

EXEMPLE D'APPLICATION BATCHREACTOR

BIOTECHNOLOGIE BLANCHE

SIMULATION DE LA PRODUCTION BATCH D'ACIDE POLY- β -HYDROXYBUTYRIQUE (PHB) AVEC UN MODELE CINETIQUE UTILISATEUR

OBJECTIFS DE CET EXEMPLE

L'intérêt principal de cet exemple est d'illustrer comment modéliser des bioréacteurs en utilisant BatchReactor. A l'aide du mode avancé de Simulis Reactions, l'utilisateur peut importer des bibliothèques de modèles cinétiques, notamment dédiés aux bioréactions. Ces modèles peuvent être facilement modifiés et enrichis afin de convenir à une large gamme de schémas réactionnels.

Cet exemple de technologie blanche traite de la production d'acide Poly- β -Hydroxybutyrique (PHB) par le micro-organisme *Alcaligenes eutrophus*. La modélisation mathématique des mécanismes de la réaction a recours à des équations spécifiques (équation de Monod et termes sigmoïdaux) non disponibles dans les bibliothèques standards de réactions chimiques.

DIFFUSION	<input checked="" type="checkbox"/> Libre internet	<input type="checkbox"/> Réservée aux clients ProSim	<input type="checkbox"/> Réduite	<input type="checkbox"/> Confidentielle
-----------	--	--	----------------------------------	---

FICHER BATCHREACTOR CORRESPONDANT

BATCHREA_EX_FR - PHB.pbpr

Il est rappelé au lecteur que ce cas d'utilisation est un exemple et ne doit pas être utilisé à d'autres fins. Bien que cet exemple soit basé sur un cas réel il ne doit pas être considéré comme un modèle de ce type de procédé et les données utilisées ne sont pas toujours les plus exactes disponibles. Fives ProSim ne pourra en aucun cas être tenu pour responsable de l'application qui pourra être faite des calculs basés sur cet exemple.

Energy

Fives ProSim

Siège social : Immeuble Stratège A - 51 rue Ampère - 31670 Labège - FRANCE

Tél. : +33 (0)5 62 88 24 30

S.A.S. au capital de 147 800 € - 350 476 487 R.C.S. Toulouse - Siret 350 476 487 00037 - APE 5829C - N° TVA FR 10 350 476 487

www.fivesgroup.com / www.fives-prosim.com

TABLE DES MATIERES

1. INTRODUCTION	3
2. MECANISME REACTIONNEL	3
3. CONSTITUANTS	4
4. MODELE THERMODYNAMIQUE	5
5. MODELE CINETIQUE	5
6. IMPLEMENTATION DU MODELE CINETIQUE EN UTILISANT SIMULIS REACTIONS	6
6.1. Modélisation de la réaction 1	6
6.2. Modélisation de la réaction 2	10
7. SIMULATION	15
7.1. Description du procédé	15
7.2. Résultats	17
8. BIBLIOGRAPHIE	18
9. NOMENCLATURE	19

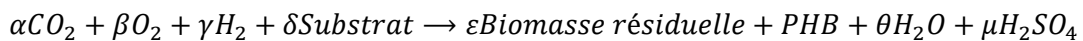
1. INTRODUCTION

Cet exemple provient de [HEU80] et traite de la production d'acide poly- β -hydroxybutyrique (PHB), un polymère biodégradable, grâce à l'action de la bactérie *Alcaligenes eutrophus*. Le modèle développé par Heinzle et Lafferty [HEI80] décrit la culture en mode batch de ces micro-organismes et considère que la croissance et le stockage de PHB, utilisé comme réserve d'énergie par la bactérie, sont liés aux substrats limitants (NH_4^+), à la biomasse résiduelle et aux concentrations du produit. L'influence du transfert de gaz est annulée par le maintien des concentrations de gaz dissous. En phase de croissance, il y a assez de substrat pour permettre la synthèse de protéines (biomasse résiduelle). Quand le substrat arrive à une concentration suffisamment basse, la production de protéines est stoppée et la production de PHB augmente (phase de stockage).

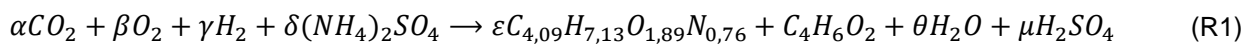
2. MECANISME REACTIONNEL

Le mécanisme réactionnel pour la synthèse du PHB est le suivant :

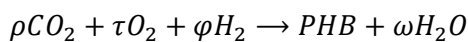
✓ Étape de croissance :



Par exemple :



✓ Étape de stockage :



Par exemple :



Les coefficients stœchiométriques des réactions sont obtenus par bilan massique pour chaque élément chimique. Le tableur Excel est utilisé pour ce calcul. Cette étape est indispensable car les stœchiométries des réactions ne sont pas disponibles dans la bibliographie utilisée. Il est important de noter que le PHB est un polymère et que le nombre de monomères le constituant est inconnu. Dans [ISH91], ce constituant est modélisé par son monomère. La même hypothèse est faite pour la simulation présentée dans cet exemple. Les coefficients stœchiométriques utilisés sont présentés dans le tableau ci-dessous.

