

# Biochemische Ingenieurstechnieken

## Taak MATLAB

Prof. R. Willaert

Spanoghe Wouter

3<sup>e</sup> Bachelor

Academiejaar 2011-2012

## Inhoudsopgave

1.	Oefening 5.4 Batchgroei met productvorming .....	3
1.1	Balansen.....	3
1.2	Gebruikte code .....	3
1.3	Resultaat .....	4
2.	Oefening 5.5 Fed-batchfermentatie .....	5
2.1	Balansen.....	5
2.2	Gebruikte code .....	5
2.3	Resultaat .....	6
3.	Oefening 5.6 De chemostaat .....	7
3.1	Balansen.....	7
3.2	Gebruikte code .....	7
3.3	Resultaat .....	8
4.	Oefening 5.7 Continue bioreactor met celrecyclage .....	9
4.1	Balansen.....	9
4.2	Gebruikte code .....	10
4.3	Resultaat .....	12
5.	Oefening 5.8 Enzymkinetiek .....	14
5.1	Balansen.....	14
5.2	Gebruikte code .....	14
5.3	Resultaat .....	16
6.	Oefening 5.9 Populatiedynamica van een roofdier-prooi-systeem.....	18
6.1	Balansen.....	18
6.2	Gebruikte code .....	18
6.3	Resultaat .....	20
7.	Oefening 5.10 Nitrificatie in een actief-slibproces.....	21
7.1	Balansen.....	21
7.2	Gebruikte code .....	22
7.3	Resultaat .....	24

## 1. Oefening 5.4 Batchgroei met productvorming

We berekenen de biomassa-, substraat- en productconcentratie gedurende een batchfermentatie en dit voor een periode van 30 uur. Dit werd gedaan aan de hand van volgende vergelijkingen.

### 1.1 Balansen

Substraat:  $\frac{dS}{dt} = - \frac{\mu X}{Y_{XS}}$

Product:  $\frac{dP}{dt} = (k_1 + k_2 \mu) X$

Biomassa:  $\frac{dX}{dt} = \mu X$

met  $\mu = \mu_{max} \frac{S}{K_S + S}$

### 1.2 Gebruikte code

```
%initiele condities
y0=[0.1 20 0]
%Totale fermentatieduur
tspan=[0 30]
%solver oproepen
[t y]=ode45(@oef4_vgl,tspan,y0);
%resultaat plotten
plot(t,y(:,1),'b',t,y(:,2),'r',t,y(:,3),'g')
xlabel('Tijd (h)')
ylabel('Concentratie (kg/m^3)')
legend('Biomassa','Substraat','Product')
```

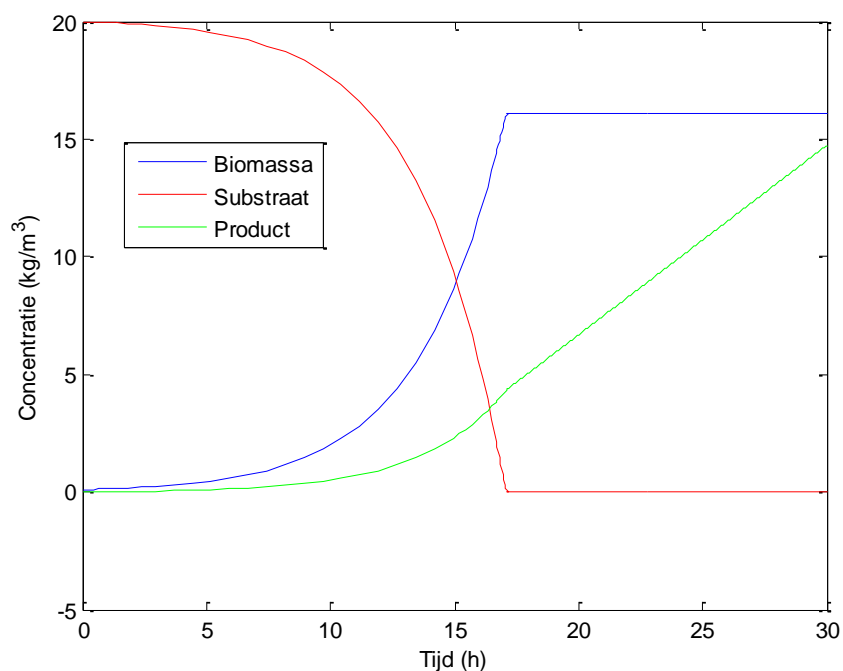
```
function ydot = oef4_vgl( t,y )
%y(1) is X, y(2) is S, y(3) is P
%
umax=0.3;
Ks=0.1;
k1=0.05;
k2=0.1;
Yxs=0.8;

X=y(1);
S=y(2);
P=y(3);
ydot=[umax*S/(Ks+S)*X
      -umax*S/(Ks+S)*X/Yxs
      (k1+k2*umax*S/(Ks+S))*X];
end
```

### 1.3 Resultaat

Als resultaat bekomen we volgende grafiek. Zoals op de grafiek te zien is, zal de biomassa exponentieel toenemen door het verbruik van substraat. Dit maakt dat het substraat zelf ook exponentieel afneemt (zelfs iets sneller). Door de exponentiële toename van de biomassa is er aanvankelijk ook een exponentiële producttoename, maar deze schakelt over naar een lineaire groei eens al het substraat is opgebruikt. Op dit punt zal er geen toename meer zijn van biomassa en de nu constante hoeveelheid biomassa zal dus voor een lineaire producttoename zorgen aangezien de specifieke groeisnelheid 0 wordt.

$$\frac{dP}{dt} = k_1 X$$



Figuur 1: Verloop van biomassa-, substraat- en productconcentratie gedurende de batchfermentatie

## 2. Oefening 5.5 Fed-batchfermentatie

Bij deze oefening zal een fed-batchfermentatie worden gesimuleerd. Gedurende de eerste 22,5 uur zal de fermentor opereren als een batchfermentor en na deze periode wordt er overgeschakeld op een fed-batchfermentatie. De totale fermentatieduur bedraagt 100 uur.

