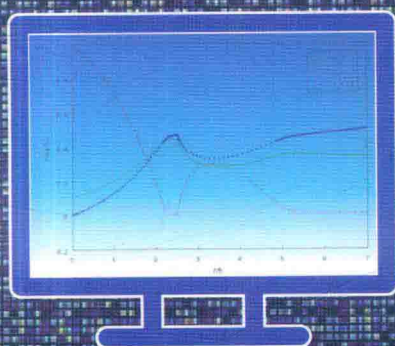


MATLAB

生物化工计算与模拟

刘俏 著



**Computation and Simulation
in Chemical Engineering Using MATLAB**

化学工业出版社

MATLAB

生物化工计算与模拟

刘俏 著

Computation and Simulation
in Chemical Engineering Using MATLAB



化学工业出版社

· 北京 ·

MATLAB 作为一款高性能数值计算软件,以其易学易用功能为生物化工领域解决数值计算问题提供了便捷的解决方案。本书从解决生物化工及相关领域的实际问题出发,以 MATLAB R2016b 版本为平台,通过近百个实例,详尽介绍了用 MATLAB 实现酶反应、微生物反应、化工传热及传质过程的数据分析与统计、参数计算与优化、动力学模拟、模型参数估计的方法与技巧。全书内容包括 MATLAB 入门基础、线性与非线性方程(组)求解、符号微分与积分、数值微分与积分、数据插值与拟合、无约束与有约束的线性及非线性规划等内容。涵盖了 MATLAB 符号运算工具箱、曲线拟合工具箱、优化工具箱、统计工具箱、生物过程模拟工具的应用。

本书适合生物化工及相关领域 MATLAB 的初、中级读者,可供高等院校生物工程、化学工程、环境工程、制药工程、食品工程及相关专业师生阅读参考,也可供相关领域科研人员自学与参考。

图书在版编目(CIP)数据

MATLAB 生物化工计算与模拟/刘俏著. —北京:化学工业出版社, 2018.3

ISBN 978-7-122-31431-4

I. ①M… II. ①刘… III. ①Matlab 软件-应用-生物工程②Matlab 软件-应用-化学工程 IV. ①Q81-39
②TQ02-39

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2018)第 013604 号

责任编辑:张彦

文字编辑:云雷

责任校对:边涛

装帧设计:王晓宇

出版发行:化学工业出版社(北京市东城区青年湖南街 13 号 邮政编码 100011)

印装:中煤(北京)印务有限公司

787mm×1092mm 1/16 印张 9 字数 254 千字 2018 年 7 月北京第 1 版第 1 次印刷

购书咨询:010-64518888(传真:010-64519686) 售后服务:010-64518899

网 址: <http://www.cip.com.cn>

凡购买本书,如有缺损质量问题,本社销售中心负责调换。

定 价: 49.00 元

版权所有 违者必究

前言

Foreword



MATLAB (Matrix Laboratory, 矩阵实验室) 是由美国 MathWorks 公司推出的一款高性能数值计算软件, 以其简单易学、强大的计算功能及图形表达功能、界面友好的特点, 在工程计算等诸多领域得到了广泛应用, 成为当前国际流行的科学计算软件。在发达国家, MATLAB 在生物化工领域的应用已经相当普及, 相关书籍也较多。而在我国用计算机辅助生物化工计算还比较薄弱, 相关文献大多只局限在给出计算机计算或模拟结果, 却没有用计算机实现的具体过程及程序, 使业内人士遇到类似问题常常束手无策。笔者在应用 MATLAB 进行生物化工计算的探索过程中, 解决了教学与科研中遇到的许多实际问题, 积累了一些经验与教训。笔者旨在通过此书总结十几年间使用 MATLAB 在生物化工领域应用的实践经验, 与大家分享在 MATLAB 学习和应用中的成果及体会, 使我国生物化工科技工作者尽快了解、熟悉和使用 MATLAB, 减少消耗在编程及数学理论和计算上的时间和精力, 享用 MATLAB 给生物化工数值计算带来的便利。

本书通过近百个实例, 为生物化工过程的计算、建模与模拟提供了具体的实例参考, 具有如下特点。

(1) 应用性 本书以应用为目的, 不要求读者掌握高深的数学知识和计算机理论, 紧密结合生物化工及相关领域的应用实例, 由浅入深地介绍了 MATLAB 应用基础, 用 MATLAB 对典型酶反应、微生物反应、化工传热及传质过程进行数据分析与统计、参数计算与优化、动力学模拟以及模型参数估计的具体方法, 使读者对 MATLAB 入门以及用 MATLAB 进行生物化工计算与模拟提供了可借鉴的应用程序。

