx}} - u_{Dcte})^4} < 0$$

lo que garantiza un máximo; si $u_D^{\text{máx}} < u_D^+$ se satisface el control antes presentado; en caso contrario, el control óptimo se encuentra en la frontera, esto puede ser escrito como

$$u_{Dcte}^{\text{opt}} = \min \left\{ \mu_{\text{máx}} \left(1 - \sqrt{\frac{K_s}{K_s + S_{in}}} \right), u_D^+ \right\} \blacksquare$$

Este resultado es ampliamente utilizado pero tiene como principal desventaja que no se considera en ningún momento la dinámica del sistema antes de alcanzar el estado estacionario, lo que nos motiva a encontrar un control óptimo sobre todo el tiempo de ejecución del experimento.

3.2.2. Análisis del Flujo Óptimo con Dinámica Completa

Se propone entonces el siguiente funcional de costo a maximizar definido como la integral de la biomasa durante el tiempo de experimentación. Es decir, maximizar

$$J(u) = \int_0^{t_f} y_1(t) u_D dt$$

o bien, sea entonces **el costo de desempeño a minimizar**

$$\boxed{J = -\int_0^{t_f} y_1(t) u_D dt \rightarrow \text{mín} \quad u_D \in [0, u_D^+];} \quad (3.30)$$

Sujeto a **la dinámica del sistema** no lineal

$$\boxed{\frac{d}{dt}y(t) = f(y(t)) + g(y(t))u_D; \quad y(0) = y_0} \quad (3.31)$$

donde

$$\begin{aligned} f(y(t)) &= \begin{bmatrix} \mu_S(y_2(t)) y_1(t) \\ -Y \mu_S(y_2(t)) y_1(t) \end{bmatrix} \\ g(y(t)) &= \begin{bmatrix} -y_1(t) \\ S_{in} - y_2(t) \end{bmatrix} \\ \mu_S(y_2(t)) &= \frac{\mu_{\text{máx}} y_2(t)}{K_s + y_2(t)} > 0; \quad t_f \text{ fija} \end{aligned} \quad (3.32)$$

Capítulo 4

Conceptos Básicos de Optimalidad

En este capítulo se presentan algunos conceptos fundamentales de control óptimo para la resolución del problema presentado.

4.1. Programación Dinámica y la ecuación Hamilton-Jacobi-Bellman (HJB)

En el método de programación dinámica, una política óptima es encontrada por el denominado principio de optimalidad de Bellman, el cual brevemente se explicará sin la intención de dar mas detalles de los únicamente requeridos.

4.1.1. Principio de Optimalidad de Bellman (Any tail of an optimal trajectory is optimal too).

El Principio de Optimalidad es un concepto de naturaleza bastante simple e intuitiva. Suponga que la ruta óptima para un proceso multietapa es mostrado en

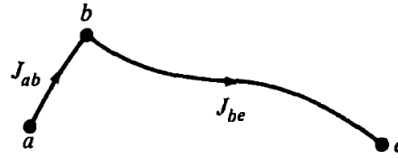


Figura 4.1: Trayectoria óptima a-e

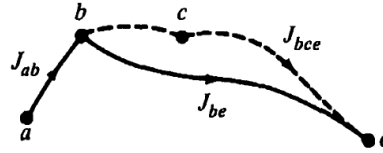


Figura 4.2: Dos posibles trayectorias óptimas b-e

(Fig. 4.1). Suponga que la decisión tomada en a resulta en el segmento $a - b$ con costo J_{ab} ; la decisión tomada en b resulta en el segmento $b - e$ con costo J_{be} . Sea entonces el costo mínimo $J_{ae}^* = J_{ab} + J_{be}$.

Ahora bien de (Fig. 4.2), suponga que la ruta $b - c - e$ es la trayectoria óptima del punto b al e , entonces

$$J_{bce} < J_{be} \quad \& \quad J_{ab} + J_{bce} < J_{ab} + J_{be} = J_{ae}^*$$

Lo que contradice la idea original que J_{ae}^* es la ruta óptima, lo que nos conduce a lo que Bellman llamó el principio de optimalidad:

Una política óptima tiene la propiedad que cualquiera sean sus estados o decisiones iniciales, las subsecuentes decisiones deben constituir una política óptima sin importar el estado resultante de la primera decisión.

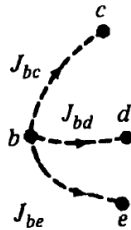


Figura 4.3: Trayectorias y costos admisibles desde b

4.1.2. Aplicación del principio de optimalidad a la toma de decisiones

Considere un proceso cuya estado actual es b . Las trayectorias admisibles desde b son mostradas en la Figura 4.3. Las rutas óptimas desde c , d y e al punto terminal f se muestran en la Figura 4.4.

El principio de optimalidad implica que si el segmento inicial $b - c$ es la ruta óptima, entonces $c - f$ es el segmento terminal de esta trayectoria óptima; el mismo razonamiento aplica para las otras posibles trayectorias iniciales (ver Figura 4.5). Entonces, la trayectoria óptima que empieza en b es encontrada al comparar los costos de siguientes trayectorias

$$C_{bcf}^* = J_{bc} + J_{cf}^*$$

$$C_{bdf}^* = J_{bd} + J_{df}^*$$

$$C_{bef}^* = J_{be} + J_{ef}^*$$

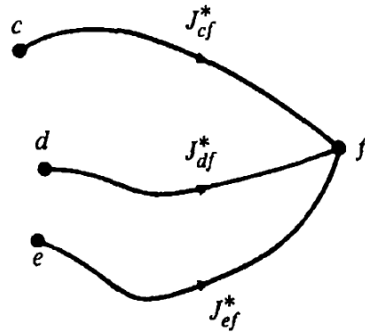


Figura 4.4: Trayectorias óptimas desde c, d y e hasta el punto terminal f

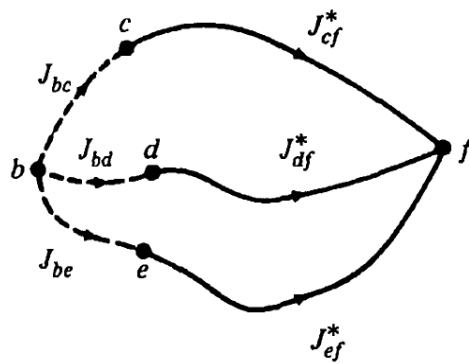


Figura 4.5: Candidatos únicos para trayectoria óptima desde b hacia f

El mínimo de estos costos debe ser asociado con la decisión óptima en el punto b .

4.2. Ecuación HJB

Hasta ahora se ha planteado solo el principio de optimalidad, así como una idea intuitiva para su aplicación. Consideremos ahora el sistema

$$\begin{aligned}\dot{x}(t) &= f(x(t), u(t)); & t \in [s, t_f] \\ x(s) &= y\end{aligned}\tag{4.1}$$

donde $x \in \mathbb{R}^n$ es el estado, $u \in \mathbb{R}^m$ es el control, $t \in \mathbb{R}_+$. Considere además el funcional de costo en la forma de Lagrange

$$J(s, y, u(\cdot)) := \int_{t=s}^{t_f} L(x(t), u(t)) dt\tag{4.2}$$

se hace claro que $u(\cdot) \in U_{admis}[s, T]$. La función Valor (**Value Function**) definida para todo $(s, y) \in [0, T) \times \mathbb{R}^n$ como

$$\begin{aligned}V(s, y) &: = \inf_{u \in U_{admis}[s, t]} J(s, y, u(\cdot)) \\ V(T, y) &= 0\end{aligned}\tag{4.3}$$

El principio de optimalidad de Bellman con un mayor formalismo debe cumplir para todo $(s, x) \in [t_0, t_f) \times \mathfrak{R}^n$ y todo $\delta s \in (0, t_f - s]$, la función de valor V definida en (4.3) se debe satisfacer la relación

$$V(s, y) = \inf_{u \in U_{admis}[s, t]} \left\{ \int_{t=s}^{s+\delta t} L(x(t), u(t)) dt + V(s + \delta s, x(s + \delta s)) \right\}\tag{4.4}$$

Este argumento nos dice, que para buscar el control óptimo, podemos buscar en un pequeño intervalo un control que minimice el costo en este intervalo mas el subsecuente costo óptimo de operación. Se tiene que

$$x(t + \delta t) = x(t) + f(x, u(t)) \delta t + o(\delta t) \quad (4.5)$$

$$\begin{aligned} V(t + \delta t, x(t + \delta t)) &= V(t, x) + V_t(t, x) \delta t + \\ &+ \langle V_x(t, x), f(x, u(t)) \rangle \delta t + o(\delta t) \end{aligned} \quad (4.6)$$

las expansiones de Taylor de primer orden, donde $V_x = \frac{\partial V}{\partial x}$ y $V_t = \frac{\partial V}{\partial t}$, y considerando además

$$\int_t^{t+\delta t} L(x(\tau), u(\tau)) d\tau = L(x, u) \delta t + o(\delta t) \quad (4.7)$$

Se tiene que al sustituir (4.5), (4.6) y (4.7) en (4.4) y evaluando en el límite $\delta t \rightarrow 0$ (en donde se tiene $\lim_{\delta t \rightarrow 0} o(\delta t) = 0$).

Se concluye que la llamada **ecuación de Hamilton-Jacobi-Bellman (HJB)**

$$\begin{aligned} -V_t(t, x) &= \inf_{u \in U_{admis}} \{L(x, u) + \langle V_x(t, x), f(x, u) \rangle\} \\ (t, x) &\in [0, T] \times \mathbb{R}^n, \quad V(T, x) = 0 \end{aligned} \quad (4.8)$$

se debe cumplir para todo $t \in [t_0, t_f]$ y para todo $x \in \mathfrak{R}^n$, junto con la condición de frontera.

