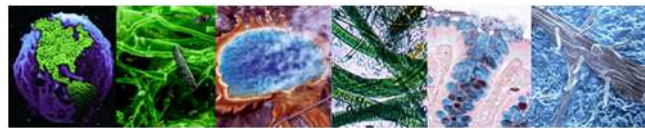


Bioreactor shape optimization

Modeling, simulation, and shape optimization of a simple bioreactor for water treatment*

Juan M. Bello Rivas, Jérôme Harmand, Benjamin Ivorra,
Angel M. Ramos del Olmo, Alain Rapaport



*Résultats préliminaires

STIC & ENVIRONNEMENT
11-13 mai 2011 – Saint Etienne

INRA

Problématique (1)



Depuis les années 60, les travaux sur la caractérisation des écoulements dans les réacteurs ont amené de nombreuses questions d'optimisation de conception De (bio)procédés...

"If one fermenter gives good results, two fermenters will give better results and three fermenters better still.

This is sometimes true, but often false"

D. Herbert, 1964

STIC & ENVIRONNEMENT
11-13 mai 2011 – Saint Etienne

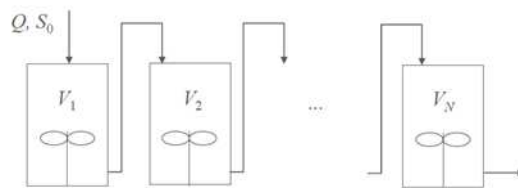
INRA

Problématique (2)

Design optimal des bioprocédés, étant donnés :

- un modèle cinétique,
- le débit d'alimentation du système,
- les concentrations d'entrée et de sortie souhaitées,

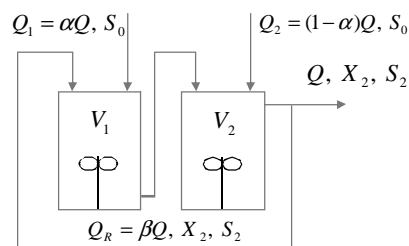
quel est le volume de chaque réacteur d'une cascade de sorte que le volume total soit minimal?



STIC & ENVIRONNEMENT
11-13 mai 2011 – Saint Etienne

INRA

Problématique (3)



Problèmes résolus pour des cas assez complexes et sous des hypothèses assez générales :

- $\mu(0)=0$
- $\mu(S)>0$
- $1/\mu$ convexe

STIC & ENVIRONNEMENT
11-13 mai 2011 – Saint Etienne

INRA

Problématique (4)

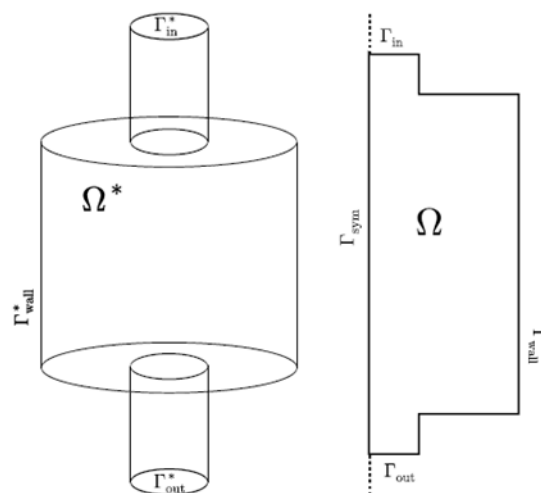
Mais :

- *restent peu réalistes lorsque les systèmes sont de grande taille;*
- *ne tirent pas partie du fait que l'on peut jouer sur les paramètres de dimensionnement des réacteurs...*

STIC & ENVIRONNEMENT
11-13 mai 2011 – Saint Etienne

INRA

Modélisation (1)



STIC & ENVIRONNEMENT
11-13 mai 2011 – Saint Etienne

INRA

Modélisation (2)

Caractérisation hydrodynamique (Navier Stokes pour les fluides incompressibles)

$$\begin{cases} \rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} = \nabla \cdot [-p\mathbf{I} + \eta(\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^T)] + \mathbf{F}, \\ \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \end{cases}$$

convection (pointing to $\rho(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u}$)
Résultante des forces massiques (pointing to \mathbf{F})
Condition d'incompressibilité (pointing to $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$)
Viscosité dynamique du fluide (pointing to η)