(2) 适用性 本书采用 MATLAB R2016b 版本, 用户界面以中文显示, 并按照“中文/英文”用户界面, 以汉-英双语形式介绍, 以满足不同读者的需要。

根据我国高等院校本科生及硕士研究生的“生物化学”“化工原理”“生物反应工程”等相关课程, 部分实例来源于国内相关教材, 为教学用 MATLAB 实现其计算与模拟提供了具体指导。

(3) 拓展性 本书一些实例介绍了 MATLAB 的多种求解途径, 有些实例还出现在不同

的章节里，为读者展示了用 MATLAB 解决同一问题的不同思路及方法，使读者更全面地了解 MATLAB 的特性与功能，比如用生物系统模拟工具的图形用户界面（GUI）使细胞反应模型的参数估计过程大为简化。还有一些实例具有很强的综合应用性，如“有/无菌体死亡的细胞生长与基质消耗的动力学模拟”“恒速流加分批培养过程的动态模拟”“细胞反应动力学模型参数的估计”等，为读者提供了用 MATLAB 解决此类综合问题的实践方法。

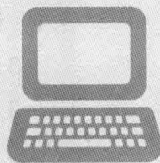
出版此书，感谢美国 MathWorks 公司及时提供更新软件以及技术支持，感谢辽宁省石油化工规划设计院有限公司教授级高级工程师杜菊女士为本书绘制了插图。

由于笔者水平有限，书中难免会有不足之处，恳请读者提出宝贵意见。

刘 俏
2018.4

目录

CONTENTS



第1章 MATLAB 基础 / 001

- 1.1 MATLAB 工作环境 / 001
 - 1.1.1 MATLAB 窗口 / 001
 - 1.1.2 M 文件的编辑调试环境 / 003
 - 1.1.3 在线帮助 / 005
- 1.2 数学运算 / 006
 - 1.2.1 基础运算 / 007
 - 1.2.2 数组及运算 / 008
- 1.3 绘图功能 / 012
 - 1.3.1 基本图形 / 012
 - 1.3.2 对数坐标图形 / 019
 - 1.3.3 函数绘图 / 019
 - 1.3.4 双轴绘图 / 020
- 1.4 数据导入与导出 / 021
 - 1.4.1 数据导入 / 021
 - 1.4.2 数据导出 / 025

第2章 线性与非线性方程（组）的应用 / 027

- 2.1 线性方程组 / 027
 - 2.1.1 细胞反应的元素衡算 / 028
 - 2.1.2 细菌共存数的确定 / 028
 - 2.1.3 多级逆流萃取理论级数的确定 / 029
- 2.2 非线性方程(组) / 032
 - 2.2.1 应用基础 / 032
 - 2.2.2 汽液平衡组成及泡点温度的确定 / 036
 - 2.2.3 分批培养过程细胞浓度的确定 / 037
 - 2.2.4 换热器组温度的优化 / 038
 - 2.2.5 传热过程流量的调节 / 040

第 3 章 微分模型的应用 / 042

3.1 微分的解析解 / 042

- 3.1.1 微分方程与微分函数的解析解 / 042
- 3.1.2 连续搅拌反应器最大稀释率的确定 / 045
- 3.1.3 酶底物抑制动力学方程及最佳底物浓度的确定 / 047
- 3.1.4 发酵培养基最佳配方的确定 / 048

3.2 微分方程数值解 / 050

- 3.2.1 应用基础 / 050
- 3.2.2 细胞生长动力学模拟 / 051
- 3.2.3 细胞分批培养过程动力学模拟 / 052
- 3.2.4 有/无菌体死亡的细胞生长与基质消耗的动力学模拟 / 054
- 3.2.5 恒速流加细胞分批培养过程的动态模拟 / 060

第 4 章 积分模型的应用 / 064

4.1 符号积分 / 064

- 4.1.1 应用基础 / 064
- 4.1.2 均相酶促反应时间的确定 / 066

4.2 数值积分 / 067

- 4.2.1 应用基础 / 067
- 4.2.2 均相酶促反应时间的确定 / 069
- 4.2.3 乳糖在平推流反应器中水解的 A/F 的确定 / 069
- 4.2.4 高浓度气体吸收传质单元数的计算 / 070