### 2.1 Balansen

$$\text{Substraat: } \frac{dS}{dt} = (S_f - S) \frac{F}{V} - \frac{\mu X}{Y_{XS}}$$

$$\text{Product: } \frac{dP}{dt} = (k_1 + k_2 \mu) X - P \frac{F}{V}$$

$$\text{Biomassa: } \frac{dX}{dt} = \mu X - X \frac{F}{V}$$

$$\text{Volume: } \frac{dV}{dt} = F$$

$$\text{met } \mu = \mu_{\max} \frac{S}{K_S + S}$$

### 2.2 Gebruikte code

```
%initiele condities
y0=[0.01 0 10 1];
%tijdsduur
tspan=[0 100];
%solver oproepen
[t y]=ode45(@oef5_vgl,tspan,y0) ;
%resultaat plotten
plot(t,y(:,1),'b',t,y(:,2),'g',t,y(:,3),'r')
xlabel('Tijd (u)')
ylabel('Fed-batchfermentatie (kg/m^3)')
legend('Biomassa','Product','Substraat')

function [ ydot ] = oef5_vgl(t,y)

%umax=0.3; Ks= 0.1; k1= 0.03; k2= 0.08, Yxs= 0.8
%F=0 voor batchfermentatie; F=1.5 voor fed-batchfermentatie
%Sf=10
X=y(1);
P=y(2);
S=y(3);
V=y(4);
```

```

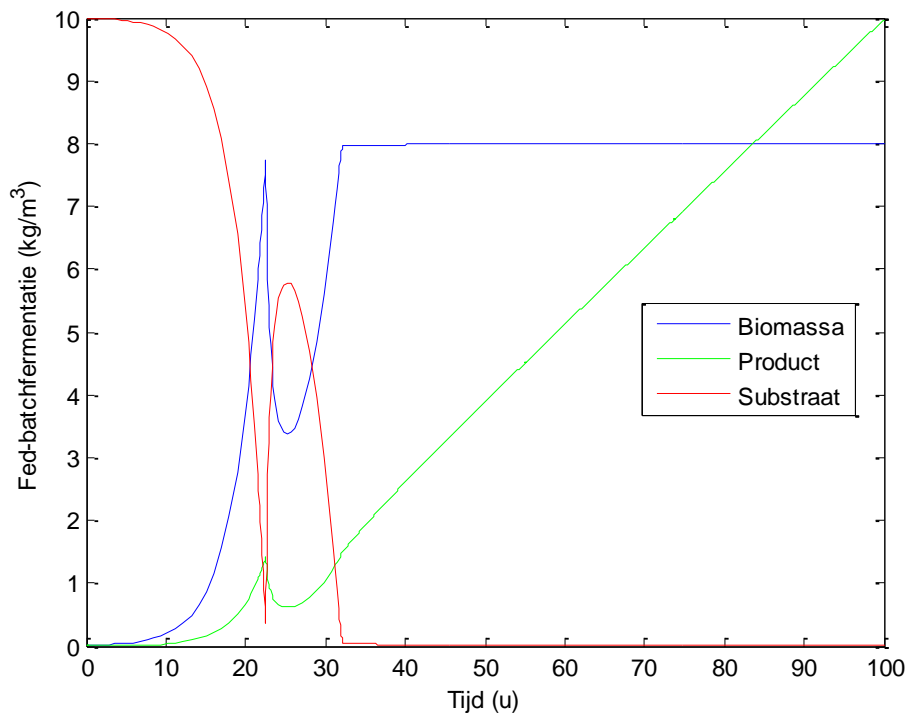
if t<22.5;
    ydot=[ (0.3*(S/(0.1+S))*X)
           (0.03+0.08*0.3*(S/(0.1+S)))*X
           (-0.3*(S/(0.1+S))*X)/0.8
           0];

else t>22.5;
    ydot=[ (0.3*(S/(0.1+S))*X)-(X*(1.5/V))
           ((0.03+0.08*0.3*(S/(0.1+S)))*X)-(P*(1.5/V))
           (10*(1.5/V))-((0.3*(S/(0.1+S))*X)/0.8)-(S*(1.5/V))
           1.5];
end

```

## 2.3 Resultaat

Op de grafiek is duidelijk te zien dat er aanvankelijk eenzelfde verloop is zoals bij oefening 5.4. Het substraat wordt verbruikt door de biomassa tot vorming van product. Na 22,5 uur wordt er dan overgeschakeld op een fed-batchfermentatie en dit is ook te zien op de grafiek.



**Figuur 2: Verloop van biomassa-, substraat- en productconcentratie gedurende de batch- en fed-batchfermentatie**

Door het toevoegen van extra substraat worden de biomassa en het product verdund door het toegenomen volume in het reactorvat. Zo zien we dat de concentratie aan substraat even terug stijgt en zowel de concentratie aan biomassa als die van product even daalt. Nu er terug een grote hoeveelheid substraat beschikbaar is, zal de biomassa terug exponentieel beginnen toenemen net als het product. Dit zal er uiteindelijk voor zorgen dat er een *steady-state* wordt bereikt waarbij het toegevoegd substraat direct wordt verbruikt door de biomassa. De biomassaconcentratie zal vanaf dat moment constant blijven en de producttoename wordt lineair. Een meer geconcentreerde substraattoevoeging kan de verdunning deels tegengaan.

### 3. Oefening 5.6 De chemostaat

Tijdens deze oefening wordt er met een continue bioreactor of chemostaat gewerkt die wordt gebruikt om product aan te maken met behulp van groeiende microbiële cellen. De eerste 5 uur van de fermentatie blijft de dilutiesnelheid 0 (transiënte opstart) wat overeenkomt met een batchfermentatie. Vanaf dan wordt er nog 55 uur gewerkt met een CSTR bij *steady-state* condities.

#### 3.1 Balansen

Substraat:  $\frac{dS}{dt} = D (S_f - S) - \frac{\mu X}{Y_{XS}}$

Product:  $\frac{dP}{dt} = -D P + (k_1 + \mu k_2) X$

Biomassa:  $\frac{dX}{dt} = (\mu - D)X$

met  $\mu = \mu_{\max} \frac{S}{K_S + S}$

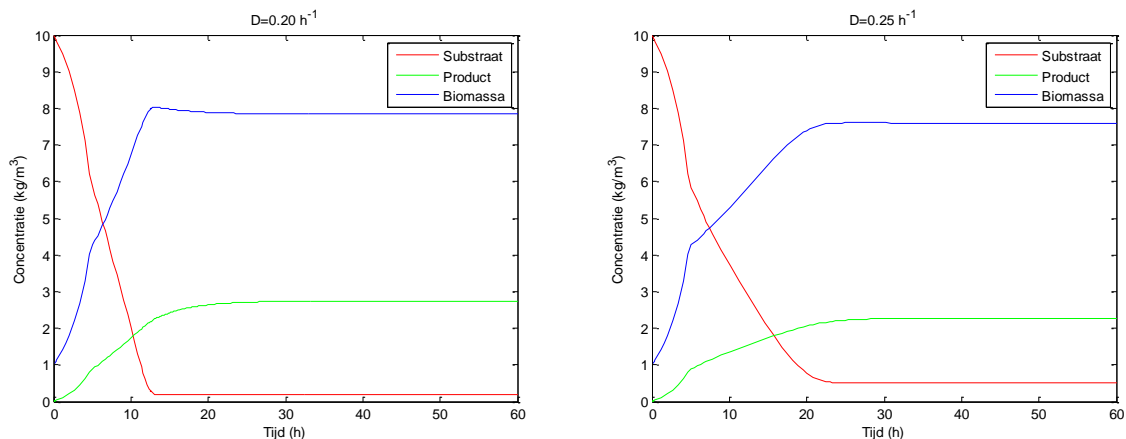
#### 3.2 Gebruikte code

```
%initiele condities
y0=[10 0 1];
%totale tijdsperiode
tspan=[0 60];
%solver oproepen
[t y]=ode45(@oef6_vgl, tspan,y0);
%resultaat plotten
plot(t,y(:,1),'r',t,y(:,2),'g',t,y(:,3),'b')
xlabel('Tijd (h)')
ylabel('Concentratie (kg/m^3)')
legend('Substraat','Product','Biomassa')
```

```
function ydot = oef6_vgl( t,y )
%t>5 D=0; t>5 D=0.20; 0.25; 0.30; 0.35
umax=0.3;
Ks=0.1;
k1=0.05;
k2=0.1;
Yxs=0.8;
Sf=10;
S=y(1);
P=y(2);
X=y(3);
if t<5
    D=0;
else
    D=0.20;
end
ydot=[D*(Sf-S)-umax*S/(Ks+S)*X/Yxs
      -D*P+(k1+k2*umax*S/(Ks+S))*X
      (umax*S/(Ks+S)-D)*X];
```