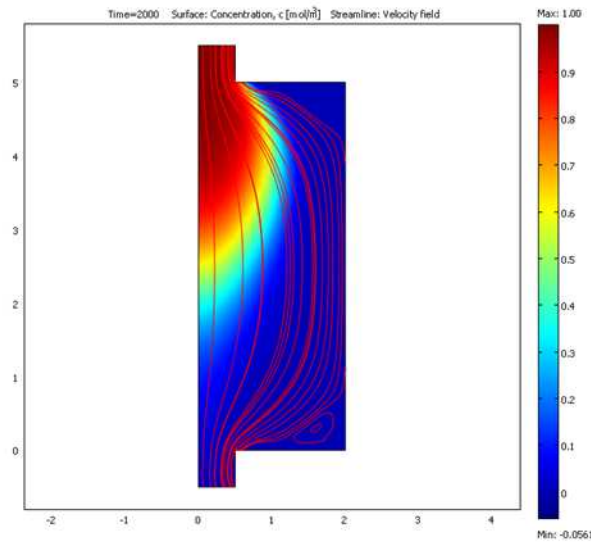
Couplée avec les équations d'un processus de réaction-diffusion pour le substrat et la biomasse

$$\frac{\partial s}{\partial t} + \nabla \cdot (-D_1 \nabla s) = -\mu(s)x - \mathbf{u} \cdot \nabla s$$

STIC & ENVIRONNEMENT
11-13 mai 2011 – Saint Etienne

INRA

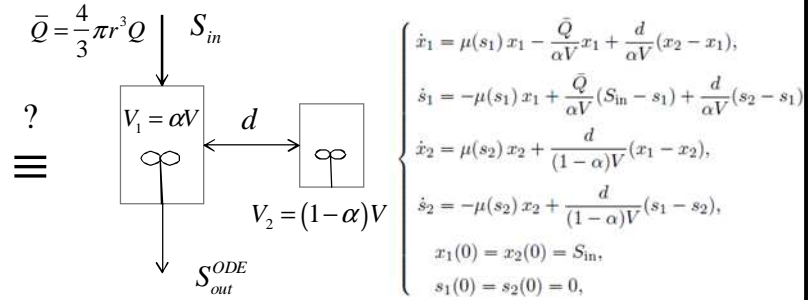
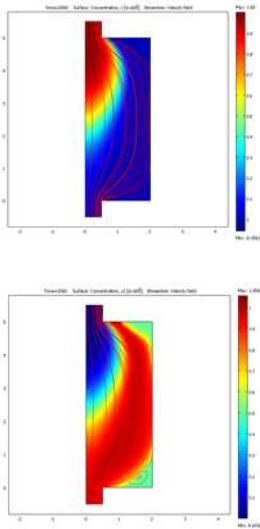
Simulation



STIC & ENVIRONNEMENT
11-13 mai 2011 – Saint Etienne

INRA

Optimisation #1 (1)



STIC & ENVIRONNEMENT
11-13 mai 2011 – Saint Etienne

INRA

Optimisation #1 (2)

$$S_{in} \mapsto S_{out}^{ODE}(S_{in}; \alpha, d)$$

$$S_{in} \mapsto S_{out}^{PDE}(S_{in}) = \frac{\int_{\Gamma_{out}} c \, d\Gamma}{\int_{\Gamma_{out}} d\Gamma}$$

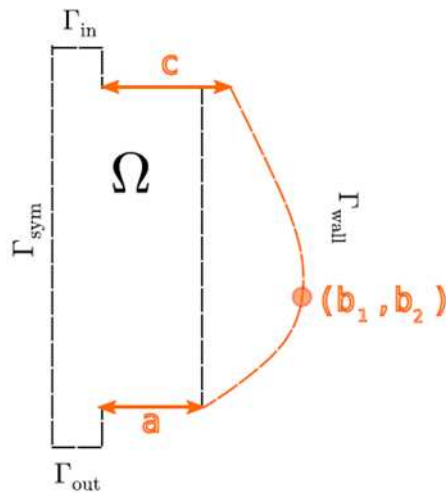
ODE1 For each value of S_{in} we computed the values of α and d that minimized $(S_{out}^{ODE}(S_{in}; \alpha, d) - S_{out}^{PDE}(S_{in}))^2$. The resulting values are shown in Figure 3.2.

