

Univerza v Ljubljani  
Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo

## **VAJE IZ BIOTEHNOLOGIJE**

### **4. VAJA – SIMULACIJA KONTINUIRNEGA BIOPROCESA**

Ljubljana, 24. 11. 2007

# 1. NALOGA

S pomočjo matematičnega modela in računalniške simulacije kontinuirnega procesa in kemostata izvedite naslednje naloge:

- Pri kontinuirnem procesu po začetnem šaržnem obratovanju ( $D = 0 \text{ h}^{-1}$ ) spreminjajte  $D$  tako, da dobite izpiranje biomase. Določite stacionarne vrednosti  $X$  in  $S$  in opazujte, v kolikšnem času se vzpostavi stacionarno stanje.
- Proučite vpliv parametrov  $K_s$  in  $Y_{X/S}$  na vrednosti  $X$ ,  $S$  in produktivnost  $X \cdot D$  v kemostatu pri različnih  $D$ . Določite tudi vpliv obeh parametrov na optimalni  $D$  in na točko izpiranja oz.  $D_{\text{krit}}$ .

# 2. OSNOVE

Pri kontinuirnem procesu reaktor obratuje z določenim pretokom medija v reaktor in iz njega. Obravnavamo primer, ko je  $F_v = F_{iz} = F$  ( $\text{m}^3/\text{h}$ ) in ko se v vstopajočem toku nahaja le substrat s koncentracijo  $S_v$ , v izstopajočem

pa glede na pogoje nastala biomasa, neporabljen substrat in nastali produkt.  $V$  je konstanten, torej  $\frac{dV}{dt} = 0$ .

Prav tako je konstantna hitrost redčenja  $D$ . Zaradi poenostavitve predpostavimo idealno pomešanje ( $c(\text{v reaktorju}) = c_{iz}$ ).

$$\frac{d(cV)}{dt} = F_v c_v - F_{iz} c_{iz} \pm rV \quad (\pm \text{ zaradi tega, ker je odvisno ali pišemo bilanco za S ali P})$$

$$\text{Glede na to, da je v stacionarnem stanju } \frac{d(cV)}{dt} = c \frac{dV}{dt} + V \frac{dc}{dt} = 0 \quad (dV=0, dc=0),$$

$$\text{velja } F_v c_v = F_{iz} c_{iz} \pm rV$$

Proces začnemo s šaržnim gojenjem in po pridobitvi ustrezne količine biomase nadaljujemo s kontinuirnim obratovanjem. Po določenem času, ki je odvisen predvsem od zadrževalnega časa  $\tau = 1/D$  [h], dosežemo stacionarno stanje, ki mikroorganizmu nudi boljše pogoje za razvoj, operaterju pa za vodenje in regulacijo. Vendar pa lahko proces vodimo le do t.i. kritične hitroszi redčenja  $D_{\text{krit}}$ , pri kateri pride do popolnega izpiranja biomase (wash-out) in skozi reaktor vodimo le napajalno raztopino ( $S=S_v$ ). Po velikosti je  $D_{\text{krit}}$  nekoliko manjša od  $\mu_{\text{max}}$ .

Z izrazom kemostat imenujemo bioreaktor, ki obratuje kontinuirno, je idealno pomešan, ima konstanten volumen ter konstantno sestavo na vtoku in iztoku.

Produktivnost biomase v reaktorju se izraža kot produkt  $X \cdot D$  in je tako funkcija kinetičnih parametrov ter obratovalnih pogojev ( $D$ ) kemostata.

### 3. APARATURA

Računalnik in program Berkeley Madonna.

