

Modelación matemática de los procesos cinéticos en la cámara ánódica en una Celda de Combustible Microbiana

Peraza Baeza Isaías^{1,*}, Pérez Hernández Antonino², Alzate Gaviria Liliana¹

¹Centro de Investigación Científica de Yucatán (CICY), ²Centro de Investigación en Materiales Avanzados (CIMAV).
Unidad de Energías Renovables

Introducción

La investigación en Celdas de Combustible Microbianas (CCM), ha despertado un gran interés debido a su capacidad para transformar compuestos orgánicos en electricidad [1-4]. En estos sistemas, interactúan múltiples factores tanto físicos, químicos como biológicos que determinan el desempeño del proceso, sin embargo, la gran cantidad de variables de operación dificultan su análisis. Hasta la fecha los trabajos sobre CCM, siguen siendo en su mayoría experimentales y se orientan hacia la comprensión de la microbiología [2] ó a la ingeniería de la CCM [4]. A pesar de la intensa investigación, la potencia máxima que es posible extraer de estos sistemas, está restringida por parámetros de operación como el pH, la velocidad de crecimiento, entre otros [3, 4]. Asimismo, existen ciertos procesos que carecen de explicación como la relación entre el pH y el metabolismo microbiano [3]. Los modelos matemáticos para CCM, son empleados para detectar elementos clave, que permitirán maximizar la potencia generada [4]. A excepción de algunos trabajos que investigan la cinética de crecimiento de la biopelícula, muy poco se ha estudiado al respecto [3, 4].

Objetivo general

Desarrollar un modelo matemático para predecir el desempeño electroquímico de una CCM tipo PEM, en función de los procesos cinéticos de la cámara ánódica (pH y biopelícula) en una CCM.

Hipótesis

Implementando un modelo matemático, basado en balances de materia, y pH como parámetro principal, se podrán predecir tanto la producción de electricidad, consumo de sustrato, así como las propiedades de la biopelícula ánódica.