Búsqueda de función de $V(t, x)$ mediante la discretización del sistema

Se escogió una búsqueda directa sobre el sistema discretizado siguiendo el principio de optimalidad de Bellman. Consideremos nuevamente

$$\begin{aligned}\dot{x}(t) &= f(x(t), u(t)); & t \in [0, t_f] \\ x(0) &= x_0\end{aligned}\tag{4.9}$$

la aproximación mediante el método de Euler

$$\begin{aligned}\frac{x(t + \Delta t) - x(t)}{\Delta t} &= f(x(t), u(t)) \\ x(t + \Delta t) &= x(t) + \Delta t f(x(t), u(t))\end{aligned}\tag{4.10}$$

Donde Δt es lo suficientemente pequeña para aproximar el sistema a una serie de funciones piezo constantes que cambian solo en instantes de tiempo $t = 0, \Delta t, \dots, (T - 1) \Delta t$; así, para $t = k\Delta t$. Esto resulta en

$$x((k + 1) \Delta t) = x(k\Delta t) + \Delta t f(x(k\Delta t), u(k\Delta t))$$

donde $x(k\Delta t)$ es el k -ésimo nivel de la variable de estado x y será expresada como $x[k]$, y la ecuación anterior puede ser re-escrita de la forma

$$x[k + 1] = x[k] + \Delta t f(x[k], u[k])$$

donde $u[k]$ denota el control aplicado en el k -ésimo momento. Redefiniendo esta ecuación, se tiene

$$x[k + 1] \triangleq f_d(x[k], u[k])$$

en donde, por propósitos de notación, será expresado, $x[k] = x_k$ e $u[k] = u_k$. Obteniendo finalmente

$$x_{k+1} = f_d(x_k, u_k) \quad (4.11)$$

Operando el índice de desempeño de una manera similar, se obtiene

$$J(0, x_0, u(\cdot)) = \int_0^{\Delta t} L(x_0, u_0) dt + \int_{\Delta t}^{2\Delta t} L(x_{\Delta t}, u_{\Delta t}) dt + \cdots + \int_{(T-1)\Delta t}^{t_f=T\Delta t} L(x_{(N-1)\Delta t}, u_{(N-1)\Delta t}) dt \quad (4.12)$$

y para Δt suficientemente pequeña se tiene

$$J(0, x_0, u(\cdot)) \approx \Delta t \sum_{k=0}^{T-1} L(x_k, u_k)$$

por lo que podemos establecer

$$J(0, x_0, u(\cdot)) = \sum_{k=0}^{T-1} L_d(x_k, u_k) \quad (4.13)$$

En donde claramente $L_d(x_k, u_k) := \Delta t L(x_k, u_k)$. Hasta este punto se ha establecido que la transición de algún estado x_k a x_{k+1} correspondiente a alguna señal de control u_k tiene un costo asignado. Para cada trayectoria posible, el costo total acumulado al tiempo final es la suma de los costos de transición en los brincos de tiempo $0, \dots, T-1$. Se tiene que el costo mínimo

$$V(m, x_m) = \inf_{u \in U_{admis}} J(m, x_m, u(\cdot)) = \inf_{u \in U_{admis}} \left\{ \sum_{k=m}^{T-1} L_d(x_k, u_k) \right\}$$

$$V(m, x_m) = \inf_{u \in U_{admis}} \left\{ L_d(x_m, u_m) + \sum_{k=m+1}^{T-1} L_d(x_k, u_k) \right\}$$

Y siguiendo el principio de optimalidad de Bellman, se tiene

$$\begin{aligned}
V(m, x_m) &= \inf_{u \in U_{admis}} \{L_d(x_m, u_m) + V(m+1, x_{m+1})\} \\
&= \inf_{u \in U_{admis}} \{L_d(x_m, u_m) + V(m+1, f_d(x_m, u_m))\} \quad (4.14)
\end{aligned}$$

despues de considerar (4.11); además se debe cumplir $V(T, x_T) = 0$, pudiendo reconstruir de forma recursiva hacia atrás $V_{T-1}, V_{T-2}, \dots, V_m, \dots, V_1, V_0$. Dadas las limitaciones físicas de los sistemas estudiados en el presente trabajo, se tienen restricciones físicas conocidas sobre los estados y el control, esto es

$$x \in [x_{\min}, x_{\max}]; \quad u \in [u_{\min}, u_{\max}];$$

El algoritmo que se empleará y se detalla más adelante, requiere la discretización del estado x y el control u ; defina los conjuntos

$$\begin{aligned}
\chi_x &: = \{x^{(1)}, x^{(2)}, \dots, x^{(p)}\} & x^{(i)} \in x; \quad i = 1, \dots, p \\
\chi_u &: = \{u^{(1)}, u^{(2)}, \dots, u^{(q)}\} & u^{(j)} \in u; \quad j = 1, \dots, q
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
x_{\min} &= x^{(1)} < x^{(2)} < \dots < x^{(p)} = x_{\max}; & x^{(i+1)} - x^{(i)} &= \Delta x \\
u_{\min} &= u^{(1)} < u^{(2)} < \dots < u^{(q)} = u_{\max}; & u^{(j+1)} - u^{(j)} &= \Delta u
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
card(\chi_x) &= p = \frac{x_{\max} - x_{\min}}{\Delta x} + 1 \\
card(\chi_u) &= q = \frac{u_{\max} - u_{\min}}{\Delta u} + 1 \quad (4.15)
\end{aligned}$$

Capítulo 5

Control óptimo mediante Ecuación HJB

En el presente capítulo se muestra la solución de los problemas planteados en el Capítulo 2.

5.1. Intensidad Luminosa

Como se ha planteado, para alcanzar la mayor cantidad de microorganismo usando como único control la intensidad lumínica, se tiene que minimizar el funcional

$$J = - \int_0^{t_f} (1 - x_2(t)) g(u_I) dt \rightarrow \text{mín} \quad u_I \in [0, u_I^+] \quad (5.1)$$

sujeto a la dinámica

$$\frac{d}{dt} x_2(t) = -P x_2(t) + (1 - x_2(t)) h(u_I); \quad x_2 \in [0, 1] \quad (5.2)$$

donde

$$g(u_I) = \frac{u_I}{u_I + N} \geq 0; \quad h(u_I) = \frac{u_I^2}{u_I + N} M \geq 0; \quad P = \frac{M}{N} > 0;$$

5.1.1. Sistema Hamiltoniano

En el Principio de Maximización de Potryagin (PMP) [40], el sistema Hamiltoniano H y el sistema adjunto para (5.1), (5.2) es

$$H(\psi_1(t), x_2(t), u_I) = (1 - x_2(t))g(u_I) + \psi_1(t)(-Px_2 + (1 - x_2(t))h(u_I)) \quad (5.3)$$

$$\frac{d}{dt}\psi_1(t) = g(u_I) + \psi_1(t)(h(u_I) + P); \quad \psi_1(t_f) = 0 \quad (5.4)$$

Si $u^{opt}(t)$, $t \in [0, t_f]$, soluciona el problema (5.1), (5.2), entonces el PMP sostiene que

$$H(\psi_1(t), x_2^{opt}(t), u_I^{opt}(t)) = \max_{u_I \in [0, u_I^+]} H(\psi_1(t), x_2(t), u_I) \equiv \text{const}$$

para algún $\psi \neq 0$. Esta última condición puede ser reescrita como

$$\begin{aligned} \max_{u_I \in [0, u_I^+]} H(\psi_1(t), x_2(t), u_I) &\implies \max_{u_I \in [0, u_I^+]} \{(1 - x_2(t)) [g(u_I) + \psi_1(t)h(u_I)]\} \\ &\implies \max_{u_I \in [0, u_I^+]} \left\{ (1 - x_2(t)) \left(\frac{M\psi_1(t)u_I^2 + u_I}{u_I + N} \right) \right\} \end{aligned}$$

Veamos algunas propiedades del sistema antes de buscar el control óptimo.

Afirmación 6 *Sea la variable adjunta $\psi_1(t)$ sujeta a la dinámica (5.4), se tiene entonces $\psi_1(t) \leq 0 \forall t < t_f$.*

Prueba 6 Suponga que existe $\psi_1(t') > 0$ para alguna $t' < t_f$. Entonces por (5.4), $\frac{d}{dt}\psi_1(t) > 0 \forall t \geq t'$; lo que contradice la condición final $\psi_1(t_f) = 0$ ■

Afirmación 7 Se tiene que $\psi_1(t) = 0, \forall t \in [t', t_f] \iff u(t) \equiv 0, \forall t \in [t', t_f]$.

Prueba 7 Se sigue inmediatamente de (5.4).

Ahora se puede probar el control óptimo:

Afirmación 8 El control óptimo que soluciona el problema (5.1), (5.2); de acuerdo al sistema (5.3), (5.4) es

$$u_I^{opt}(t) = \min \left\{ U, -N + \sqrt{N^2 - \frac{N}{M\psi_1(t)}} \right\} \quad (5.5)$$

Prueba 8 Sea

$$\phi(u) := (1 - x_2) \left(\frac{M\psi_1 u_I^2 + u_I}{u_I + N} \right)$$

se tiene que

$$\frac{\partial}{\partial u} \phi(u) := \frac{1 - x_2(t)}{(u_I + N)^2} (M\psi_1(t) u_I^2 + 2MN\psi_1(t) u_I + N) \quad (5.6)$$

La condición $x_2 \in [0, 1]$ y $\psi_1(t) < 0$, permite que

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial u} \phi(u) &> 0; & u \in [0, \bar{u}) \\ \frac{\partial}{\partial u} \phi(u) &= 0; & u = \bar{u} \\ \frac{\partial}{\partial u} \phi(u) &< 0; & u \in (\bar{u}, \infty] \end{aligned}$$

Note que $\psi_1(t) = 0 \implies \frac{\partial}{\partial u} \phi(u) > 0$, lo que elimina la posibilidad de un máximo en esta zona. Se tiene entonces que resolver $\frac{\partial}{\partial u} \phi(\bar{u}) = 0$, obteniendo finalmente

$$u_I^{opt}(t) = \min \left\{ U, -N + \sqrt{N^2 - \frac{N}{M\psi_1(t)}} \right\} \blacksquare$$

Esta ecuación no tiene solución analítica y debe ser resuelta solo por métodos numéricos.

5.1.2. Ecuación de Hamilton-Jacobi-Bellman

Como otro poderoso acercamiento para resolver problemas de control óptimo. Provee condiciones suficientes para probar si un control es óptimo o no. El problema de optimización se torna a encontrar una función valor $V(t, x_2)$ tal que

$$-V_t(t, x_2) = \inf_{u_I \in u_I^{adm}} \{(x_2 - 1)g(u_I) + \langle V_x(t, x_2), (P - h(u_I))x_2(t) + h(u_I) \rangle\} \quad (5.7)$$

se mantenga para todo $t \in [0, t_f)$ y todo $x_2 \in \mathbb{R}$.

Es muy complicado encontrar de manera analítica la función valor $V(t, x_2)$; debiéndose encontrar por métodos numéricos.

Búsqueda de función de Valor $V(t, x_2)$

Para encontrar la función valor $V(t, x_2)$, se escogió una búsqueda directa sobre la discretización del sistema siguiendo el principio de optimalidad de Bellman mencionados en el capítulo anterior. Sea entonces el sistema (3.19) discretizado mediante Euler, resultando de la forma

$$\begin{aligned} x_{k+1} &= f_d(x_k, u_{I_k}); \quad x_k \in [0, 1]; \quad k = 1, \dots, T-1; \\ &= \left[x_{2k} + \Delta t \left(-\frac{M}{N}x_{2k} + (1 - x_{2k}) \frac{u_{I_k}^2 M}{u_{I_k} + N} \right) \right] \end{aligned} \quad (5.8)$$

y el funcional discretizado de costo

$$\begin{aligned} J(0, x_0, u_I(\cdot)) &= \sum_{k=0}^{T-1} L_d(x_k, u_{I_k}) \\ &= -\sum_{k=0}^{T-1} \Delta t (1 - x_{2k}) \frac{u_{I_k}}{u_{I_k} + N} \end{aligned} \quad (5.9)$$

sobre los cuales se aplicará el algoritmo numérico detallado en el capítulo anterior.