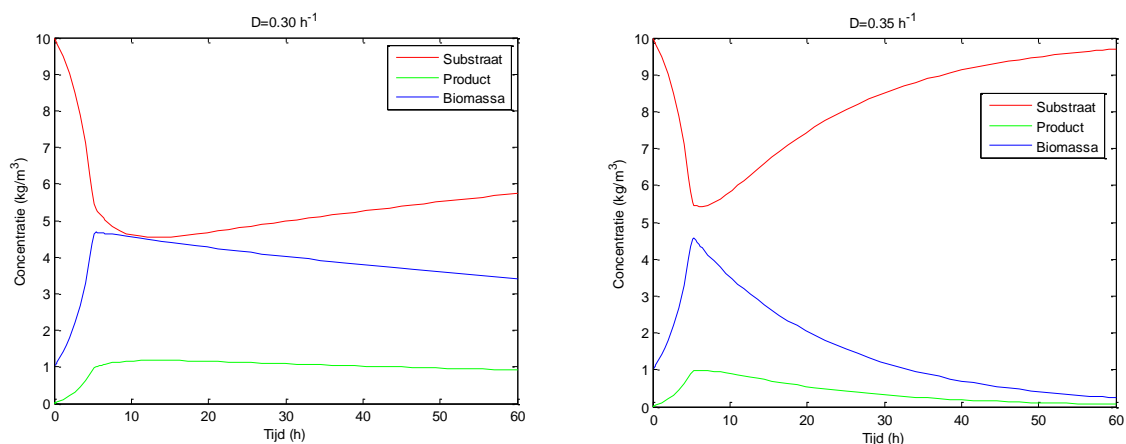
### 3.3 Resultaat

Het verloop van de fermentatie werd voor vier verschillende dilutiesnelheden berekend. Op elke grafiek is te zien dat de eerste 5 uur een batchfermentatie wordt gebruikt. Op de eerste grafiek is het duidelijk dat de *steady-state* zeer snel wordt bereikt. De biomassaconcentratie is er ook hoog in vergelijking met de andere grafieken, dit wil dus zeggen dat er bij deze dilutiesnelheid genoeg substraat wordt aangevoerd om de biomassa te onderhouden. Dit betekent eveneens dat de biomassa niet te snel uit het reactorvat wordt gespoeld en de productconcentratie hierdoor relatief hoog is omdat de biomassa de tijd heeft om het product te vormen.



Figuur 3: Verloop van biomassa-, substraat- en productconcentratie in de continue bioreactor bij  $D=0.20$  en  $D=0.25$

Op de tweede grafiek is te zien dat wanneer de dilutiesnelheid wordt verhoogd, de biomassa sneller uit het reactorvat zal verdwijnen. Dit zorgt ervoor dat niet al het substraat wordt verbruikt en er relatief minder product wordt gevormd.



Figuur 4: Verloop van biomassa-, substraat- en productconcentratie in de continue bioreactor bij  $D=0.30$  en  $D=0.35$

Bij de overige 2 grafieken kan men zien dat door de te hoge dilutiesnelheden de biomassa te snel uit het reactorvat wordt gespoeld waardoor het substraat zal beginnen opstapelen in het reactorvat. Dit zal ervoor zorgen dat er zeer weinig product wordt aangemaakt en de fermentatie heel sterk daalt in efficiëntie.

Het is dus duidelijk dat de dilutiesnelheid ( $D=0.20 \text{ h}^{-1}$ ) bij de eerste grafiek de beste is.



## 4. Oefening 5.7 Continue bioreactor met celrecyclage

Voor de continue productie van melkzuur wordt een 2-stapsmembraanrecyclebioreactor gebruikt. Dit heeft te maken met het feit dat er productinhibitie optreedt wanneer het substraat (glucose) wordt gefermenteerd tot melkzuur.

### 4.1 Balansen

$$\mu = \mu_{\max} \frac{S}{K_S + S} \frac{K_P}{K_P + P}$$

$$k_d = k_{d0} (1 + a P)$$

$$r_S = \frac{\mu}{\gamma_S + \mu \delta_S}$$

$$r_P = \frac{\mu}{\gamma_P + \mu \delta_P}$$

$$D = \frac{F}{V}$$

#### Reactor 1

Totale Biomassa:  $\frac{dX_{tot,1}}{dt} = -B_1 X_{tot,1} D_1 + \mu_1 X_1$

Levende Biomassa:  $\frac{dX_1}{dt} = -B_1 X_1 D_1 + \mu_1 X_1 - k_{d1} X_1$

Substraat:  $\frac{dS}{dt} = D_1 S_{f1} - B_1 D_1 S_1 - (1 - B_1) D_1 S_1 - r_{S1} X_1$

Product:  $\frac{dP}{dt} = D_1 P_{f1} - D_1 P_1 + r_{P1} X_1$

#### Reactor 2

Totale Biomassa:  $\frac{dX_{tot,2}}{dt} = -B_2 X_{tot,2} D_2 + \mu_2 X_2 + B_1 D_2 X_{tot,1}$

Levende Biomassa:  $\frac{dX_2}{dt} = -B_2 X_2 D_2 + \mu_2 X_2 - k_{d2} X_2 + B_1 D_2 X_1$

Substraat:  $\frac{dS}{dt} = D_2 S_{f2} + \frac{F_1 S_1 B_1}{V_2} - (B_1 F_1 + F_2) \frac{S_2}{V_2} - r_{S2} X_2$

Product:  $\frac{dP}{dt} = D_2 P_{f2} + \frac{F_1 P_1 B_1}{V_2} - (B_1 F_1 + F_2) \frac{P_2}{V_2} - r_{P2} X_2$

