



Technische Universiteit Delft  
Faculteit Elektrotechniek, Wiskunde en Informatica  
Delft Institute of Applied Mathematics

**Semi-stochastisch cell-based model voor BioGrout**

Verslag ten behoeve van het  
Delft Institute of Applied Mathematics  
als onderdeel ter verkrijging

van de graad van

**BACHELOR OF SCIENCE**  
**in**  
**TECHNISCHE WISKUNDE**

door

**WILLEM VAN LOENEN**

**Delft, Nederland**  
**Augustus 2014**





**BSc verslag TECHNISCHE WISKUNDE**

**“Semi-stochastisch cell-based model voor BioGrout ”**

**WILLEM VAN LOENEN**

**Technische Universiteit Delft**

**Begeleider**

Dr.ir. F.J. Vermolen

**Overige commissieleden**

Prof.dr.ir. A.W. Heemink

Dr. J.G. Spandaw

Augustus, 2014

Delft



# Samenvatting

Biogrout is een technologie waarbij grond verstevigd wordt met behulp van bacteriën. Deze bacteriën scheiden, wanneer ze gevoed worden met ureum, carbonaat af dat met aanwezig calcium reageert tot kalksteen. Dit kalksteen hecht vervolgens de zandkorrels in de grond aan elkaar vast, waardoor de gehele ondergrond uithardt.

Deze biologische technologie vindt de laatste jaren steeds meer toepassingen in de praktijk. Belangrijk is het voor het toepassen van de technologie dat het proces zelf goed doorgrond wordt. Een belangrijke stap hierbij wordt de laatste jaren gezet door het proces te vatten in een model. Aan de hand van een goed model kan het verloop van het proces worden verklaard en voorspeld en kunnen met behulp van die informatie aanpassingen worden gedaan in het gebruik.

In dit project is een semi-stochastisch cell-based model voor Biogrout gemaakt. Op porie-schaal worden enkele zandkorrels beschouwd waarop alle individuele bacteriën worden gesimuleerd. In dit onderzoek wordt een model opgebouwd waarbij drie verschillende onderdelen aan bod komen.

Allereerst worden de verschillende bacteriën gesimuleerd. Er wordt gekeken naar de beweging van de bacteriën en ook de deling en sterfte van de bacteriën is meegenomen in het model.

Ten tweede worden de verschillende chemische processen beschreven en gemodelleerd. Zowel de afscheiding van carbonaat door de bacteriën als de reactie van calcium en carbonaat tot kalksteen worden meegenomen.

Tot slot wordt de injectie van ureum geïmplementeerd; de voeding voor de bacteriën die ze nodig hebben om carbonaat af te scheiden.



# Lijst van gebruikte symbolen

Symbol	Omschrijving	Eenheid
$R_z$	Straal van een zandkorrel	mm
$R_b$	Straal van een bacterie	$\mu\text{m}$
$D_{bact}$	Diffusiviteit van een bacterie	$\text{cm}^2/\text{s}$
$a$	Mobiliteitsparameter	$\text{m}^3/\text{Ns}$
$P_s(\Delta t)$	Kans dat een bacterie in een periode van $\Delta t$ sterft	-
$P_s(\Delta t)$	Kans dat een bacterie in een periode van $\Delta t$ deelt	-
$E_b$	Elasticiteit van een bacterie	kPa
$c$	Concentratie $\text{CO}_3^{2-}$ , ofwel carbonaat	$\text{mol}/\text{m}^3$
$k$	Concentratie $\text{CaCO}_3$ , ofwel calciumcarbonaat of kalksteen	$\text{mol}/\text{m}^3$
$D$	Diffusiecoëfficiënt $\text{CO}_3^{2-}$	-
$\gamma$	Snelheid afscheiding van $\text{CO}_3^{2-}$ door bacterie	$\text{mol}/\text{m}^3/\text{s}$
$\alpha$	Reactiesnelheid vorming $\text{CaCO}_3$	$\text{mol}/\text{m}^3/\text{s}$
$\beta$	Reactiesnelheid splitsing $\text{CaCO}_3$	$\text{mol}/\text{m}^3/\text{s}$





# Inhoudsopgave

<b>Samenvatting</b>	<b>v</b>
<b>Lijst van gebruikte symbolen</b>	<b>vii</b>
<b>1 Introductie</b>	<b>1</b>
<b>2 Wiskundig Model</b>	<b>3</b>
2.1 Bacteriën . . . . .	3
2.1.1 Random walk . . . . .	4
2.1.2 Passieve migratie . . . . .	5
2.1.3 Deling en sterfte . . . . .	5
2.2 Carbonaatafscheiding en kalkneerslag . . . . .	6
2.2.1 Chemische reactie . . . . .	6
2.2.2 Diffusie carbonaat . . . . .	6
2.3 Toestroom ureum . . . . .	7
<b>3 Numerieke Implementatie</b>	<b>9</b>
3.1 Mobiliteit bacteriën . . . . .	9
3.2 Deling en sterfte van de bacteriën . . . . .	10
3.3 Carbonaatafscheiding en diffusie . . . . .	11
3.4 Reactie van carbonaat tot kalksteen . . . . .	12
3.5 Parameterkeuze . . . . .	12
<b>4 Resultaten</b>	<b>13</b>
4.1 Bacteriesimulatie . . . . .	13
4.1.1 Beweging . . . . .	13
4.1.2 Populatie . . . . .	14
4.2 Kalksteenneerslag . . . . .	15
4.3 Percentuele uitharding van het totale oppervlak . . . . .	16
4.4 Parametervariatie . . . . .	18
4.4.1 Bacteriesterfte . . . . .	18
4.4.2 Bacteriemobiliteit . . . . .	21
<b>5 Conclusie</b>	<b>25</b>
<b>6 Discussie</b>	<b>27</b>

<b>Appendix</b>	<b>31</b>
.1 Matlab-code model . . . . .	31
.2 Matlab-code visualisatie output . . . . .	36
.2.1 plotcircle.m . . . . .	39
.2.2 fillcircle.m . . . . .	39





# Hoofdstuk 1

## Introductie

Biogrout is een biologische technologie waarmee grond verstevigd wordt met behulp van bacteriën. Deze bacteriën worden gevoed met een mengsel van ureum en calcium, waardoor ze vervolgens kristallen van calciumcarbonaat, ofwel kalksteen, gaan vormen, die de zandkorrels stevig aan elkaar binden. Op deze manier kan zanderige ondergrond worden verstevigd tot kalksteen. Biogrout kent zeer veel mogelijk toepassingen, zoals bijvoorbeeld spoorwegstabilisatie, kustverdediging en versterking van de fundering van gebouwen. Ook op minder voor de hand liggende terreinen blijkt de toepassing van de technologie potentieel te hebben. Zo kun je het gebruiken voor grondwaterreiniging, met reactieve schermen die verontreiniging uit het grondwater binden. Testen onder extreme fysische condities in termen van temperatuur en druk hebben aangetoond dat ook in de olie-industrie nuttige toepassingen denkbaar zijn.

Sinds 2003 is er in Nederland actief onderzoek naar Biogrout met als doel het effectief in de praktijk toe te kunnen passen. Belangrijke partijen zijn hierbij vanaf het begin de TU Delft en Deltares geweest. In de eerste jaren is er vooral experimenteel onderzoek gedaan waarbij steeds grotere hoeveelheden zand tot kalksteen werden gevormd. Voor efficiënte toepassing is het van belang dat er goede modellen zijn die het proces simuleren. Op die manier kunnen goede locaties van injectie- en onttrekkingspunten worden bepaald met debieten en concentraties.

Eerder zijn er al verschillende modellen gemaakt om het proces te simuleren. Van Wijngaarden heeft zo een model gemaakt waar aan de hand van de concentraties urea en verschillende chemische stoffen, de dichtheid, porositeit en de vloeistoftoevoer het Biogroutproces wordt beschreven [3]. De partiële differentiaalvergelijkingen die zijn opgesteld aan de hand van deze parameters worden opgelost met de standaard Galerkin eindige-elementenmethode.

