

VALIDACIÓN ANALÍTICA Y EXPERIMENTAL DE UN SOFTWARE EXTRACTOR DE CAPACITANCIAS DE CÓDIGO ABIERTO

Fernando Amor; Martín Jamilis; Marcelo Haberman; Hernán De Battista

Instituto LEICI (UNLP-CONICET), Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de La Plata,
La Plata, Buenos Aires, Argentina, 1900. E-mail: fernando.amor@ext.ing.unlp.edu.ar

INTRODUCCIÓN

Este trabajo se halla enmarcado en un proyecto de desarrollo de instrumental de laboratorio para sensado de biomasa por medio de espectroscopía dieléctrica (ED). Resulta entonces una búsqueda de cimientos, sobre los cuáles se puedan ensayar en simulación distintas geometrías y configuraciones de electrodos. Para esto resulta indispensable contar con programas informáticos de diseño CAD, simuladores de efecto de campo eléctrico y aplicaciones para resolver matrices de capacitancia. Las características de *FasterCap* (FC) lo tornan candidato para abordar esta última cuestión. Es un programa versátil, potente, y que hereda las prestaciones y precisión de su antecesor, *FastCap2* [1].

Espectroscopía dieléctrica aplicada a medición de biomasa

La ED, caracterización de las propiedades dieléctricas del medio para con la frecuencia, puede emplearse como técnica de cuantificación de biomasa en procesos biotecnológicos [2]. Esta técnica es capaz de muestrear de manera *on-line* o *in-line*, de forma no destructiva y en tiempo real, permitiendo generar conjuntos de datos para monitoreo de tendencias. Como además la concentración de microorganismos es una variable relevante en la industria de bioprocesos, esto torna a la ED una herramienta compatible con estrategias de control capaces de cumplir con los lineamientos PAT [3].

Empleando ED se puede correlacionar una medida diferencial de capacidad para dos frecuencias específicas con la concentración de microorganismos en una solución [4].

La metodología tradicional de instrumentación de ED para con soluciones biológicas involucra mediciones con electrodos en contacto con el medio de cultivo (Figura 1a). Esto de por sí presenta dos desafíos importantes: la resolución del pequeño ángulo de fase entre las componentes real e imaginaria de la impedancia, y la polarización de los electrodos [5]. Si bien se han empleado celdas de medición con dos electrodos, las de cuatro ofrecen el atractivo de reducir el efecto de la polarización en la superficie de los electrodos de medición [6]. Esto se logra haciendo circular corriente eléctrica a través de dos de los electrodos y el medio, y midiendo la caída de potencial entre los otros dos. El circuito de la Figura 1c esquematiza esta configuración.

Aislar galvánicamente los electrodos del medio de cultivo en principio permite hacer despreciable el efecto de la polarización [7]. Si además se colocan en la pared externa del biorreactor, o por fuera de una cámara de medida en línea con el bioproceso, se relajan los requisitos mecánicos y biológicos propios del contacto directo con el producto [8]. Pero, eléctricamente, ahora se forma un capacitor entre los electrodos conductores externos, el material dieléctrico intermedio y el medio de cultivo interno (ver Figura 1b). La impedancia de este último, que es lo que se desea determinar, puede ser mucho menor a la de los electrodos [9]. Las capacidades de acoplamiento resultan comparables a las capacidades de entrada de los amplificadores y otras capacidades parásitas con el entorno [10]. Esto obliga a diseños especiales de amplificadores: en principio, de muy bajas capacidades de entrada y con un cuidadoso manejo de blindajes y electrodos de guarda. Las características requeridas para la instrumentación no invasiva de biomasa abren el

juego al desarrollo de circuitos *ad hoc* para la medición capacitiva de pequeños potenciales a través de altas impedancias de electrodo de medida. Bajo estas condiciones resulta sumamente práctico contar con una herramienta como FC, explicada a continuación, que se utilizará en instancias más avanzadas de la investigación para el cálculo de las capacitancias de dichos electrodos (y de parásitos) empleando distintas geometrías y materiales. Esto permitirá tener un modelo de instrumentación con más certidumbre, pudiendo dimensionar adecuadamente la electrónica de acondicionamiento de señal y acotar los errores de medición.