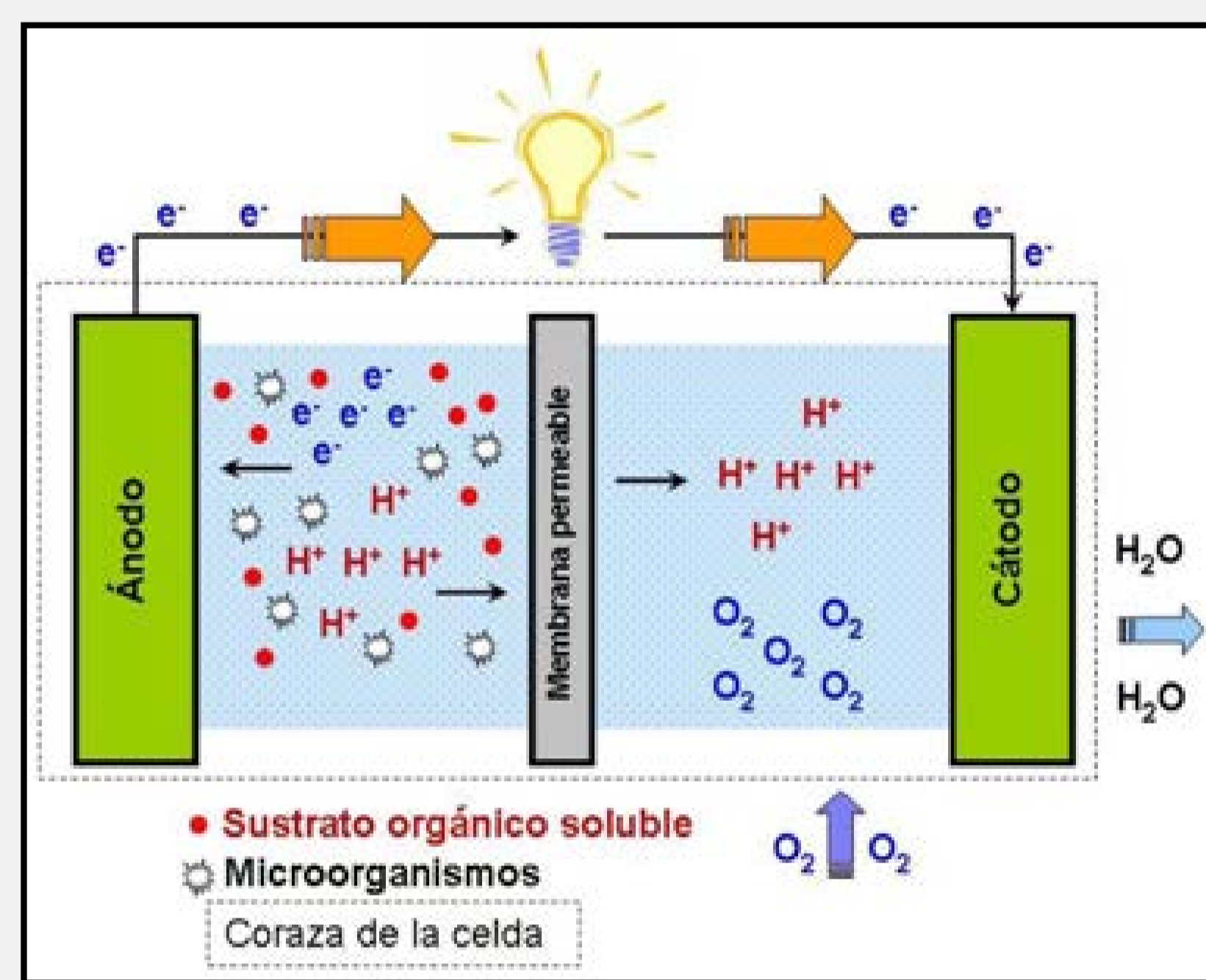


Figura 1 Celda de Combustible Microbiana

Metodología

Descripción del sistema: la cámara ánódica de una CCM tipo PEM, esta compuesta por un electrodo en el que crece una biopelícula, generando una corriente eléctrica. Existe difusión del sustrato a través de la biopelícula y finalmente los electrones son transferidos hacia la superficie del electrodo (Figura 1). La metodología de modelación empleada en este trabajo, se muestra en la Figura 2.

