Biochemische Ingenieurstechnieken

MATLAB-oefeningen

Ruben Nackaerts Begeleider: Prof. dr. ir. R. Willaert

20090957 Academiejaar 2011 - 2012

ruben.nackaerts@student.ua.ac.be

Inhoud

[1. Oefening 5.4 Batchgroei met productvorming 2](#_Toc324696296)

[1.1 Balansen en vergelijkingen 2](#_Toc324696297)

[1.2 MATLAB functies en scripten 2](#_Toc324696298)

[1.3 Resultaat en bespreking 2](#_Toc324696299)

# 1. Oefening 5.4 Batchgroei met productvorming

## 1.1 Balansen en vergelijkingen

## 1.2 MATLAB functies en script

%5.4. batchgroei met productvorming functie

function ydot=batchgroei54(t,y)

%y(1) is X, y(2) = S, y(3)= P

%k1 is 0.05, k2 is 0.1, Ks is 0.1, umax is 0.3

X=y(1);

S=y(2);

u=0.3\*(S/(S+0.1));

ydot=[u\*X;(-u\*X)/0.8;(0.05+0.1\*u)\*X];

%5.4. batchgroei met productvorming script

%initile condities

y0=[0.01 10 0];

%duur van de reacties

tspan=[0 30];

%functie oproepen

[t y]=ode45(@batchgroei54,tspan,y0);

%grafiek

plot(t,y(:,1),'-',t,y(:,2),'--',t,y(:,3),'-.')

xlabel('tijd (h)')

ylabel('concentratie(kg/m^3)')

legend('X','S','P')

## 

## 1.3 Resultaat en bespreking

In de onderstaande grafiek staan de concentraties van de biomassa, substraat en product gedurende een batchfermentatie van 30 uur. Hierbij stelt X de biomassaconcentratie, S de substraatconcentratie en P de productconcentratie voor. De biomassa begint door de opname van substraat te groeien. Hierdoor zal de concentratie van de biomassa toenemen en deze van het substraat zal afnemen. Wanneer het substraat op is zal de biomassa niet meer kunnen groeien (de groeisnelheid wordt 0) en zal de concentratie hiervan stabiel blijven aangezien er geen afbraak van biomassa is. De biomassa zal ook vanaf een bepaald moment product beginnen te vormen. Zolang er nog substraat is gebeurt dit exponentieel, maar wanneer het substraat op is en de groei van de biomassa dus stopt zal de productie verder lineair gebeuren (dP/dt = k1 \* X) in plaats van exponentieel.



Figuur : Batchgroei met productvorming

# 2. Oefening 5.5 Fed-batchfermentatie

## 2.1 Balansen en vergelijkingen

*Debiet :*

*Substraat :*

*Product :*

*Biomassa :*

## 2.2 MATLABfunctie en script

%5.5. Fed-batchfermentatie functie

function ydot=fedbatchferm55(t,y)

V=y(1);

X=y(2);

S=y(3);

P=y(4);

umax=0.3;

Ks=0.1;

k1=0.03;

k2=0.08;

Yxs=0.8;

Sf=10;

u=umax\*S/(Ks+S);

if t<22.5

F=0;

else

F=1.5;

end

ydot=[F; u\*X-X\*(F/V); Sf\*(F/V)-((u\*X)/Yxs)-S\*(F/V); (k1+k2\*u)\*X-P\*(F/V)];

%5.5. Fed-batchfermentatie script

%initile condities

y0=[1 0.01 10 0];

% Periode reactie

tspan=[0 100];

% Functie invoegen

[t y]=ode45(@fedbatchferm55, tspan, y0);

plot(t,y(:,2),'-',t,y(:,3),'-.',t,y(:,4),'--')

xlabel('tijd(h)')

ylabel('concentratie (kg/m^3)')

legend('X','S','P')