## 4.2 Gebruikte code

```
%reactor 1
%initiele condities
y0=[0.01 0.01 30 0 0 0 30 0];
%Totale tijdspanne
tspan=[0 40];
%solver oproepen
[t y]=ode45(@oef7_vg1,tspan,y0);
%resultaat plotten
plot(t,y(:,1),'b',t,y(:,2),'c',t,y(:,3),'r',t,y(:,4),'g')
xlabel('Tijd (h)')
ylabel('Concentratie (kg/m^3)')
legend('Totale biomassa','Levende biomassa','Substraat','Product')
title('Reactor 1')

%reactor 2
%initiele condities
y0=[0.01 0.01 30 0 0 0 30 0];
%Totale tijdspanne
tspan=[0 40];
%solver oproepen
[t y]=ode45(@oef7_vg1,tspan,y0);
%resultaat plotten
plot(t,y(:,5),'b',t,y(:,6),'c',t,y(:,7),'r',t,y(:,8),'g')
xlabel('Tijd (h)')
ylabel('Concentratie (kg/m^3)')
legend('Totale biomassa','Levende biomassa','Substraat','Product')
title('Reactor 2')

function [ ydot ] = oef7_vg1( t,y )

umax=1.6;
Ks=0.22;
Kp=9.5;
kd0=0.08;
a=0.0065;
ys=0.13;
deltas=0.128;
yp=0.2;
deltap=0.04;
V1=1;
F1=1.5;
D1=1.5;
B1=0.3;
V2=V1;
F2=F1;
B2=B1;
Pf1=0;
Pf2=0;
Sf1=30;
Sf2=30;
D1=F1/V1;
D2=F2/V2;

Xtot1=y(1);
X1=y(2);
```

```

S1=y(3);
P1=y(4);

Xtot2=y(5);
X2=y(6);
S2=y(7);
P2=y(8);

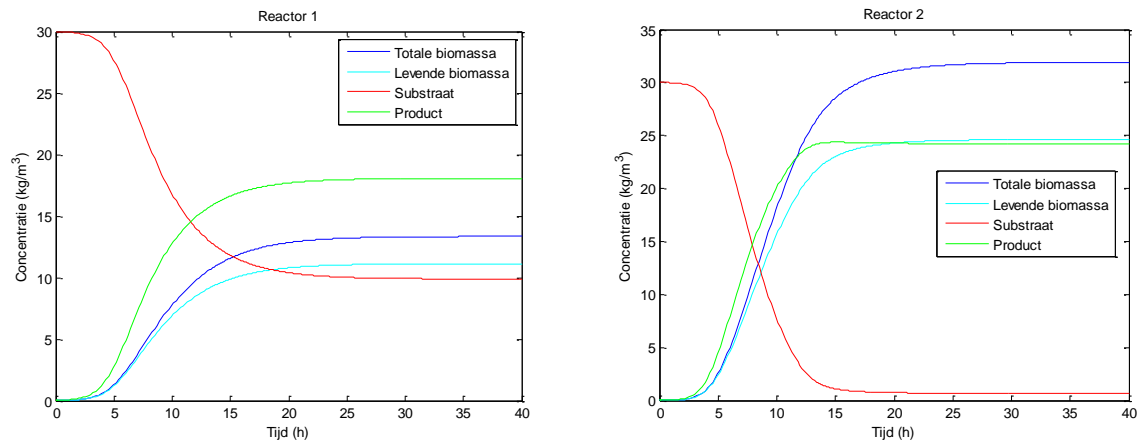
kd1=kd0*(1+a*P1);
kd2=kd0*(1+a*P2);
u1=umax*S1/(Ks+S1)*Kp/(Kp+P1);
u2=umax*S2/(Ks+S2)*Kp/(Kp+P2);
rs1=u1/(ys+deltas*u1);
rs2=u2/(ys+deltas*u2);
rp1=u1/(yp+deltap*u1);
rp2=u2/(yp+deltap*u2);

ydot=[-B1*Xtot1*D1+u1*X1
      -B1*X1*D1+u1*X1-kd1*X1
      D1*Sf1-D1*S1-rs1*X1
      D1*Pf1-D1*P1+rp1*X1
      -B2*Xtot2*D2+u2*X2+B1*D2*Xtot1
      -B2*X2*D2+u2*X2+B1*D2*X1-kd2*X2
      D2*Sf2+F1*S1*B1/V2-(B1*F1+F2)*S2/V2-rs2*X2
      D2*Pf2+F1*P1*B1/V2-(B1*F1+F2)*P2/V2+rp2*X2];
end

```

### 4.3 Resultaat

Het verloop van de verschillende concentraties in beide reactoren werd bepaald gedurende 40 uur. Vermits we hier te maken hebben met productinhibitie verwachten we een afsterfte van biomassa. We kunnen dit probleem enigszins verhelpen door te werken met een 2-trapssysteem om de productiviteit te verhogen. De resultaten voor reactor 1 en 2 ziet u in onderstaande grafieken.

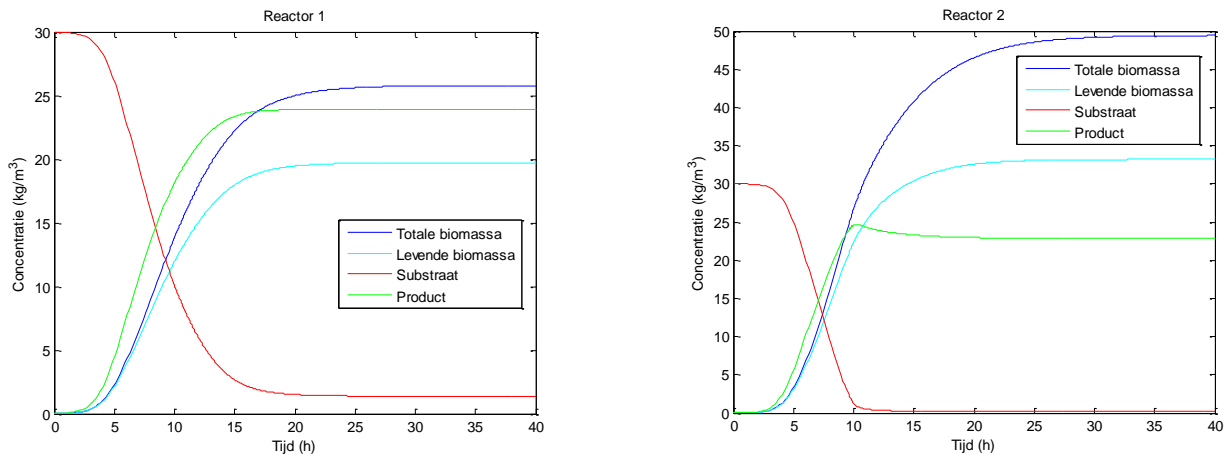


Figuur 5: Verloop van de concentraties in reactor 1 en 2 met  $B=0,3$

Het is duidelijk dat de concentraties niet gelijklopen in de reactoren. In reactor 1 wordt niet al het substraat verbruikt en wordt het verbruikte substraat vooral aangewend om product te vormen. De concentratie van de biomassa is hier dan ook relatief laag.