### 4. REZULTATI SIMULACIJ IN KOMENTARJI

Podatki in začetni pogoji:

```
{CHEMOSTAT START UP AND OPERATION}
{FILE, "CHEMO"}

{Constants}
UM=0.3 KS=0.1 K1=0.03 K2=0.08 Y=0.8
SF=10 D1=0.25 tstart=5
Stoptime=80

{Conditional equation for D}
D=if time>=tstart then D1 else 0

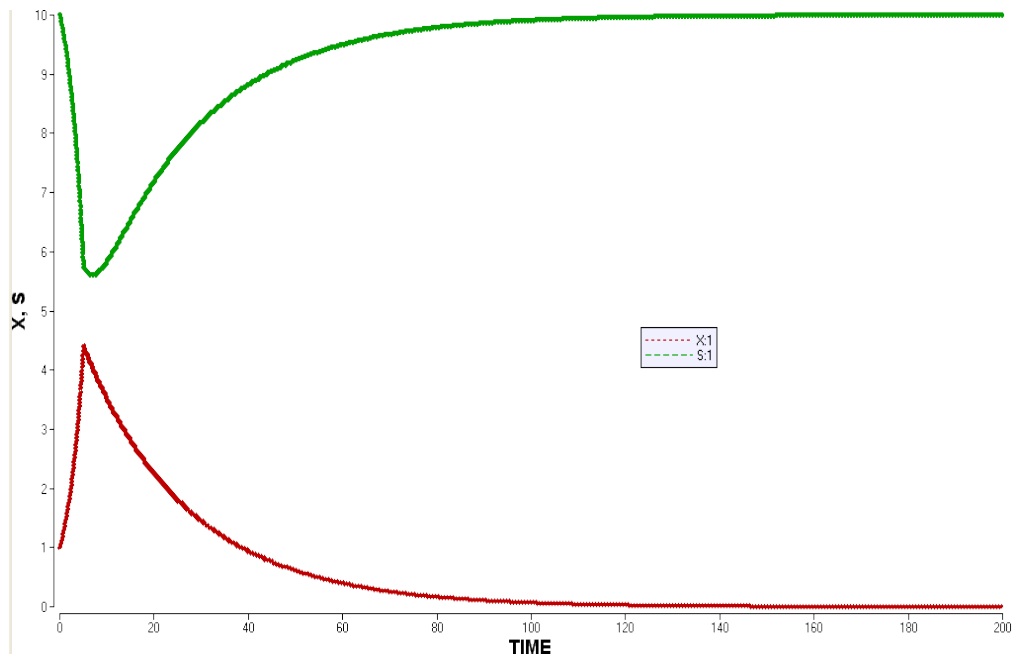
Init X=1
Init S=10
Init P=0

{Mass Balances}
X'=-D*X+RX ; BIOMASS BALANCE EQUATION
S'=D*(SF-S)+RS ; SUBSTRATE BALANCE EQUATION
P'=-D*P+RP ; PRODUCT BALANCE EQUATION

{KINETIC EQUATIONS}
RX=U*X
U=UM*S/(KS+S)
RS=-RX/Y
RP=(K1+K2*U)*X

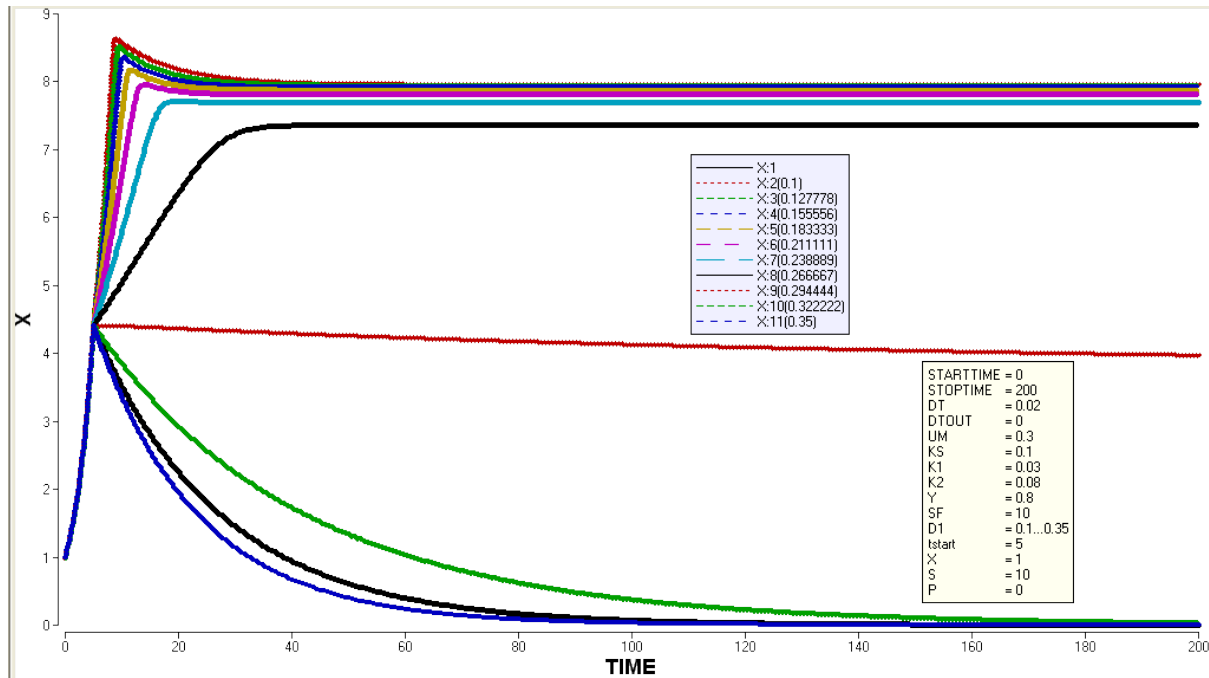
Prod=D*X
```