5.1.3. Caso de estudio

Como ejemplo, consideremos los valores del modelo PSF reparametrizado calculados en [19] para la microalga *Porphyridium sp.*

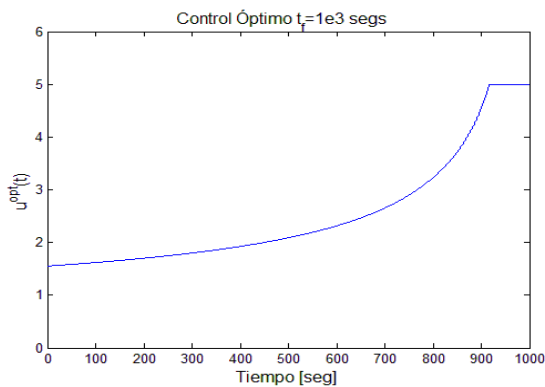
$$\begin{aligned} q_1 &= 250.106 \mu E m^{-2} s^{-1}; & q_2 &= 0.301591; & q_3 &= 0.000176498 s^{-1}; \\ q_4 &= 0.483955 s^{-1}; & q_5 &= 0.000298966; \end{aligned}$$

Lo que resulta en valores de $M = 1.4464 e - 004$; $N = 0.3016$;

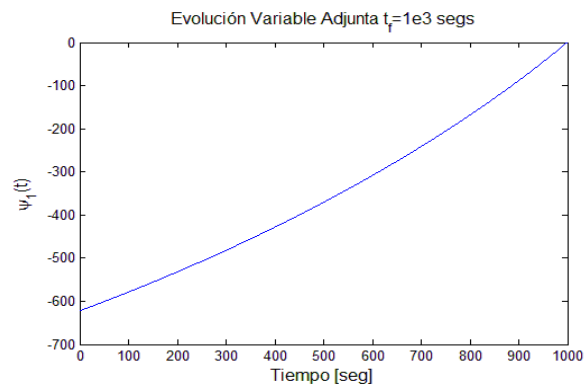
Resultados: Hamiltoniano

Se presentan el control óptimo resultado de resolver los sistemas (5.4), (5.5); donde $\psi_1(t)$ no depende de las condiciones iniciales del experimento; por lo tanto, el control óptimo no depende de las condiciones iniciales del experimento, solamente de la duración del mismo.

Para $t_f = 1,000 \text{ seg}$

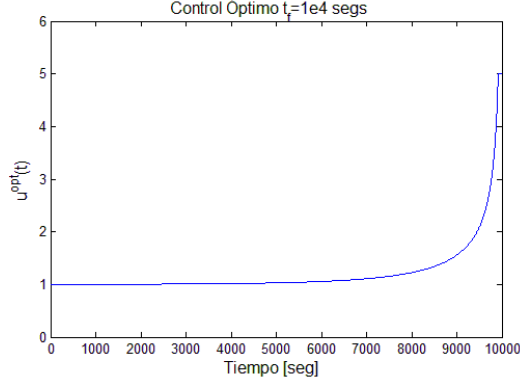


Control Óptimo para $t_f = 1e3$ mediante
Principio del Máximo

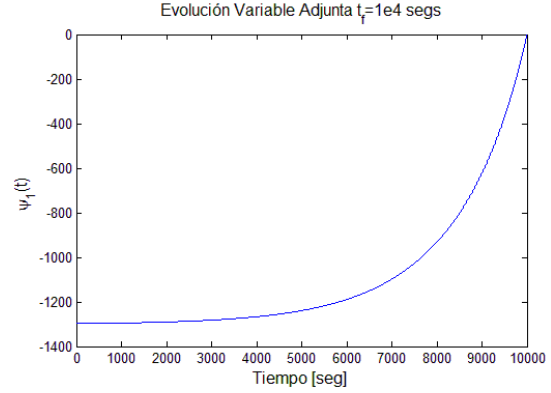


Variable Adjunta para $t_f = 1e3$ mediante
Principio del Máximo

Para $t_f = 10,000 \text{ seg}$



Control Óptimo para $t_f = 1e4$
mediante Principio del Máximo



Variable Adjunta para $t_f = 1e4$
mediante Principio del Máximo

Resultados: Ecuación HJB

Considere el sistema (5.8) y funcional de costo (5.9), con la siguiente discretización de estados y controles admisibles considerados en el sistema de ecuaciones (4.15),

$$x_2 \in [0, 1]; \quad u_I \in [0, 5]; \quad \Delta t = 0.5;$$

$$\chi_x = \{0, 0.05, \dots, 1\} \quad \Delta x = 0.05$$

$$\chi_u = \{0, 0.1, \dots, 5\} \quad \Delta u = 0.1$$

$$\text{card}(\chi_x) = \frac{1 - 0}{0.05} + 1 = 21$$

$$\text{card}(\chi_u) = \frac{5 - 0}{0.1} + 1 = 51$$

Para $t_f = 1,000 \text{ seg}$ (i.e. $T = 2,000$ pasos de simulación)

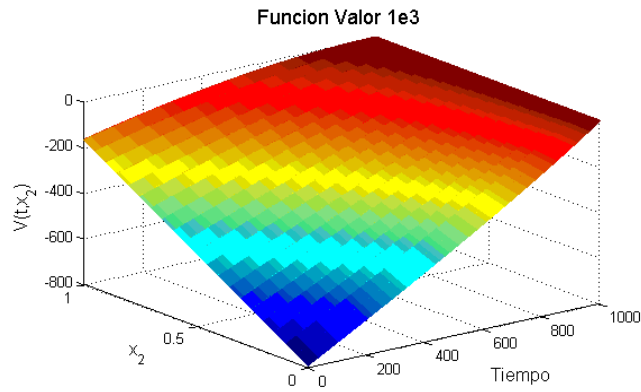


Figura 5.1: Función Valor $t_f = 1e3$ seg

La superficie aproximada para la función valor $V(t, x_2)$ se muestra en la Figura 5.1, donde se satisface $V(t_f, x_2) = 0 \forall x_2$.

La superficie de control $u_I(t, x)$ se muestra en la Figura 5.2, y al igual que en el Hamiltoniano, el control no depende del estado x_2 .

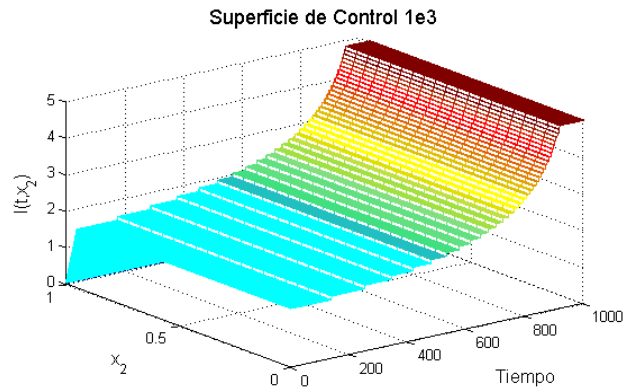


Figura 5.2: Superficie de Control $t_f = 1e3$ seg

Para validar estos resultados, comprobemos que tanto el ínfimo como la igualdad de la ecuación (5.7), sea entonces

$$G(t, x, u_I) := (x_2 - 1) \frac{u_I}{u_I + N} + \left\langle V_x(t, x_2), -\frac{M}{N}x_2 + (1 - x_2) \frac{u_I^2}{u_I + N} M \right\rangle \quad (5.10)$$

se debe tener

$$G^*(t, x_2^{opt}, u_I^{opt}) = \inf_{u_I \in U_{admis}} \{G(t, x_2, u_I)\} \quad (5.11)$$

En la Figura 5.3 para algún t fijado (se puede mostrar que $\forall t$ se cumple); se presenta la superficie $G(t_{fixed}, x_2, u_I)$ y el plano generado por $G(t_{fixed}, x_2, u_I^{opt})$ y se observa que el mínimo de esta función se alcanza con la superficie de control propuesta.

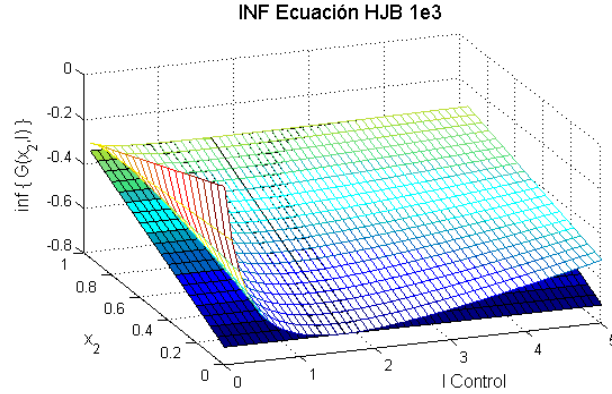


Figura 5.3: Superficie $G(t_{fixed}, x_2, u_I)$ y plano generado por $u_I^{opt}(t_{fixed})$

De esta forma, se puede ver que no solo satisfacemos la condición del ínfimo, sino que con la función $V(t, x_2)$ encontrada, $G(t, x, I)$ es una función convexa, lo que nos permitirá encontrar el ínfimo como

$$\begin{aligned} \frac{\partial G(t, x_2, u_I)}{\partial u_I} &= (x_2 - 1) \frac{N}{(u_I + N)^2} + V_x(t, x_2) \left((1 - x_2) \frac{u_I^2 + 2u_I N}{(u_I + N)^2} M \right) \\ \Rightarrow u_I^{opt} &= \min \left\{ 5, -N + \sqrt{N^2 + \frac{N}{M V_x(t, x_2)}} \right\} \end{aligned} \quad (5.12)$$

en donde además se satisface $\frac{\partial^2 G(t, x_2, u_I)}{\partial u_I^2} > 0$, condición que empata con aquella encontrada en los sistemas Hamiltonianos; el sustituir (5.12) en (5.7) conducirá a una ecuación diferencial parcial no lineal complicada de resolver por métodos analíticos. Para demostrar la validez de la igualdad en (5.7), propongamos la función

$$E(t, x_2) = V_t(t, x_2) + \inf_{u_I \in u_I^{adm}} \left\{ (x_2 - 1) \frac{u_I}{u_I + N} + \left\langle V_x(t, x_2), -\frac{M}{N} x_2 + (1 - x_2) \frac{u_I^2}{u_I + N} M \right\rangle \right\} \quad (5.13)$$

La cual se supone sino cero, muy cercana a este valor por ser una aproximación discreta del sistema; la superficie de esta función se muestra en la Figura 5.4, en la cual se observa que $\{\text{máx } |e_{ij}| = 3.2145e - 4\}$ donde e_{ij} corresponde a cada elemento de la matriz correspondiente a la aproximación discreta de $E(t, x_2)$.