## 2.3 Resultaat en bespreking

In figuur 2 zien we het verloop van een fed-batchfermentatie. Gedurende het eerste 22,5 u vindt er een gewone batchfermentatie. Na de 22,5 u schakelt de fermentor over op de eigenlijke fed-batchfermentatie, die dan loopt tot 100u. Ook hier stellen X, S en P respectievelijk de biomassa-, de substraat- en de productconcentratie voor. Het eerste 22,5 u gebeurt er net hetzelfde als in de batchfermentatie van oefening 5.5. De biomassa groeit door het consumeren van substraat, waarbij ook product gevormd zal worden. Na 22,5 u zal er dus extra substraat gevoed worden waardoor de concentratie van het substraat terug zal stijgen. Door deze toevoeging zal het volume toenemen en zal de aanwezige biomassa en product verdund worden waardoor de concentratie van beide in eerste instantie zal afnemen. Deze daling is maar van korte duur en al snel zorgt de toevoeging van extra substraat voor een exponentiële groei van biomassa en bijgevolg ook van product. Dit gaat door tot er een steady-state situatie is bereikt waarbij het substraat dat gevoed wordt direct wordt opgenomen door de biomassa en meteen wordt omgezet in product. Hierdoor zal de biomassaconcentratie en de concentratie van het substraat constant blijven. De productconcentratie zal vanaf dan ook lineair gaan toenemen.



Figuur Fed-Batchfermentatie

# 3. Oefening 5.6 de Chemostaat

## 3.1 Balansen en vergelijkingen

## 3.2 MATLABfunctie en script

%Functie chemostaat 5.6a

function ydot=chemostaat56a(t,y)

S=y(1);

P=y(2);

X=y(3);

umax=0.3;

Ks=0.1;

k1=0.05;

k2=0.1;

Yxs=0.8;

Sf=10;

u=umax\*S/(Ks+S);

if t<=5

D=0;

else

D=0.20;

end

ydot=[D\*(Sf-S)-(u\*X)/Yxs

-D\*P+(k1+k2\*u)\*X

-D\*X+u\*X];

% Chemostaat 5.6a

y0=[10 0 1];

tspan=[0 60];

[t y]=ode45(@chemostaat56a,tspan, y0);

plot(t,y), xlabel('Tijd in uur'), ylabel('Concentratie in kg/m^3');

legend('S','P','X')

%Functie chemostaat 5.6b

function ydot=chemostaat56b(t,y)

S=y(1);

P=y(2);

X=y(3);

umax=0.3;

Ks=0.1;

k1=0.05;

k2=0.1;

Yxs=0.8;

Sf=10;

u=umax\*S/(Ks+S);

if t<=5

D=0;

else

D=0.25;

end

ydot=[D\*(Sf-S)-(u\*X)/Yxs

-D\*P+(k1+k2\*u)\*X

-D\*X+u\*X];

% Chemostaat 5.6b

y0=[10 0 1];

tspan=[0 60];

[t y]=ode45(@chemostaat56b,tspan, y0);

plot(t,y), xlabel('Tijd in uur'), ylabel('Concentratie in kg/m^3');

legend('S','P','X')

%Functie chemostaat 5.6c

function ydot=chemostaat56c(t,y)

S=y(1);

P=y(2);

X=y(3);

umax=0.3;

Ks=0.1;

k1=0.05;

k2=0.1;

Yxs=0.8;

Sf=10;

u=umax\*S/(Ks+S);

if t<=5

D=0;

else

D=0.30;

end

ydot=[D\*(Sf-S)-(u\*X)/Yxs

-D\*P+(k1+k2\*u)\*X

-D\*X+u\*X];

% Chemostaat 5.6c

y0=[10 0 1];

tspan=[0 60];

[t y]=ode45(@chemostaat56c,tspan, y0);

plot(t,y), xlabel('Tijd in uur'), ylabel('Concentratie in kg/m^3');

legend('S','P','X')

%Functie chemostaat 5.6d

function ydot=chemostaat56d(t,y)

S=y(1);

P=y(2);

X=y(3);

umax=0.3;

Ks=0.1;

k1=0.05;

k2=0.1;

Yxs=0.8;

Sf=10;

u=umax\*S/(Ks+S);

if t<=5

D=0;

else

D=0.35;

end

ydot=[D\*(Sf-S)-(u\*X)/Yxs

-D\*P+(k1+k2\*u)\*X

-D\*X+u\*X];

% Chemostaat 5.6d

y0=[10 0 1];

tspan=[0 60];

[t y]=ode45(@chemostaat56d,tspan, y0);

plot(t,y), xlabel('Tijd in uur'), ylabel('Concentratie in kg/m^3');

legend('S','P','X')

