การสร้างแบบจำลองคณิตศาสตร์ สำหรับการหมักเอทานอลจากกากน้ำตาล โดย *Saccharomyces cerevisiae* M30

นาย ณัฐพันธ์ ศรีรัตน์

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต

สาขาวิชาวิศวกรรมเคมี ภาควิชาวิศวกรรมเคมี

คณะวิศวกรรมศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ปีการศึกษา 2546

ISBN 974-17-4516-8

MATHEMATICAL MODELING FOR ETHANOL FERMENTATION FORM MOLASSES BY *Saccharomyces cerevisiae* M30

Mr. Nuttapan Srirattana

A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements

for the Degree of Master of Engineering in Chemical Engineering

Department of Chemical Engineering

Faculty of Engineering

Chulalongkorn University

Academic Year 2003

ISBN 974-17-4516-8

Thesis Title	MATHEMATICAL MODELING FOR ETHANOL FERMENTATION FROM MOLASSES BY *Saccharomyces cerevisiae* M30
By	Mr. Nuttapan Srirattana
Field of study	Chemical Engineering
Thesis Advisor	Muenduen Phisalaphong, Ph.D.

Accepted by the Faculty of Engineering, Chulalongkorn University in Partial Fulfillment of the Requirements for the Master's Degree

..... Dean of Faculty of Engineering

(Professor Direk Lavansiri, Ph.D.)

THESIS COMMITTEE

..... Chairman

(Professor Wiwut Tanthapanichakoon, Ph.D.)

..... Thesis Advisor

(Muenduen Phisalaphong, Ph.D.)

..... Member

(Assistant Professor Seeroong Prechanont, Ph.D.)

..... Member

(Assistant Professor Wirat Vanichsriratana, Ph.D.)

ณัฐพันธ์ ศรีรัตน์ : การสร้างแบบจำลองคณิตศาสตร์ สำหรับการหมักเอทานอลจากกากน้ำตาล โดย *Saccharomyces cerevisiae* M30. (MATHEMATICAL MODELING FOR ETHANOL FERMENTATION FROM MOLASSES BY SACCHAROMYCES CEREVISAIE M30) อ. ที่ปรึกษา: ดร. เหมือนเดือน พิศาลพงศ์, 74 หน้า.
ISBN 974-17-4516-8.

แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ถูกสร้างขึ้นเพื่อใช้อธิบายจลนพลศาสตร์ของการหมักเอทานอลจากกากน้ำตาล (Molasses) โดยใช้ยีสต์ *Saccharomyces cerevisiae* สายพันธุ์ M30 ซึ่งมีความสามารถในการตกตะกอนเร็ว กากน้ำตาลซึ่งเป็นวัตถุดิบตั้งต้นหลักในการหมักเอทานอลของประเทศไทย ถูกใช้เป็นสารตั้งต้นในการทดลอง การทดลองที่ทำเป็นชนิดครั้งคราว (Batch) ในขวดเขย่า ในขั้นแรกการหมักถูกทำขึ้นในขวดเขย่าที่ควบคุมอุณหภูมิไว้ 33 องศาเซลติเกรดโดยปรับเปลี่ยนค่าน้ำตาลเริ่มต้นระหว่าง 3 ถึง 25 เปอร์เซ็นต์มวลต่อปริมาตร จากการทดลองพบว่าความเข้มข้นเริ่มต้นของน้ำตาลที่เหมาะสมคือ 22 เปอร์เซ็นต์มวลต่อปริมาตร จากนั้นจึงทำการหมักโดยใช้ความเข้มข้นน้ำตาลเริ่มต้นที่ 22 เปอร์เซ็นต์มวลต่อปริมาตรที่อุณหภูมิต่างๆ ในช่วง 30 ถึง 42 องศาเซลติเกรด แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ที่สร้างขึ้นนี้พัฒนาจากแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของโมนอด โดยมีปัจจัยหลักสามส่วนคือ ปัจจัยของความเข้มข้นน้ำตาลเริ่มต้น ปัจจัยของความเข้มข้นของน้ำตาลและเอทานอล และปัจจัยของอุณหภูมิในการหมัก และนอกจากนั้นยังเพิ่มพจน์ของอัตราการตายและการบำรุงรักษาเซลล์ในสมการสมดุลมวลของเซลล์ โดยสมการชนิดโพลิโนเมียลถูกใช้ในการสร้างความสัมพันธ์ระหว่างค่าน้ำตาลเริ่มต้นกับค่าพารามิเตอร์ทางจลนพลศาสตร์ หลังจากนั้นสมการเอกซ์โปเนนเชียลถูกใช้เพื่ออธิบายความสัมพันธ์ระหว่างอุณหภูมิกับค่าพารามิเตอร์ทางจลนพลศาสตร์ต่างๆ อาทิเช่น การเจริญเติบโตจำเพาะและการผลิตเอทานอลจำเพาะสูงสุด และความเข้มข้นสูงสุดของเซลล์ ค่าพารามิเตอร์ที่เหมาะสมถูกคำนวณจากการวนรอบของชุดโปรแกรมคำนวณทางคณิตศาสตร์ที่เขียนขึ้นโดยใช้ระเบียบวิธีกำลังสองน้อยที่สุด การจำลองการหมักด้วยแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ที่สร้างขึ้นให้ผลในทางเดียวกันกับการทดลองของการหมักเอทานอล ค่าความเข้มข้นน้ำตาลที่เหมาะสมทั้งในด้านการเจริญเติบโตของยีสต์และความเข้มข้นของเอทานอลมีค่าเป็น 22% มวลต่อปริมาตร ที่อุณหภูมิการหมัก 33 องศาเซลติเกรด ผลที่ได้สามารถนำไปปรับปรุงและพัฒนาความสามารถของระบบการหมักเอทานอลในลำดับต่อไป