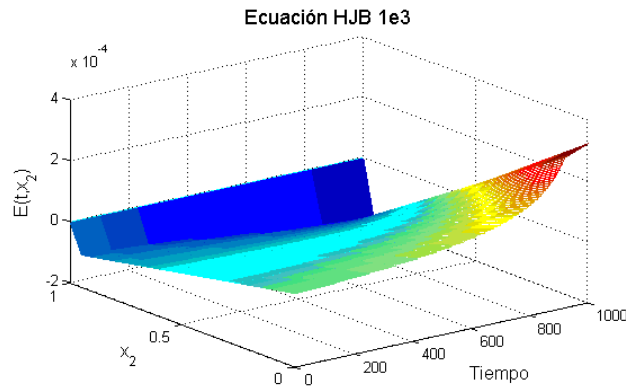


Figura 5.4: Error en la ecuación HJB $t_f = 1e3$ seg

Para $t_f = 10,000 \text{ seg}$ (i.e. $T = 20,000$ pasos de simulación)

Con este nuevo tiempo final, se obtuvo la aproximación de la función valor $V(t, x_2)$ mostrada en la Figura 5.5, en la Figura 5.6 la nueva superficie de control $u_I(t, x_2)$, es evidente que conforme t tiende a infinito, el control óptimo normalizado se vuelve invariablemente la unidad, como es de esperar.

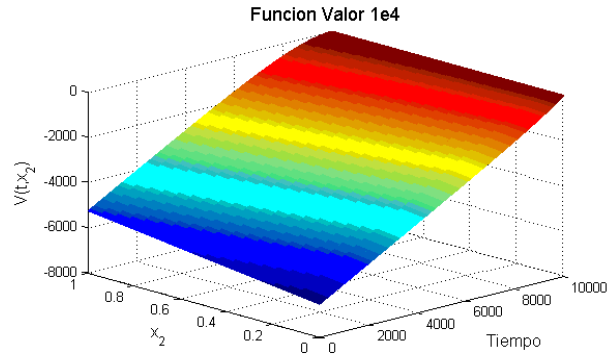


Figura 5.5: Función Valor $t_f = 1e4 \text{ seg}$

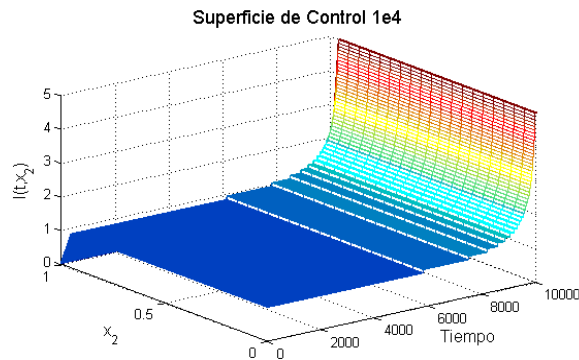


Figura 5.6: Superficie de Control $t_f = 1e4 \text{ seg}$

Definiendo nuevamente (5.10), (5.11), en la Figura 5.7 se aprecia como se al-

canza el ínfimo en $u_I^{opt}(t, x_2)$. Además (5.13) cumple nuevamente la condición de ser muy cercana a cero, en la Figura 5.8 se aprecia el error de la ecuación **HJB** ($\{\text{máx } |e_{ij}| = 3.2145e - 4\}$ nuevamente). Los resultados presentados satisfacen las condiciones de la ecuación de HJB y entregan el régimen de luz óptimo para un sistema que presenta foto inhibición.

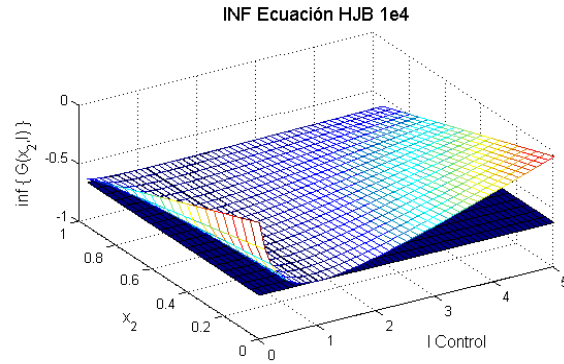


Figura 5.7: Superficie $G(t_{fixed}, x_2, u_I)$ y plano generado por $u_I^{opt}(t_{fixed})$

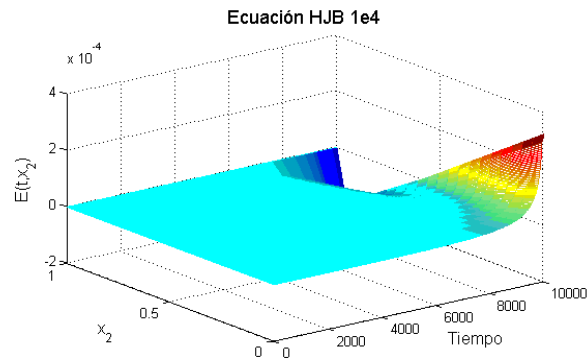


Figura 5.8: Error en la ecuación HJB $t_f = 1e4$ seg

Los resultados mostrados coinciden con los reportes en la literatura.

5.2. Razón de Dilución

Finalmente, para maximizar el rendimiento del bioreactor continuo, se propuso el funcional de costo

$$J = - \int_0^{t_f} y_1(t) u_D(t) dt \rightarrow \text{mín} \quad u_D \in [0, u_D^+] \quad (5.14)$$

Sujeto a la dinámica del sistema

$$\frac{d}{dt}y(t) = f(y) + g(y) u_D; \quad y(0) = y_0 \quad (5.15)$$

donde

$$f(y) = \begin{bmatrix} \mu_S(y_2) y_1 \\ -Y \mu_S(y_2) y_1 \end{bmatrix}; \quad g(y) = \begin{bmatrix} -y_1 \\ S_{in} - y_2 \end{bmatrix}$$

$$\mu_S(y_2) = \frac{\mu_{\text{máx}} y_2}{K_s + y_2}$$

5.2.1. Sistema Hamiltoniano

En el Principio de Maximización de Potryagin (PMP) [40], el Hamiltoniano H y el sistema adjunto $\lambda \in \mathbb{R}^2$ para el sistema (5.14) y el funcional de costo (5.15) es

$$\begin{aligned} H &= y_1 u_D + \langle \lambda, f(y) + g(y) u_D \rangle \\ &= \langle \lambda, f(y) \rangle + [\langle \lambda, g(y) \rangle + y_1] u_D \end{aligned} \quad (5.16)$$

$$\begin{aligned} \dot{\lambda} &= -\nabla_y H \therefore \\ \begin{bmatrix} \dot{\lambda}_1 \\ \dot{\lambda}_2 \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} (\lambda_1 - 1) u_D + (Y \lambda_2 - \lambda_1) \left(\frac{\mu_{\max} y_2}{K_s + y_2} \right) \\ (Y \lambda_2 - \lambda_1) \left(y_1 \frac{\mu_{\max} K_s}{(K_s + y_2)^2} \right) + \lambda_2 u_D \end{bmatrix}; \end{aligned} \quad (5.17)$$

Si $u^{opt}(t)$, $t \in [0, t_f]$, soluciona el problema (5.14), (5.15), entonces el PMP sostiene que

$$H(\lambda^{opt}(t), y^{opt}(t), u_D^{opt}(t)) = \max_{u_D \in [0, u_D^+]} H(\lambda(t), y(t), u_D) \equiv \text{const}$$

para algún $\lambda \neq 0$. Para determinar $u^{opt}(t)$

$$\begin{aligned} H(\lambda^{opt}(t), u^{opt}(t), y^{opt}(t)) &= \max_{u \in [0, u_D^+]} \{ \langle \lambda, f(y) \rangle + [\langle \lambda, g(y) \rangle + y_1] u_D \} \\ &\implies \max_{u \in [0, u_D^+]} \{ [\langle \lambda, g(y) \rangle + y_1] u_D \} \end{aligned}$$

Definiendo

$$h(y, \lambda) := \langle \lambda, g(y) \rangle + y_1$$

se tiene el siguiente control preliminar

$$u_D^{opt}(t) = \begin{cases} u_D^+ & \text{si } h(y, \lambda) > 0 \\ 0 & \text{si } h(y, \lambda) < 0 \\ \in [0, u_D^+] & \text{si } h(y, \lambda) = 0 \end{cases}$$

Análisis de un potencial arco singular

Si existe un arco singular, la función de conmutación $h(y, \lambda)$ y su primera derivada $\dot{h}(y, \lambda)$, deben desvanecerse simultáneamente a lo largo de la trayectorias $y(\cdot)$ y $\lambda(\cdot)$ [39], i.e.:

$$h(y, \lambda) = (1 - \lambda_1) y_1 + \lambda_2 (S_{in} - y_2) \equiv 0 \quad (5.18)$$

&

$$\dot{h} = -\dot{\lambda}_1 y_1 + (1 - \lambda_1) \dot{y}_1 + \dot{\lambda}_2 (S_{in} - y_2) - \lambda_2 \dot{y}_2 \equiv 0 \quad (5.19)$$

al sustituir (5.15) y (5.17) en la ecuación anterior, se obtiene

$$\begin{aligned} \dot{h} = & - \left(1 + (Y \lambda_2 - \lambda_1) \frac{\mu_{\text{máx}} y_2}{K_s + y_2} + \lambda_1 \right) y_1 u_D + (1 - \lambda_1) \left(\frac{\mu_{\text{máx}} y_2}{K_s + y_2} - u_D \right) y_1 + \\ & + \left((Y \lambda_2 - \lambda_1) \left(y_1 \frac{\mu_{\text{máx}} K_s}{(K_s + y_2)^2} \right) + \lambda_2 u_D \right) (S_{in} - y_2) - \\ & - \lambda_2 \left(-Y \frac{\mu_{\text{máx}} y_2}{K_s + y_2} y_1 + (S_{in} - y_2) u_D \right) \end{aligned}$$

Se comprueba de forma inmediata que (5.18) y (5.19) se satisface en

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= 1; \\ \lambda_2 &= 0; \\ u_D &= \mu_{\text{máx}} \left(1 - \sqrt{\frac{K_s}{K_s + S_{in}}} \right); \\ y_1 &= Y^{-1} \left(S_{in} - \frac{K_s u_D}{\mu_{\text{máx}} - u_D} \right); \\ y_2 &= \frac{K_s u_D}{\mu_{\text{máx}} - u_D}; \end{aligned}$$

Estos valores corresponden a un punto, aunque se pueden encontrar superficies que cumplan con las restricciones (5.18) y (5.19). Se tiene entonces un control denominado *singular control* [38]. Al no poder resolver de forma adecuada el sistema adjunto $\lambda(t) \forall t$, que satisfaga las condiciones del PMP, se procedió con otras técnicas para hayar éste control óptimo.