	CO ₂	O ₂	H ₂	Substrat (NH ₄) ₂ SO ₄	Biomasse résiduelle	PHB	H ₂ O	H ₂ SO ₄
(R1)	-42,95238	-3,678021	-99,35604	-3,619048	9,5238095	1	73,26080	3,619048
(R2)	-4	-12	-33	-	-	1	30	-

3. CONSTITUANTS

Les constituants considérés dans la simulation sont les suivants :

Nom	Numéro CAS ⁽¹⁾
Dioxyde de carbone ^(*)	124-38-9
Oxygène ^(*)	7782-44-7
Azote ^(*)	7727-37-9
Hydrogène ^(*)	1333-74-0
Eau ^(*)	7732-18-5
Acide sulfurique ^(*)	7664-93-9
Sulfate d'ammonium ^(*)	7783-20-2
PHB	55001-01-9
Biomasse résiduelle	55001-02-0

Les constituants suivis d'un astérisque proviennent de la base de données standard de Simulis Thermodynamics, serveur de calculs de propriétés physico-chimiques et d'équilibres entre phases utilisé dans BatchReactor. Les propriétés thermodynamiques stockées dans cette base de données sont issues de la base DIPPR [ROW15]. L'azote est ajouté car au début de la simulation, le ciel du réacteur est rempli par de l'air (79% N₂, 21% O₂). Les pressions de vapeur saturante du dioxyde de carbone, de l'oxygène, de l'azote et de l'hydrogène ont été modifiés pour représenter au mieux leur solubilité dans l'eau. Les paramètres de ces lois de Henry proviennent de [FOG91].

Le PHB et la biomasse résiduelle ont été créés en utilisant la fonctionnalité « Ajouter un nouveau constituant » dans Simulis Thermodynamics. Leur formule chimique provient de [ISH91]. Les propriétés spécifiées sont les suivantes :

- ✓ Numéro CAS^(*) : Numéro arbitraire
- ✓ Formule chimique : Dans [ISH91]
- ✓ Poids moléculaire : Dans [ISH91]
- ✓ État physique à 25°C : Solide
- ✓ État physique en solution aqueuse à 25°C : Insoluble
- ✓ Enthalpie de formation gaz parfait à 25°C : 0 J/mol
- ✓ Chaleurs spécifiques massiques vapeur et liquide : Identique à celle de l'eau
- ✓ Pression de vapeur saturante : choisies de façon à éviter la vaporisation

$$\ln(P^0) = -30 \quad (\text{Equation 101})$$

- ✓ Enthalpie de vaporisation : 0 J/mol
- ✓ Densité liquide : Identique à celle de l'eau

Les propriétés qui figurent ci-dessus, à l'exception du numéro CAS⁽¹⁾, sont également appliquées au sulfate d'ammonium. Pour tous les constituants de la phase liquide (acide sulfurique, sulfate d'ammonium, PHB et biomasse résiduelle), la densité liquide est considérée comme étant égale à la densité de l'eau.

⁽¹⁾: Les CAS Registry Numbers® sont la propriété intellectuelle de American Chemical Society et sont utilisés par Fives ProSim SAS avec l'autorisation expresse d'ACS. Les CAS Registry Numbers® n'ont pas été vérifiés par ACS et peuvent être inexacts

4. MODELE THERMODYNAMIQUE

Les réactions se produisent à température ambiante (30°C) et à pression atmosphérique, de telle sorte que la phase gazeuse soit supposée respecter la loi des gaz parfaits.

La phase liquide contient des solides insolubles (biomasse résiduelle, PHB et sulfate d'ammonium). Ces solides ont été représentés comme étant des liquides non volatiles (voir § 3). Ils devraient être exclus de la phase liquide pour l'équilibre liquide-vapeur. Dans le cas contraire, ils modifient les compositions réelles de la phase liquide, et donc de la constante d'équilibre liquide-vapeur des constituants volatiles (eau, dioxyde de carbone, oxygène, azote, hydrogène). Ainsi, le modèle « Solides exclus de la phase liquide » a été sélectionné pour calculer la fugacité liquide.

Les lois de Henry [FOG91] ont été utilisées pour modéliser les solubilités des gaz (dioxyde de carbone, oxygène, azote et hydrogène) dans l'eau.

5. MODELE CINETIQUE

[HEI80] a développé un modèle mathématique pour la production de PHB par la bactérie *Alcaligenes eutrophus*. L'évolution de la concentration du PHB est modélisée comme étant la somme de deux contributions:

$$\frac{dP}{dt} = r_P = r_{P,1} + r_{P,2}$$

Ces deux contributions sont décrites ci-dessous, ce sont les deux réactions mises en œuvre dans la simulation.

- ✓ Terme associé à la croissance :

$$r_{P,1} = Y_{P/X} \times r_{X,1} = \frac{v_P}{v_X} \times r_{X,1} \tag{R1}$$

Où

$$r_{X,1} = \mu \times X$$

$$\mu = \mu_1 + \mu_2 = \mu_{m,1} \frac{S}{K_{S,1} + S} + \mu_{m,2} \frac{(S/K_{S,2})^{n_{Hill}}}{1 + (S/K_{S,2})^{n_{Hill}}}$$

- ✓ Terme associé au stockage :

$$r_{P,2} = \frac{K_1}{K_1 + S} (-k_1 P + k_2 X) \tag{R2}$$

Tous les paramètres provenant de [HEI80] sont présentés dans le tableau suivant.

$\mu_{m,1}$ (h ⁻¹)	$\mu_{m,2}$ (h ⁻¹)	$K_{S,1}$ (g/l)	$K_{S,2}$ (g/l)	n_{Hill}	K_1 (g/l)	k_1 (h ⁻¹)	k_2 (h ⁻¹)
0,13	0,08	0,1	1,0	5	0,041	0,045	0,18

6. IMPLEMENTATION DU MODELE CINETIQUE EN UTILISANT SIMULIS REACTIONS

Le mode « utilisateur interprété » a été utilisé pour implémenter le modèle cinétique présenté par [HEI80] pour les deux réactions. Cette fonctionnalité de Simulis Reactions permet à l'utilisateur d'écrire pour le modèle cinétique son propre code en VBScript (Microsoft Visual Basic Scripting Edition), qui est un langage interprété (c'est-à-dire un langage ne nécessitant pas de compilateur).