UM	$\mu_{\max}$	0.3	$\text{h}^{-1}$
KS	$K_s$	0.1	$\text{kg}/\text{m}^3$
K1	$\beta$	0.03	$\text{h}^{-1}$
K2	$\alpha$	0.08	/
Y	$Y_{x/s}$	0.8	/
X0	$X_0$	1	$\text{kg}/\text{m}^3$
S0	$S_0$	10	$\text{kg}/\text{m}^3$
P0	$P_0$	0	$\text{kg}/\text{m}^3$



*Graf št. 1: Kontinuirni proces po začetnem šaržnem obratovanju*

Najprej v reaktorju poteka šaržni proces (ni vtoka in iztoka, zato koncentracija biomase narašča na račun padanja koncentracije substrata), ki ga po nekem času (5 h) prekinemo ter začnemo z kontinuirnim postopkom. Zaradi napajanja sistema začne koncentracija substrata naraščati tako dolgo, dokler se ne približa in ustali pri koncentraciji substrata v napajalni raztopini. Koncentracija biomase pa zaradi iztoka pada tako dolgo, da se na koncu ustali pri ničli (wash-out efekt). Ravno zato lahko trdimo, da je stanje, do katerega pridemo (po približno 80 h), stacionarno.



Graf št. 2: Vpliv spreminjanja pretoka D na koncentracijo biomase

Graf prikazuje koncentracijo biomase v odvisnosti od časa glede na pretok s katerim uvajamo substrat. V vseh primerih je na začetku nestacionarni del, nato pa vedno pridemo do stacionarnega dela. Kako hitro, pa je odvisno od pretoka. V primeru velikih pretokov (velika hitrost redčenja) je končna koncentracija nižja. Pri največjih pretokih je koncentracija biomase padla celo do ničle, kar imenujemo efekt izpiranja (wash-out). Vidimo lahko, da pri pretokih manjših od maksimalne specifične hitrosti rasti ( $\mu_{\max} = 0,3$ ) še ne pride do izpiranja.

Ko upoštevamo obratovanje pri že stacionarnih pogojih, upoštevamo naslednje enačbe:

(Ni več odvisnosti od časa.  $S_0$  je napajalna koncentracija,  $UM$  ( $\mu_{max}$ ) je enaka 1, pretok  $D$  spreminjamo od 0 do 1.  $XD$  je produktivnost, za katero želimo, da je najvišja.)