In reactor 2 wordt dan weer zo goed als al het substraat verbruikt en wordt het vooral aangewend om de biomassa te laten toenemen. Wel moet erbij vermeld worden dat er ook nog rekening moet worden gehouden met de aanvoer van biomassa, substraat en product uit reactor 1. Zowel de biomassa- als de productconcentratie liggen relatief hoger dan in reactor 1.

Wanneer we de *bleed ratio* nu verlagen van 0,3 naar 0,2 zien we dat het verloop van de verschillende concentraties volledig anders ligt.



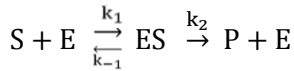
**Figuur 6: Verloop van de concentraties in reactor 1 en 2 met  $B=0,2$**

In reactor 1 wordt er nu meer substraat verbruikt omdat er nu minder biomassa naar reactor 2 vloeit. Ook dit zien we op de grafiek. Vermits er nu relatief meer biomassa in reactor 1 zit dan bij de andere *bleed ratio*, ligt ook de productconcentratie in reactor 1 hoger dan bij  $B=0,3$ .

In reactor 2 ligt de biomassaconcentratie ook hoger dan bij de eerste *bleed ratio* van 0,3. Het substraat wordt ook iets sneller verbruikt, maar er wordt relatief minder product gevormd. Het valt ook op dat er een grotere afsterfte is van biomassa in beide reactoren.

## 5. Oefening 5.8 Enzymkinetiek

Een enzym E katalyseert de omzetting van een substraat S om een product P te vormen via de vorming van een intermediair complex ES. Dit ziet er als volgt uit:



Eerst zullen we kijken naar het verloop van een batchreactie, daarna doen we hetzelfde voor Michaelis-Menten-kinetiek met *quasi-steady state* condities zonder intermediair complex en uiteindelijk nog een keer maar dan met enzymdeactivatie. Deze modellen werden bekeken gedurende een periode van telkens 1000 seconden.

### 5.1 Balansen

Substraat:  $\frac{d[S]}{dt} = -k_1 [S][E] + k_{-1} [ES]$

$$\frac{d[S]}{dt} = -v_{max} \frac{S}{K_m + S} \quad (\text{Michaelis-Menten-kinetiek } quasi\text{-steady state})$$

$$\frac{d[S]}{dt} = -v_{max} \frac{e^{-k_d t} S}{K_m + S} \quad (\text{Michaelis-Menten-kinetiek met enzymdeactivatie})$$

Enzym:  $\frac{d[E]}{dt} = -k_1 [S][E] + k_{-1} [ES] + k_2 [ES]$

Intermediair complex:  $\frac{d[ES]}{dt} = k_1 [S][E] - k_{-1} [ES] - k_2 [ES]$

Product:  $\frac{d[P]}{dt} = k_2 [ES]$

### 5.2 Gebruikte code

```
%oef 8a
%initiele condities
y0=[1 0.1 0 0];
%Totale tijdspanne
tspan=[0 1000];
%solver oproepen
[t y]=ode45(@oef8_vgl,tspan,y0);
%resultaat plotten
plot(t,y(:,1),'r',t,y(:,2),'b',t,y(:,3),'y',t,y(:,4),'g')
xlabel('Tijd (s)')
ylabel('Concentratie (μM)')
legend('S','E','ES','P')
```

```

function [ ydot ] = oef8_vgl( t,y )

k1=0.1;
k_1=0.1;
k2=0.05;

S=y(1);
E=y(2);
ES=y(3);
P=y(4);

ydot=[-k1*S*E+k_1*ES
      -k1*S*E+k_1*ES+k2*ES
      k1*S*E-k_1*ES-k2*ES
      k2*ES];
end

%oef 8
%initiele condities
y0=[1 0.1 0 0];
%Totale tijdsperiode
tspan=[0 1000];
%solver oproepen
[t y]=ode45(@oef8b_vgl,tspan,y0);
%resultaat plotten
plot(t,y(:,1),'r',t,y(:,4),'g')
xlabel('Tijd (s)')
ylabel('Concentratie (μM)')
legend('S','P')

function [ ydot ] = oef8b_vgl( t,y )

k1=0.1;
k_1=0.1;
k2=0.05;
E0=0.1;

vmax=k2*E0;
Km=(k_1+k2)/k1;

S=y(1);
E=y(2);
ES=y(3);
P=y(4);

ydot=[-vmax*S/(Km+S)
      0
      0
      vmax*S/(Km+S)];
end

%oef 8c
%initiele condities
y0=[1 0.1 0 0];
%Totale tijdsperiode
tspan=[0 1000];

```

```

%solver oproepen
[t y]=ode45(@oef8c_vgl,tspan,y0);
%resultaat plotten
plot(t,y(:,1),'r',t,y(:,4),'g')
xlabel('Tijd (s)')
ylabel('Concentratie (µM)')
legend('S','P')

function [ ydot ] = oef8c_vgl( t,y )

k1=0.1;
k_1=0.1;
k2=0.05;
E0=0.1;
kd=0.001

vmax=k2*E0;
Km=(k_1+k2)/k1;

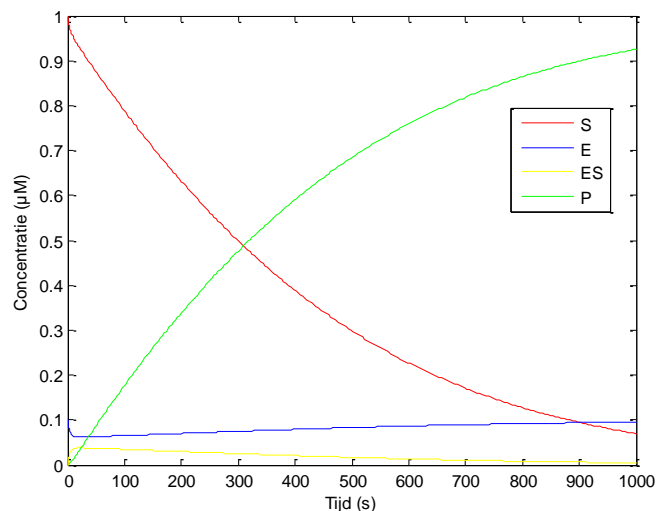
S=y(1);
E=y(2);
ES=y(3);
P=y(4);

ydot=[-vmax*exp(-kd*t)*S/(Km+S)
      0
      0
      vmax*exp(-kd*t)*S/(Km+S)];
end

```

### 5.3 Resultaat

Op de eerste grafiek is te zien dat de vrije enzymconcentratie aanvankelijk heel even daalt en de enzym-substraat-complexconcentratie even stijgt. Dit komt doordat het vrije enzym zal binden met het substraat tot vorming van het intermediair complex, maar na verloop van tijd zal de vrije enzymconcentratie weer stijgen aangezien er dan al een deel van het substraat verbruikt is. Eens al het substraat is opgebruikt, komt daardoor de enzymconcentratie weer op de beginwaarde en de enzym-substraat-complexconcentratie daalt tot nul.