5.2.2. Ecuación de Hamilton-Jacobi-Bellman

El problema de optimización se torna a encontrar una función $V(t, y)$ tal que

$$-V_t(t, y) = \inf_{u \in [0, u_D^+]} \{L(y, u_D) + \langle V_y(t, y), f(y) + g(y)u_D \rangle\} \quad (5.20)$$

se mantenga para todo $t \in [t_0, t_f]$ y todo $y \in \mathbb{R}^2$. Es inmediato de (5.20)

$$\begin{aligned} -V_t(t, y) &= \inf_{u \in [0, u_D^+]} \{-y_1 u_D + \langle V_y(t, y), f(y) + g(y)u_D \rangle\} \\ &= f^T(y) V_y(t, y) + \inf_{u_D \in [0, u_D^+]} \{-y_1 + g^T(y) V_y(t, y)\} \end{aligned} \quad (5.21)$$

al definir

$$\phi(t, y) := -y_1 + g^T(y) V_y(t, y) \quad (5.22)$$

como en el sistema Hamiltoniano. De (5.20), al igual que en la sección anterior, no se buscará la igualdad exacta, sino que se suavizará permitiendo una aproximación de la forma

$$-V_t(t, y) \cong f^T(y) V_y(t, y) + \inf_{u_D \in u \in [0, u_D^+]} \{u_D \phi(t, y)\}$$

nuevamente, se hace claro que el control óptimo se encuentra por la ley de realización

$$u^{opt} = \begin{cases} u^+ & \text{si } \phi(t, y) < 0 \\ 0 & \text{si } \phi(t, y) > 0 \\ \in [0, u^+] & \text{si } \phi(t, y) = 0 \end{cases} \quad (5.23)$$

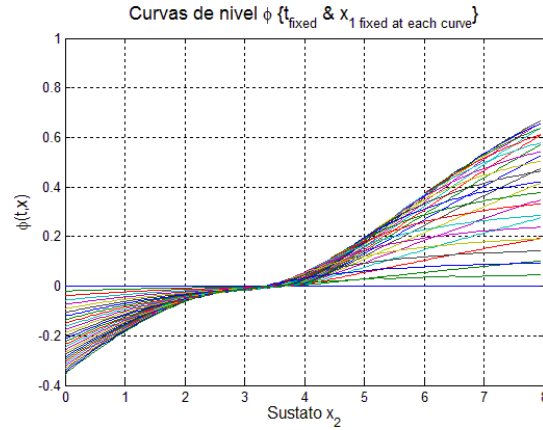


Figura 5.9: Comportamiento cualitativo de $\phi(t, y)$

donde la condición $\phi(t, y) = 0$ arroja el llamado control singular, el pedazo correspondiente de trayectoria óptima es llamado arco singular, a partir de este momento empezaremos a hablar no de un control óptimo, sino de un subóptimo, en el cual a pesar de no tener convergencia en el controlador (*i.e.* $\|u^{opt} - u^{sopt}\| > \varepsilon$, para algún $\varepsilon > 0$), presenta convergencia en la funcional de costo (*i.e.* $\|J(t, x^{opt}, u^{opt}) - J(t, x^{sopt}, u^{sopt})\| < \delta(\varepsilon)$, para algún $\delta > 0$). Este enfoque de buscar un controlador subóptimo hace más sencilla la búsqueda de la función valor $V(t, y)$, permite una implementación más sencilla y brinda una mayor robustez al sistema controlado.

El comportamiento cualitativo de $\phi(t, y)$ está ejemplificado en la Figura 5.9, en la cual se muestra que este control singular no necesariamente será en $\phi(t, y)$ idénticamente cero, sino que en la solución numérica se podrá presentar en una región tal que $|\phi(t, y)| > \varepsilon$ para cierto $\varepsilon > 0$ que dependerá de forma implícita de la selección de los niveles discretizados del control y de los estados así como el paso Δt seleccionado para resolver de forma numérica el problema.

Búsqueda de función de Valor $V(t, y)$

Al igual que en la sección anterior, tenemos

$$\begin{aligned}
 y_{k+1} &= f_d(y_k, u_{D_k}); \quad y_0 \in \{(a, b) \mid a \in [0, 1.5]; b \in [0, 8]\}; \quad k = 1, \dots, T-1 \\
 &= \begin{bmatrix} y_{1_k} + \Delta t \left(\frac{\mu_{\text{máx}} y_{2_k}}{K_s + y_{2_k}} y_{1_k} - u_{D_k} y_{1_k} \right) \\ y_{2_k} + \Delta t \left(-Y \frac{\mu_{\text{máx}} y_{2_k}}{K_s + y_{2_k}} y_{1_k} + u_{D_k} (S_{in} - y_{2_k}) \right) \end{bmatrix}
 \end{aligned}$$

y el funcional discretizado de costo

$$\begin{aligned}
 J(0, y_0, u_D(\cdot)) &= \sum_{k=0}^{T-1} L_d(y_k, u_{D_k}) \\
 &= -\sum_{k=0}^{T-1} \Delta t y_{1_k} u_{D_k}
 \end{aligned}$$

5.2.3. Caso de estudio

Como ejemplo, consideremos los valores obtenidos experimentalmente en el apéndice A para la microalga *Spirulina Máxima*

$$\mu_{\text{máx}} = 0.9170; \quad K_S = 5.4585; \quad Y = 3.8165; \quad S_{in} = 8; \quad (5.24)$$

Con la siguiente discretización de estados y controles admisibles considerados en el sistema de ecuaciones (4.15).

$$\begin{aligned}
 y_1 &\in [0, 1.5]; \quad y_2 \in [0, 8]; \quad u_D \in [0, 1]; \quad \Delta t = 0.01; \\
 \chi_{y_1} &= \{0, 0.05, \dots, 1.5\} \quad \Delta y_1 = 0.05 \\
 \chi_{y_2} &= \{0, 0.05, \dots, 8.0\} \quad \Delta y_2 = 0.05 \\
 \chi_u &= \{0, 0.01, \dots, 1\} \quad \Delta u = 0.01
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{card}(\chi_{y1}) &= \frac{1.5 - 0}{0.05} + 1 = 31 \\ \text{card}(\chi_{y2}) &= \frac{8 - 0}{0.05} + 1 = 161 \\ \text{card}(\chi_u) &= \frac{1 - 0}{0.01} + 1 = 101 \end{aligned}$$

Para $t_f = 14$ días (i.e. $T = 1,400$ pasos de simulación)

La superficie de control $V(t, y) : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$, se muestra en la Figura 5.10, donde se muestra para algún t fijado.

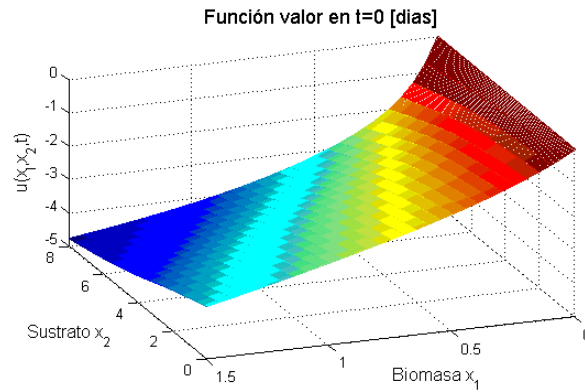


Figura 5.10: Función Valor $t_{fixed} = 0$ días para Flujo

De igual manera, el control $u^{opt}(t, y) : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ correspondiente se muestra en la Figura 5.11, en donde se observa una superficie de control, la cual entrega información similar a la observada en la ecuación del sistema Hamiltoniano, es decir un control bang–singular–bang.

De igual manera, a semejanza del resultado mostrado en la sección anterior, el error máximo de la ecuación (5.13) esta dado por $\max\{|e_{ijk}|\} = 0.0541$ (donde e_{ijk} corresponde nuevamente a los elementos de la matriz $E(t, y)$ con $1 \leq i \leq 31$, $1 \leq j \leq 161$, $1 \leq k \leq 101$). La Figura 5.12 corresponde al error para alguna t fija.

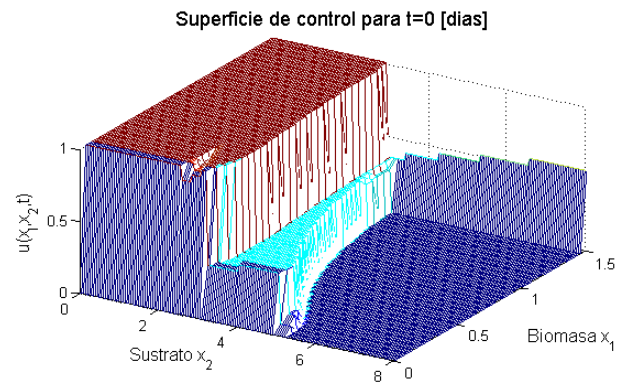


Figura 5.11: Superficie de Control $t_{fixed} = 0$ dias para Flujo

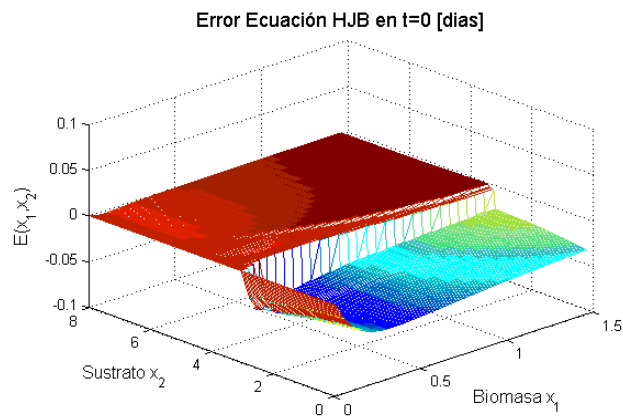


Figura 5.12: Error ecuación HJB $t_{fixed} = 0$ dias para Flujo

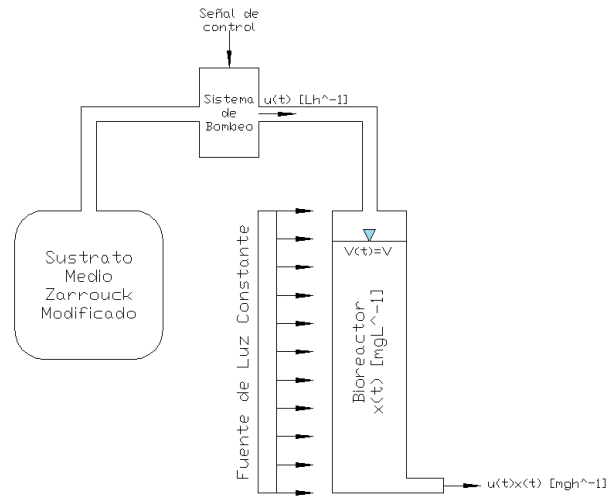


Figura 5.13: Esquema General del Bioreactor

Experimento de laboratorio Spirulina Máxima

En esta sección se presentarán los resultados de un experimento tras haber escogido condiciones iniciales arbitrarias en un bioreactor continuo con el objetivo de mostrar el comportamiento de una trayectoria óptima bajo el control obtenido de nuestra solución numérica. Para este propósito, un bioreactor continuo construido en el laboratorio, cuyo diagrama se muestra en la Figura 5.13,