ODE2 For the set $\{S_{in}^i \mid i = 1, \dots, 5\}$, we computed the pair α, d that minimized $\sum_{i=1}^5 (S_{out}^{ODE}(S_{in}^i; \alpha, d) - S_{out}^{PDE}(S_{in}^i))^2$. The resulting values are $\alpha = 0.304$, $d = 0.072$

STIC & ENVIRONNEMENT
11-13 mai 2011 – Saint Etienne

INRA

Optimisation #2



$$Z = - \int_{\Gamma_{out}} s v d\Gamma'$$

$$J = P \max \{0, Z - Z^{eyl}\} + \text{Volume}$$

H : Hauteur du réacteur fixe, entrée et sortie de taille « petite »

STIC & ENVIRONNEMENT
11-13 mai 2011 – Saint Etienne

INRA

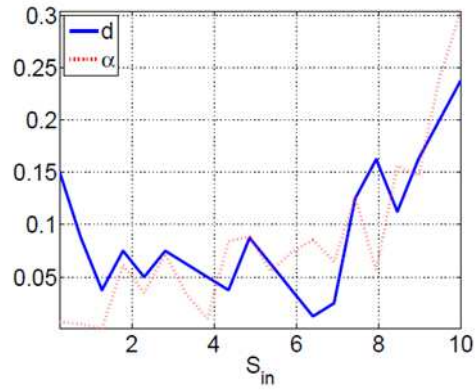
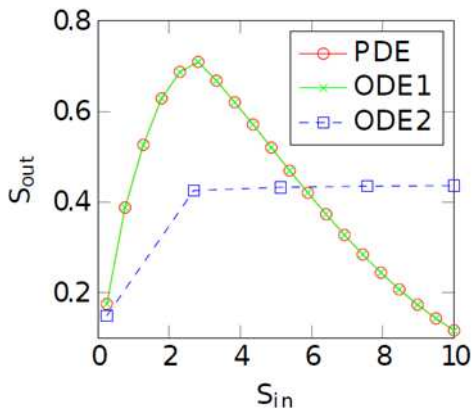
Résolution Pb. Opt. par AGHs

- Optimisation réalisée sur la base des algorithmes génétiques qui combinent, sélection, croisement et mutation
- Algorithmes « souples » (peu d'information à fournir), globaux mais (i) présentent parfois peu de performance (lents) et assez complexes
- Modification en implémentant un algorithme inspiré de la méthode de la sécante pour améliorer la vitesse de convergence de l'algorithme : AGH (Cf. Ivorra et coll., 2006)