Ook door Bergwerff is een model gemaakt voor een simulatie van het proces [6]. In tegenstelling tot Van Wijngaarden is het model van Bergwerff op porieschaal, waar de poriën in het model van Van Wijngaarden nog omschreven worden door dichtheden. Ten opzichte van het macro-model van Van Wijngaarden kan hier wel gesproken worden van een micro-model. Bergwerff gebruikt een level set methode in zijn simulaties voor het oplossen van de partiële differentiaalvergelijkingen.

In dit onderzoek heb ik een model gemaakt op porieschaal zoals eerder ook door Bergwerff gemodelleerd is, maar nu worden alle bacteriën afzonderlijk bekeken. In dit project zal dus een cell-based model (deeltjesmodel) ontwikkeld worden. In zo'n model wordt aan de hand van de interactie van individuele deeltjes, in dit geval bacteriën, een simulatie gemaakt die het collectieve gedrag van de bacteriën kan voorspellen. Aan de hand van biologisch aannemelijk gedrag waaraan de gesimuleerde bacteriën voldoen, kunnen patronen worden verklaard die indirect volgen uit het gedrag van de bacteriën en de onderlinge interacties. Hiermee wordt in dit model

de verkalking van het ureum met het afgescheiden carbonaat door de bacteriën gesimuleerd. In dit soort modellen is over het algemeen meer ruimte voor biofysische beschrijvingen van de individuele bacteriën. In tegenstelling tot de eerder gemaakte modellen, die een strikt continue benadering volgen, volg ik hierbij dus een hybride aanpak door de toevoeging van de discretisatie van het model, namelijk de beschouwing van de afzonderlijke bacteriën. De bewegingen van de bacteriën worden stochastisch beschreven.

De onderzoeksvraag die ik hierbij heb geformuleerd luidt als volgt:

*‘Is het mogelijk een realistische weergave te geven van het Biogroutproces aan de hand van een semi-stochastisch deeltjesmodel op de schaal van bacteriën?’*

In dit verslag wordt eerst in hoofdstuk 2 het wiskundige model opgebouwd. Stap voor stap worden de processen beschreven die relevant zijn voor de beschrijving van het Biogroutproces. Er wordt toegelicht welke verbanden in het model zijn geïmplementeerd en welke aannames zijn gemaakt om bepaalde vergelijkingen te vereenvoudigen. In hoofdstuk 3 komt vervolgens de numerieke implementatie van het model in matlab aan bod. De numerieke methoden die zijn gebruikt in het model worden hier toegelicht. In hoofdstuk 4 worden de simulaties getoond die aan de hand van het model in matlab zijn gemaakt. De conclusies worden samengevat in hoofdstuk 5 waarna in het laatste hoofdstuk enkele punten ter discussie worden gesteld. Ook aanbevelingen voor eventueel vervolgonderzoek worden hier genoemd. In de appendix is alle gebruikte matlab-code te vinden waarmee de simulaties zijn verkregen.

## Hoofdstuk 2

# Wiskundig Model

Het Biogroutproces is een proces waarbij bacteriën, wanneer ze gevoed worden met ureum, carbonaat afscheiden. Dit carbonaat reageert met toegevoegd calcium tot calciumcarbonaat wat neerslaat op de zandkorrels en zo kalksteen vormt. De plaatsing van de bacteriën vindt plaats voordat het ureum en calcium wordt geïnjecteerd. Dit gebeurt zo om kristalvorming op het punt van injectie te vermijden en om een meer homogene verspreiding van het calciumcarbonaat te krijgen in de bodem. In het model zoals het in dit verslag beschreven is, wordt dan ook aangenomen dat de bacteriën reeds aanwezig zijn en wordt er geen aandacht geschonken aan de plaatsing van deze bacteriën. In dit wiskundig model wordt in een 2-dimensionaal vlak gekeken naar enkele zandkorrels. Zodra er een oplossing van ureum met calcium wordt toegevoegd, ontstaat er neerslag van calciumcarbonaat op de zandkorrels. Deze neerslag blijft op elkaar hopen en zo hechten de zandkorrels na verloop van tijd aan elkaar. Op deze manier kan de ondergrond verstevigd worden door het ontstaan van zandsteen.

In afbeelding 2 is een schematische weergave van het model zoals hierboven beschreven.

In de volgende paragrafen zullen de verschillende onderdelen van het model aan bod komen. De verschillende aannames en parameters aan de hand waarvan de vergelijkingen zijn opgesteld die zijn gebruikt voor het model zullen worden beschreven. Later in het verslag wordt de numerieke implementatie van deze vergelijkingen toegelicht.

Allereerst worden de bacteriën die aan de basis van dit model staan beschreven. Er wordt aangenomen dat bacteriën zich voor een deel willekeurig bewegen en een ander deel wordt verklaard door onderlinge krachten zoals dat ook wel bij andere cellen gebeurt. Ook wordt deling en sterfte van de bacteriën in acht genomen. De tweede stap in het model is de kalksteenproductie. Per bacterie wordt de afscheiding van carbonaat berekend wat, onder toevoeging van ureum, neerslaat als kalk. Als laatste wordt ook nog de injectie van het ureum voor de bacteriën dat ze nodig hebben om zandsteen te produceren gemodelleerd.

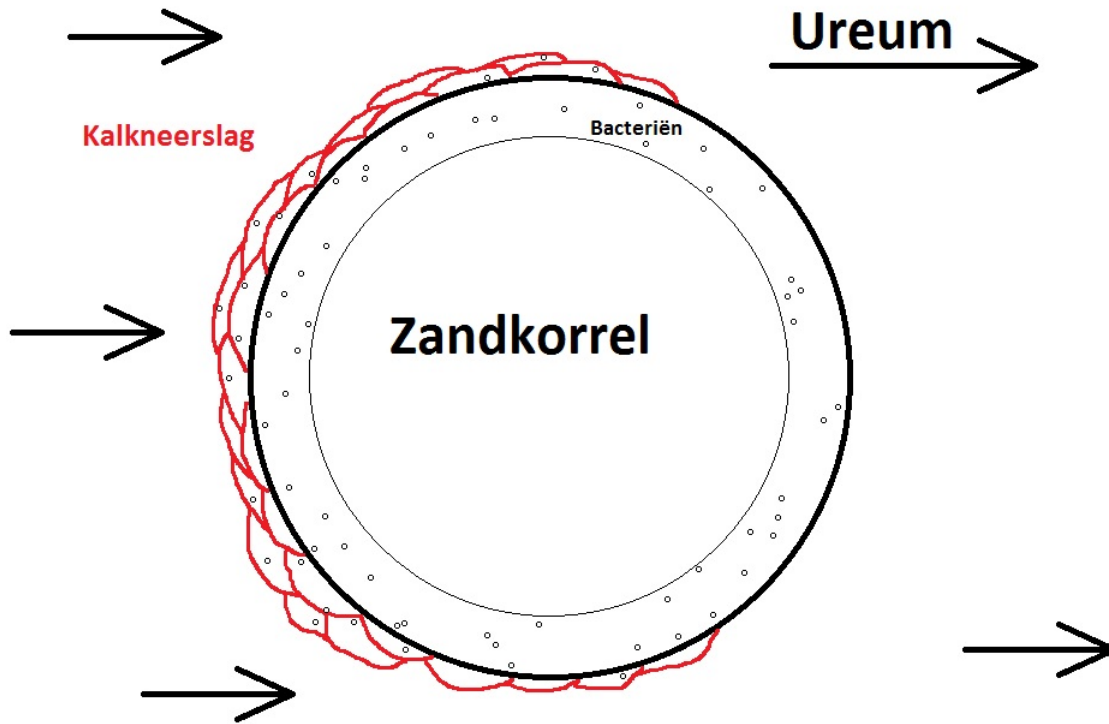
### 2.1 Bacteriën

Bij beschrijving van de bacteriën worden twee delen onderscheiden; allereerst wordt de beweging van de bacteriën uitgelicht en daarna komt de celdeling en sterfte aan bod.