Este bioreactor continuo se compone básicamente de un recipiente que contiene todo el sustrato (Medio Zarrouck) a ocupar durante el experimento, cuyos componentes exactos y preparación son perfectamente conocidos (ver Apéndice A); un sistema de bombeo de flujo variable que es óptimo en cierto sentido (ver Apéndice B) y que es capaz de seguir cualquier señal de control (flujo de sustrato) suficientemente lenta de una forma muy precisa; el sistema donde se realizan los procesos biológicos (bioreactor), es simplemente un espacio físico en el que los microorganismos



Figura 5.14: Prototipo Físico de Bioreactor en Laboratorio

mos encuentran las condiciones adecuadas para su crecimiento, en el presente trabajo se considera una mezcla homogénea de sustrato y microorganismos; se tiene además una salida de cuadal (mezcla de microorganismos y sustrato) para mantener el volumen del bioreactor constante; el sistema físico implementado en el laboratorio para la validación experimental puede ser observado en Fig. (5.14).

Dado que es posible medir y/o se conocen las condiciones iniciales del sistema (*i.e.* concentración de sustrato y biomasa -directamente relacionada con la absorbancia (ver Apéndice A)), y se tiene un control del flujo suficientemente preciso y la presunción de un modelo suficientemente incluyente y cercano al comportamiento real del sistema, un conocimiento pleno de los parámetros del sistema (*i.e.* parámetros estimados serán asumidos como nominales), por lo que de forma arbitraria, se asumirá que durante todo el experimento se pueden conocer el valor de las dos variables de estado del sistema con solo monitorear el valor de una de ellas, en este caso la absorbancia del medio de cultivo.

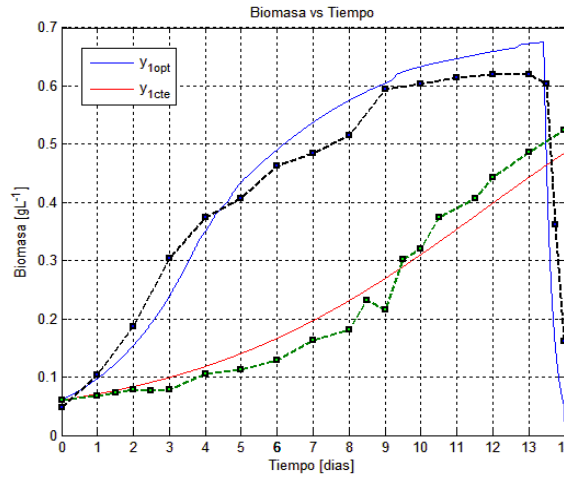


Figura 5.15: Crecimiento de la Biomasa (Real vs Estimada) bajo ambas políticas de control (Control fijo y Control Óptimo)

Simulación y Resultados experimentales Se tiene entonces un recipiente en el cual puede contener un volumen total $V_{Total} = 1460ml$, con una concentración inicial arbitraria de $0.113 mgL^{-1}$ de la microalga *Spirulina Maxima*, así como una concentración del sustrato de $7.3 mgL^{-1}$; la intensidad lumínica más alta alcanzada en el laboratorio esta dada por $1200 \mu Em^{-2}s^{-1}$ brindada por diodos emisores de luz blanca; el crecimiento del microorganismo seleccionado fue de acuerdo al modelo sin foto inhibición (3.21), por lo que además de evidenciar el uso de la intensidad máxima en el presente experimento, permite ejemplificar el resultado en ese capítulo desarrollado.

En la Gráfica 5.15 se observa la dinámica del crecimiento de la microalga con respecto al control óptimo en estado estacionario desarrollado y el control óptimo propuesto por la ecuación de HJB, se observa claramente que en los primeros instantes del experimento, en el primer caso, no se considera en ningún momento la

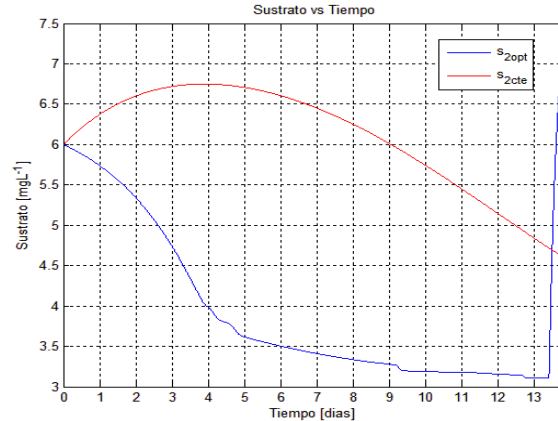


Figura 5.16: Concentración del Sustrato bajo ambas políticas de control (Control fijo y Control Óptimo)

etapa transitoria del sistema hacia su estado estacionario provocando un incremento muy lento en la acumulación de los microorganismos pues la remoción de los mismos es apenas inferior a su crecimiento, el segundo control, sin embargo considera las condiciones iniciales tanto en sustrato y concentración de microorganismos permitiendo explotar de mejor forma el bioreactor y ahorrar en los tiempos denominados "de preparación". De igual forma, en el último periodo del experimento, el primer control no modifica la política de flujo, lo que impide obtener el máximo rendimiento; por su parte el control propuesto, explota al máximo la obtención de microorganismo sobrepasando condición de lavado en caso de que el sistema de bombeo así lo permitá, extrayendo la mayor cantidad de algas.

En la Gráfica 5.16, recordemos que este no muestra lo que ocurrió realmente durante el experimento, sino un estimado a partir de las condiciones iniciales y la medición de la biomasa; se aprecia la dinámica del sustrato, en el caso de un control fijo, se logrará tener una mayor concentración de sustrato, pero éste no repercute de

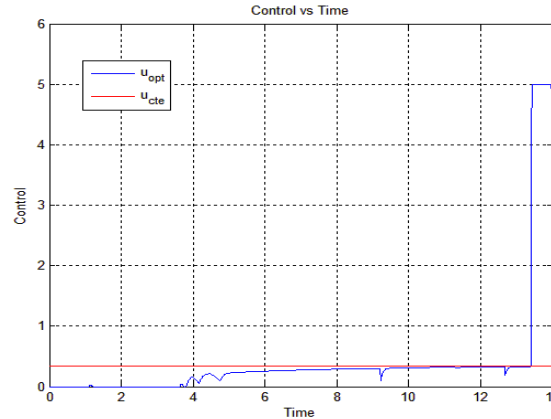


Figura 5.17: Control ó Razón de Dilución vs Tiempo, (Control fijo y Control Óptimo)

forma inmediata en la concentración de microorganismo, bajo nuestra propuesta de control, se sacrifica el contenido de sustrato con el fin de acumular una suficiente cantidad de microorganismos.

En la Gráfica 5.17 es presentado el control óptimo que nos mantendrá sobre esta trayectoria óptima y admisible partiendo de las condiciones iniciales antes mencionadas, el cual consta de 3 regiones importantes, y como se presentó en la ecuación (5.23) dependen de la función $\phi(t, x)$ y cuyo comportamiento se observa en la gráfica (5.18), la primera región establecida con $u^{opt} = 0$ ($\phi(t, x) > 0$, y se encuentra aproximadamente en el intervalo de tiempo de $t \in [0, 3.5]$ días), posteriormente $u^{opt} \in [0, 1]$ ($\phi(t, x) \approx 0$, donde $t \in [3.5, 13.5]$ días y coincide además con el flujo óptimo encontrado en (??)) y finalmente $u^{opt} = 1$ ($\phi(t, x) < 0$ comprendido en el último intervalo de tiempo definido en $t \in [13.5, 14]$ días).

En la Gráfica 5.19 se hace una comparativa de la producción generada por un control estático y aquella generada por nuestro control óptimo, se hace evidente la mejora al funcionar como bioreactor en lote en los primeros instantes y caer en una

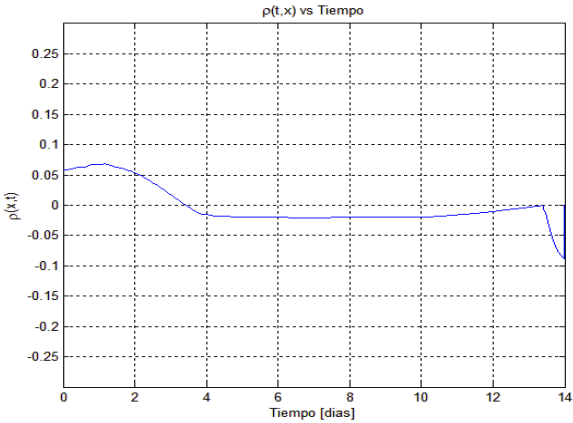


Figura 5.18: ϕ vs Tiempo; Trayectoria estimada de ϕ a lo largo de la trayectoria generada por el control óptimo.

condición de lavado en los últimos momentos del experimento.