Une bibliothèque de VBScripts, dédiés à la modélisation des cinétiques de bioréactions, est fournie avec BatchReactor. Il est recommandé de consulter le document « Démarrer avec BatchReactor – cas 2 », présentant de façon détaillée l'utilisation de cette bibliothèque de scripts.

Toutes les réactions ont lieu en phase liquide et il est supposé que les réactions sont athermiques.

6.1. Modélisation de la réaction 1

Les informations liées au modèle cinétique à utiliser ainsi qu'aux paramètres à fournir sont disponibles en cliquant sur « Aide technique », disponible dans l'onglet « Aide » de « l'éditeur de réaction chimique » :

Editeur de réaction chimique

RÉACTION CHIMIQUE

Cette fenêtre vous permet de spécifier le contexte de votre réaction chimique

ID: {90984B37-0A33-4BC6-82E2-403BA9344656}

Général | Chaleur de la réaction | Cinétique

Activé

Nom
[Nouvelle réaction]

Etat physique
Liquide

ID utilisateur

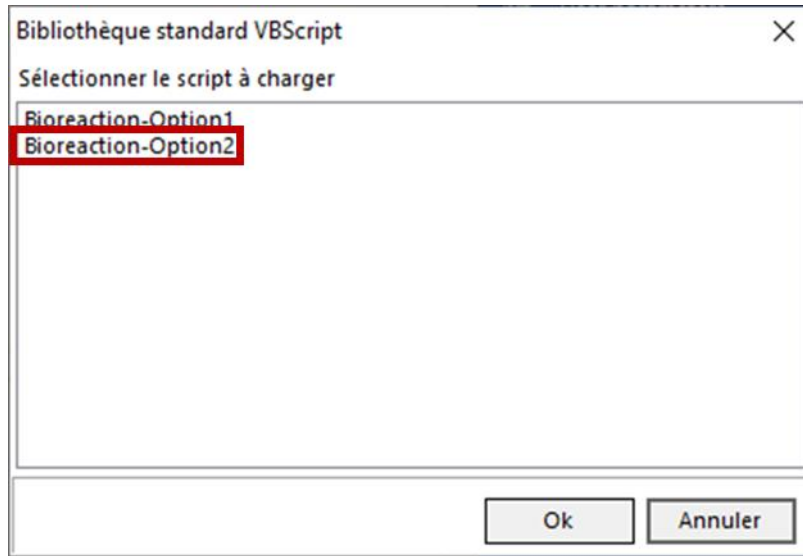
Commentaires

AIDE

Aide technique...

Ok Annuler

La vitesse globale de la réaction 1 ($r_{G,1}$) peut être modélisée à l'aide du script « Bioreaction-Option2 » disponible dans la bibliothèque standard de VBScript :



$$r_{G,1} = \left(\alpha \cdot \sum_{i=1}^{NLS} \mu_{max} \cdot r(S_i) + \beta \right) \cdot X$$

$$\text{Sachant que } r_{G,1} = \frac{r_{X,1}}{v_{X,1}}$$

Deux termes cinétiques élémentaires sont nécessaires et leurs indices sont sélectionnés dans le tableau 2 de l'aide technique :

$$r_{X,1} = \mu \times X = \left(\mu_{m,1} \frac{S}{K_{S,1} + S} + \mu_{m,2} \frac{(S/K_{S,2})^{n_{Hill}}}{1 + (S/K_{S,2})^{n_{Hill}}} \right) \times X$$

Modèle élémentaire n°1: Monod
↑
Modèle élémentaire n°2: Hill
↓

Les paramètres à fournir sont les suivants :

Paramètres du modèle	Réaction R ₁
Nombre de termes élémentaires	2
α (« Alpha »)	$\frac{1}{\nu_{X,1}} = \frac{1}{9,52} = 0,105$
β (« Beta »)	0
Sélection du constituant « Biomasse » (« CAS of X »)	Numéro CAS ^(*) : 55001-02-0
Sélection du constituant de référence (« CAS of Reference »)	Numéro CAS ^(*) : 55001-01-9
Paramètre du terme n°1 (« Term #1 »)	$\text{Indice du modèle} = 1 : \frac{C_S}{K_S + C_S}$ Avec : Sélection du substrat (« CAS of S ») : 7783-20-2 $K_S = K_{S,1} = 0,1 \text{ g/L}$ $\mu_{\max,1} = \mu_{m,1} = 0,13/3600 = 3,61 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$
Paramètre du terme n°2 (« Term #2 »)	$\text{Indice du modèle} = 2 : \frac{C_S^N}{K_S^N + C_S^N}$ Avec : Sélection du substrat (« CAS of S ») : 7783-20-2 $K_S = K_{S,2} = 1 \text{ g/L}$ $N = n_{Hill} = 5$ $\mu_{\max,2} = \mu_{m,2} = 0,08/3600 = 2,22 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$

(*) Les CAS Registry Numbers® sont la propriété intellectuelle de American Chemical Society et sont utilisés par Fives ProSim SAS avec l'autorisation expresse d'ACS. Les CAS Registry Numbers® n'ont pas été vérifiés par ACS et peuvent être inexacts

Le modèle cinétique est configuré de la façon suivante :

Editeur de réaction chimique

RÉACTION CHIMIQUE

REACTION

- Equilibrée
- Cinétique
- Instantanée

OUTILS

- Export PDF (Impression)

MODIFICATIONS

Cette fenêtre vous permet de spécifier le contexte de votre réaction chimique

ID: {F7E95757-5DAA-43B8-9F8D-C419A79FA93A}

Général | Chaleur de la réaction | Cinétique

Modèle de vitesse: Utilisateur "interprété" | Energie d'activation: 0 cal/mol

Code Montrer les erreurs du script

1
2
3
4

PARAMETRES

Paramètres utilisateur...