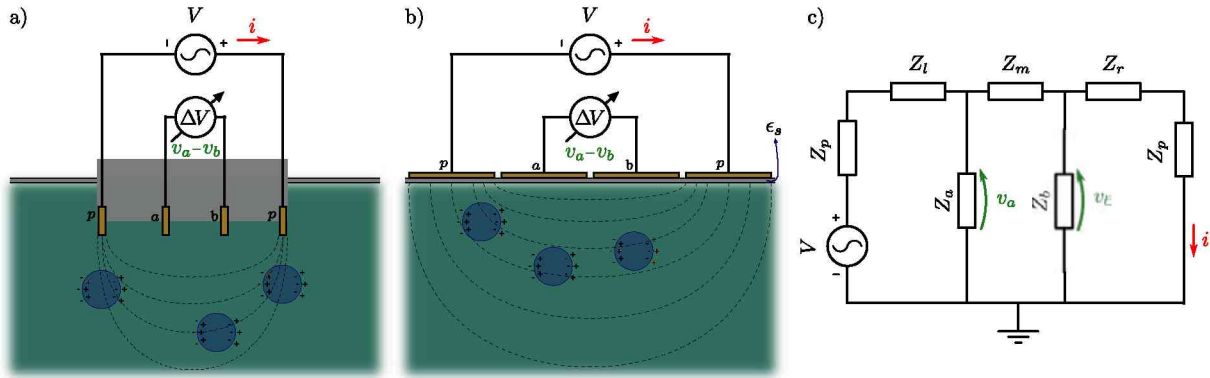


Figura 1: Diagramas que modelan sensores de ED con electrodos en contacto con el medio de cultivo (a), de acoplamiento capacitivo (b), y el circuito eléctrico equivalente de ambos esquemas de medición (c). Las sondas sumergidas requieren tanto de robustez frente a condiciones de proceso y esterilización, como de ser además biológicamente inactivas. Las capacitivas necesitan de un diseño cuidadoso del front end analógico, para compensar las capacidades formadas con el dieléctrico ϵ_s . En (c), se miden el diferencial de potencial complejo $v_a - v_b$ entre los electrodos de medición con altas impedancias modeladas por Z_a y Z_b , y la corriente compleja i que circula a través de los electrodos Z_p . Se conoce además la fase de la fuente de voltaje V empleada. Las impedancias Z_l , Z_m y Z_r representan porciones de la solución biológica.

FasterCap

FC es un software de código abierto capaz de realizar extracciones de matrices de capacitancia de superficies conductoras tridimensionales embebidas en múltiples regiones dieléctricas, como muestra la Figura 2 [11].

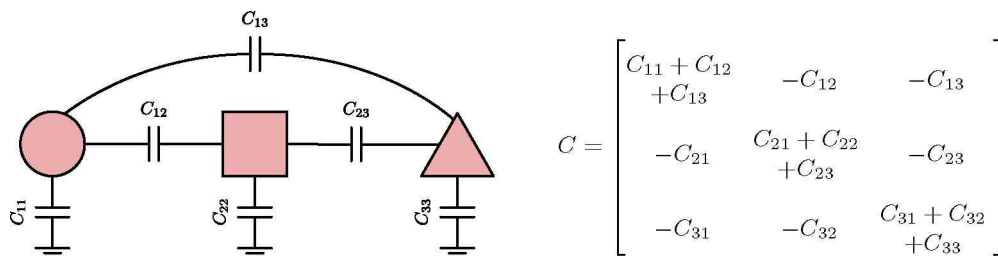


Figura 2: Diagrama que modela las capacidades mutuas y hacia el infinito (autocapacidades) de tres conductores, con su respectiva matriz de capacitancia de Maxwell.