第 5 章 数据插值与拟合 / 073

5.1 数据插值 / 073

- 5.1.1 一维与二维插值 / 073
- 5.1.2 折光率与乙醇质量分数的估算 / 076
- 5.1.3 发酵时间与青霉素浓度的估算 / 077

5.2 数据拟合——曲线拟合工具箱 (Curve Fitting Toolbox) 的应用 / 079

- 5.2.1 Curve Fitting Toolbox 的交互环境 / 079
- 5.2.2 多项式拟合——反应物分压与反应时间关系模型 / 080
- 5.2.3 有理式拟合——无抑制的细胞生长动力学模型 / 081
- 5.2.4 幂函数拟合——强制对流传热关联式及反应级数的确定 / 082
- 5.2.5 自定义方程拟合——有/无抑制剂的酶反应动力学模型 / 088

第 6 章 优化工具箱 (Optimization Toolbox) 的应用 / 093

6.1 线性规划 / 093

- 6.1.1 无约束与有约束线性规划 / 093

- 6.1.2 污水系统处理费用最小值的确定 / 096
- 6.2 非线性规划 / 097
 - 6.2.1 无约束与有约束非线性规划 / 097
 - 6.2.2 保温层厚度的优化 / 100
 - 6.2.3 发酵生产年利润最大化的确定 / 103
- 6.3 优化工具箱图形用户界面 (GUI) / 105
 - 6.3.1 GUI 优化工具的启动与使用 / 105
 - 6.3.2 无约束优化 (fminunc/ fminsearch 求解器) / 106
 - 6.3.3 有约束优化 (fmincon 求解器) / 107
 - 6.3.4 线性规划 (linprog 求解器) / 108
 - 6.3.5 非线性最小二乘优化 (lsqnonlin 求解器) / 108
 - 6.3.6 遗传算法优化 (ga 求解器) / 108
 - 6.3.7 遗传算法优化发酵过程体积溶氧传递系数 (ga 求解器) / 110

第 7 章 细胞反应动力学模型参数的估计 / 114

- 7.1 细胞反应动力学研究方法 / 114
- 7.2 洋葱伯克霍尔德菌分批发酵动力学研究 / 114
 - 7.2.1 模型建立与模型参数估计方法 / 115
 - 7.2.2 模型参数初始值的估计 / 116
 - 7.2.3 动力学模型参数的估计 / 120

第 8 章 生物系统模拟工具 (SimBiology) 的应用 / 123

- 8.1 酶反应动力学模拟 / 123
 - 8.1.1 可逆酶反应动力学模拟 / 123
 - 8.1.2 有抑制剂的酶反应动力学模拟 / 126
- 8.2 细胞反应动力学模拟 / 129
- 8.3 细胞反应模型参数的估计 / 132

参考文献 / 136

第1章

MATLAB 基础

1.1 MATLAB 工作环境

1.1.1 MATLAB 窗口

启动 MATLAB R2016b 常用以下两种方法。

- 从系统桌面选择“开始/所有程序/MATLAB/MATLABR2016b”菜单。
- 桌面快捷方式。

打开之后，显示界面如图 1-1 所示。



图 1-1 MATLAB 用户界面

由图 1-1 可以看到选项卡包括三个标签页：主页（HOME）、绘图（PLOTS）、APP（应用程序）。其中主页包括命令行窗口（Command Window）、工作区（Workspace）、当前文件夹

(Current Folder)、命令历史窗口 (Command History)。

(1) 命令行窗口 (Command Window)

启动 MATLAB，出现 MATLAB 的命令行窗口，可以见到提示符 “>>”，如图 1-1 所示。在命令行窗口中，可以输入变量、函数及表达式等，按 Enter 键后，系统即可执行相应操作。例如，要计算 “120+60÷5” 的值，在命令行窗口输入：

```
>> x=120+60/5
```

按 Enter 键，输出为：

```
x =  
132
```

命令行窗口常用命令及功能如下。

- clc: 对命令行窗口清屏；
- clear: 从工作区清除所有变量；
- clear all: 从工作区清除所有变量和函数；
- clf: 清除图形窗口内容；
- who: 列出当前工作区中的变量；
- whos: 列出当前工作区中的变量及信息；
- which: 查找指定文件的路径；
- save name: 保存工作区变量到文件 name.mat；
- save name x y: 保存工作区变量 x 和 y 到文件 name.mat；
- load name: 加载 name 文件中的所有变量到工作区；
- load name x y: 加载 name 文件中的变量 x 和 y 到工作区；
- what: 列出当前目录下的 M 文件和 mat 文件。

(2) 工作区 (Workspace)