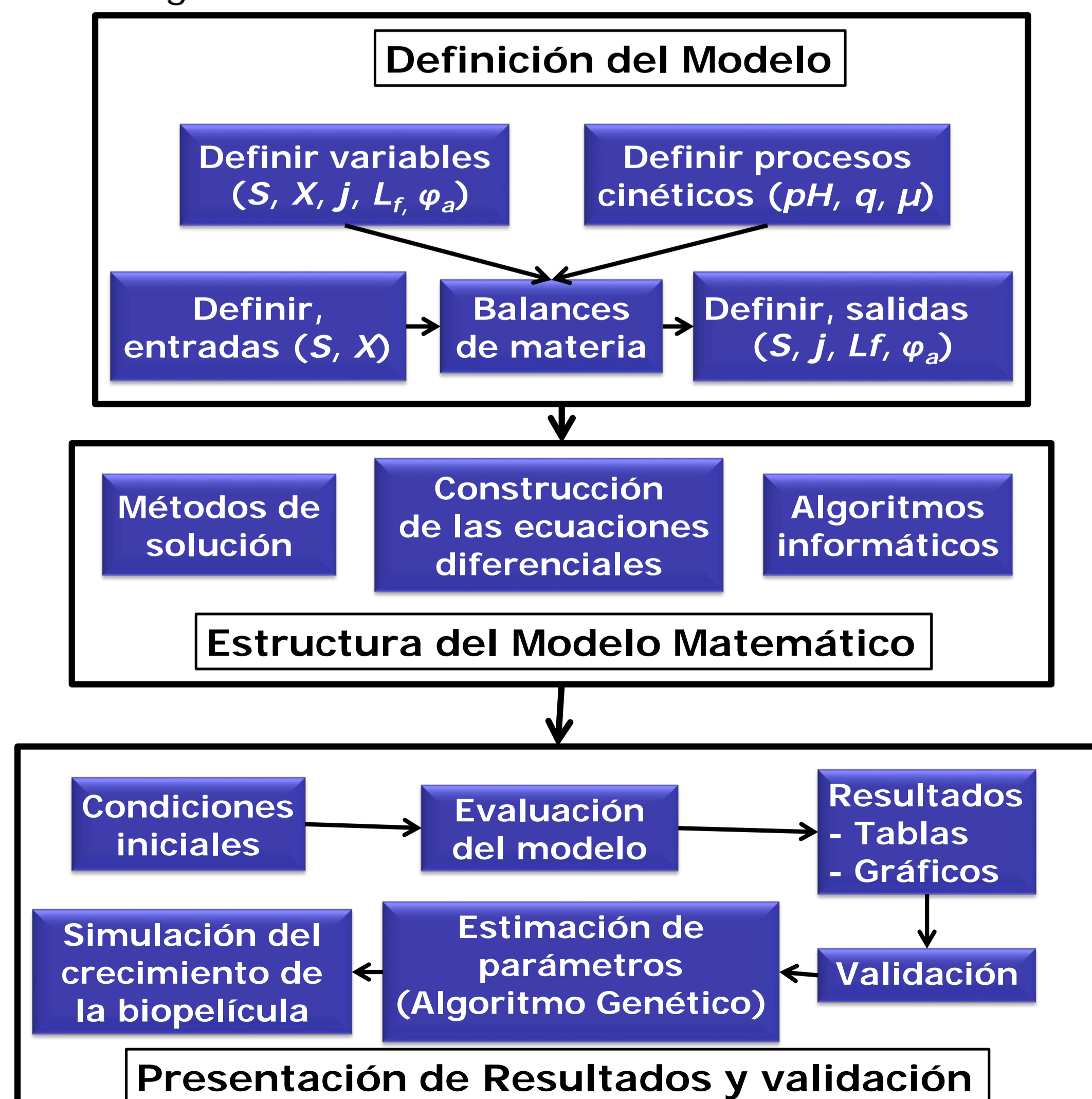


Figura 2. Metodología del proceso de modelación

Modelos matemáticos

Modelo del pH en función del consumo de sustrato

$$pH(t)^* = ae^{-bt} \cos(ct + d) - [1]$$

$$q(pH) = \frac{q_{max} \phi_a}{2} \left(1 + \cos\left(\frac{\pi}{W} (pH(t)^*)\right) \right) \left(\frac{S}{K_s + S} \right) - [2]$$

$$\frac{dX_a(t)}{dt} = q(pH)X_a(t) - k_d X_a - [3]$$

$$j = \mu_{max} \left(-\frac{1}{Y_{X/S}} \right) \frac{dX_a(t)}{dt} nFEC - [4]$$

Modelo de biopelícula

$$\frac{\partial \phi_a}{\partial t} + \frac{\partial(u\phi_a)}{\partial t} = Yq(pH) - r_{res} - r_{ina} \equiv \mu_a - [5]$$

$$\frac{\partial u}{\partial z} = \mu_a + \mu_i - [7] \rightarrow \frac{dL_f}{dt} = u(t, L_f) - b_{des} L_f - [8]$$

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} + \frac{\partial(u\phi_i)}{\partial t} = \frac{X_a}{X_i} r_{ina} \equiv \mu_i - [6]$$

$$D_s \left(\frac{\partial^2 S(z, t)}{\partial z^2} \right) = q(pH)X_a - [9]$$

pH^* = pH anódico, q = velocidad de consumo del sustrato, (ϕ_a, ϕ_i) = fracción volumétrica de biomasa activa e inactiva, L_f = espesor de la biopelícula, X_a = concentración de biomasa, S = concentración de sustrato, j = densidad de corriente eléctrica.