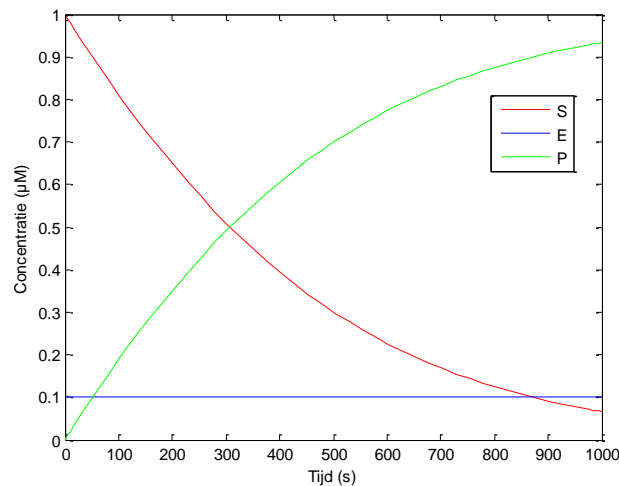
Figuur 7: Verloop van S, E, ES en P in een batchreactor



Nu wordt er hetzelfde gedaan, maar wordt er de Michaelis-Menten-kinetiek toegepast voor *quasi-steady state* condities waarbij geldt dat

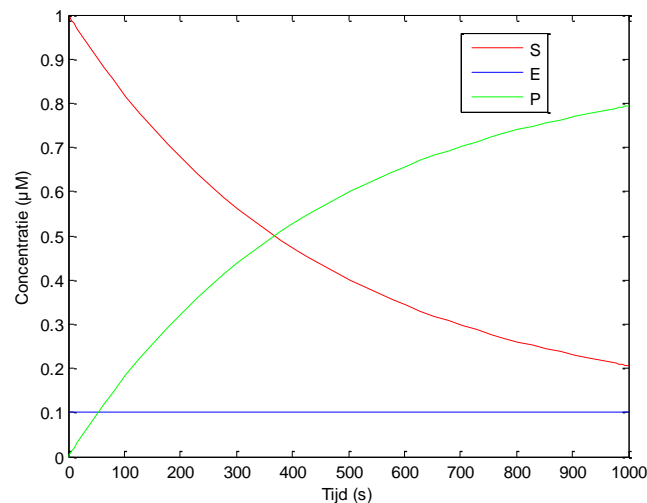
$$\frac{d[ES]}{dt} = 0$$

en de substraatbalans kan dan ook worden herschreven (zie 5.1 Balansen). Het verloop van dit model is te zien op onderstaande figuur.



**Figuur 8: Verloop S en P voor Michaelis-Menten-kinetiek bij *quasi-steady state* condities**

Het verloop van zowel de substraat- als de productconcentratie is hetzelfde als bij het vorige, transiënte model. De enzymconcentratie blijft constant aangezien er geen enzym-substraat-complex wordt gevormd.



**Figuur 9: Verloop S en P voor Michaelis-Menten-kinetiek met enzymdeactivatie**

Wanneer er aan het vorige model nog enzymdeactivatie wordt toegevoegd, krijgen we volgend verloop van substraat en product. Vermits de werking van het enzym geïnhibeerd wordt, zal er relatief meer substraat overblijven en relatief minder product zijn gevormd.

## 6. Oefening 5.9 Populatiodynamica van een roofdier-prooi-systeem

In deze oefening wordt er de populatiodynamica van een roofdier-prooi-systeem bekeken. In een chemostaat zitten 2 organismen,  $X_1$  en  $X_2$ . Het opgeloste substraat wordt verbruikt door organisme  $X_1$  en organisme  $X_1$  wordt op zijn beurt geconsumeerd door organisme  $X_2$ .

### 6.1 Balansen

$$\begin{aligned}\text{Substraat:} \quad \frac{d[S]}{dt} &= S_f D - S D - \frac{\mu_1 X_1}{Y_1} \\ \text{Biomassa prooi:} \quad \frac{dX_1}{dt} &= \mu_1 X_1 - D X_1 - \frac{\mu_2 X_2}{Y_2} \\ \text{Biomassa roofdier:} \quad \frac{dX_2}{dt} &= \mu_2 X_2 - D X_2 \\ \text{Monod-verband:} \quad \mu_1 &= \frac{\mu_{max,1} S_1}{K_1 + S_1} \\ \mu_2 &= \frac{\mu_{max,2} X_1}{K_2 + X_1}\end{aligned}$$

### 6.2 Gebruikte code

```
%oef9
%initiele condities
y0=[20 1 1 20 1 1];
%tijdsduur
tspan=[0 500];
%solver oproepen
[t y]=ode45(@oef9_vgl,tspan,y0);
%resultaat plotten
subplot(2,1,1)
plot(t,y(:,1),'r',t,y(:,2),'b',t,y(:,3),'g')
xlabel('tijd (h)')
ylabel('concentratie (kg/m^3)')
legend('Substraat','Prooi (X1)','Roofdier (X2)')
title('Populatiodynamica roofdier-prooi-systeem')
subplot(2,1,2)
plot(t,y(:,4),'r',t,y(:,5),'b',t,y(:,6),'g')
xlabel('tijd (h)')
ylabel('concentratie (kg/m^3)')

function [ ydot] = oef9_vgl( t,y)

D=0.04;
Sf=125;
Y1=0.14;
Y2=0.5;
```

```

umax1=0.5;
umax2a=0.11;
umax2b=0.49;
K1=10;
K2=10;

Sa=y(1);
X1a=y(2);
X2a=y(3);
Sb=y(4);
X1b=y(5);
X2b=y(6);

u1a=(umax1*Sa)/(K1+Sa);
u1b=(umax1*Sb)/(K1+Sb);
u2a=(umax2a*X1a)/(K2+X1a);
u2b=(umax2b*X1b)/(K2+X1b);

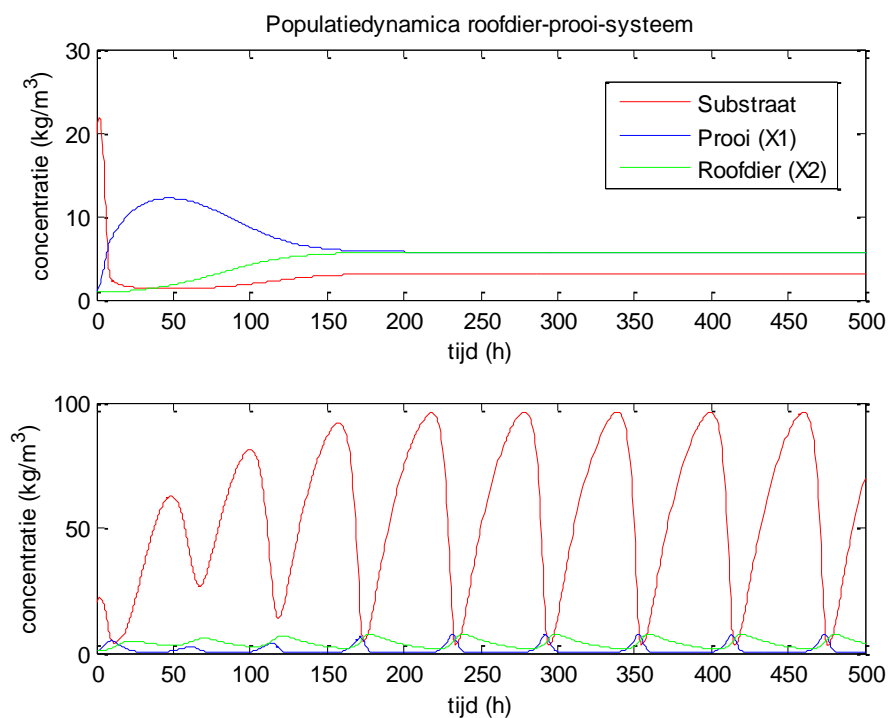
ydot=[Sf*D-Sa*D-u1a*X1a/Y1
      u1a*X1a-D*X1a-u2a*X2a/Y2
      u2a*X2a-D*X2a
      Sf*D-Sb*D-u1b*X1b/Y1
      u1b*X1b-D*X1b-u2b*X2b/Y2
      u2b*X2b-D*X2b];
end