El algoritmo de FC emplea un enfoque llamado formulación de carga equivalente: partiendo de la hipótesis de electrostática, los volúmenes de elementos conductores y dieléctricos se reducen a superficies de cargas estacionarias, que modelan las interfaces conductor-dieléctrico y dieléctrico-dieléctrico, y espacio vacío. Luego el problema es discretizado, segmentando estas superficies en N paneles triangulares con densidad de carga fija. Esto permite obtener un

sistema de ecuaciones lineales tamaño N . La resolución de este problema por vías tradicionales (eliminación de Gauss) involucra la inversión de una matriz tamaño $N \times N$, con costo computacional del orden N^3 . El algoritmo que emplea FC permite computar las matrices de capacitancia de una discretización del problema con una complejidad de NM pasos, siendo M la cantidad de conductores involucrados [12]. El programa es capaz de correr una simulación de forma no interactiva, desde una serie de archivos tipo lista de superficies y paneles coordinados y comandos de configuración, en una terminal Linux. Arroja como resultados principales la matriz de capacitancia de Maxwell del sistema provisto, y la discretización empleada para el resultado final, con el dato de la densidad de carga computada para cada panel.

PARTE EXPERIMENTAL

Interfaz en lenguaje *Python*

Dadas las características de FC, se creó un conjunto de *scripts* y clases en lenguaje *Python* para generar una capa de abstracción por sobre el programa. Esto permite trabajar en el entorno de código abierto multiplataforma *IDE* para programación científica en *Python*, *Spyder*. Las funcionalidades implementadas son, entre otras: generar superficies en 3D, cargar en memoria RAM y/o escribir a archivos en disco geometrías de elementos en formato FC, lanzar procesos Linux para correr FC, graficar en 3D las superficies y resultados. En particular, el poder automatizar las corridas de FC permite realizar barridos en frecuencia de simulaciones que involucran materiales dieléctricos con pérdidas.

Capacitores

Para permitir hacer una comparación de resultados numéricos de capacidad entre FC, mediciones experimentales y cálculos analíticos, se construyeron físicamente dos capacitores de geometrías sencillas. Ambos contaron con electrodos metálicos expuestos, capaces de entrar en contacto con diferentes dieléctricos, y electrodos de guarda. El capacitor de placas paralelas (CPP) empleado en los experimentos se construyó con placas del tipo para circuitos impresos, de material fibra de vidrio y dos caras de cobre. Para ensamblar el dispositivo, se emplearon dos separadores obtenidos por impresión 3D, como se muestra en la Figura 3a. El capacitor se conectó al LCR mediante cable coaxil y borneras BNC. Los conductores centrales de los cables se soldaron con estaño a las caras internas de las placas, definiendo los electrodos de medición; y las mallas a las caras externas, electrodos de guarda. Las dimensiones de las placas eran $50 \times 100 \text{ mm}$, con 1 mm de espesor. La separación entre electrodos de medición se fijó en 5 mm . El otro dispositivo construido fue un capacitor de superficies cilíndricas concéntricas (CSC). Como electrodos se emplearon un cilindro hueco de aluminio, y una varilla de acero inoxidable. También se ensabló el dispositivo con separadores generados por impresión 3D, Figura 3b. Se empalmaron mecánicamente los conductores centrales de dos cables coaxiales al cilindro y a la varilla, mediante tornillos y tuercas. Las mallas de los cables se conectaron eléctricamente con pinzas tipo cocodrilo a un electrodo de guarda hecho de papel aluminio forrando un tubo de cartón. El cilindro era de 246 mm de largo, $22,5 \text{ mm}$ de diámetro y $0,5 \text{ mm}$ de espesor. La varilla medía 410 mm de largo y $12,7 \text{ mm}$ de diámetro. Se tuvo cuidado que la guarda cubra enteramente al dispositivo, sin hacer cortocircuito con los electrodos.