鼠标左键双击 “工作区” 浏览器，可以使界面脱离 MATLAB 界面。在该区域可以看到各内存变量，方便快捷地实现对数据的操作。例如，x 取 0 到 4π 区间，离散点间隔为 π/50，y 为 x 的正弦函数。在命令行窗口输入：

```
>> x=0:pi/50:4*pi;  
y=sin(x);
```

按 Enter 键后，查看工作区，如图 1-2 所示。

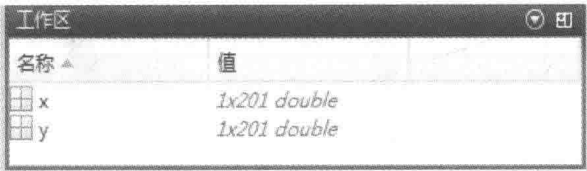


图 1-2 工作区界面

用鼠标双击图 1-2 中的变量 y ，将得到如图 1-3 所示的用数组编辑器显示的值。

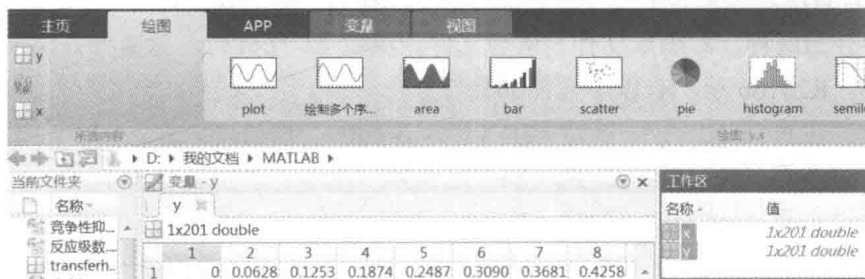


图 1-3 数组编辑器界面

当选中原图 1-3 中“工作区”的 x 和 y 时，在“绘图”标签页中可以选择任意一种绘图类型，若选择“plot”，即可得到相应的 y 与 x 的函数图像。

(3) 当前文件夹 (Current Folder)

当前路径窗口显示当前用户所在的路径，可以在其中对 MATLAB 路径下的文件进行搜索、浏览、打开等操作。点击“当前文件夹”浏览器右上角的 图标，出现如图 1-4 所示的界面。

若把鼠标放置“当前文件夹”中任意文件上，单击右键，可以弹出如图 1-5 所示的快捷菜单，通过菜单中的选项可以对文件完成一般的操作，如打开、删除、数据导入等。



图 1-4 “当前文件夹”浏览器界面



图 1-5 “当前文件夹”快捷菜单界面

(4) 命令历史记录 (Command History)

命令历史记录窗口显示已执行过的命令。若选中命令历史记录中的某段命令，按 F9 键后，则该段命令被导入命令行窗口。

1.1.2 M 文件的编辑调试环境

MATLAB 的工作模式分为指令（命令）执行模式及 M 文件程序执行方式。前者在命令行窗口直接实现，后者文件名通常保存后缀为“m”的文件，故称之为 M 文件。当遇到输入命令较多，以及要重复输入命令的情况下，利用 M 文件很方便。将所要执行的命令按顺序放

到一个扩展名为“.m”的文本文件中，每次运行时只需要在 MATLAB 的命令行窗口输入 M 文件的文件名即可。

M 文件分为两种，即脚本文件与函数文件。编辑 M 文件时，需要打开编辑器窗口。打开 MATLAB R2016b 后，有以下几种形式打开。

- 单击“主页 (HOME) /新建脚本 (New Script)”按钮。
- 单击“主页 (HOME) /新建 (New) /脚本 (Script)”按钮 (脚本文件)。
- 单击“主页 (HOME) /新建 (New) /函数 (Function)”按钮 (函数文件)。
- 在命令行窗口直接输入命令：edit。

进入 M 文件编辑区，文件默认名为 Untitle。

点击  按钮，或按 F5 键，执行 M 文件。

(1) M 脚本文件 (Script)

M 脚本文件实际上与窗口命令没有本质区别，它是一系列命令的集合，可以理解成为一种批处理文件，而且脚本文件运行产生的变量留在 MATLAB 的工作区，运行结果可以在命令行窗口显示，也可以用图形显示，还可以以文件形式保存。

【例 1-1】以下两个函数用 M 文件编辑器编辑脚本文件并运行，再分别绘制其图像。
 $y=\sin(x)+\sin(4x)$, $z=\cos(x)+\sin(3x)$ 。