Voor de beweging van de bacteriën wordt ervan uitgegaan dat die voor iedere bacterie  $i$  voldoet aan de volgende stochastische differentiaalvergelijking:

$$d\mathbf{X}_i = \underline{\boldsymbol{\mu}}(c)dt + \sigma(c)d\mathbf{W}(t). \quad (2.1)$$

Hierbij staat de term  $\underline{\boldsymbol{\mu}}dt$  voor de beweging ten gevolge van de contactkrachten die de bacteriën op elkaar uitoefenen op het moment dat ze botsen zoals dat bij alle cellen gebeurt.



Figuur 2.1: Schematische weergave van het model.

De term  $\sigma(c)d\mathbf{W}(t)$  is een stochastische term die de willekeur van de beweging van bacteriën voorstelt. Er wordt verder aangenomen dat de bacteriën zich alleen kunnen voortbewegen op de rand van de zandkorrels en door het neergeslagen poreuze kalk. Dit wordt weergegeven in de vergelijking aan de hand van de afhankelijkheid van  $c$ ; de concentratie zandsteen.

### 2.1.1 Random walk

De random walk van de bacteriën wordt in dit model beschreven door een Wiener proces, ook wel Brownian Motion genoemd, zodat de positie van de bacterie normaal verdeeld is met gemiddelde coördinaten  $(x_0, y_0)$  en een variantie van  $\sigma^2 t$  in iedere richting.

In het algemeen heeft het Wiener proces  $W$  de volgende eigenschappen:

- $W(0) = 0$ ,  $P(W(0) = 0) = 1$ ;
- De gebeurtenissen  $W(t_{k+1}) - W(t_k)$  en  $W(t_k) - W(t_{k-1})$  zijn onafhankelijk voor iedere  $0 \leq t_{k-1} < t_k < t_{k+1}$ ;
- Voor  $0 \leq s \leq t$  geldt  $W(t) - W(s) \sim N(0, t - s)$ , m.a.w.  $W(t) - W(s) \sim N(0, t - s)$  is normaal verdeeld met gemiddelde 0 en variantie  $t - s$ ;



- $W(t)$  is stochastisch continu, m.a.w.  $\lim_{t \rightarrow s} P(|W(t) - W(s)| > \epsilon) = 0$ ,  $\forall \epsilon > 0$ , waar  $P$  staat voor de kans.

### 2.1.2 Passieve migratie

Naast de random walk van de bacteriën wordt er in het model ook interactie tussen de bacteriën meegenomen voor het simuleren van de beweging. Er wordt alleen gekeken naar interactie tussen botsende bacteriën en er wordt aangenomen dat er verder geen krachten van invloed zijn tussen de bacteriën. Verder wordt in het model geen rekening gehouden met vervorming van de bacteriën door de botsingen.

Het indeuken van de celwand van de bacteriën zorgt voor een afstotende kracht die de bacteriën van elkaar wegdukt. Deze kracht is groter naarmate de bacteriën elkaar verder indeuken.

Voor bacterie  $i$  en  $j$ ,  $i \neq j$ , met respectievelijk positie  $\mathbf{x}_i$  en  $\mathbf{x}_j$  die elkaar een afstand  $h = \frac{1}{2} \max(0, 2R_b - \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|)$  indeuken, is de grootte van de afstotende kracht in termen van potentiële energie gelijk aan:

$$M^{ij} = \frac{4E_b}{15\sqrt{2}\pi} \left( \frac{h}{R_b} \right)^{\frac{5}{2}}. \quad (2.2)$$

Deze krachten worden in het model per bacterie gesommeerd over alle bacteriën waarmee deze bacterie interacteert. Vermenigvuldigd met een mobiliteitsparameter  $a$  in  $\text{m}^3/\text{Ns}$  wordt per tijdstap de bijdrage aan de beweging van de bacterie door deze krachten berekend.

### 2.1.3 Deling en sterfte

Ook deling en sterfte zijn in de beschrijving van het model meegenomen. In dit model wordt verondersteld dat de deling en sterfte allebei stochastische processen zijn. Er is verder aangenomen dat alle bacteriën van gelijke grootte zijn en niet groeien gedurende hun levensduur. Bovendien is de kans op deling of sterfte gedurende een zekere periode voor alle cellen gelijk, ongeacht hun leeftijd. Wat betreft de simulatie voor een individuele cel geeft dit natuurlijk niet de meest realistische resultaten. Voor een bacteriekolonie daarentegen zorgt dit voor degelijke simulaties.

In het eenvoudige model voor het delen en sterven van de bacteriën is gekozen om wel een factor mee te nemen die de kwaliteit van de omstandigheden moet weergeven. Dit bleek van belang, omdat er sterke kolonievorming plaatsvond op het moment dat de bacteriën zich relatief snel delen en sterven ten opzichte van de afstanden die ze afleggen. Hoewel dit niet geheel onwenselijk is, zorgt een term die de omstandigheden kwantificeert voor een remmend effect op de ophoping van de bacteriën.

De kwaliteit van de omstandigheden wordt in het model gemeten aan de hand van de aanwezigheid van andere bacteriën. Dit wordt in dit model gesimuleerd door het aantal naburige bacteriën in een zekere radius van de bacterie te tellen. Naarmate de bacterie meer ruimte, en dus ook meer voeding, tot zijn beschikking heeft wordt aangenomen dat de bacterie een grotere kans heeft om zich te delen. Omgekeerd daalt de overlevingskans van de bacterie als er zich meer bacteriën in zijn nabijheid bevinden.

In het model is gekozen om voor het aantal naburige bacteriën alle bacteriën binnen een omgeving van vijf keer zijn straal mee te tellen. Vervolgens worden de standaard deel- en sterftetekansen gedeeld door respectievelijk vermenigvuldigd met een half maal deze aantallen. Voor standaard deelkans  $P_d$  en sterftetekans  $P_s$  zijn de voor bacterie  $i$  van omstandigheden afhankelijke kansen als volgt:

$$P_d^i = P_d/(n_{bact_i}/2), \quad P_s^i = P_s(n_{bact_i}/2). \quad (2.3)$$

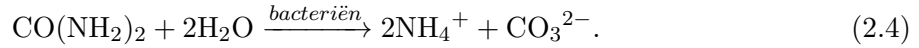
waarbij  $n_{bact_i}$  het aantal bacteriën in de omgeving van vijf keer de straal van bacterie  $i$  is.

## 2.2 Carbonaatafscheiding en kalkneerslag

In de volgende twee paragrafen wordt verder ingegaan op de chemische reactie die plaatsvindt en de rol van de bacteriën hierin. Onder voorwaarde dat ureum aanwezig is, wat in sectie 2.3 aan bod komt, wordt hier beschreven hoe de kalkneerslag tot stand komt.

### 2.2.1 Chemische reactie

De hydrolysereactie die plaatsvindt bij het ureum door de bacteriën, waarbij ammonium en carbonaat vrijkomt, is als volgt:



De neerslag van calciumcarbonaat gebeurt in verschillende stappen, de totale reactievergelijking, waarbij calcium en carbonaat samen calciumcarbonaat vormen, is als volgt:



Er is in dit model gekozen de eerste zojuist genoemde reactie buiten beschouwing te laten en de kalkneerslag alleen te modelleren aan de hand van de tweede reactie. Bovendien wordt aangenomen dat het calcium voldoende aanwezig is en dat het carbonaat geproduceerd wordt door de bacteriën. Aangenomen dat de snelheid waarmee de concentratie calciumcarbonaat positief afhankelijk is van de concentraties calcium en carbonaat en negatief van de concentratie calciumcarbonaat die al aanwezig is, wordt de volgende vergelijking opgesteld, waarbij de stoffen tussen vierkante haakjes concentraties voorstellen:

$$\frac{\partial[\text{CaCO}_3]}{\partial t} = \alpha[\text{Ca}^{2+}][\text{CO}_3^{2-}] - \beta[\text{CaCO}_3]. \quad (2.6)$$

Voor nog meer vereenvoudiging van het model is bovendien de waarde  $\tilde{\alpha}$  zo gekozen dat  $\tilde{\alpha} = \alpha[\text{Ca}^{2+}]$  en is de vereenvoudigde vergelijking

$$\frac{\partial[\text{CaCO}_3]}{\partial t} = \tilde{\alpha}[\text{CO}_3^{2-}] - \beta[\text{CaCO}_3]. \quad (2.7)$$

### 2.2.2 Diffusie carbonaat

In dit model wordt aangenomen dat de concentratie carbonaat volledig afhankelijk is van de bacteriën, zodra deze beschikking hebben tot ureum. De volgende diffusievergelijking is opgesteld voor de bijdrage van een willekeurige bacterie  $i$  aan deze productie van carbonaat:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} - \nabla \cdot [D(c)\nabla c] = \gamma_i \delta(x - x_i). \quad (2.8)$$

Hierbij is  $c$  de concentratie carbonaat,  $D$  is de diffusiecoëfficiënt,  $\gamma_i \delta(x - x_i)$  is de bronterm, waarbij de delta-functie aangeeft dat de bron, de bacterie, niet op een vaste plaats is.