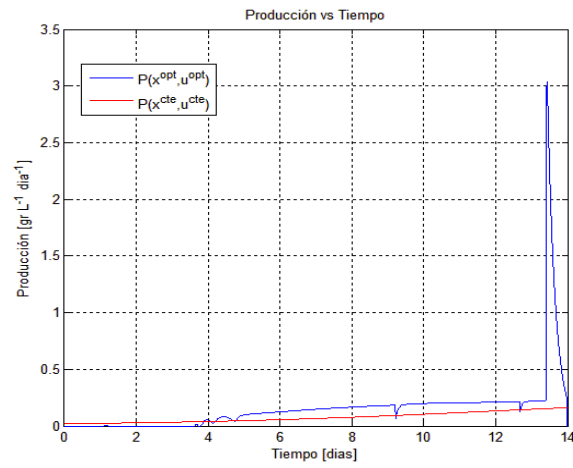


Figura 5.19: Producción generada por control óptimo y control estático

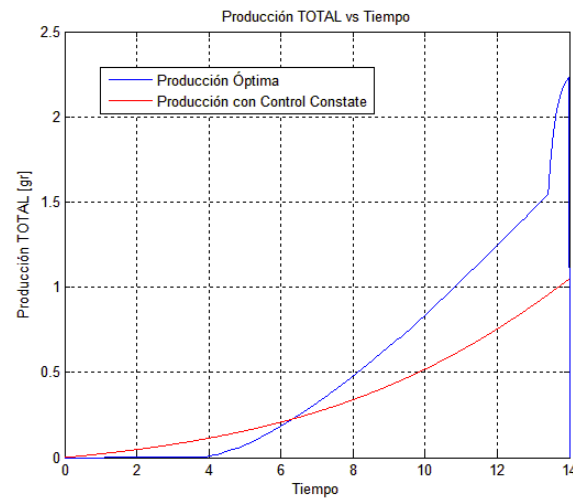


Figura 5.20: Producción total generada por control óptimo y control estático

Capítulo 6

Conclusiones

En este trabajo se abordó la estrategia de control óptimo que permite obtener el máximo crecimiento de microorganismos mediante la regulación de la intensidad luminosa (luz blanca) y un flujo de entrada de solución nutritiva.

Se comprendió el crecimiento de los microorganismos bajo sus posibles comportamientos a la luz (sin foto inhibición, con foto inhibición, con foto inhibición en base a la dinámicas rápidas y lentas) y se encontró la política óptima de intensidad luminosa en cada uno de ellos, se encontró de forma analítica el resultado para los dos primeros casos y se presentó la forma para resolver el problema de forma numérica, encontrando así la solución exacta del problema aproximado para la microalga *Porphyridium sp.*; dado que la solución hallada satisface la ecuación de HJB, nuestra solución es suficiente y necesaria para un control óptimo, la solución coincide con aquella encontrada por S. Celikovsky usando la ecuación de Hamilton y con aquellas observaciones hechas en laboratorios.

Así mismo, el crecimiento de los microorganismo fue entendido con una ecuación tipo Monod, en donde la concentración de nutrientes y de biomasa está en función

de la razón de dilución y la concentración de nutrientes en nuestra fuente de alimentación. Se encontró que la información se encuentra incompleta en la literatura, y fue encontrada mediante una aproximación numérica la política de control que satisface también la ecuación de HJB; por lo tanto, condiciones necesarias y suficientes para un control óptimo; el resultado coincide con aquél realizado por biólogos y biotecnólogos para la preparación y puesta en marcha de un cultivo continuo aunque provee una mayor información en cuanto al proceso, pues se consideran ahora condiciones iniciales del experimento, así como el tiempo y forma de cambiar de un cultivo en lote a uno continuo, eliminando así la necesidad de una decisión humana que además represente un menor rendimiento final.

Apéndice A

Métodos experimentales

A.1. Preparación de medio Zarrouck Modificado

1. En un matraz de aforación se agrega un litro de agua destilada
2. En una balanza analítica de alta precisión se pesan:

	Compuesto	gramos/Litro
1.	NaHCO ₃	8.0
2.	K ₂ HPO ₄	0.5
3.	NaNO ₃	2.5
4.	K ₂ SO ₄	1.0
5.	NaCl	1.0
6.	MgSO ₄	0.2
7.	CaCl ₂	0.04
8.	FeSO ₄	0.01
9.	Sal EDTA	0.08

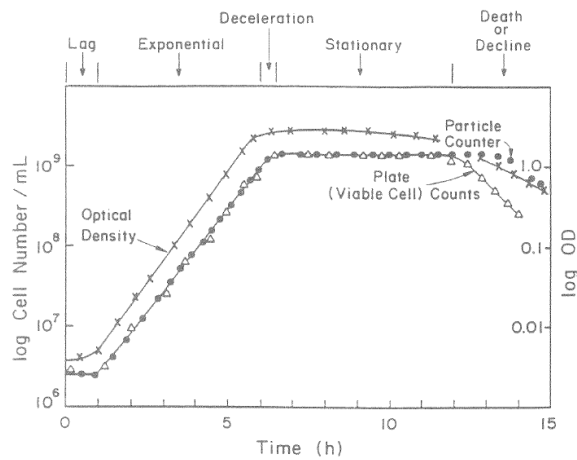


Figura A.1: Curva de Crecimiento Típica para una población de microorganismos, mostrando la influencia de la variable medida (de Ref. [35]).

3. En un agitador magnético se agregan los reactivos pesados y se agitan a 100 rpm a temperatura ambiente

A.2. Relación absorbancia y células viables

Información sobre la dinámica del crecimiento microbiano, distribución de población celular, síntesis del producto y utilización del sustrato son esenciales para la predicción del desempeño y control, así como la optimización del sistema. Cuando las células crecen en un cultivo en lote, como generalmente lo hacen en la naturaleza y en la mayoría de los procesos industriales, una serie de etapas pueden ser claramente identificadas: adaptación al medio después de la inoculación, crecimiento exponencial, desaceleración del crecimiento, fase estacionaria y muerte. La Figura A.1 muestra una curva de crecimiento típica, como es observada por mediciones de densidad óptica, conteo de partículas y conteo de células viables.

Excepto en la fase de muerte celular, los distintos tipos de mediciones mantienen una relación proporcional; en la presente tesis se busca maximizar la densidad óptica registrada por el espectrofotómetro 'Velab 722-2000' con una longitud de onda de 550 nm.

A.3. Identificación de parámetros

Para poder estimar el valor de los parámetros cinématicos, es necesario hacer una serie de corridas en lote con distintos niveles de concentración de sustrato. Entonces la razón inicial de reacción puede ser calculada como una función inicial de concentración de sustrato. Los resultados pueden ser graficados de forma que la validez del modelo cinémático puede ser probado y los valores de los parámetros cinématicos pueden ser estimados. La ecuación de Michaelis-Menten

$$\mu(s) = \frac{\mu_{\text{máx}}s}{K_M + s}$$

puede ser reacomodada para ser expresada en la forma lineal

$$\frac{s}{\mu} = \frac{K_M}{\mu_{\text{máx}}} + \frac{s}{\mu_{\text{máx}}} \quad (\text{A.1})$$

La ecuación (A.1) fue dada por Langmuir. La gráfica de la ecuación de Langmuir (*i.e.* $\frac{C_s}{r}$ vs C_s) resultará en una línea recta, cuya pendiente será igual a $\frac{1}{r_{\text{máx}}}$. La intersección con el eje y será $\frac{K_M}{r_{\text{máx}}}$ (ver Figura A.2).

De esta forma, los parámetros de nuestro sistema serán

$$\begin{aligned} \mu_{\text{máx}} &= 0.9170 \text{ [day}^{-1}\text{]} \\ K_M &= 5.4585 \text{ [nutrients]} \end{aligned}$$

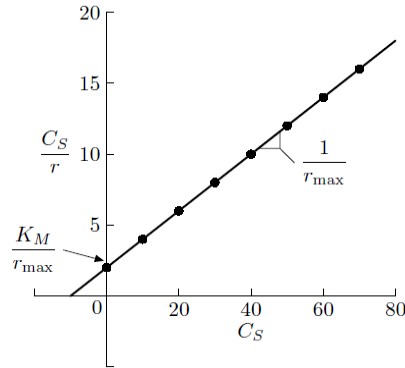


Figura A.2: La gráfica Langmuir

El rendimiento; es simplemente

$$Y = \frac{\Delta s}{\Delta x}$$

obtenido de un experimento en lote al conocer condiciones iniciales y finales.

$$Y = 3.8165 \left[\frac{\Delta x}{\Delta s} \right]$$

En la Gráfica A.3 vemos, el acercamiento

A.4. Intensidad promedio

Señalemos que la cantidad de luz absorbida puede ser evaluada integrando la razón volumétrica total de absorción de energía (**LVREA** por sus siglas en inglés) en el volumen total del bioreactor. Sea entonces la intensidad promedio sobre un bioreactor definida para cualquier geometría como

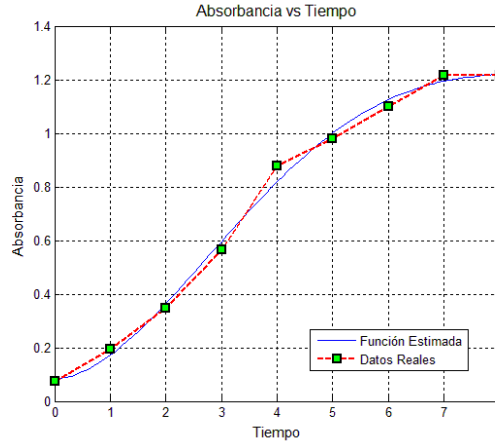


Figura A.3: Función Estimada vs Mediciones Reales

$$I_{av} = \frac{\sum_{i=1}^n V_i I_{P_i}}{\sum_{i=1}^n V_i} = \frac{\sum_{i=1}^n V_i I_{P_i}}{V_T} \quad (\text{A.2})$$

Donde V_i representa un elemento de volumen en el cual la irradiación I_{P_i} puede ser considerada constante y V_T representa el volumen total del bioreactor, en el caso de un recipiente rectangular iluminado en solo una de sus paredes, en donde la atenuación de cada rayo de luz viajando a través del medio puede ser calculado por la ley de Lambert-Beer, (A.2) puede ser calculada de forma analítica. La irradiación en cualquier punto interior separado por una distancia x de la pared iluminada es

$$I_p(x) = I_0 \exp(-x C_b K_a) \quad (\text{A.3})$$

en donde C_b es la concentración de la biomasa, K_a es el coeficiente de extinción e I_0 es la luz incidente en la pared de bioreactor. Por lo tanto la intensidad promedio correspondiente a todo el volumen del recipiente es

$$\begin{aligned}
I_{av} &= \frac{\int_V I_P(x) dV}{V} = \frac{\int_0^L I_0 \exp(-x C_b K_a) H L dx}{H L^2} \\
&= \frac{I_0}{L C_b K_a} (1 - \exp[-L C_b K_a]) \tag{A.4}
\end{aligned}$$

Una geometría cilíndrica puede ser vista como una colección de paralepípedo (ver [12]) y la luz promedio puede ser integrada como

$$I_{av} = \frac{2I_0}{\pi R C_b K_a} \left(1 - \int_0^{\frac{\pi}{2}} \cos(\phi) \exp[-2R C_b K_a \cos(\phi)] d\phi \right)$$

Y sea

$$\begin{aligned}
\alpha(C_b, K_a) &: = \frac{2}{\pi R C_b K_a} \left(1 - \int_0^{\frac{\pi}{2}} \cos(\phi) \exp[-2R C_b K_a \cos(\phi)] d\phi \right) \\
\alpha(C_b, K_a) &\neq 0 \quad \forall C_b, K_a \text{ admisibles}
\end{aligned}$$

Donde la integral puede ser evaluada numéricamente; entonces se tiene una relación de la forma

$$I_{av} = I_0 \alpha(C_b, K_a)$$

En donde se encuentra que existe una relación en función de la concentración de biomasa y el coeficiente de absorción de la misma (esta última puede llegar a ser considerada constante *i.e.* $\alpha(C_b, K_a) = \alpha(C_b)$) entre la intensidad promedio y la intensidad incidente en la pared del bioreactor.