用上述介绍的任一种方法打开编辑器 (Editor)，并输入以下命令：

```
x=0:0.02:8;  
y=sin(x)+sin(4*x);  
z=cos(x)+sin(3*x);  
plot(x,y,'*',x,z)  
xlabel('x');  
ylabel('y (z)');
```

出现如图 1-6 所示界面，点击“保存 (Save)”按钮，命名为 Example1_1.m；再点击“运行 (Run)”按钮，运行结果如图 1-7 所示。也可以在命令行窗口直接输入脚本文件名 Example1_1，按 Enter 键，会得到同样的运行结果。

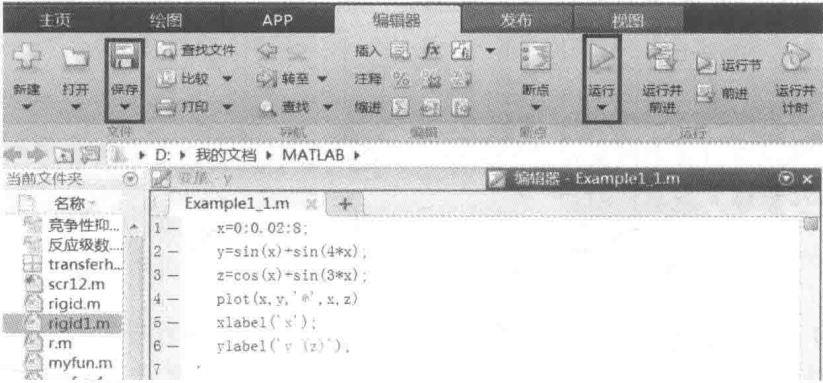


图 1-6 脚本文件的编辑状态

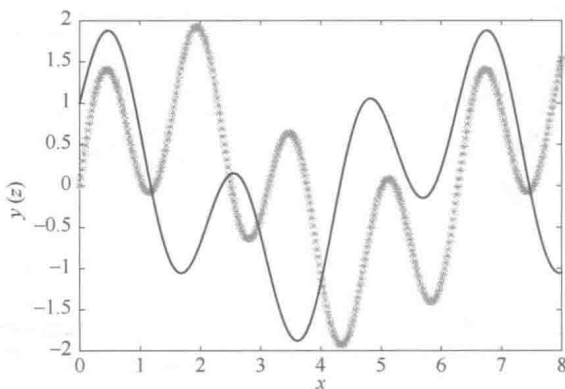


图 1-7 脚本文件运行结果

(2) M 函数文件 (Function)

函数文件必须以 `function` 开头。应用示例见第 3 章【例 3-8】。

(3) M 文件的命名规则

① 文件名命名要用英文字符，第一个字符不能是数字。

② 尽量不要是简单的英文单词，最好是由大小写英文、数字、下划线等组成。命名不能为两个单词，如 `Transfer Heat`，应该加一下划线 `Transfer_Heat`，或者 `TransferHeat`。

③ 文件名不要与 MATLAB 的内置函数名以及工具箱中的函数重名，以免发生执行错误命令的现象。

需要注意的是，M 文件最好直接放在 MATLAB 的默认搜索路径下（一般是 MATLAB 安装目录的子目录 `work` 中）。这样就不用设置 M 文件的路径，否则要用路径操作指令 `path` 重新设置路径。

1.1.3 在线帮助

MATLAB 提供了强大的帮助系统，内容丰富，获取帮助的形式多样。

(1) 利用帮助菜单获取帮助信息

选中 MATLAB 主界面菜单上的“帮助 (Help)”，下拉菜单如图 1-8 所示。如选择“示例 (Examples)”，通过该演示系统，可以直观、快速地学习 MATLAB 许多实用的知识。



图 1-8 “帮助”下拉菜单界面

(2) 在 MATLAB 命令行窗口获得帮助信息

help 功能提供 MATLAB 大部分主题的在线帮助信息。

help: 显示 help 主题一览表;

help 命令及函数名: 查询某条命令或函数的用法 (必须知道准确的函数名称);

help 及特殊符号: 显示特殊字符与符号帮助信息;

help help: 显示 help 的帮助信息。

比如, 在命令行窗口输入:

```
>> help fsolve
```

即可获得函数 “fsolve” 的相关信息:

```
fsolve solves systems of nonlinear equations of several variables.
fsolve attempts to solve equations of the form:
F(X) = 0   where F and X may be vectors or matrices.
.....
```