Zoals wellicht al is opgevallen, klopt het dat er in deze diffusievergelijking alleen een bronterm van de bacteriën is opgenomen. Er wordt van uitgegaan dat de diffusie van carbonaat die plaatsvindt, onafhankelijk is van de reactie waarin het kalk ontstaat zoals in vorige deelparagraaf

beschreven, waardoor het oplossen van de vergelijking aanzienlijk eenvoudiger wordt. Hoewel de aanname zeker niet correct is, is de aanname niet geheel onrealistisch, aangezien de stof niet verdwijnt, maar een andere vorm aanneemt en zo het proces van diffuseren minder beïnvloedt.

Door hiernaast ook de aanname te maken dat de diffusiecoëfficiënt  $D$  onafhankelijk van  $c$  is, kan de diffusievergelijking als volgt geschreven worden:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} - D\Delta c = \gamma_i \delta(x - x_i). \quad (2.9)$$

Hoewel hiermee een niet geheel realistische aanname wordt gedaan, zorgt dit, in combinatie met eerder genoemde aanname dat de reactie van het carbonaat geen invloed heeft op de diffusie, ervoor dat de vergelijking een analytische oplossing kent in de vorm van een Greense functie en dat het superpositiebeginsel toegepast kan worden. Er wordt aangenomen dat de onnauwkeurigheid relatief klein is en in het 2-dimensionale vlak kan nu gewerkt worden met de volgende oplossing:

$$c_i(t, \underline{\mathbf{x}}) = \int_0^t \frac{\gamma_i}{4\pi D(t-s)} \exp\left(-\frac{\|\underline{\mathbf{x}} - \underline{\mathbf{x}}_i(s)\|^2}{4D(t-s)}\right) ds, \quad (2.10)$$

en voor de totale afscheiding door alle bacteriën gezamenlijk geldt, volgens het superpositiebeginsel:

$$c(t, \underline{\mathbf{x}}) = \sum_i c_i(t, \underline{\mathbf{x}}) = \sum_i \int_0^t \frac{\gamma_i}{4\pi D(t-s)} \exp\left(-\frac{\|\underline{\mathbf{x}} - \underline{\mathbf{x}}_i(s)\|^2}{4D(t-s)}\right) ds. \quad (2.11)$$

Er is aangenomen dat de bronterm  $\gamma_i$  voor alle bacteriën gelijk is en niet afhankelijk van andere factoren behalve de aanwezigheid van het ureum. Daar waar geen ureum aanwezig is, is de bronterm logischerwijs gelijk aan nul en wordt er door de betreffende bacteriën geen carbonaat afgescheiden.

## 2.3 Toestroom ureum

In dit model is op een zeer versimpelde manier de injectie van het ureum gemodelleerd. Er wordt van uitgegaan dat het ureum over een zijde van het platte vlak wordt geïnjecteerd en lineair langs alle zandkorrels stroomt. Er wordt dus aangenomen dat de stroom verder geen hinder ondervindt van de zandkorrels. Dit is gemodelleerd aan de hand van een indicatorfunctie voor de bronterm in de diffusievergelijking. Vergelijking 2.11 is dus in complete vorm als volgt:

$$c(t, \underline{\mathbf{x}}) = \sum_i c_i(t, \underline{\mathbf{x}}) = \sum_i \int_0^t \frac{\gamma \mathbb{1}_{ureum}(\underline{\mathbf{x}}_i(s))}{4\pi D(t-s)} \exp\left(-\frac{\|\underline{\mathbf{x}} - \underline{\mathbf{x}}_i(s)\|^2}{4D(t-s)}\right) ds, \quad (2.12)$$

waarbij in dit model is gekozen voor het eenvoudige verband  $\mathbb{1}_{ureum} = \mathbb{1}_{[0,tx]}$  en de lineaire stroom dus langs de linkerzijde wordt geïnjecteerd vanaf de eerste tijdstap in het model.



## Hoofdstuk 3

# Numerieke Implementatie

Het model is in matlab geïmplementeerd. Er is geprobeerd de verschillende processen zoals in het voorgaande hoofdstuk omschreven zo efficiënt mogelijk te implementeren. In de volgende paragrafen zullen de numerieke methoden die hiervoor gebruikt zijn genoemd worden en komt ook de implementatie in matlab aan bod. De complete code met verder commentaar is ook te vinden in de appendix.

### 3.1 Mobiliteit bacteriën

Zoals in vergelijking 2.1 genoemd, wordt de beweging van de bacteriën beschreven door een stochastisch element, random walk, en door de onderlinge krachten die opspelen zodra de bacteriën in aanraking met elkaar komen. Dit is een stochastische differentiaalvergelijking en de Euler-Maruyama methode wordt toegepast om dit te modelleren. Dit is de gebruikelijke methode om de stochastische differentiaalvergelijking op te lossen en is een generalisatie van de Euler voorwaartse methode voor normale differentiaalvergelijkingen. Dit levert de volgende discretisatie voor de positie van de bacteriën op:

$$\underline{\mathbf{x}}_{n+1}^i = \underline{\mathbf{x}}_n^i + \Delta t \underline{\boldsymbol{\mu}} + \sigma \Delta \underline{\mathbf{W}}_{n+1}. \quad (3.1)$$

Iedere  $\underline{\mathbf{W}}_{n+1}$  is hierbij normaal verdeeld met gemiddelde nul en variantie  $\Delta t$ . Er geldt namelijk dat

$$\Delta \underline{\mathbf{W}}_{n+1} = \underline{\mathbf{W}}_{n+1} - \underline{\mathbf{W}}_n \sim \sqrt{\Delta t} \begin{bmatrix} N(0,1) \\ N(0,1) \end{bmatrix}, \quad (3.2)$$

wat aangetoond kan worden met behulp van de eigenschappen van een Wienerproces zoals genoemd in het vorige hoofdstuk. In matlab zijn deze waardes pseudorandom gegenereerd.

Om vervolgens  $\sigma$  uit te kunnen drukken in de diffusiviteit van de bacteriën  $D_{bact}$ , wordt gebruikt dat in

$$d\underline{\mathbf{x}}(t) = \sigma d\underline{\mathbf{W}}(t), \quad (3.3)$$

ook een klassieke diffusievergelijking voor de bacteriën gezien kan worden in de vorm van

$$\frac{\partial b}{\partial t} - \frac{\sigma^2}{2} \Delta b = 0, \quad (3.4)$$

waaruit volgt dat voor  $\sigma$  geldt dat:

$$\frac{\sigma^2}{2} = D_{bact} \quad \rightarrow \quad \sigma = \sqrt{2D_{bact}}. \quad (3.5)$$

De term  $\underline{\mu}$  bestaat in dit model alleen uit de afstoting tussen de bacteriën onderling. Hiervoor wordt de potentiële energie gebruikt zoals omschreven in vergelijking 2.2. Deze potentiële energie wordt nog vermenigvuldigd met een mobiliteitsparameter  $a$ . De complete vergelijking voor de mobiliteit van de bacteriën die gebruikt is per tijdstap in het model is dus als volgt:

$$\underline{\mathbf{x}}_{n+1}^i = \underline{\mathbf{x}}_n^i + \Delta t a \sum_j M^{ij} + \sqrt{2D_{bact}} \Delta \underline{\mathbf{W}}_{n+1}. \quad (3.6)$$

Tot slot wordt een indicatorfunctie gebruikt die de bacteriën alleen toestaat te bewegen zolang ze binnen de zandkorrels blijven of daar waar de concentratie calciumcarbonaat, of ook wel kalksteen, de grenswaarde  $c_{grens}$  overschrijdt.