Resultados: Simulaciones numéricas

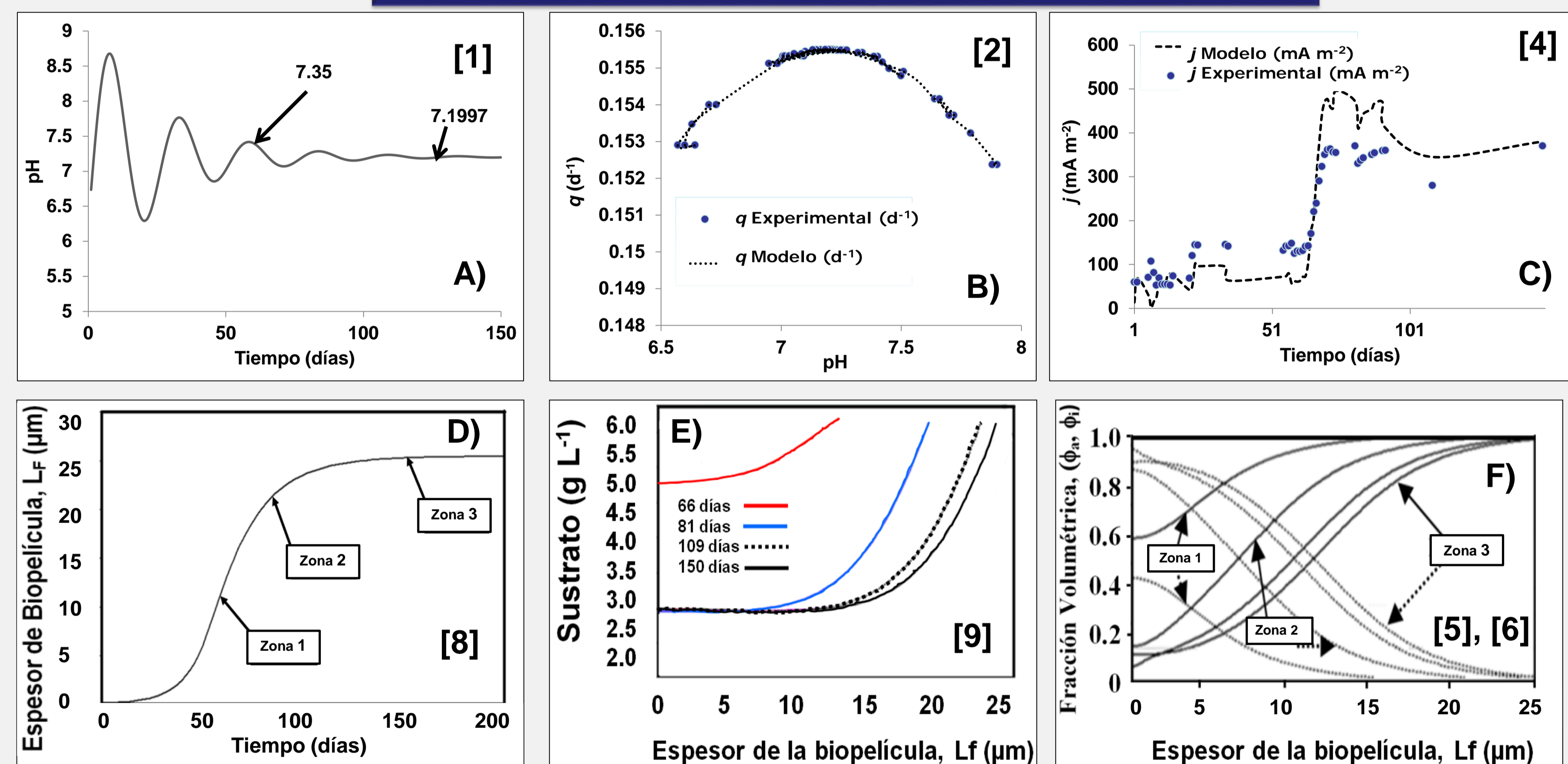


Figura 3. Simulaciones computacionales A) pH vs t, B) pH vs q_{max} , C) Densidad de corriente, D) Espesor de biopelícula con $b_{des} = 0.05, 0.1$ y 0.2 , E) gradientes de sustrato en la biopelícula y F) fracción de biomasa activa e inactiva.

Conclusiones

- El modelo matemático ajusta adecuadamente los datos experimentales de pH y densidad de corriente eléctrica.
- El modelo puede predecir el comportamiento de la cinética bacteriana bajo un amplio rango de pH, mientras que otros trabajos son únicamente exitosos bajo condiciones de pH constante.
- Los modelos propuestos en este trabajo, pueden servir de base para desarrollar modelos más completos que permitan obtener simulaciones más exactas a los datos experimentales.

Agradecimientos

Agradecemos al Centro de Investigación Científica de Yucatán (CICY), al Centro de investigación en materiales avanzados (CIMAV) y al CONACYT por la beca otorgada.

Referencias

1. Rabaey K and Willy V., (2005) Microbial fuel cells: novel biotechnology for energy generation, vol (23), no. 5, trends in biotechnology.
2. Logan BE, Hamelers B, Rozendal R, Schroder U, Keller J, Freguia S, Aelterman P, Verstraete W & Rabaey K (2006) Microbial fuel cells: methodology and technology. *Environ Sci Technol* 40: 5181–5192.
3. Picioreanu C, Head IM, Katuri KP, van Loosdrecht MCM & Scott K (2007) A computational model for biofilm-based microbial fuel cells. *Water Res* 41: 2921–2940.
4. Markus et al., Conduction-Based Modeling of the Biofilm Anode of a Microbial Fuel Cell, *Biotechnology and Bioengineering*, Vol. 98, No. 6, December 15, (2007).