Apéndice B

Control de Flujo de Entrada mediante bomba peristáltica

Se generó un perfil óptimo de un flujo de entrada para un bioreactor operando en modo continuo para maximizar la producción de biomasa; se hace entonces necesario el generar tanto el sistema de bombeo como la ley de control para dicho sistema.

Dada la construcción física de la bomba empleada, en donde solo tenemos dos estados útiles (prendido y apagado), es imposible seguir cualquier perfil arbitrariamente establecido. Para alcanzar nuestro objetivo de control, se considero el sistema de tanques que se muestra en la Figura B.1.

Dicho sistema tiene la función de transferencia en variables de estado

$$\begin{aligned}\dot{x}(t) &= Ax + Bu \\ y &= Cx\end{aligned}$$

donde

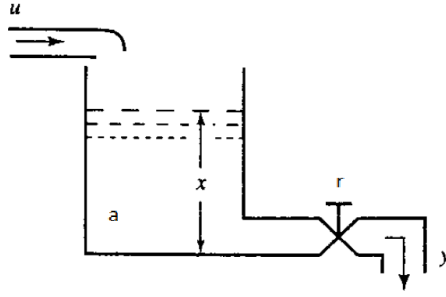


Figura B.1: Esquema de Sistema de Tanque

$$A = \begin{bmatrix} -1 \\ ra \end{bmatrix}; \quad B = \begin{bmatrix} 1 \\ a \end{bmatrix}; \quad C = \begin{bmatrix} 1 \\ r \end{bmatrix};$$

siendo x el nivel de líquido en el tanque [cm], u el flujo de entrada [$cm^3/\text{mín}$], a el diámetro transversal del recipiente [cm^2], y r la constante de resistencia de la tubería [$\text{mín}/cm^3$]; es decir, controlando el nivel de nuestro tanque e identificando el parámetro r , se alcanzará cualquier caudal requerido al controlar la variable de estado x .

Si consideramos un control óptimo con respecto al tiempo, es decir, conducir x de un valor inicial arbitrario x_0 a un valor final x_1 en tiempo mínimo, el sistema hamiltoniano es

$$H(x(t), u, p) = \langle p, Ax + Bu \rangle + p_0$$

y la condición de maximización del hamiltoniano implica

$$\langle p^{opt}, Bu^{opt} \rangle = \max_{u \in U} \langle p, Bu \rangle$$

ahora se ha vuelto obvio que teniendo un control acotado $0 \leq u \leq u^+$

$$u^{opt} \begin{cases} u^+ & \text{si } \langle p, B \rangle > 0 \\ 0 & \text{si } \langle p, B \rangle < 0 \end{cases}$$

el cual es mejor conocido como controlador bang-bang para sistemas lineales. Para fines prácticos, se tiene que $sign(p) = sign(e)$, donde e es el error entre el estado deseado y el estado actual.

Bibliografía

- [1] Yuan-Kun Lee and Chin-Seng Low; Productivity of Outdoor Algal Cultures in Enclosed Tubular Photobioreactor; *Biotechnology and Bioengineering*, Vol. 40, Pp. 1119-1122 (1992) John Wiley & Sons, Inc.
- [2] X.-W. Zhang, Y.-M. Zhang, F. Chen; Application of mathematical models to the determination optimal glucose concentration and light intensity for mixotrophic culture of *Spirulina platensis*; *Process Biochemistry* 34 (1999) 477–481
- [3] Margarita Salazar González; Aplicación e importancia de las microalgas en el tratamiento de aguas residuales; *Laboratorio de Microbiología Ambiental y Tratamiento de Aguas Residuales*.
- [4] R. Dominguez-Bocanegra, J.A. Torres-Muñoz, R. Carmona, R. Aguilera-López. Estudio teorico practico de la renocion de contaminantes presentes en el rio de Los Remedios, Estado de Mexico
- [5] Donald E. Kirk; *Optimal Control Theory: An introduction*; Englewood Cliffs; N.J.:Prentice-Hall
- [6] Rodolfo Quintero Ramírez; *Ingeniería bioquímica: Teoría y aplicaciones*; Primera edición 1981; Ed. Alhambra Mexicana S.A.

- [7] Jorge A. Viera Costa, Luciane M. Colla, Paulo F. Duarte; Improving Spirulina P. biomass yield using a fed-batch process; doi:10.1016/j.biortech.2003.09.013
- [8] Melinda J. Griffiths, Clive Garcin, Robert P. Von Hille, Susan T.L. Harrison; Interference by pigment in the estimation of microalgal biomass concentration by optical density; doi:10.1016/j.mimet.2011.02.005
- [9] Gódica Casablanca, F. y López Santían, J. Ingeniería bioquímica. Editorial Síntesis, S.A. ISBN: 84-7738-611-0.
- [10] Lee James M. Biochemical engineering. Prentice Hall 1992, ISBN 013085317.
- [11] Erik B. Muller; Synthesizing units as modeling tools for photosynthesizing organism with photoinhibition and nutrient limitation; doi:10.1016/j.ecolmodel.2010.10.008
- [12] E.Molina Grima, F.García Camacho, J.A. Sánchez Pérez, F.G. Ación Fernández, J.M. Fernández Sevilla; Evaluation of photosynthetic efficiency in microalgal cultures using average irradiance; Departamento de Ingeniería Química, E-04071, Almeria, Spain
- [13] H. Kwakernaak y R. Sivan. Linear Optimal Control Systems. Wiley-Interscience, New York, 1972.
- [14] M.C. García-Malea, C. Brindley, J.M. Fernández, E. Molina; Modelling of growth and accumulation of caratenoids in *Haematococcus pluvialis* as a function of irradiance and nutrients supply; doi:10.1016/j.bej.2005.04.007
- [15] Sergej Celikovsky, Stepacek, Alejandro Carvantes-Herrera, Javier Ruiz-Leon; Singular Perturbation Based Solution to Optimal Microalgal Growth Problem and Its Infinite Time Horizon Analysis; doi: 10.1109/TAC.2010.2040498

- [16] James M. Lee; Biochemical Engineering; Prentice Hall Series in the physical and chemical engineering sciences.
- [17] Roberto Carmona Rodriguez; Modelado y Control en simulación de un cultivo continuo de spirulina máxima para el tratamiento de agua residual.
- [18] Daniel Liberzon; Calculus of variations and optimal control theory: A concise introduction.
- [19] Branislav Reháč, Sergej Celikovsky, Stepan Papacek; Model of Photosynthesis and Photoinhibition: Parameter Identification Based on the Harmonic Irradiation O₂ Response Measurement; doi:10.1109/TAC.2007.911345
- [20] Xiaoxi Wu, Jose C. Merchuck; A model integrating fluid dynamics in photosynthesis and photoinhibition processes
- [21] P.H.C. Eilers, J.C.H. Peeters; A model for the relationship between light intensity and the rate of photosynthesis in phytoplankton; Ecological Modelling 42 (1988) 195-215
- [22] Dimitri P. Bertsekas; Dynamic Programming and Optimal Control; Volume I, Third Edition
- [23] Yuan-Kun Lee, Chin-Seng Low; Productivity of Outdoor Algal cultures in Enclosed Tubular Photobioreactor; Biotechnology and Bioengineering, Vol 40 Page 119-122 (1992) John Wiley & sons
- [24] X-W Zhang, Y-M Zhang, F. Chen; Application of mathematical models to the determination of optimal glucose concentration and light intensity for mixotrophic culture of *Spirulina Platensis*

- [25] Hassan K. Khalil. *Nonlinear systems*, Third Edition; Prentice Hall
- [26] Chi-Tsong Chen. *Linear system theory and desing*, Third Edition, Oxford University Press, 1990.
- [27] Isidori Alberto. *Nonlinear Control System*. Springer-Verlag 1989.
- [28] Martino Bardi, Italo Capuzzo-Dolceta; *Optimal Control and Viscosity Solutions of Hamilton-Jacobi-Bellman Equations*; Birkhäuser 1997
- [29] A.N. Tihonov, A.B. Vasileva and V.M. Volosov. *Mathematics Applied to Physice*, New York, Springer-Verlag, ch. IV, Sect. 5; and UNESCO, Paris, 1970.
- [30] Agrawal, P., & Lim, H. (1984). Analysis of various control schemes for continuous bioreactors. *Advances in Biochemical Engineering/ Biotechnology*, 30, 61–90.
- [31] Sergio Domínguez, *Control en el espacio de estado*, Segunda edición, Prentice Hall, 2006.
- [32] C. Zonneveld: Photoinhibition as affected by photoacclimation in phytoplankton: a Model Approach. *J. Theor. Biol.* 193 (1998), 115–123.
- [33] B.-P. Han: A Mechanistic Model of Algal Photoinhibition Induced by Photodamage to Photosystem – II. *J. Theoret. Biol.* 214 (2002), 519–527.
- [34] X. Wu and J.C. Merchuk. A model integrating fluid dynamics in photosynthesis and photoinhibition processes. *Chem. Eng. Sci.*, vol 56, pp. 3527-3537, 2001.
- [35] Juan A. Asenjo, José C. Merchuk. *Bioreactor System Design*. Marcel Dekker, Inc. 1995.

- [36] Hans P. Geering. *Optimal Control with Engineering Applications*, Springer-Verlag 2007.
- [37] B. S. Goh, G. Leitmann, T.L. Vincent. *Optimal Control of a Fish Resource*, *Malayan Scientist*,5 (1969/70), pp. 65-70.
- [38] C. D. Johnson. *Singular Solutions in Problems of Optimal Control*. in C.T. Leondes (ed.), *Advances in Control Systems*, vol. 2, pp. 209-267, Academic Press, New York, NY, 1965.
- [39] R. E. Kopp, H. G. Moyer. *Necessary Conditions for Singular Extremals*. *AIAA Journal*, vol. 3 (1965), pp. 1439-1444.
- [40] L. S. Pontryagin, V. G. Boltyanskii, R. V. Gamkrelidze, and E. F. Mishchenko. *The Mathematical Theory of Optimal Processes*. John Wiley & Sons 1962
- [41] Alexander S. Poznyak. *Advanced Mathematical Tools for Automatic Control Engineers*, Volume 1. Elsevier 2008