[CHEMOSTA

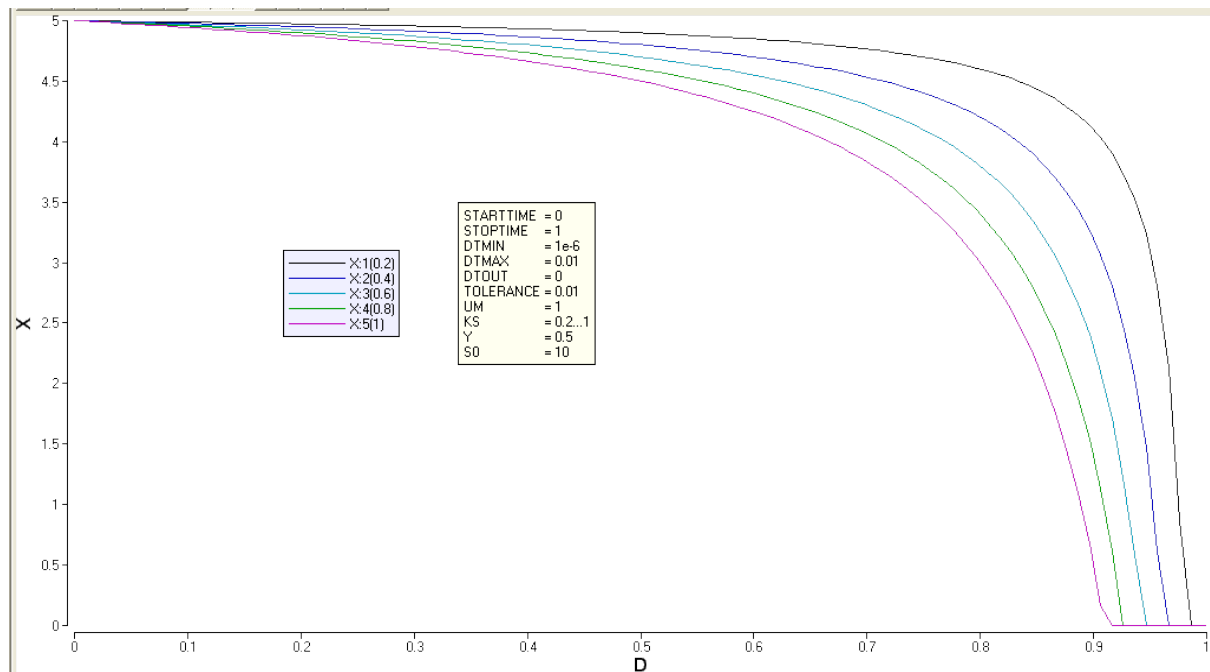
Solves the steady state chemostat equations for Monod kinetics. Plots steady state values of  $X$  and  $S$  versus  $D$

{Note this plot can be accomplished using a Parameter Plot with the dynamic example CHEMO, choosing the final values for 20 or more runs and making certain that also the runs at low  $D$  reach steady state}