Paramètres utilisateur

PARAMETRES

- Ajouter
- Supprimer
- Vers le haut
- Vers le bas
- Copier
- Coller

AIDE

- Aide technique...

Liste de paramètres

#	Description	Valeur
1	Number of terms	2
2	Alpha (-)	0.105
3	Beta (s-1)	0
4	CAS of X	55001020
5	CAS of compound of reference	55001019
6	Term #1: Model index (OPTIONAL)	1
7	Term #1: CAS of S (OPTIONAL)	7783202
8	Term #1: CAS of I (OPTIONAL)	0
9	Term #1: Max growth rate (s-1) (OPTIONAL)	3.61E-005
10	Term #1: Ks (g/L) (OPTIONAL)	0.1
11	Term #1: Ki (g/L) (OPTIONAL)	0
12	Term #1: N (OPTIONAL)	0
13	Term #1: Tmin (K) (OPTIONAL)	1
14	Term #1: Tmax (K) (OPTIONAL)	1000
15	Term #2: Model index (OPTIONAL)	2
16	Term #2: CAS of S (OPTIONAL)	7783202
17	Term #2: CAS of I (OPTIONAL)	0
18	Term #2: Max growth rate (s-1) (OPTIONAL)	2.22E-005
19	Term #2: Ks (g/L) (OPTIONAL)	1
20	Term #2: Ki (g/L) (OPTIONAL)	0
21	Term #2: N (OPTIONAL)	5
22	Term #2: Tmin (K) (OPTIONAL)	1
23	Term #2: Tmax (K) (OPTIONAL)	1000

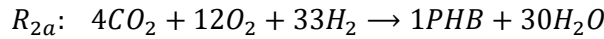
Ok Annuler

6.2. Modélisation de la réaction 2

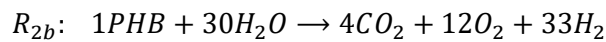
La vitesse spécifique de réaction, correspondant à la formation de PHB (P) dans la seconde réaction, peut s'écrire de la façon suivante :

$$r_{P,2} = \frac{K_1}{K_1 + S} (-k_1 P + k_2 X) = k_2 \frac{K_1}{K_1 + S} X - k_1 \frac{K_1}{K_1 + S} P$$

Afin de pouvoir utiliser la bibliothèque de modèles cinétiques de bioréaction, il est nécessaire de décomposer cette réaction en deux réactions de sens opposés :

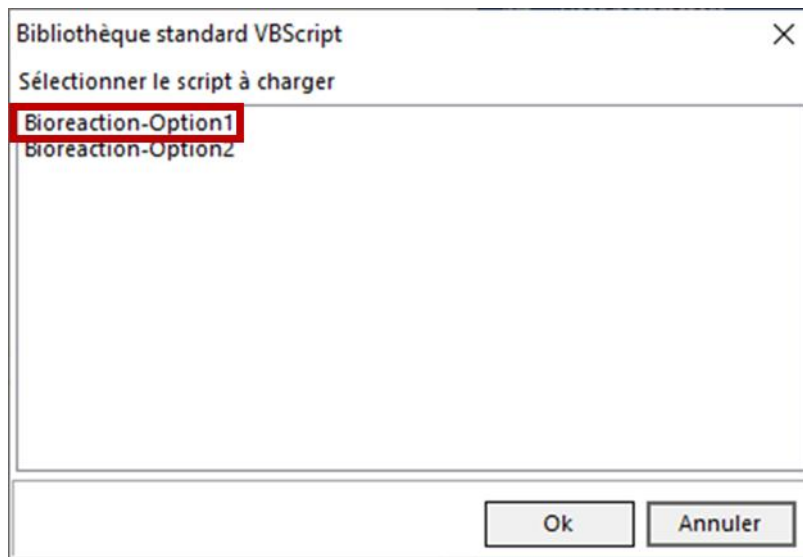


$$\text{avec } r_{P,2a} = k_2 \frac{K_1}{K_1 + S} X$$



$$\text{avec } r_{P,2b} = -k_1 \frac{K_1}{K_1 + S} P$$

Les vitesses globales de ces deux réactions peuvent être modélisées à l'aide du script « Bioreaction-option1 », disponible dans la bibliothèque de scripts :



$$r_G = \left(\alpha \cdot \mu_{max} \prod_{i=1}^{NLS} r(S_i) + \beta \right) \cdot X$$

$$\text{sachant que } r_{G,2} = \frac{r_{P,2}}{\nu_{P,2}}$$

- Pour la réaction R_{2a} :

Un seul terme élémentaire est nécessaire, et son indice est sélectionné dans le tableau 2 de l'aide technique :