Voor de beginposities van de bacteriën is ervoor gekozen ze eerst gelijkmatig te verdelen over de zandkorrels om vervolgens het model met enkel de dynamiek van de bacteriën voor een aantal iteraties te laten lopen zonder aanwezig ureum. Met de daarmee verkregen posities wordt het model uitgevoerd.

### 3.2 Deling en sterfte van de bacteriën

Alle bacteriën in het model worden gerepresenteerd door een enkele matrix die hun posities weergeeft. De rijen representeren de verschillende bacteriën en de kolommen de x- en y-coördinaten. Voor de efficiëntie van het model zijn voor alle mogelijke nieuwe bacteriën door celdeling vanaf het begin af aan plaatsen vrijgehouden. Op deze plaatsen is de betreffende rij van de positie-matrix  $(0, 0)$ , een positie die onmogelijk te bereiken is voor de bacteriën, aangezien deze zich midden in een zandkorrel bevindt. Als een bacterie zich deelt, worden aan de eerste ‘lege’ positie de coördinaten van de betreffende delende bacterie toebedeeld. Een bacterie die sterft krijgt op eenzelfde manier weer positie  $(0, 0)$  toegewezen.

Voor de numerieke implementatie is het belangrijk dat de kans voor een bacterie om te sterven of te delen gedurende een periode niet afhankelijk is van de stapgrootte. Voor een periode  $T$  waarvoor geldt dat  $T = n\Delta t$ , moet de kans om te overleven of niet te delen dus gelijk zijn. Voor overleven moet gelden als  $P_s$  de kans om te sterven is dat

$$1 - P_s(T) = 1 - P_s(n\Delta t) = (1 - P_s(\Delta t))^n, \quad (3.7)$$

en equivalent voor de kans om niet te delen, waarbij  $P_d$  de kans is om te delen,

$$1 - P_d(T) = 1 - P_d(n\Delta t) = (1 - P_d(\Delta t))^n. \quad (3.8)$$

Zoals in het voorgaande hoofdstuk genoemd, is de deling in dit model ook afhankelijk van de hoeveelheid bacteriën in de omgeving van de bacterie. Dit is geïmplementeerd door het aantal bacteriën te tellen in de omgeving van vijf keer de straal van de bacterie. De deelkans en sterftekans worden vervolgens gedeeld door respectievelijk vermenigvuldigd met een half maal deze aantallen.

Voor algemene  $\Delta t$  deel- en sterftekans worden de kansen dan gegeven door

$$P_d^i(\Delta t) = 1 - (1 - P_d/(n_{bact_i}/2))^{\Delta t}, \quad P_s^i(\Delta t) = 1 - (1 - P_s(n_{bact_i}/2))^{\Delta t}, \quad (3.9)$$

waarbij  $n_{bact_i}$  het aantal bacteriën in de omgeving van vijf keer de straal van bacterie  $i$  is.

### 3.3 Carbonaatafscheiding en diffusie

Zoals gezien in het voorgaande hoofdstuk, is er, onder de gemaakte aannames, voor de diffusie van de totale hoeveelheid carbonaat die wordt afgescheiden door de bacteriën een analytische oplossing beschikbaar. Aan de hand van het superpositiebeginsel wordt in het model met de analytische oplossing, zoals genoemd in vergelijking 2.11, op iedere tijdstap de hoeveelheid carbonaat berekend.

Er is voor gekozen om de concentratie carbonaat iedere tijdstap te evalueren op een grid in het 2-dimensionale vlak. Er is gekozen om dit niet op de posities van de bacteriën te berekenen, aangezien de bacteriën iedere tijdstap andere posities hebben en daarnaast ook niet het hele vlak beslaan. Het neergeslagen kalk moet bovendien ook op plaatsen bekend zijn waar bacteriën nog niet aanwezig zijn geweest, aangezien deze bacteriën daar nog wel kunnen komen. Om het reageren van het carbonaat tot calciumcarbonaat naast de diffusie van het carbonaat goed te kunnen implementeren, is er daarom gekozen dit te berekenen voor vaste punten in een grid.

In matlab is de integraal over de verlopen tijd uit de analytische oplossing berekend door middel van een sommatie over alle  $n$  tijdstappen vermenigvuldigd met de grootte van de tijdstap  $\Delta t$ . Dit levert geen grote problemen op, aangezien alle brontermen voor het carbonaat, de bacteriën, vanwege de numerieke basis van het model allemaal precies één tijdstap aanwezig zijn.

Hiernaast is om het model in matlab zo efficiënt mogelijk te houden ook de sommatie over alle bacteriën in dezelfde sommatie verwerkt. Aan de hand van alle voorgaande posities van de brontermen, ofwel alle posities waar iedere tijdstap bacteriën zijn geweest waarbij ook rekening gehouden wordt met de verstreken tijd  $t - s = t'$  per bronterm, wordt zo in een enkele berekening de concentratie carbonaat voor ieder punt met puntsgewijze matrixoperaties in het grid berekend. Voor ieder element wordt de volgende berekening uitgevoerd:

$$\mathbf{c}_n(\mathbf{x}) = \sum_n \sum_{i=1}^{i_n} \frac{\gamma}{4\pi Dt'_n} \exp\left(-\frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_n^{i_n}\|^2}{4Dt'_n}\right) \Delta t. \quad (3.10)$$

In deze berekening is  $i_n$  het aantal carbonaatafscheidende bacteriën op tijdstap  $n$  en  $\mathbf{x}_n^i$  de positie van bacterie  $i$  die carbonaat afscheidt op tijdstap  $n$ . In matlab zijn beide sommaties verwerkt door middel van een enkele sommatie over de rijen van een enkele matrix waarin puntsgewijs bovenstaande berekening is uitgevoerd. Deze matrix is hiertoe geordend en als volgt opgebouwd:

$$\mathbf{X}_n = \begin{bmatrix} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_n^1\|^2 & \cdots & \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_n^{i_n}\|^2 & \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_{n-1}^1\|^2 & \cdots \\ & & & \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_{n-1}^{i_{n-1}}\|^2 & \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_{n-2}^1\|^2 & \cdots & \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_1^{i_1}\|^2 \end{bmatrix}. \quad (3.11)$$

Op soortgelijke manier is ook  $t'_n$  in matlab geordend in een enkele matrix  $\mathbf{T}_n$  die puntsgewijs de bij  $\mathbf{X}_n$  corresponderende verstreken tijd bevat.

Zoals eerder genoemd scheiden de bacteriën alleen carbonaat af bij aanwezigheid van het ureum. Dit is geïmplementeerd met behulp van een indicatorfunctie voor de aanwezigheid van het ureum. Alleen de bacteriën die zich bevinden op een positie waar het ureum reeds naartoe is gestroomd worden op deze manier meegenomen in de berekening zoals staat in vergelijking 3.10.