ภาควิชา วิศวกรรมเคมี ลายมือชื่อนิสิต.....
สาขาวิชา วิศวกรรมเคมี ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา.....
ปีการศึกษา 2546

4570314121 : MAJOR CHEMICAL ENGINEERING

KEY WORD: ETHANOL FERMENTATION / SACCHAROMYCES CEREVISIAE / MATHEMATICAL MODEL / MOLASSES / SIMULATION

NUTTAPAN SRIRATTANA : MATHEMATICAL MODELING FOR ETHANOL FERMENTATION FROM MOLASSES BY SACCHAROMYCES CEREVISIAE M30 THESIS ADVISOR: MUENDUEN PHISALAPHONG, Ph.D., 74 pp.

ISBN 974-17-4516-8.

A mathematical model is developed to explain the process dynamics of ethanol production by flocculating yeast, *Saccharomyces cerevisiae* M30. Molasses, the main feedstock for ethanol production in Thailand, is used as the substrate source for all experiments. Firstly, the experiments are carried out by the batch fermentation in shaking flasks with the initial sugar concentration ranging from 3 to 25%w/v and incubate at 33°C. Subsequently, the optimal initial sugar concentration growth and production is found to be 22%w/v. At the optimal initial sugar concentration (22%w/v), the fermentation are performed with operating temperature ranging from 30 to 42°C. The mathematical model is developed from Monod kinetic model. It consists of three main factors; initial substrate concentration, substrate and ethanol concentration, and operating temperature, and counts with death rate and cell maintenance for biomass equation. Polynomial equation is used to describe the relationship between initial substrate concentration and kinetic parameters. Then, exponential relationships between operating temperature and kinetic parameters such as both maximum specific growth rate and production rate and maximum production concentrations are determined. The parameters of model are converged by using least-square method. The results reveal a good agreement between the simulation and the experiment data. The optimum conditions of ethanol batch fermentation by using molasses as substrate are at 22%w/v initial reducing sugar and 33°C of operating temperature. The results can be further used to improve the ethanol fermentation process performance.

Department .....Chemical Engineering..... Student's signature .....

Field of study...Chemical Engineering.. Advisor's signature .....

Academic year.....2003.....

ACKNOWLEDGEMENTS

This thesis will never have been completed without the help and support of many people and organizers who are gratefully acknowledged here. Firstly, I would like to express my sincere gratitude to Dr. Muenduen Phisalaphong, my advisor, for her suggestions, guidance, warm encouragement and generous supervision throughout my master program. In addition, would like to gratefully thank Associate Professors Dr. Paisan Kittisupakorn for his valuable suggestions and knowledge during the research. I would also like to thank all of my thesis committees for their guidance and proof-read this manuscript.

Moreover, my work could not have been carried out without the help of all members in atmospheric biochemical laboratory Ms. Ratchat Chantawongvuti, Mr. Jeerun Kingkaew, Ms. Wanwisa Sangrungsri, and Ms. Thasanaprapha Lertsremongkol. I would like to express my deep appreciation to them and also to my friend in computer engineering laboratory, Mr. Piriya Prathuangwong who encouraged me during my Master's degree time. I can not forget to express my thankfulness to my lovely friends, Mr. Narawoot Thongmarongsri and Ms. Parichat Baramichai. Moreover, special thanks should be made for all members in the Biochemical and Environmental Engineering Laboratories for their pleasantness and encouragement Mr. Kunawut Boonyanopakun, Ms. Siriwan Silapakul, Mr. Krit Lilitkarntakul, Ms. Lerdluk Kaewvimol, Mr. Rawit Cheasagul, and Ms. Phungjai Boonyeun.

Of course, I would like to express my sincere indebtedness to my family for their worthy supports throughout my Master course.

CONTENTS

CONTENTS (Continued)

LIST OF TABLES

TABLE **PAGE**

LIST OF FIGURES

FIGURE PAGE

LIST OF FIGURES (Continued)

FIGURE **PAGE**

NOMENCLATURE

K_{CM} Maintenance constant [h^{-1}]

K_d Specific cell death rate [h^{-1}]

K_S Saturation growth constant [g/L]

K_{SP} Saturation production constant [g/L]

K_{SS} Substrate growth inhibition term [g/L]

K_{SSP} Substrate production inhibition term [g/L]

P_m Ethanol inhibition term [g/L]

C_X Cell concentration [g/L]

C_P Ethanol concentration [g/L]

C_S Substrate concentration [g/L]

C_{X0} Initial cell concentration [g/L]

C_{P0} Initial ethanol concentration [g/L]

C_{S0} Initial substrate concentration [g/L]

$Y_{P/S}$ Yield coefficient for product on substrate

$Y_{X/S}$ Yield coefficient for cells on substrate

Greek Symbols

μ Specific growth rate [h^{-1}]

μ_m Maximum specific growth rate [h^{-1}]

μ' Initial specific growth rate [h^{-1}]

ν Specific production rate [h^{-1}]

ν_m Maximum specific production rate [h^{-1}]

γ Ratio between its temperature parameter and reference temperature parameter [-]

τ Normalized specific growth rate [-]

NOMENCLATURE (Continued)

Derivatives

d C_X/dt	Cell growth rate [g/(L.h)]
d C_S/dt	Rate of change in substrate [g/(L.h)]
d C_P/dt	Ethanol production rate [g/(L.h)]