Mediciones, simulaciones y cálculos efectuados

Se utilizó un medidor LCR de banco marca *Instek* modelo LCR-819 para efectuar las mediciones de capacitancia y conductividad. Este instrumento permite operar en un rango de frecuencias de 12 Hz a 100 kHz , con resoluciones en capacidad menores a 1 fF y en resistividad de $0,1 \text{ m}\Omega$. Posee cuatro terminales BNC para mediciones a dos o cuatro puntas. Se realizaron barridos en frecuencia en forma manual para cada capacitor, midiendo y registrando los valores de capacidad y resistividad. Como se emplearon dos materiales dieléctricos distintos en los capacitores, aire y agua bidestilada, los conjuntos de mediciones fueron cuatro. Previo a cada

barrido, se calibraron los valores de *offset* paramétricos a circuito abierto del instrumento, desconectando el dispositivo bajo medición. Luego se barrió el rango de frecuencias del LCR, tomando alrededor de cuatro muestras por década. Para todas las mediciones el voltaje impuesto por el instrumento fue seteado en 1,25 V, la velocidad de adquisición de datos en modo "FAST", circuito equivalente de tipo paralelo, y promediador en 5 muestras. Los datos obtenidos se cargaron a una PC para su posterior análisis. El valor de capacidad experimental se tomó como el promedio de las mediciones a las cuatro mayores frecuencias.

Ambos capacitores fueron recreados en CAD. Se definieron superficies conductoras planas para los electrodos de medición y de guarda. Las superficies cilíndricas se aproximaron con paneles planos unidos por sus lados más largos, como se aprecia en la Figura 3c. También se crearon superficies para delimitar los materiales dieléctricos. Los paneles en que se segmentaron las superficies fueron de relativamente gran tamaño, porque se empleó luego la función de autorefinamiento de malla en FC. Los procesos lanzados con FC se configuraron con los comandos ' $-a0,005'$ (tolerancia de corte al autorefinamiento de malla), ' $-d0,0005'$ (razón de agrupamiento de paneles para cómputo de carga equivalente), ' $-g'$ (empleo de esquema de elementos finitos de Galerkin), ' $-ps1024'$ (uso de preconditionador de dos niveles tamaño 1024). Las permitividades relativas del aire y agua bidestilada se consideraron $\epsilon_{ra_i} = 1$ y $\epsilon_{ra_b} = 80$ respectivamente. De las matrices de capacitancia resultantes, se tomó el valor de capacidad de los dispositivos como el promedio de las capacitancias mutuas entre los electrodos de medición.



Figura 3: (a) CPP construido, con separadores rojos también realizados en impresión 3D y cables coaxiales soldados a las placas. El dieléctrico se varió midiendo al aire o sumergiendo al dispositivo en una pequeña cuba plástica con líquido. (b) CSC físico, con soportes de plástico impresos en 3D y empalmes eléctricos de tuerca y tornillo. Su material dieléctrico entre electrodos se varió llenando de líquido o aire el espacio entre el eje y el cilindro hueco. (c) Capacitores replicados en CAD. Estas geometrías se ingresaron a FC. Se notan la aproximación de los cilindros por paneles rectangulares, y los paralelepípedos que modelan a las placas de circuito impreso del CPP.

Despreciando gradientes de concentración de cargas para los capacitores, dadas las dimensiones y características físicas de los mismos, sus valores de capacidad pueden calcularse analíticamente de manera sencilla mediante (1). Para el CPP, A es el área de las placas paralelas, y d su distancia de separación. En la fórmula del CSC, r_{ext} y r_{int} representan los radios de los cilindros concéntricos externo e interno respectivamente, y L la distancia de apantallamiento en sentido axial. ϵ_0 representa la permitividad del vacío en ambas ecuaciones, y ϵ_r la permitividad relativa del material dieléctrico entre electrodos.

$$C_{PP} = \epsilon_r \epsilon_0 \frac{A}{d}, \quad C_{SC} = \epsilon_r \epsilon_0 \frac{2\pi L}{\ln(r_{ext}/r_{int})} \quad (1)$$