Rename Time =D

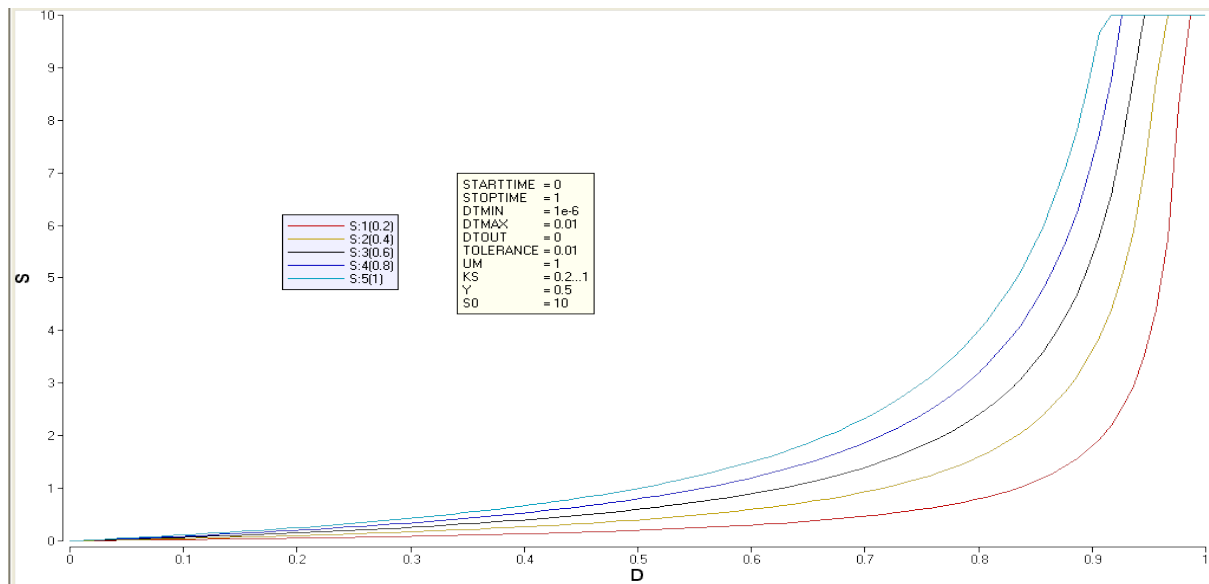
UM=1  
KS=0.2  
Y=0.5  
S0=10

S=D\*KS/(UM-D)  
limit S<=S0  
limit S>=0  
X=Y\*(S0-S)  
limit X>=0  
XD=X\*D



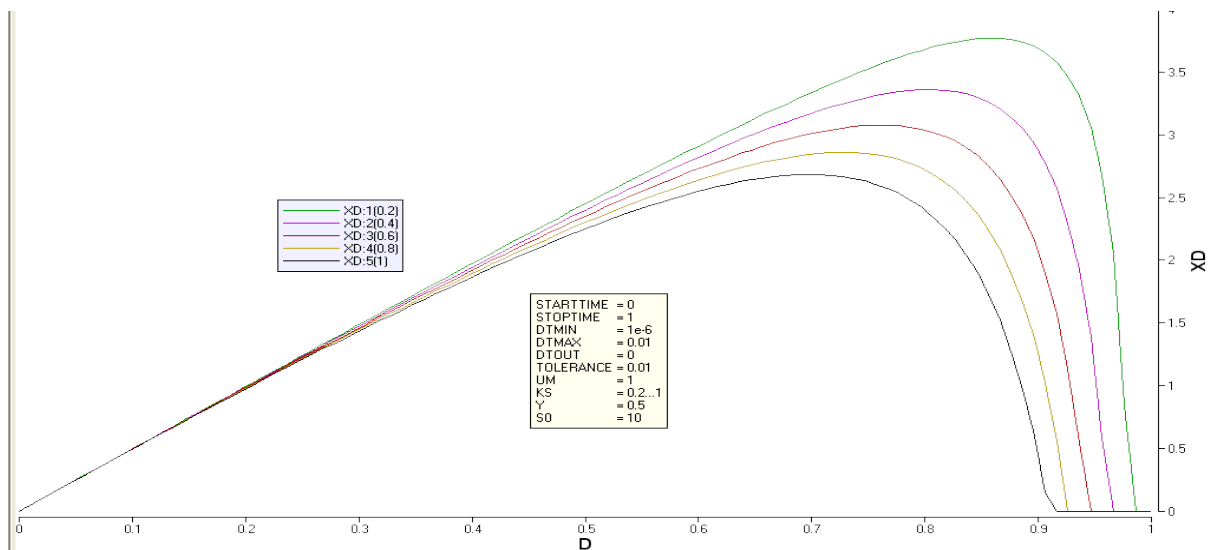
Graf št. 3: Vpliv spreminjanja  $K_s$  na koncentracijo biomase

Pri majhnih  $K_s$  je večja specifična hitrost, biomase je več. Pri velikih  $K_s$  se točka izpiranja pomakne k nižjim  $D$ -jem.  $D_{krit}$  je torej najvišji pri malih  $K_s$ .



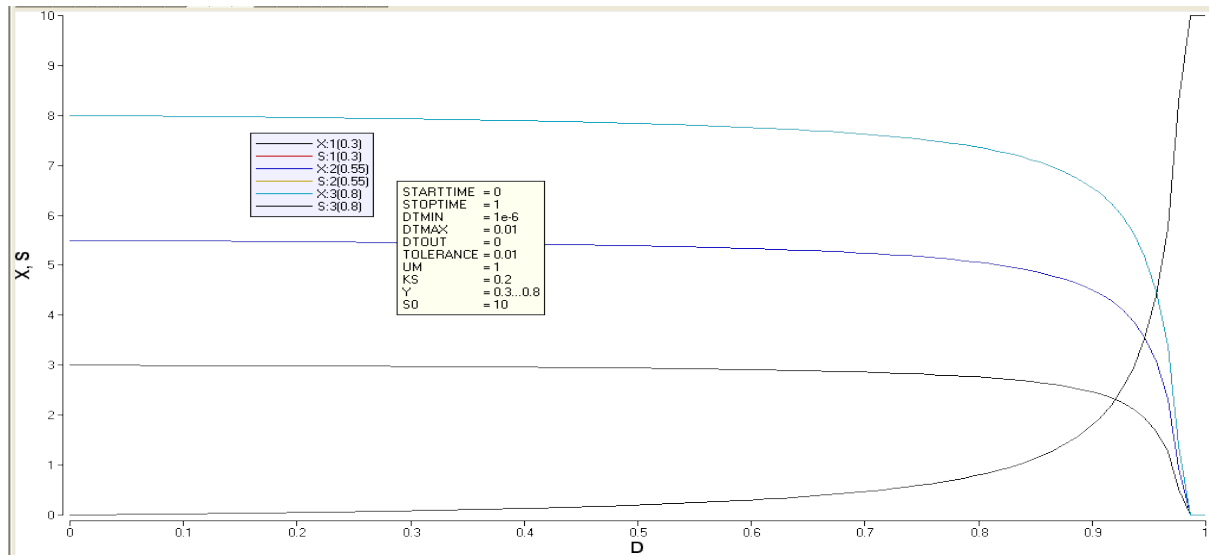
Graf št. 4: Vpliv spreminjanja  $K_s$  na koncentracijo substrata