## 3.3 Resultaat en bespreking

Onderstaande grafieken zijn allemaal chemostaten waarbij de eerste 5 uur een gewone batchfermentatie is met dulitiesnelheid 0 om op te starten. Hierna wordt er echter een debiet aangelegd. Het volume blijft wel constant. Voor de onderstaande reactoren gelden er telkens verschillende dilutiesnelheden. Bij de laagste dilutiesnelheid, dit is figuur 3, zien we dat de steady-state toestand vrij snel bereikt wordt. De biomassa verbruikt meteen het substraat want de substraatconcentratie ligt heel laag en kan dus op een optimale manier product vormen. Hoe hoger de dilutiesnelheid gaat zijn, hoe meer biomassa er gaat weggewassen worden. Dit zien we al in de chemostaat met D = 0,25 h-1. Daar duurt het al wat langer voor de steady-state is bereikt. Deze wordt nog wel bereikt binnen de 60 uur, maar de concentratie van de biomassa en het product liggen wel lager en die van het substraat hoger. Bij nog hogere dilutiesnelheden gaat de biomassa geen kans meer krijgen om te groeien en wordt het gewoon weggewassen. Een steady-state zal niet meer bereikt worden. Door de verminderende biomassaconcentratie zal het substraat zich ook beginnen opstapelen in de reactor. Met de verdwijnende biomassa zal er ook steeds minder product gevormd worden.



Figuur Chemostaat met dilutiesnelheid 0,20 h-1



Figuur Chemostaat met dilutiesnelheid 0,25 h-1



Figuur Chemostaat met dilutiesnelheid 0,30 h-1



Figuur Chemostaat met dilutiesnelheid 0,35 h-1

# 4. Oefening 5.7 Continue bioreactor met celrecyclage

## 4.1 Balansen en vergelijkingen

Voor de eerste reactor :

Voor de tweede reactor:

*Glucose:*

*Melkzuur:*

Gebruikte vergelijkingen:

## 4.2 MATLABfunctie en script

% Oefening 5.7 Continue bioreactor met celrecyclage functie

function ydot=continuebio57(t,y)

umax=1.6;

Ks=0.22;

Kp=9.5;

kd0=0.08;

a=0.0065;

Gs=0.13;

Ds=0.128;

Gp=0.2;

Dp=0.04;

V1=1;

F1=1.5;

D1=1.5;

D2=D1;

B1=0.3;

V2=V1;

F2=F1;

B2=B1;

Pf1=0;

Pf2=0;

Sf1=30;

Sf2=30;

Xt1=y(1);

X1=y(2);

S1=y(3);

P1=y(4);

Xt2=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/(Gs+Ds\*u1);

rs2=u2/(Gs+Ds\*u2);

rp1=u1/(Gp+Dp\*u1);

rp2=u2/(Gp+Dp\*u2);

ydot=[-B1\*Xt1\*D1+u1\*X1

-B1\*X1\*D1+u1\*X1-kd1\*X1

D1\*Sf1-D1\*S1-rs1\*X1

D1\*Pf1-D1\*P1+rp1\*X1

u2\*X2+D1\*Xt1\*B1-(B2\*(B1\*F1+F2)\*Xt2)/V2

u2\*X2-kd2\*X2+B1\*D1\*X1-(B2\*(B1\*F1+F2)\*X2)/V2

D2\*Sf2+S1\*B1\*D1-rs2\*X2-(B2\*(B1\*F1+F2)\*S2)/V2-((1-B2)\*(B1\*F1+F2))/V2\*S2

D2\*Pf2+P1\*B1\*D1+rp2\*X2-(B2\*(B1\*F1+F2)\*P2)/V2-((1-B2)\*(B1\*F1+F2))/V2\*P2];

% Oefening 5.7 Continue bioreactor met celrecyclage script

y0=[0.01 0.01 30 0 0 0 30 0];

span=[0 40];

[t y]=ode45(@continuebio57,span,y0);

subplot(2,1,1)

plot(t,y(:,1),'m-',t,y(:,2),'b-',t,y(:,3),'g-',t,y(:,4),'k-')

xlabel('tijd(h)')

ylabel('concentatie(kg/m^3)')

legend('Xt1','X1','S1','P1')

subplot(2,1,2)

plot(t,y(:,5),'m-',t,y(:,6),'b-',t,y(:,7),'g-',t,y(:,8),'k-')

xlabel('tijd(h)')

ylabel('concentratie(kg/m^3)')

legend('Xt2','X2','S2','P2')

## 4.3 Resultaat en bespreking

In onderstaande grafiek staan de concentraties voor een 2-trapssysteem. De algemene verwachting is dat een dergelijk systeem een hogere productiviteit geeft. Hier wordt er ook rekening gehouden met het afsterven van de cellen door een onderscheid te maken tussen de totale biomassa en de levende biomassa. In de eerste trap is er te zien dat de concentratie van de totale biomassa inderdaad hoger ligt dan de levende biomassa door de sterfte. Naar de tweede stap wordt dit verschil tussen beide concentraties wel groter, maar de concentratie van de biomassa's nemen ook toe van de eerste naar de tweede trap. Meer levende biomassa betekent ook een hogere productie en productconcentratie in de tweede stap. Waar in de eerste stap het substraat verre van volledig verbruikt wordt bij het bereiken van de steady state, wordt in de tweede stap het substraat nagenoeg volledig verbruikt bij het bereiken van de steady state. Deze verhoging komt dus door de extra biomassa die stroomt van de eerste reactor naar de 2de reactor.