$$r_{p,2a} = k_2 \frac{K_1}{K_1 + S} X$$

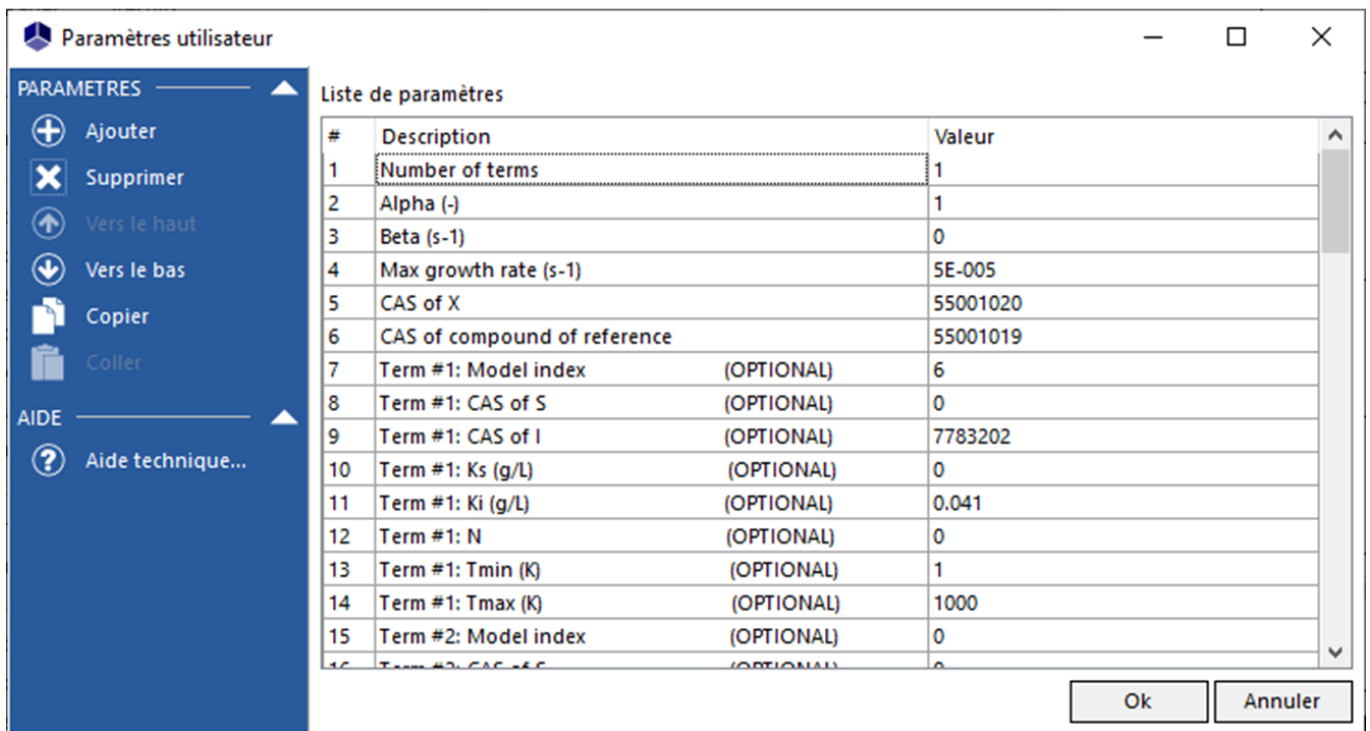
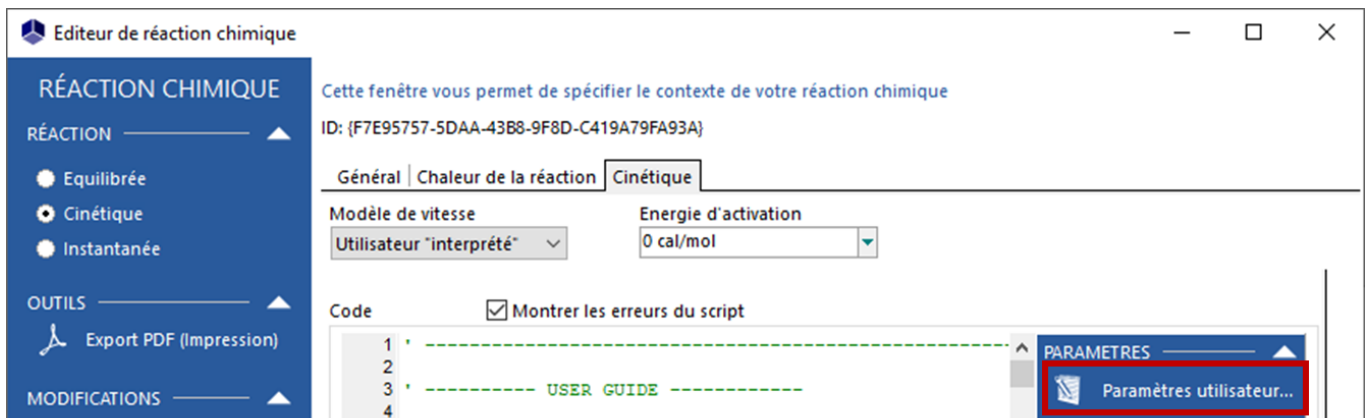
μ_{\max} ← k_2 $\frac{K_1}{K_1 + S}$ → Terme cinétique élémentaire n°6 (Inhibition non-compétitive) : $\frac{1}{1 + \frac{C_I}{K_I}}$

Les paramètres à fournir sont les suivants :

Paramètres du modèle	Réaction R _{2a}
Nombre de termes élémentaires	1
α (« Alpha »)	$\frac{1}{\nu_{p,2a}} = 1$
β (« Beta »)	0
μ_{\max} (« Max growth rate »)	$\mu_{\max} = k_2 = 0,18/3600 = 5.10^{-5} \text{ s}^{-1}$
Sélection du constituant « Biomasse » (« CAS of X »)	Numéro CAS ^(*) : 55001-02-0
Sélection du constituant de référence (« CAS of Reference »)	Numéro CAS ^(*) : 55001-01-9
Paramètre du terme n°1 (« Term #1 »)	Indice du modèle = 6: $\frac{1}{1 + \frac{C_I}{K_I}}$ Sélection de l'inhibiteur (« CAS of I »): 7783-20-2 $K_I = K_1 = 0,041 \text{ g/L}$