STIC & ENVIRONNEMENT
11-13 mai 2011 – Saint Etienne

INRA

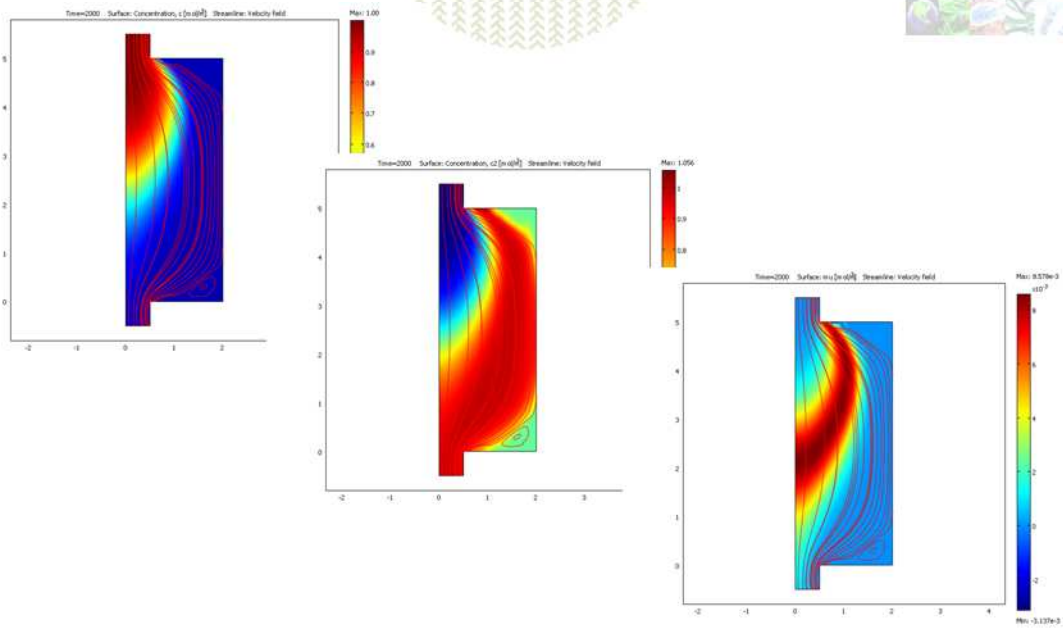
Résultats Pb. Opt. #1



STIC & ENVIRONNEMENT
11-13 mai 2011 – Saint Etienne

INRA

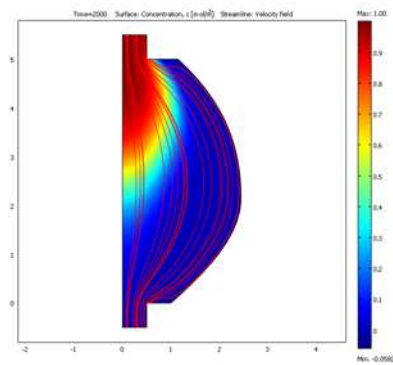
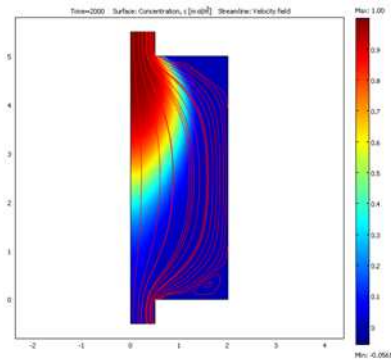
Résultats Pb. Opt. #2 (1)



STIC & ENVIRONNEMENT
11-13 mai 2011 – Saint Etienne

INRA

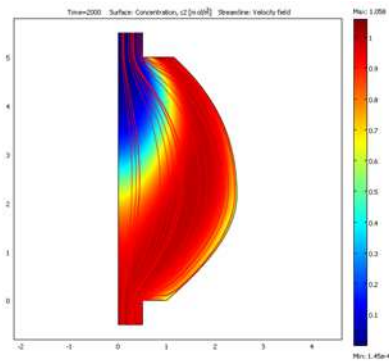
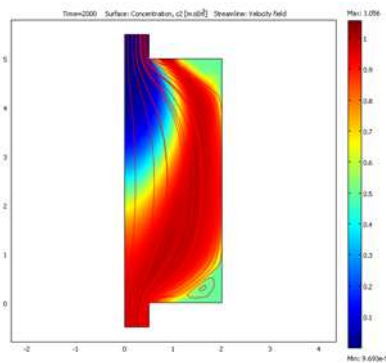
Résultats Pb. Opt. #2 (2)



STIC & ENVIRONNEMENT
11-13 mai 2011 – Saint Etienne

INRA

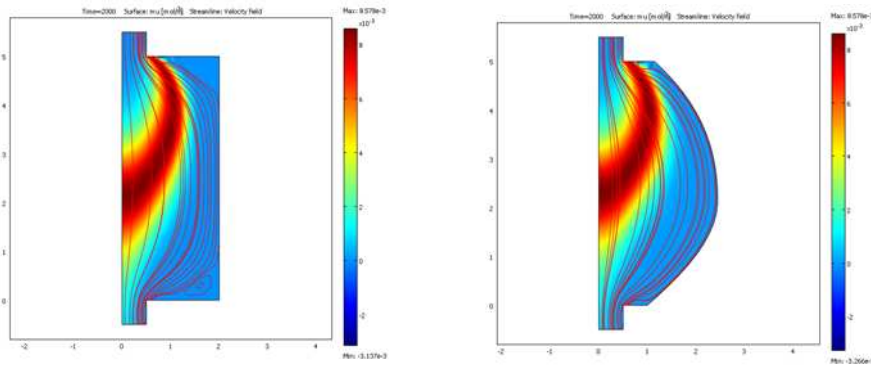
Résultats Pb. Opt. #2 (3)



STIC & ENVIRONNEMENT
11-13 mai 2011 – Saint Etienne

INRA

Résultats Pb. Opt. #2 (1)



STIC & ENVIRONNEMENT
11-13 mai 2011 – Saint Etienne

INRA

Conclusions...

- Optimisation de forme d'un réacteur biologique
 - Modélisation : couplage des processus biologiques et hydrodynamiques
 - Optimisation : deux problèmes d'optimisation ont été abordés
 - Les résultats mettent en évidence un rôle majeur :
 - Des entrées du système;
 - des zones mortes - grande zone de diffusion dans les résultats du problème #1 avec un rapport 20%-80%.

STIC & ENVIRONNEMENT
11-13 mai 2011 – Saint Etienne

INRA

...et perspectives



- Approches essentiellement numériques spécifiques à une cinétique particulière : à court terme, extension à des modèles plus réalistes de bioprocédés;
- Pas de système de rétention de la biomasse : à moyen terme, prise en compte de la présence d'un système de rétention;
- A plus long terme, recherche de données pour une « investigation expérimentale »