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En la Tabla 1 se muestran los resultados de simulación, analíticos y experimentales para ambos capacitores. También puede visualizarse el error porcentual de cada valor analítico y experimental para con su contraparte simulada. Las mediciones con dieléctrico aire no

presentaron discrepancias significativas en capacidad y resistividad respecto a la frecuencia. Con agua bidestilada sí ocurrió esto, incrementándose ambas variables conforme se reducía la frecuencia. En las figuras 4a y 4b se observan estos fenómenos. El error del instrumento para las mediciones experimentales con agua bidestilada en altas frecuencias resultó de aproximadamente 2%. Si bien se observa un mayor error comparativo para las mediciones con agua bidestilada en la Tabla 1, estos porcentajes de error no se hallan muy lejanos al error propio del instrumento. En las mediciones con aire, los valores numéricos son prácticamente iguales. La forma de las curvas de capacidad versus frecuencia obtenidas en los experimentos con agua bidestilada pareciera indicar la presencia de algún fenómeno no modelado. Uno plausible según la literatura es el de polarización de los electrodos [13]. Al existir carga iónica libre en el agua (pudieron medirse resistencias relativamente bajas, ver figuras 4a y 4b), puede generarse la formación de una doble capa iónica en la superficie de los electrodos. Esto implica una caída abrupta localizada del potencial aplicado y por lo tanto una enorme polarización del material y una ausencia casi total de campo eléctrico en el medio a bajas frecuencias.

Tabla 1: Valores de capacidad obtenidos

	Sim.	Anal. - Error_{sim.}	Exp. - Error_{sim.}
CPP_{agua}	716 pF	708,32 pF - 1,1%	674 pF - 5,9%
CPP_{aire}	8,97 pF	8,85 pF - 1,3%	8,84 pF - 1,4%
CSC_{agua}	1,92 nF	1,91 nF - 0,5%	1,76 nF - 8,3%
CSC_{aire}	24,37 pF	23,93 pF - 1,8%	24,7 pF - 1,4%

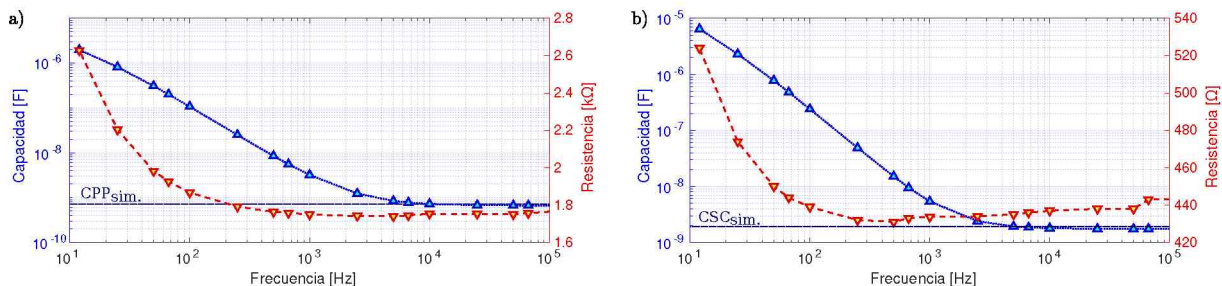


Figura 4: Valores experimentales de ensayos con agua bidestilada. (a) CPP, (b) CSC. Se muestran también los valores de capacidad obtenidos por simulación.

CONCLUSIONES

Pudo validarse el software FC como herramienta de cómputo de capacitancias entre electrodos de medición con guarda. Los resultados numéricos obtenidos y su poca variación entre simulación, realidad e idealidad sostienen esto. También se ganó una valorable experiencia en el conocimiento del algoritmo del programa, sus parámetros y la forma de utilizarlo para poder en un futuro simular modelos tridimensionales de configuraciones de electrodos para desarrollar sensores capacitivos externos capaces de cuantificar biomasa.