### 3.4 Reactie van carbonaat tot kalksteen

Voor de reactievergelijking worden, zoals uit vergelijking 2.7 duidelijk wordt, twee concentraties meegenomen; de concentratie calciumcarbonaat, ofwel kalksteen, en de concentratie carbonaat. Zoals in het voorgaande hoofdstuk is genoemd, is de toe- en afname van carbonaat zoals uit de reactie volgt niet meegenomen bij het modelleren van de diffusie van het carbonaat, waardoor voor de diffusievergelijking een analytische oplossing beschikbaar is. In de voorgaande paragraaf is dan ook geen extra bron- en verliesterm voor carbonaat meegenomen naast die van de bacteriën. Omdat met de reactie wel deze toe en afname van carbonaat meegenomen moet worden voor een nauwkeurige beschrijving van het ontstaan van het kalksteen, is dit gemodelleerd met behulp van een meer correcte schaduwconcentratie carbonaat  $\tilde{c}$ . Deze concentratie en ook de concentratie kalksteen  $k$  worden allebei iedere tijdstap berekend op dezelfde gridpunten die ook bij de diffusievergelijking zijn gebruikt. Voor de implementatie van deze twee concentraties is gebruik gemaakt van de Euler voorwaartse methode. De numerieke integratie van de schaduwconcentratie carbonaat wordt dan gegeven door

$$\tilde{\mathbf{c}}_{n+1} = \tilde{\mathbf{c}}_n + \left( \frac{\mathbf{c}_{n+1} - \mathbf{c}_n}{\Delta t} - \tilde{\alpha}\tilde{\mathbf{c}}_n + \beta\mathbf{k}_n \right) \Delta t, \quad (3.12)$$

en de numerieke integratie van de concentratie kalksteen wordt gegeven door

$$\mathbf{k}_{n+1} = \mathbf{k}_n + (\tilde{\alpha}\tilde{\mathbf{c}}_n - \beta\mathbf{k}_n)\Delta t. \quad (3.13)$$

### 3.5 Parameterkeuze

Voor de simulatie is gekozen voor een model met 3 zandkorrels en 300 bacteriën per zandkorrel. Als grenswaarde voor de concentratie kalksteen wanneer wordt aangenomen dat het uitgehard is, is  $10\text{mol/m}^3$  gebruikt. Verder staan de gebruikte parameters in tabel 3.1.

Parameter	Betekenis	Waarde	Eenheid
$R_z$	Straal van een zandkorrel	0.5	mm
$R_b$	Straal van een bacterie	5.0	$\mu\text{m}$
$D_{bact}$	Diffusiviteit van een bacterie	$10^{-5}$	$\text{cm}^2/\text{s}$
$a$	Mobiliteitsparameter	1	$\text{m}^3/\text{Ns}$
$P_s(\Delta t)$	Kans dat een bacterie in een periode van $\Delta t$ sterft zonder aanwezigheid van andere bacteriën	0.01	-
$P_d(\Delta t)$	Kans dat een bacterie in een periode van $\Delta t$ deelt zonder aanwezigheid van andere bacteriën	0.04	-
$E_b$	Elasticiteit van een bacterie	0.5	kPa
$D$	Diffusiecoëfficiënt $\text{CO}_3^{2-}$	0.01	-
$\gamma$	Snelheid afscheiding van $\text{CO}_3^{2-}$ door bacterie	0.006	$\text{mol}/\text{m}^3/\text{s}$
$\tilde{\alpha}$	Reactiesnelheid vorming $\text{CaCO}_3$	0.05	$\text{mol}/\text{m}^3/\text{s}$
$\beta$	Reactiesnelheid splitsing $\text{CaCO}_3$	0.02	$\text{mol}/\text{m}^3/\text{s}$

Tabel 3.1: Gebruikte waarden voor parameters



# Hoofdstuk 4

## Resultaten

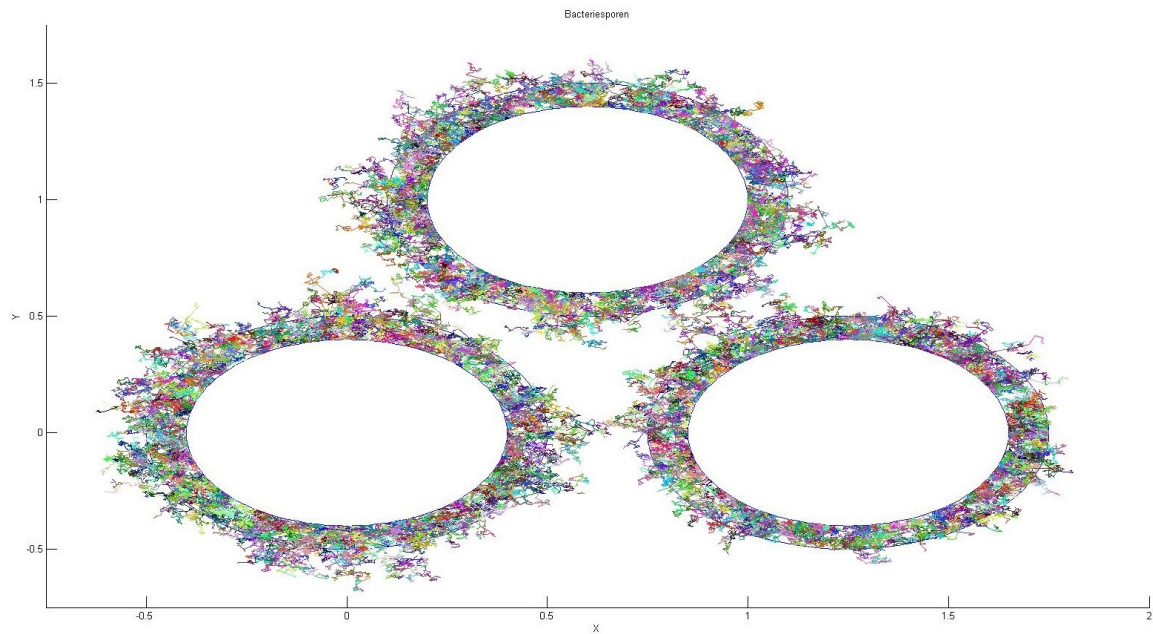
In de volgende paragrafen staan de resultaten van het model verwerkt in verschillende afbeeldingen. Allereerst wordt aandacht besteed aan de simulering van de bacteriën. Daarna worden de simulaties van het Biogroutproces getoond. Ook wordt er nog naar kleine variatie in de parameters voor de bacteriën gekeken.

Alle simulaties zijn gedaan over een periode van 181 tijdstappen, wat in het huidige model niet heel goed interpreteerbaar is als tijdseenheid. Voor de meeste waarden is wel gekozen voor een tijdseenheid waarbij iedere tijdstap overeenkomt met een seconde. Dit is weliswaar niet voor alle elementen uit het model correct, maar is toch gekozen om de verschillende elementen die gemodelleerd zijn naast elkaar in hetzelfde model te kunnen simuleren. De levensduur van bacteriën is bijvoorbeeld in werkelijkheid vele malen groter, ongeveer 170 uur, dan in het model, maar het zou vooralsnog onmogelijk zijn om hiervoor realistische waardes te kiezen. Voor de overige elementen uit het model klopt de tijdschaal wel redelijk en om toch ook bacteriedeling en -sterfte mee te nemen, is er gekozen om de bijbehorende gebruikte kansen vele malen groter in te schalen.