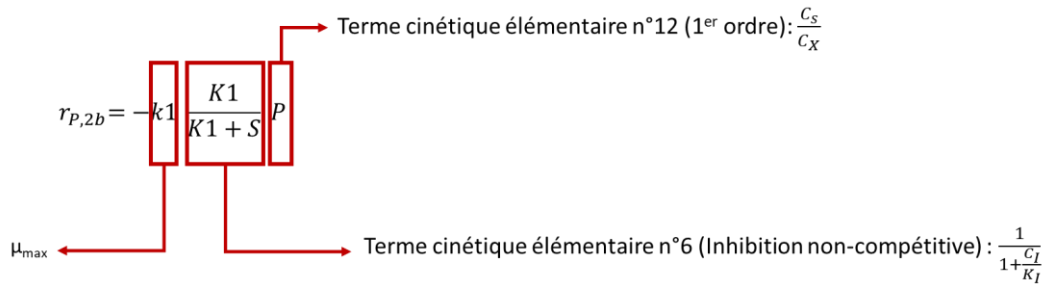
^(*): Les CAS Registry Numbers® sont la propriété intellectuelle de American Chemical Society et sont utilisés par Fives ProSim SAS avec l'autorisation expresse d'ACS. Les CAS Registry Numbers® n'ont pas été vérifiés par ACS et peuvent être inexacts

Le modèle cinétique est configuré de la façon suivante :



- Pour la réaction R_{2b} :

Deux termes cinétiques élémentaires sont nécessaires et leurs indices sont sélectionnés dans le tableau 2 de l'aide technique :



Les paramètres à fournir sont les suivants :

Paramètres du modèle	Réaction R _{2b}
Nombre de termes élémentaires	2
α (« Alpha »)	$-\frac{1}{\nu_{P,2b}} = 1$
β (« Beta »)	0
μ_{max} (« Max growth rate »)	$\mu_{max} = k_1 = 0,045/3600 = 1,25 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$
Sélection du constituant « Biomasse » (« CAS of X »)	Numéro CAS ^(*) : 55001-02-0
Sélection du constituant de référence (« CAS of Reference »)	Numéro CAS ^(*) : 55001-01-9
Paramètre du terme n°1 (« Term #1 »)	Indice du modèle = 6: $\frac{1}{1 + \frac{C_I}{K_I}}$ Sélection de l'inhibiteur (« CAS of I »): 7783-20-2 $K_I = K_1 = 0,041 \text{ g/L}$
Paramètre du terme n°2 (« Term #2 »)	Indice du modèle = 12: $\frac{C_S}{C_X}$ Avec : Sélection du substrat (« CAS of S »): 55001-01-9

(*) Les CAS Registry Numbers® sont la propriété intellectuelle de American Chemical Society et sont utilisés par Fives ProSim SAS avec l'autorisation expresse d'ACS. Les CAS Registry Numbers® n'ont pas été vérifiés par ACS et peuvent être inexacts

Le modèle cinétique est configuré de la façon suivante :

Editeur de réaction chimique

RÉACTION CHIMIQUE

REACTION

- Equilibrée
- Cinétique
- Instantanée

OUTILS

- Export PDF (Impression)

MODIFICATIONS

Cette fenêtre vous permet de spécifier le contexte de votre réaction chimique

ID: {F7E95757-5DAA-43B8-9F8D-C419A79FA93A}

Général | Chaleur de la réaction | Cinétique

Modèle de vitesse: Utilisateur "interprété" | Energie d'activation: 0 cal/mol

Code Montrer les erreurs du script

```

1 | -----
2 |
3 | ----- USER GUIDE -----
4 |
    
```

PARAMETRES

Paramètres utilisateur...



Paramètres utilisateur

PARAMETRES

- Ajouter
- Supprimer
- Vers le haut
- Vers le bas
- Copier
- Coller

AIDE

- Aide technique...

Liste de paramètres

#	Description	Valeur
1	Number of terms	2
2	Alpha (-)	1
3	Beta (s-1)	0
4	Max growth rate (s-1)	1.25E-005
5	CAS of X	55001020
6	CAS of compound of reference	55001019
7	Term #1: Model index (OPTIONAL)	6
8	Term #1: CAS of S (OPTIONAL)	0
9	Term #1: CAS of I (OPTIONAL)	7783202
10	Term #1: Ks (g/L) (OPTIONAL)	0
11	Term #1: Ki (g/L) (OPTIONAL)	0.041
12	Term #1: N (OPTIONAL)	0
13	Term #1: Tmin (K) (OPTIONAL)	1
14	Term #1: Tmax (K) (OPTIONAL)	1000
15	Term #2: Model index (OPTIONAL)	12
16	Term #2: CAS of S (OPTIONAL)	55001019
17	Term #2: CAS of I (OPTIONAL)	0
18	Term #2: Ks (g/L) (OPTIONAL)	0
19	Term #2: Ki (g/L) (OPTIONAL)	0
20	Term #2: N (OPTIONAL)	0
21	Term #2: Tmin (K) (OPTIONAL)	1
22	Term #2: Tmax (K) (OPTIONAL)	1000

Ok Annuler

7. SIMULATION

7.1. Description du procédé

Le réacteur utilisé pour la production de PHB est décrit dans le tableau suivant. Un condenseur est utilisé pour éviter la perte d'eau par évaporation.