AGRADECIMIENTOS

Este trabajo fue financiado por los proyectos PPID 2020/I014 y PPID 2020/I015 de la UNLP, PICT 2017-3211 y PICT 2019-3476 de Agencia I+D+i, y PUE-0053 de CONICET.

BIBLIOGRAFÍA

- [1] Nabors, K. y White, J. (1992) Multipole-accelerated 3-D capacitance extraction algorithms for structures with conformal dielectrics. IEEE Transactions on Circuits and Systems - I: Fundamental Theory and Applications, Vol. 39, No. 11.

- [2] Davey, C., Davey, H., Kell, D. y Todd, R. (1993). Introduction to the dielectric estimation of cellular biomass in real time, with special emphasis on measurement at high volume fractions. *Analytica Chimica Acta*, 279, pp. 155-161. Elsevier.
- [3] Fernandes, J., Currie, J., Ramer, K., Zhang, A. (2019). Development of capacitance tools: at-Line method for assessing biomass of mammalian cell culture and fixed cell calibration standard. *Biotechnol. J.*, 14, 1800283. DOI: 10.1002/biot.201800283.
- [4] Yardley, J., Kell, D., Barrett, J. y Davey, C. (2000). On-line, real-time measurements of cellular biomass using dielectric spectroscopy. *Biotechnology & genetic engineering reviews*. 17. Taylor & Francis, pp. 3-35. 10.1080/02648725.2000.10647986.
- [5] Mazzeo, B. y Flewitt, A. (2007). Two- and four-electrode, wide-bandwidth, dielectric spectrometer for conductive liquids: Theory, limitations, and experiment. *Journal of Applied Physics*, 102, 104106. DOI: 10.1063/1.2815666.
- [6] Mazzeo, B. (2009). Parasitic capacitance influence of potential-sensing electrodes on four-electrode liquid impedance measurements. *Journal of Applied Physics*, 105, 094106. DOI: 10.1063/1.3124365.
- [7] Hoffmann, M., et al. (2005). Galvanic decoupled sensor for monitoring biomass concentration during fermentation processes. *Sensors and Actuators B*, 111-112. pp. 370-375. Elsevier. DOI: 10.1016/j.snb.2005.03.037.
- [8] Kiviharju, K., Salonen, K., Moilanen, U., Eerikäinen, T. (2008). Biomass measurement online: the performance of in situ measurements and software sensors. *J. Ind. Microbiol. Biotechnol.*, 35, pp.657-665. Springer. DOI: 10.1007/s10295-008-0346-5
- [9] Reinecke, T., et al. (2017). Continuous noninvasive monitoring of cell growth in disposable bioreactors. *Sensors and Actuators B*, 251. pp. 1009–1017. Elsevier. DOI: 10.1016/j.snb.2017.05.111.
- [10] Pallas-Areny, R., Aliau-Bonet, C. (2014). Effects of stray capacitance to ground in bipolar water impedance measurements based on capacitive electrodes. *XXI IMEKO World Congress - Full Papers*. Praga. ISBN: 978-80-01-05793-3
- [11] Di Lorenzo, E. (2013). The treatment of dielectrics in fasterCap [White Paper]. *FastFieldSolvers S.R.L.*. https://www.fastfieldsolvers.com/Papers/The_Treatment_of_Dielectrics_in_FasterCap_WP130527_R01.pdf
- [12] Di Lorenzo, E. (2020). The Maxwell capacitance matrix [White Paper]. *FastFieldSolvers S.R.L.*. https://www.fastfieldsolvers.com/Papers/The_Maxwell_Capacitance_Matrix_WP110301_R02.pdf
- [13] Ishai, P., Talary, M., Caduff, A., Levy, E. y Feldman, Y. (2013). Electrode polarization in dielectric measurements: a review. *Measurement Science and Technology*. 24. 102001-21. IOP Publishing. 10.1088/0957-0233/24/10/102001.