若在命令行窗口输入:

```
>> help pi
```

即可获得 π 的相关信息:

```
pi      3.1415926535897....
pi = 4*atan(1) = imag(log(-1)) = 3.1415926535897....
.....
```

帮助系统导航浏览器是 MATLAB 专门提供的一个独立的帮助子系统, 该系统包含所有的帮助文件都存储在 MATLAB 安装目录的 help 子目录下。若在命令行窗口输入:

```
>>doc
```

则打开了帮助导航浏览器。

(3) 远程帮助

通过网络获得远程帮助。可以直接访问 MathWorks 公司主页 (www.mathworks.com 或 <http://cn.mathworks.com>), 从中可以找到许多有用的信息。还有国内的 MATAB 中文论坛 (<http://www.ilovematlab.cn>)、MATAB 技术论坛 (<http://www.matlabsky.com>) 等也有很丰富的信息资源。

1.2 数学运算

MATLAB 算术运算符 “+” “-” “*” “/” “\” “^” “sqrt ()” 等, 分别实现符号矩阵加、减、乘、右除、左除、求幂及开平方等运算, 运算符 “.*” “./” “.\” “.^” 分别实现符号数

组元素与元素的运算。

在 MATLAB 中有几个常用的固定变量，它们代表着特殊的数值或意义。这样的变量有 π 代表圆周率 3.141 592 653..., i 或 j 代表复数单位 $\sqrt{-1}$, inf 代表无穷大 $1/0$, NaN 代表不定值 $0/0$ 、 $0*\infty$ 、 ∞/∞ 等。

1.2.1 基础运算

【例 1-2】① 计算 $120+60/5$ 。在命令行窗口输入：

```
>>x=120+60/5
```

按 Enter 键，输出为：

```
x =  
132
```

② 计算 5^4 ，并将其结果开平方。在命令行窗口输入：

```
>>5^4
```

按 Enter 键，输出为：

```
ans =  
625
```

在命令行窗口输入：

```
>>sqrt(ans)
```

按 Enter 键，输出为：

```
ans =  
25
```

③ 求 $\sin(\pi/3)$ 与 i^2 。在命令行窗口输入：

```
>>sin(pi/3)
```

按 Enter 键，输出为：

```
ans =  
0.8660
```

在命令行窗口输入：

```
>>i^2
```

按 Enter 键，输出为：

```
ans =  
-1
```

④ 求 $\sqrt{1+2 \times 3^4} \times \sin(\pi/4)$ 。在命令行窗口输入:

```
>>sqrt(1+2*3^4)*sin(pi/4)
```

按 Enter 键, 输出为:

```
ans =  
9.0277
```

⑤ 求当 $x=1$ 时多项式 $x^3+11x^2+55x+125$ 的值。在命令行窗口输入:

```
>>p=[1 11 55 125];  
x=1;  
polyval(p,x)
```

按 Enter 键, 输出为:

```
ans =  
192
```

1.2.2 数组及运算

(1) 创建数组

【例 1-3】 在命令行窗口输入:

```
>>clear all  
A=[]  
B=[6 3 4 3 2 1]  
C=[6,3,4,3,2,1] %与 B 相同  
D=[6;3;4;3; 2;1] %将 B 转置  
E=B' %将 B 转置
```

按 Enter 键, 输出为:

```
A =  
  
[]  
B =  
6 3 4 3 2 1  
C =  
6 3 4 3 2 1  
D =  
6  
3  
4  
3  
2  
1  
E =  
6  
3  
4  
3  
2  
1
```

```

3
4
3
2
1
E =
6
3
4
3
2
1

```

由此可见，创建一维数组就是将整个数组放在方括号里，行数组（row vector）元素用空格或逗号分隔，列数组（column vector）元素用分号分隔，标点符号一定要在英文状态下输入。

（2）访问数组

【例 1-4】 在命令行窗口输入：

```

>>clear all
B=[6 3 4 3 2 1];
b1=B(1) %访问数组第 1 个元素
b2=B(1:3) %访问数组第 1、第 2、第 3 个元素
b3=B(3:end) %访问数组第 3 个到最后一个元素
b4=B([1 6]) %访问数组第 1 及第 6 个元素

```

按 Enter 键，输出为：

```

b1 =
    6
b2 =
    6     3     4
b3 =
    4     3     2     1
b4 =
    6     1

```

（3）用 linspace 函数创建一维数组

调用格式：x=linspace(a,b,n)

说明：创建行向量 x，第 1 个元素为 a，最后 1 个元素为 b，形成总数为 n 个的等比数列。