Réacteur	
Type	Liquide-vapeur (fermé)
Volume global (vapeur + liquide)	10 l
Ciel (initial)	Air
Condenseur	
Type	Idéal sous-refroidi
Température	0°C
Taux de reflux	1 (i.e. reflux total)

Les conditions initiales sont présentées dans le tableau suivant :

Conditions initiales	
Température	30°C
Pression	1 atm
Charge initiale (kg)	
Eau	7,97968
Sulfate d'ammonium	0,01840
PHB	0,00016
Biomasse résiduelle	0,00176
Autres constituants	0
Charge totale	8

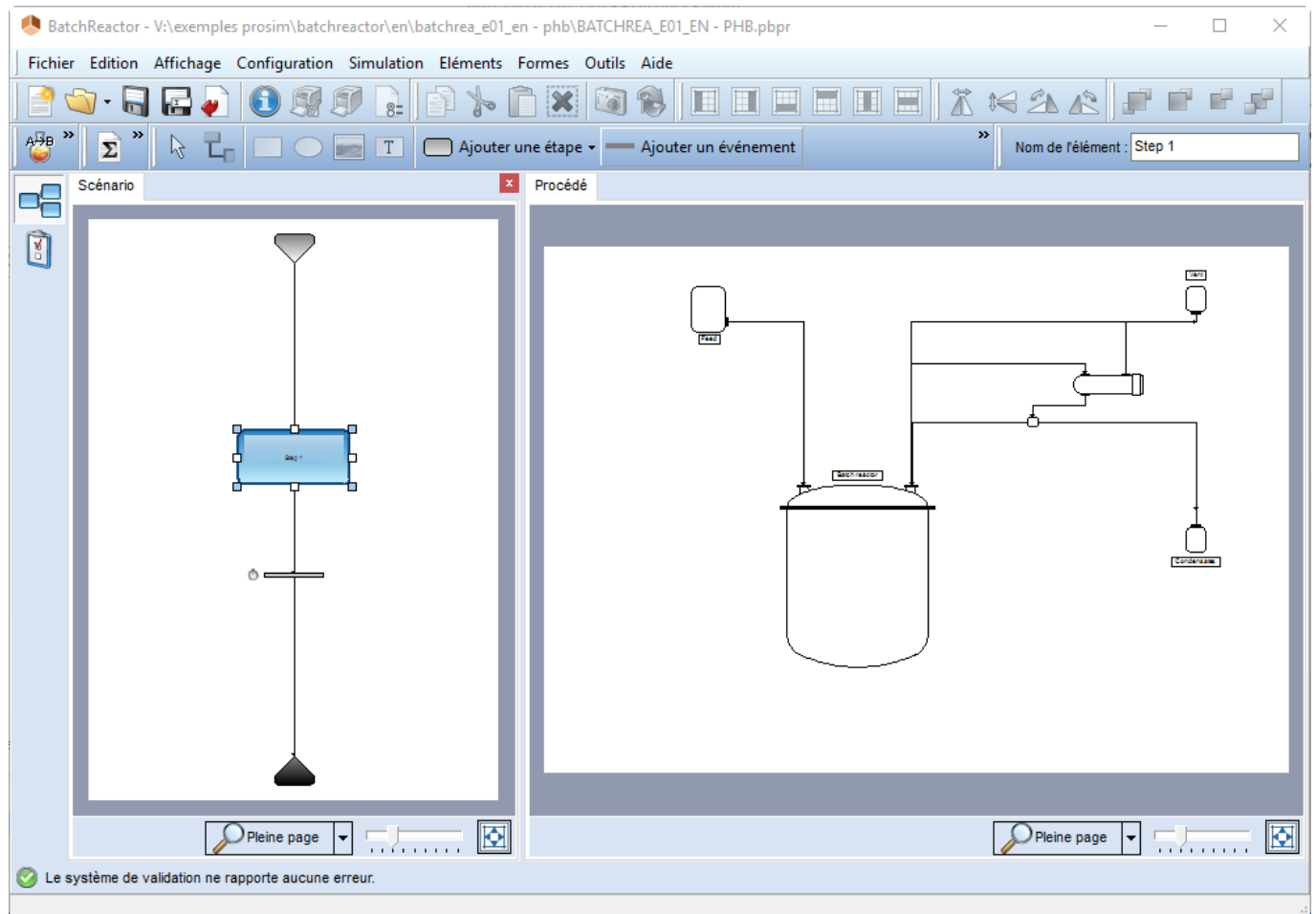
Un flux de gaz alimente en continu le réacteur dans les conditions ambiantes de façon à transporter l'hydrogène, le dioxyde de carbone et l'oxygène (rapport molaire 6:2:1) exigés pour les réactions. Le tableau suivant présente les caractéristiques de cette alimentation :

Température	30°C
Pression	1 atm
Débit total	15 l/min
Fractions molaires	
Dioxyde de carbone	0,11
Oxygène	0,22
Hydrogène	0,67
Autres constituants	0

Le mode opératoire (scénario) est constitué d'une seule étape isotherme avec les paramètres suivants :