### 4.1 Bacteriesimulatie

#### 4.1.1 Beweging

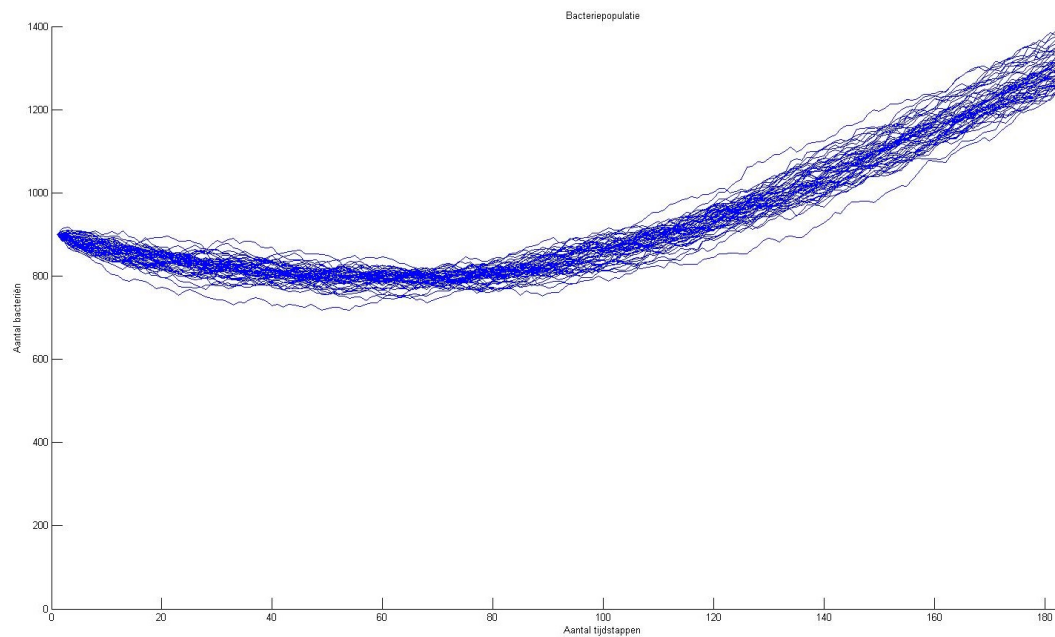
In afbeelding 4.1 zijn alle bewegingen van de bacteriën weergegeven. De zwarte cirkels geven de drie zandkorrels weer met in iedere korrel nog een extra zwarte cirkel aangezien de bacteriën zich zoals aangenomen alleen op de buitenste rand van de zandkorrels kunnen verplaatsen. Iedere lijn stelt de weg voor die een bacterie in de simulatie heeft afgelegd. Heel duidelijk komt de random walk van de bacteriën in deze afbeelding naar voren. Een duidelijk verloop van tijd is hier niet zichtbaar, maar het geeft een redelijk beeld van de bewegingen van de bacteriën zoals dat ook verwacht wordt met random walk. De invloed van de onderlinge afstoting tussen de bacteriën is hier verder niet zichtbaar. Dit is ook niet gek, aangezien deze interactie op zich al relatief zeldzaam is, gezien de dichtheid van slechts 300 bacteriën per zandkorrel. Tot slot is het ook erg duidelijk dat de bacteriën zich alleen op de buitenste rand van de zandkorrels begeven. Er zijn ook al een aantal uitlopers vanaf de zandkorrels zichtbaar; dit is natuurlijk te verklaren doordat naarmate de simulatie vordert het kalksteen begint neer te slaan en de bacteriën daar meer bewegingsruimte krijgen.



Figuur 4.1: Bacteriesporen.

### 4.1.2 Populatie

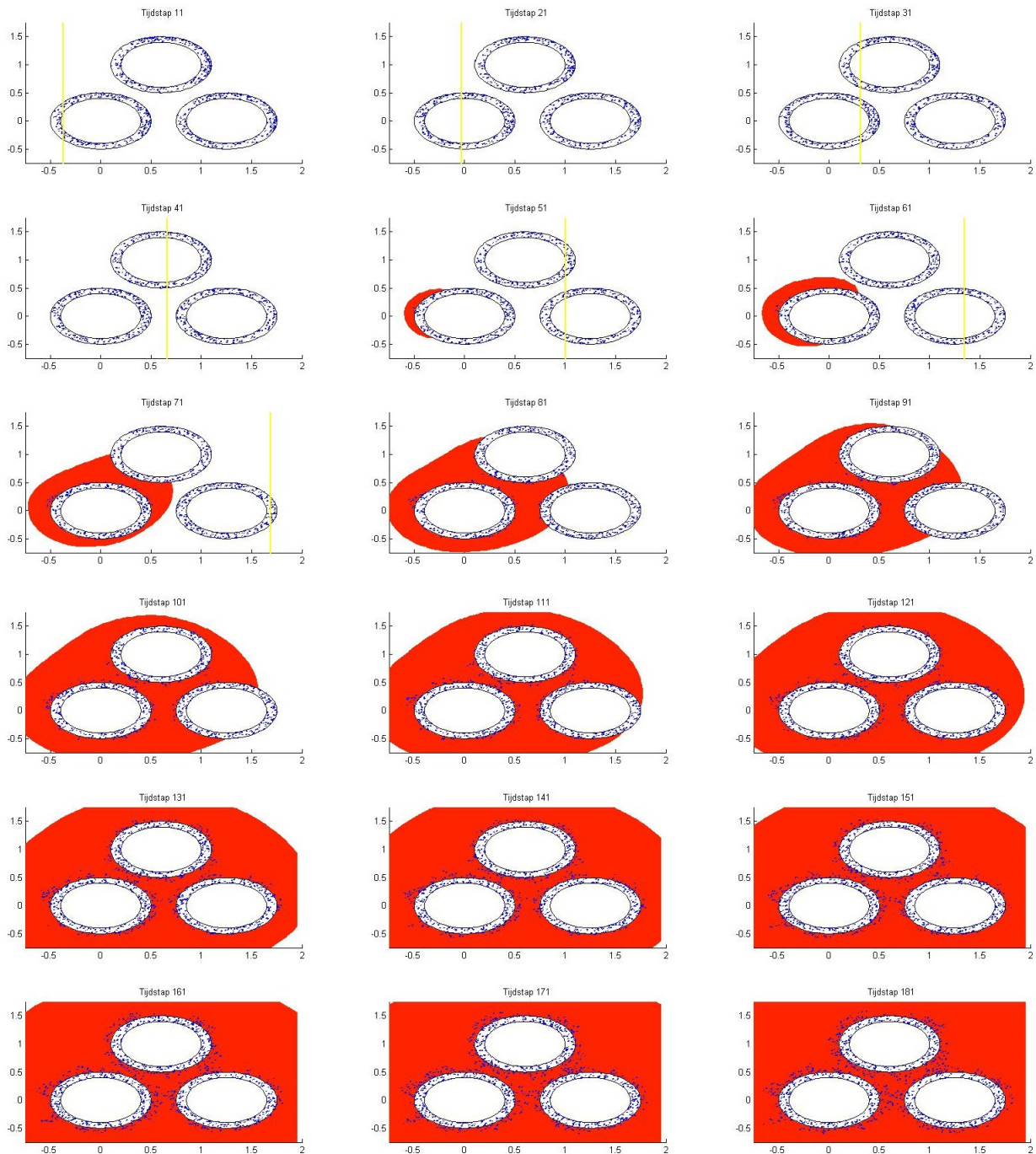
In afbeelding 4.2 is het verloop van de bacteriepopulatie zichtbaar. Aan het begin van het model is begonnen met 300 bacteriën per zandkorrel, dus 900 in totaal. Met de hoeveelheid oppervlakte op de zandkorrels die ze samen beschikbaar hebben blijkt dat ze in eerste instantie wat verminderen in aantal. Wel is duidelijk dat zodra de bacteriën ook kunnen afwijken van de korrels naar de neergeslagen kalk en ze minder dicht op elkaar zitten, de populatie inderdaad groeit zoals ook de verwachting is. In totaal zijn er voor deze afbeelding 52 simulaties gedaan, waaruit het stochastische element duidelijk naarvoren komt.



Figuur 4.2: Bacteriepopulatie van 52 verschillende simulaties.

## 4.2 Kalksteenneerslag

In afbeelding 4.3 staat per 10 tijdstappen een afbeelding van de situatie. Met de rode contourlijn wordt aangegeven waar de concentratie kalksteen de grenswaarde heeft overschreden en er dus vanuit wordt gegaan dat het kalksteen is uitgehard. Met de gele contourlijn wordt aangegeven tot waar het ureum is gekomen. Op  $t = 0$  is aan de linkerkant van het vlak ureum geïnjecteerd wat met een lineair verband door het hele vlak stroomt. De bacteriën die allemaal worden weergegeven door de kleine blauwe cirkels gaan pas carbonaat afscheiden zodra ze beschikking hebben over ureum. Het is dan ook niet verwonderlijk dat uit de afbeeldingen volgt dat het kalksteen zich als eerste vormt aan de linkerkant van het vlak, waar de bacterieconcentratie het hoogst is.