Figuur Continue bioreactor met celrecyclage. In de bovenste grafiek staan de concentraties voor in de eerste reactor (eerste stap) en de onderste grafiek staat voor de concentraties in de tweede reactor (tweede stap).

# 5. Oefening 5.8 Enzymkinetiek

## 5.1 Balansen en vergelijkingen

Voor de "quasi steady state" wordt een andere balans voor de substraatconcentratie gebruikt:

## 5.2 MATLABfunctie en script

%enzymkin58functie

function ydot = enzymkin58(t,y)

k1=0.1;

k1rev=0.1;

k2=0.05;

S=y(1);

E=y(2);

ES=y(3);

P=y(4);

ydot=[-k1\*S\*E+k1rev\*ES

-k1\*S\*E+k1rev\*ES+k2\*ES

k1\*S\*E-k2\*ES-k1rev\*ES

k2\*ES];

%enzymkin58script.m

y0=[1.0 0.1 0 0];

tspan=[0 1000];

[t y]=ode45(@enzymkin58,tspan,y0);

plot(t,y(:,1),'-',t,y(:,2),'-',t,y(:,3),'-',t,y(:,4),'-')

xlabel('concentratie (10^-6 M)')

ylabel('tijd (s)')

legend('S','E','ES','P')

%enzymkin58bfunctie.m

function ydot = enzymkin58b(t,y)

k1=0.1;

k1rev=0.1;

k2=0.05;

S=y(1);

E=y(2);

ES=y(3);

P=y(4);

Km=(k2+k1rev)/k1

vmax=k2\*0.1

ydot=[-vmax\*S/(Km+S)

0

0

vmax\*S/(Km+S)];

%enzymkin58bscript.m

y0=[1.0 0.1 0 0];

tspan=[0 1000];

[t y]=ode45(@enzymkin58b,tspan,y0);

plot(t,y(:,1),'-',t,y(:,4),'-')

xlabel('concentratie (10^-6 M)')

ylabel('tijd (s)')

legend('S','P')

%enzymkin58cfucntie

function ydot = enzymkin58c(t,y)

k1=0.1;

k1rev=0.1;

k2=0.05;

S=y(1);

E=y(2);

ES=y(3);

P=y(4);

Km=(k2+k1rev)/k1

kd=0,001

vmax=k2\*0.1\*exp(-kd\*t)

ydot=[-vmax\*S/(Km+S)

0

0

vmax\*S/(Km+S)];

%enzymkin58cscript.m

y0=[1.0 0.1 0 0];

tspan=[0 1000];

[t y]=ode45(@enzymkin58c,tspan,y0);

plot(t,y(:,1),'-',t,y(:,4),'-')

xlabel('concentratie (10^-6 M)')

ylabel('tijd (s)')

legend('S','P')

## 5.3 Resultaat en bespreking





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

## 6.1 Balansen en vergelijkingen

## 6.2 MATLABfunctie en script

%oefening59popdynfunctie.m

function ydot=popdyn59(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);

u2a=umax2a\*X1a/(K2+X1a);

u1b=umax1\*Sb/(K1+Sb);

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];

%popdyn59script.m

y0=[20 1 1 20 1 1];

tspan=[0 500];

[t y]=ode45(@popdyn59,tspan,y0);

subplot(2,1,1)

plot(t,y(:,1),'-',t,y(:,2),'-',t,y(:,3),':')

xlabel('tijd (h)')

ylabel('concentratie (kg/m^3)')

legend('Sa','X1a','X2a');

subplot(2,1,2)

plot(t,y(:,4),'-',t,y(:,5),'-',t,y(:,6),'-')

xlabel('tijd (h)')

ylabel('concentratie (kg/m^3)')

legend('Sb','X1b','X2b');