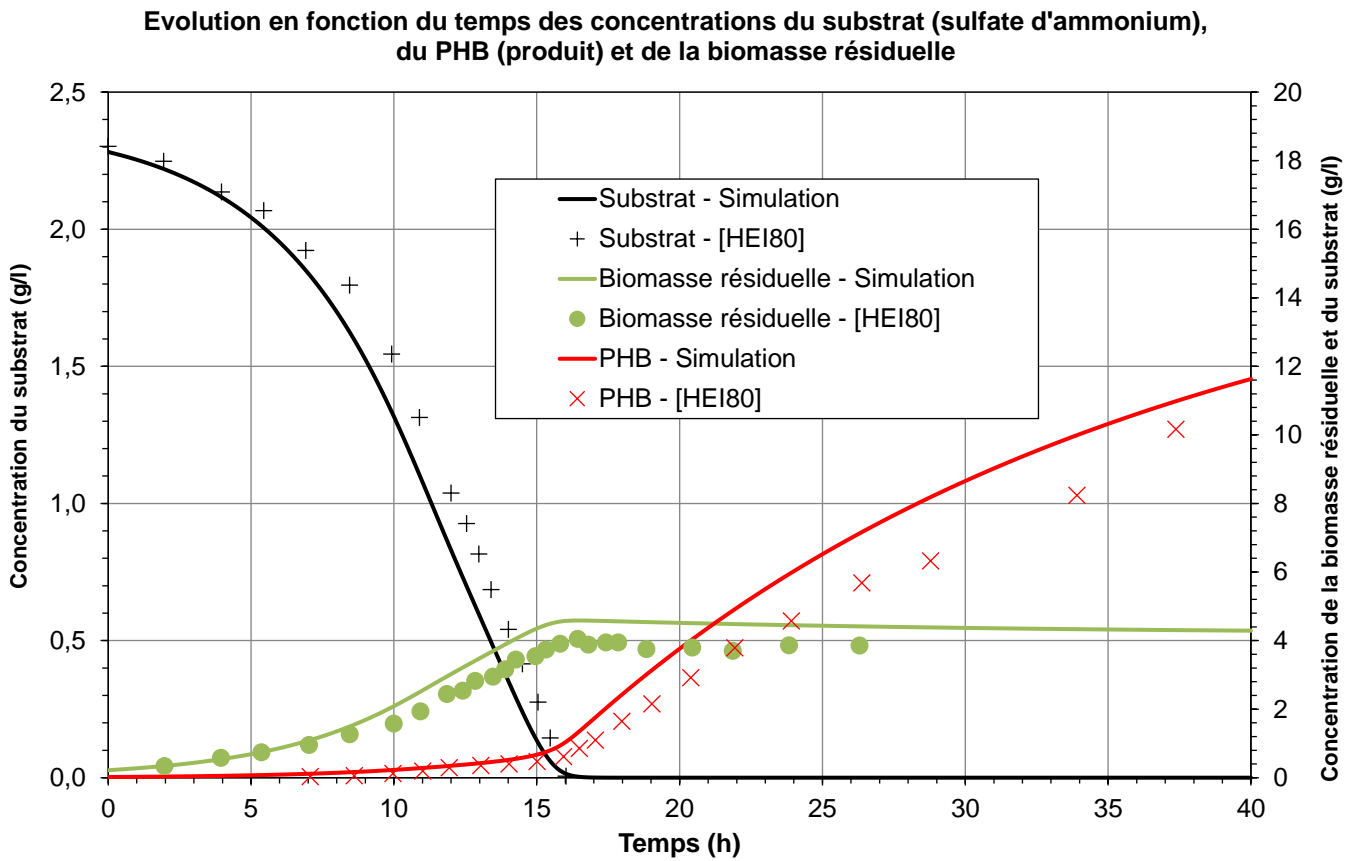
Type	Température du réacteur fixée
Température	30°C
Pression	1 atm
Durée de l'étape	40 h

Le scénario apparaît sur la gauche de l'écran ci-dessous et le schéma procédé dans la partie de droite.



7.2. Résultats

Le graphique suivant présente les résultats de la simulation obtenus avec BatchReactor. Les courbes de concentrations des constituants en fonction du temps montrent une bonne adéquation avec les données fournies par [HEI80]. L'utilisation de BatchReactor permet de contrôler tous les paramètres (volume liquide, composition de la phase gaz...). De plus, la modélisation détaillée du réacteur (système de chauffage/refroidissement, condenseur, géométrie de la cuve...) peut être prise en considération dans BatchReactor.



8. BIBLIOGRAPHIE

- [FOG91] FOGG P.G.T., GERRARD W., "Solubility of gases in liquids", Wiley (1991)
- [HEI80] HEINZLE E., LAFFERTY R.M., "A Kinetic Model for Growth and Synthesis of Poly- β -Hydroxybutyric Acid (PHB) in *Alcaligenes eutrophus* H16", European J. Appl. Microbiol. Biotechnol. 11, 8-16 (1980)
- [ISH91] ISHIZAKI A., TANAKA K., "Production of Poly- β -Hydroxybutyric Acid from Carbon Dioxide by *Alcaligenes eutrophus* ATCC 17697^T", J. Ferment. Bioeng., 71, 254-257 (1991)
- [ROW15] ROWLEY R.L., WILDING W.V., OSCARSON J.L., GILES N.F., "DIPPR® Data Compilation of Pure Chemical Properties", Design Institute for Physical Properties, AIChE, New York, NY (2015)

9. NOMENCLATURE

k_1	Constante	h^{-1}
K_1	Constante d'inhibition	g/l
k_2	Constante	h^{-1}
$K_{S,1}$	Constante d'inhibition	g/l
$K_{S,2}$	Constante d'inhibition	g/l
n_{Hill}	Coefficient de Hill	(-)
P	Concentration de PHB	g/l
P^0	Pression de vapeur saturante du constituant pur	Pa
X	Concentration de la biomasse résiduelle	g/l
r_p	Vitesse de synthèse du PHB	g/(l.h)
$r_{p,1}$	Vitesse de la réaction (R1)	g/(l.h)
$r_{p,2}$	Vitesse de la réaction (R2)	g/(l.h)
r_x	Vitesse de synthèse de la biomasse résiduelle	g/(l.h)
S	Concentration du substrat (sulfate d'ammonium)	g/l
t	Durée	h
μ	Vitesse spécifique de synthèse de la biomasse résiduelle	h^{-1}
μ_1	Terme 1 de la vitesse spécifique de synthèse de la biomasse résiduelle	h^{-1}
μ_2	Terme 2 de la vitesse spécifique de synthèse de la biomasse résiduelle	h^{-1}
$\mu_{m,1}$	Taux de croissance spécifique maximum	h^{-1}
$\mu_{m,2}$	Taux de croissance spécifique maximum	h^{-1}