```

### 6.3 Resultaat

Het verloop van deze fermentatie werd berekend vanaf de transiënte opstart gedurende 500 uur. Op de eerste grafiek is het verloop van de substraat-, prooi- en roofdierconcentratie te zien waarbij  $\mu_{\max,2} = 0,11 \text{ h}^{-1}$ . Op de grafiek eronder werd hetzelfde gedaan, maar dan met een andere maximale groeisnelheid voor het roofdier ( $X_2$ ) namelijk  $\mu_{\max,2} = 0,49 \text{ h}^{-1}$ .

Op de eerste grafiek is te zien dat de prooipopulatie snel toeneemt waardoor het substraat op zijn beurt snel afneemt. De roofdierpopulatie groeit iets trager, maar het is duidelijk dat de prooipopulatie terug begint af te nemen. Na iets minder dan 200 uur wordt er een *steady-state* bereikt, waarbij de substraat-, prooi- en roofdierconcentratie dus constant blijven.



Figuur 10: Verloop van de substraat-, prooi- en roofdierconcentratie voor  $\mu_{\max,2}=0,11$  (boven) en  $\mu_{\max,2}=0,49$  (onder)

Op de tweede grafiek is het verloop volledig anders. Hier evolueert het verloop van de concentraties naar een periodiek verloop. Het begin is echter gelijkaardig (tot 10-15 uur), maar vanaf de roofdierpopulatie de prooipopulatie bijna volledig heeft opgebruikt is er een onvermijdelijke terugval in de roofdierpopulatie ten gevolge van schaarste. Terwijl de prooipopulatie afnam, was er een stijging waar te nemen voor de substraatconcentratie. Eens de roofdierpopulatie terugvalt door schaarste heeft de prooipopulatie de tijd om terug aan te groeien. Eens deze terug is aangegroeid, zal er dus weer voedsel zijn voor de roofdierpopulatie waardoor deze terug zal stijgen. Dit proces zal zich dan telkens gaan herhalen tot een periodiek verloop wordt bekomen. Dit periodiek verloop valt te verklaren aan de hand van de maximale groeisnelheden van beide organismen. In het eerste geval ( $\mu_{\max,2} = 0,11 \text{ h}^{-1}$ ) is die van de roofdierpopulatie namelijk veel kleiner dan die van de prooipopulatie, maar in het tweede geval ( $\mu_{\max,2} = 0,49 \text{ h}^{-1}$ ) zijn ze bijna even groot.

## 7. Oefening 5.10 Nitrificatie in een actief-slibproces

Ammonium kan worden geoxideerd door nitrifiërende bacteriën, dit proces heet nitrificatie. In deze oefening wordt er een proces bekeken waarbij er wordt gewerkt met actief slib. Zo zijn er nitrifiërende en heterotrofe bacteriën in het systeem aanwezig. De heterotrofe bacteriën oxideren organische koolstof. Het probleem is echter dat de groei van de nitrifiërende bacteriën veel lager ligt dan die van de heterotrofe bacteriën.

### 7.1 Balansen

Monod-verband:

$$q_H = \mu_H X_H = \frac{\mu_{max,H} S X_H}{K_H + S}$$
$$q_N = \mu_N X_N = \frac{\mu_{max,N} A X_N}{K_N + A}$$

#### Reactor

Organisch substraat:  $\frac{dS_r}{dt} = \frac{F_0 S_0 - F_1 S_1 + F_2 S_2}{V_r} - \frac{q_H}{Y_H}$

Ammoniumsubstraat:  $\frac{dA_r}{dt} = \frac{F_0 A_0 - F_1 A_1 + F_2 A_2}{V_r} - \frac{q_N}{Y_N}$

Heterotrofe biomassa:  $\frac{dX_{Hr}}{dt} = q_H + \frac{X_{Hr} F_2 - X_{Hb} F_1}{V_r}$

Nitrifiërende biomassa:  $\frac{dX_{Nr}}{dt} = q_N + \frac{X_{Nb} F_2 + X_{Nr} F_1}{V_r}$

#### Bezinkingstank

Organisch substraat:  $\frac{dS_b}{dt} = \frac{F_1 S_1 - F_3 S_2 - F_4 S_2}{V_b}$

Ammoniumsubstraat:  $\frac{dA_b}{dt} = \frac{F_1 A_1 - F_3 A_2 - F_4 A_2}{V_b}$

Heterotrofe biomassa:  $\frac{dX_{Hb}}{dt} = \frac{F_1 X_{Hr} - F_3 X_{Hb}}{V_b}$

Nitrifiërende biomassa:  $\frac{dX_{Nb}}{dt} = \frac{F_1 X_{Nr} - F_3 X_{Nb}}{V_b}$