Nizji kot je  $K_s$ , bolj je substrat izkoriščen in manj ga vržemo stran. Črta z najvišjim  $K_s$  kaže koncentracijo substrata na iztoku, torej tistega substrata, ki je zavržen.



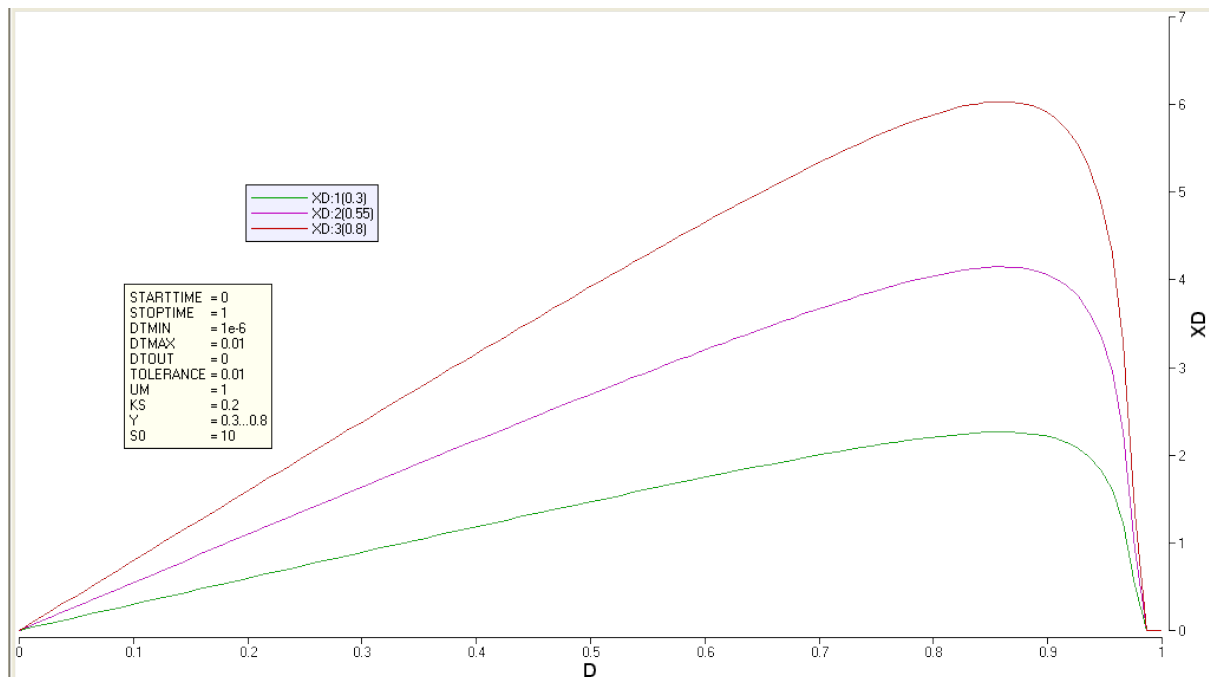
Graf št. 5: Vpliv spreminjanja  $K_s$  na produktivnost

Pri najnižjem  $K_s$  je produktivnost najvišja. Tudi washout je odvisen od  $K_s$ . Optimalen  $D$  je pri nizkih vrednostih  $K_s$ .



Graf št. 6: Vpliv spreminjanja izkoristka  $Y_{X/S}$  na koncentraciji biomase in substrata

Spreminjamo izkoristek; višji kot je, višja je koncentracija X v stacionarnem stanju. Točka izpiranja ( $D_{krit}$ ) in koncentracija substrata pa nista odvisni od izkoristka.



Graf št. 7: Vpliv spreminjanja izkoristka  $Y_{X/S}$  na produktivnost

Višji je izkoristek, višja je produktivnost. Optimalen D je pri najvišjem izkoristku.