## 6.3 Resultaat en bespreking

Hieronder is een grafiek te zien van een populatiedynamiek van een gemengde populatie bestaande uit 2 organismen X1 en X2. X1 wordt hierbij geconsumeerd door X2 en is dus de prooi. De dynamiek is bepaald voor 2 verschillende maximale groeisnelheden voor X2 (0,11 en 0,49 h-1). In de eerste grafiek (met de laagste maximale groeisnelheid voor de prooi) merken we dat in het begin er een hoge concentratie van het substraat is waardoor de prooipopulatie kan groeien en toenemen in concentratie. Deze toenemende prooipopulatie zorgt ervoor dat er ook meer voedsel is voor de roofdierpopulatie. Door het consumeren van X1 zal de concentratie van X2 toenemen en die van X1 afnemen, hierdoor zal er minder substraat worden geconsumeerd worden en zal de substraatconcentratie ook toenemen. Uiteindelijk wordt er een evenwicht bereikt (steady-state) waarbij er een gelijke en constante concentratie is van prooi en roofdier en een constante concentratie van het substraat. Dit komt hoofdzakelijk door het grote verschil in maximale groeisnelheden dat het verschil in opbrengstcoëfficiënten compenseert. In het tweede geval heeft het roofdier een maximale groeisnelheid die haast gelijk is aan de maximale groeisnelheid van de prooi. We zien dat hier het model evolueert naar een periodieke fluctuatie van de concentraties. Initieel is er een groei van de prooipopulatie dat een dalende substraatconcentratie met zich meebrengt. Door de stijgende prooiconcentratie kan de roofdierpopulatie beginnen te consumeren waardoor hiervan de concentratie stijgt. De substraatconcentratie is echt zo hard gedaald dat er een schaarste is aan substraat voor de prooien. Door de substraatschaarste en de stijgende roofdierconcentratie zal de prooiconcentratie dalen. Hierdoor kan de substraatconcentratie terug beginnen stijgen. Het duurt echter een tijdje voor de prooiconcentratie zich terug kan herstellen. Er zal dus een tijdelijke prooischaarste zijn waardoor de concentratie van de roofdieren zal dalen. Deze onstabiele toestand herhaalt zich vervolgens tot het einde van de tijdspanne.



Figuur Populatiedynamica van een roofdier-prooi-systeem bij de bovenste grafiek is er een µmax voor het roofdier van 0,11 h-1, bij de onderste grafiek is dit 0,49 h-1

# 7. Oefening 5.10 Nitrificatie in een actief-slibproces

## 7.1 Balansen en vergelijkingen

In de reactor:

*Organisch substraat:*

*Ammoniumsubstraat:*

*Heterotrofe biomassa:*

*Nitrifiërende biomassa:*

In de bezinkingstank:

## 7.2 MATLABfunctie en script

% Oefening 5.10 Nitrificatie functie

function ydot=nitrif510(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=1.0;

Yh=0.5;

Yn=0.1;

S1=y(1);

A1=y(2);

Xh1=y(3);

Xn1=y(4);

S2=y(5);

A2=y(6);

Xh2=y(7);

Xn2=y(8);

F2=F0\*R;

F1=F0\*R+F0;

F3=F1/C;

F4=F1-F3;

F5=F3-F2;

qh=(umaxH\*S1\*Xh1/(Kh+S1))\*Xh1;

qn=(umaxN\*A1\*Xn1/(Kn+A1))\*Xn1;

ydot=[(F0\*S0-F1\*S1+F2\*S2-qh\*V1/Yh)/V1

(F0\*A0-F1\*A1+F2\*A2-qn\*V1/Yn)/V1

(qh\*V1-Xh1\*F1+Xh2\*F2)/V1

(qn\*V1-Xn1\*F1+Xn2\*F2)/V1

(F1\*S1-F3\*S2-F4\*S2)/V2

(F1\*A1-F3\*A2-F4\*A2)/V2

(F1\*Xh1-F3\*Xh2)/V2

(F1\*Xn1-F3\*Xn2)/V2];

% Oefening 5.10 Nitrificatie script

y0=[0.15 0.15 2 2 0.05 0.05 2 2];

tspan=[0 20];

[t y]=ode45(@nitrif510,tspan,y0);

subplot(2,1,1)

plot(t,y(:,1:4)), xlabel('Tijd(h)'), ylabel('Concentratie in g/m^3');

legend('S1','A1','Xh1','Xn1');

subplot(2,1,2)

plot(t,y(:,5:8)), xlabel('Tijd(h)'), ylabel('Concentratie in g/m^3');

legend('S2','A2','Xh2','Xn2');

## 7.3 Resultaat en bespreking