## 7.2 Gebruikte code

```
%oef 10
%initiele condities
y0=[0.05 0.05 2 2 0.05 0.05 2 2];
%Totale tijdspanne
tspan=[0 20];
%solver oproepen
[t y]=ode45(@oef10_vgl,tspan,y0);
%resultaat plotten
subplot(2,1,1)
plot(t,y(:,1:4)), xlabel('Tijd (h)'), ylabel('Concentratie (g/m^3)');
legend('Organisch substraat','Ammoniumsubstraat','Heterotrofe
biomassa','Nitrifiërende biomassa');
title('Reactor');
subplot(2,1,2)
plot(t,y(:,5:8)), xlabel('Tijd (h)'), ylabel('Concentratie (g/m^3)');
legend('Organisch substraat','Ammoniumsubstraat','Heterotrofe
biomassa','Nitrifiërende biomassa');
title('Bezinkingstank')
```

```
function [ ydot ] = oef10_vgl( t,y )

V1=100;
V2=100;
R=0.95;
C=2;
F0=20;
S0=1;
A0=0.5;
umaxH=0.5;
umaxN=0.04;
KH=0.5;
KN=1;
YH=0.5;
YN=0.1;

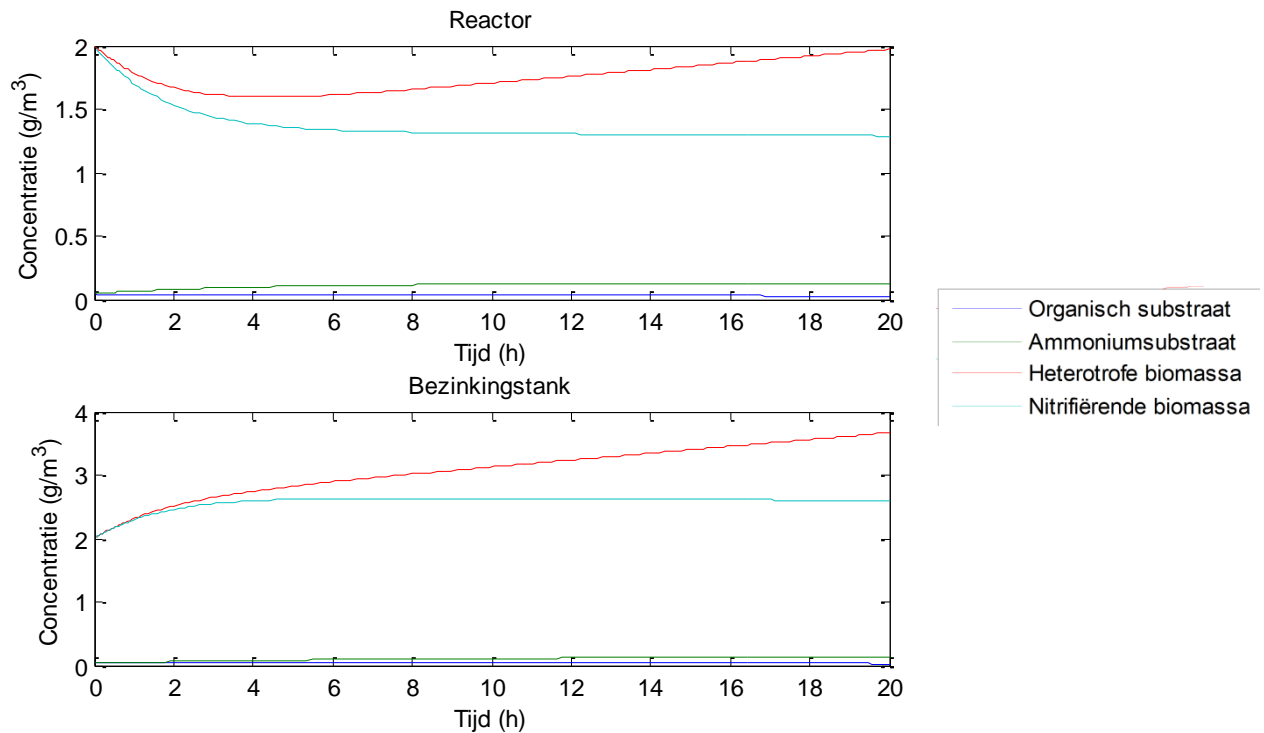
Sr=y(1);
Ar=y(2);
XHr=y(3);
XNr=y(4);
Sb=y(5);
Ab=y(6);
XHb=y(7);
XNb=y(8);
F2=F0*R;
F1=F0*R+F0;
F3=F1/C;
F4=F1-F3;
F5=F3-F2;
qHr=(umaxH*Sr*XHr/(KH+Sr))*XHr;
qNr=(umaxN*Ar*XNr/(KN+Ar))*XNr;

ydot=[ (F0*S0-F1*Sr+F2*Sb-qHr*V1/YH)/V1
      (F0*A0-F1*Ar+F2*Ab-qNr*V1/YN)/V1
      (qHr*V1-XHr*F1+XHb*F2)/V1
      (qNr*V1-XNr*F1+XNb*F2)/V1
      (F1*Sr-F3*Sb-F4*Sb)/V2
```

```
(F1*Ar-F3*Ab-F4*Ab) /V2  
(F1*XHr-F3*XHb) /V2  
(F1*XNr-F3*XNb) /V2];  
end
```

### 7.3 Resultaat

Het actief-slibproces werd gedurende 20 uur bekeken. Het verloop van de concentraties van het organisch substraat, het ammoniumsubstraat, de heterotrofe biomassa en de nitrifiërende biomassa is te zien op onderstaande grafieken.



Figuur 11: Verloop van de substraat- en biomassaconcentraties in de reactor (boven) en de bezinkingstank (onder)

Op de grafiek van de reactor is te zien dat de concentratie van zowel het organisch substraat als het ammoniumsubstraat heel laag blijven. Hieruit blijkt dat beide substraten goed worden benut en het actief-slibproces goed werkt. Wat ook opvalt is dat de concentratie van beide biomassa's aanvankelijk even daalt, dit is te verklaren door het feit dat de beginconcentratie van beide substraten relatief laag ligt en er uitspoeling is naar de bezinkingstank. Eens er substraat wordt aangevoerd, stoppen beide biomassa's met dalen. (Dit is echter niet helemaal waar, want zowel in de reactor als in de bezinkingstank zal de concentratie aan nitrifiërende biomassa een heel klein beetje dalen.) De heterotrofe biomassaconcentratie zal lineair stijgen vermits er enkel in de reactor groei plaatsvindt.

Op de grafiek van de bezinkingstank zien we voor de substraatconcentraties een gelijkaardig verloop als in de reactor. De biomassaconcentraties zullen, in tegenstelling tot in de reactor, even sterk stijgen. Dit valt te wijten aan de uitspoeling van beide biomassa's uit de reactor naar de bezinkingstank. Net als in de reactor zal de heterotrofe biomassaconcentratie uiteindelijk lineair stijgen en de nitrifiërende biomassa constant blijven (of heel zacht lineair dalen).

Algemeen kan worden geconcludeerd dat het actief-slibproces goed werkt.