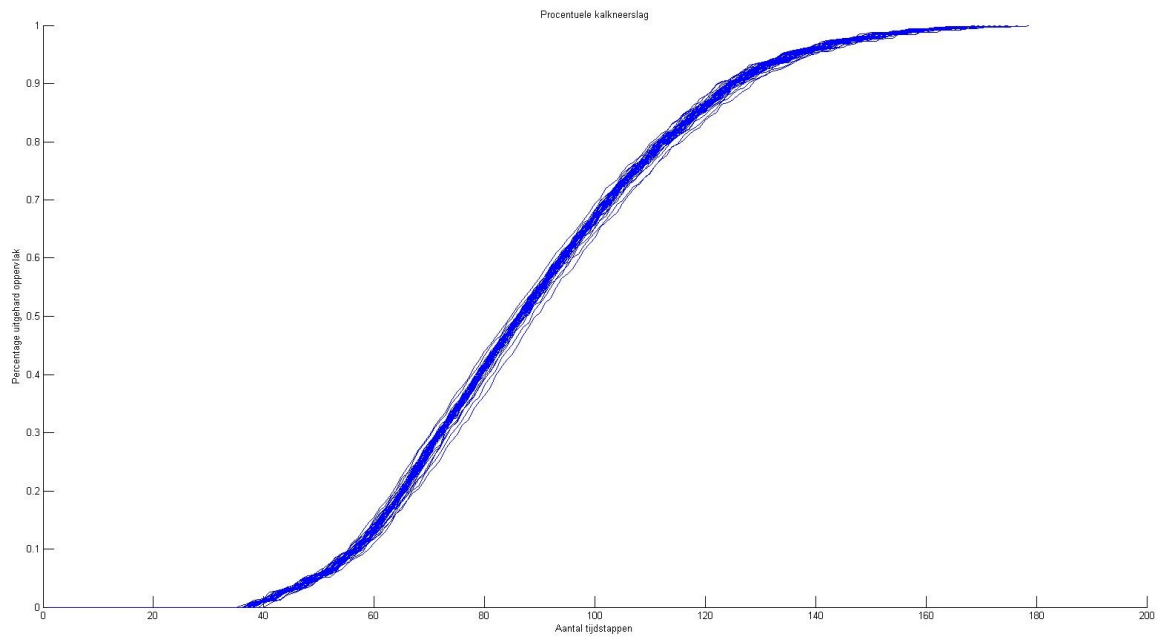


Figuur 4.3: De gele lijn laat zien hoe het ureum stroomt van links naar rechts, het rode vlak geeft de kalkneerslag weer en bacteriën worden weergegeven door de kleine blauwe cirkels.

### 4.3 Percentuele uitharding van het totale oppervlak

In afbeelding 4.4 wordt de percentuele uitharding van het totale rechthoekige oppervlak weergegeven. Hiertoe zijn 52 simulaties gedaan waardoor duidelijk de stochastiek van het model

naarvoren komt. Een groot deel van deze variantie komt voort uit de de variantie van de populatie van de bacteriën zoals in voorgaande paragraaf in afbeelding 4.2 zichtbaar is.



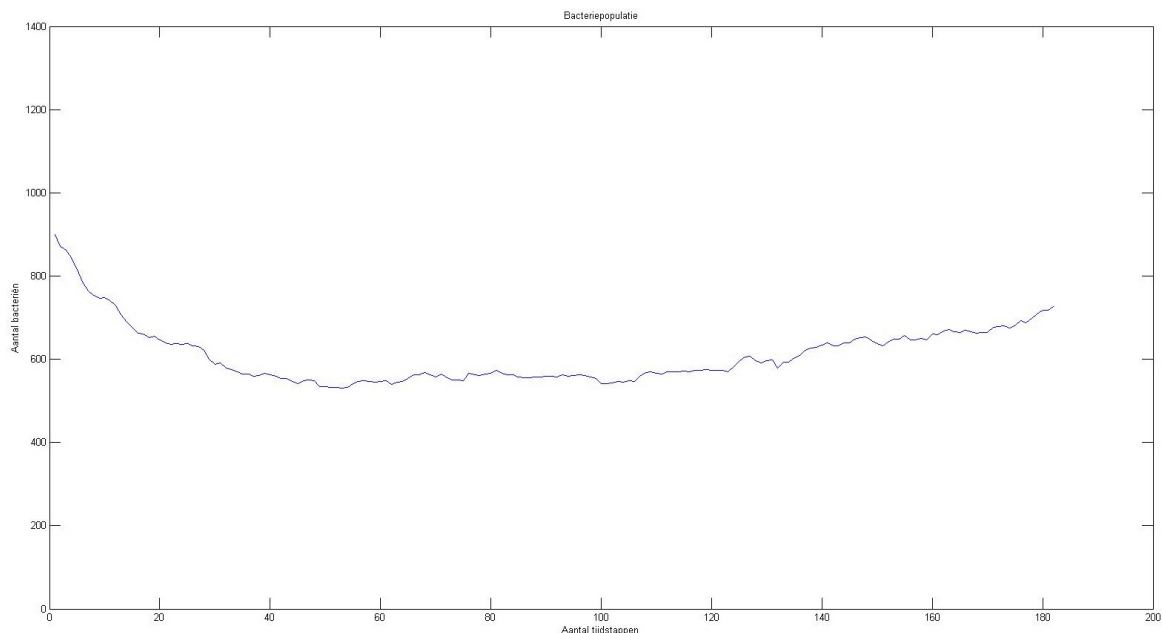
Figuur 4.4: Percentuele uitharding van 52 verschillende simulaties.

## 4.4 Parametervariatie

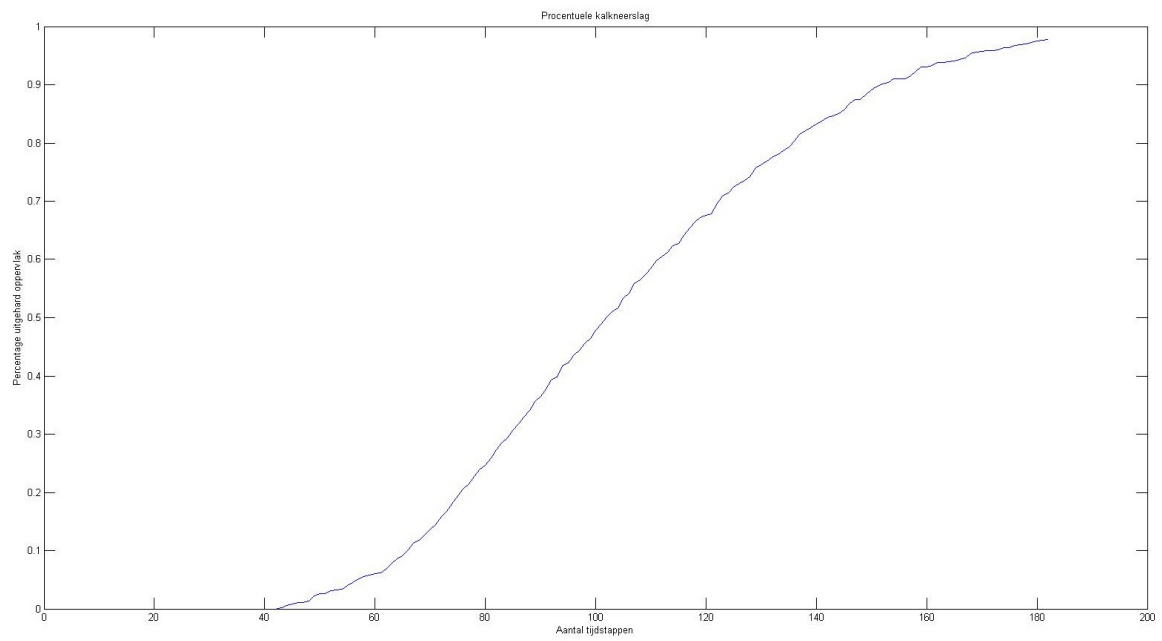
Met de behaalde resultaten uit de eerdere paragrafen is het ook interessant om te kijken wat de invloed is van verschillende factoren in het model. In de volgende paragrafen zijn de resultaten te zien van simulaties waarbij eigenschappen van de bacteriën zijn aangepast. Er wordt gekeken wat er gebeurt als de bacteriën een hogere sterftekans hebben en wat er gebeurt bij een grotere mobiliteit van de bacteriën.

### 4.4.1 Bacteriesterfte

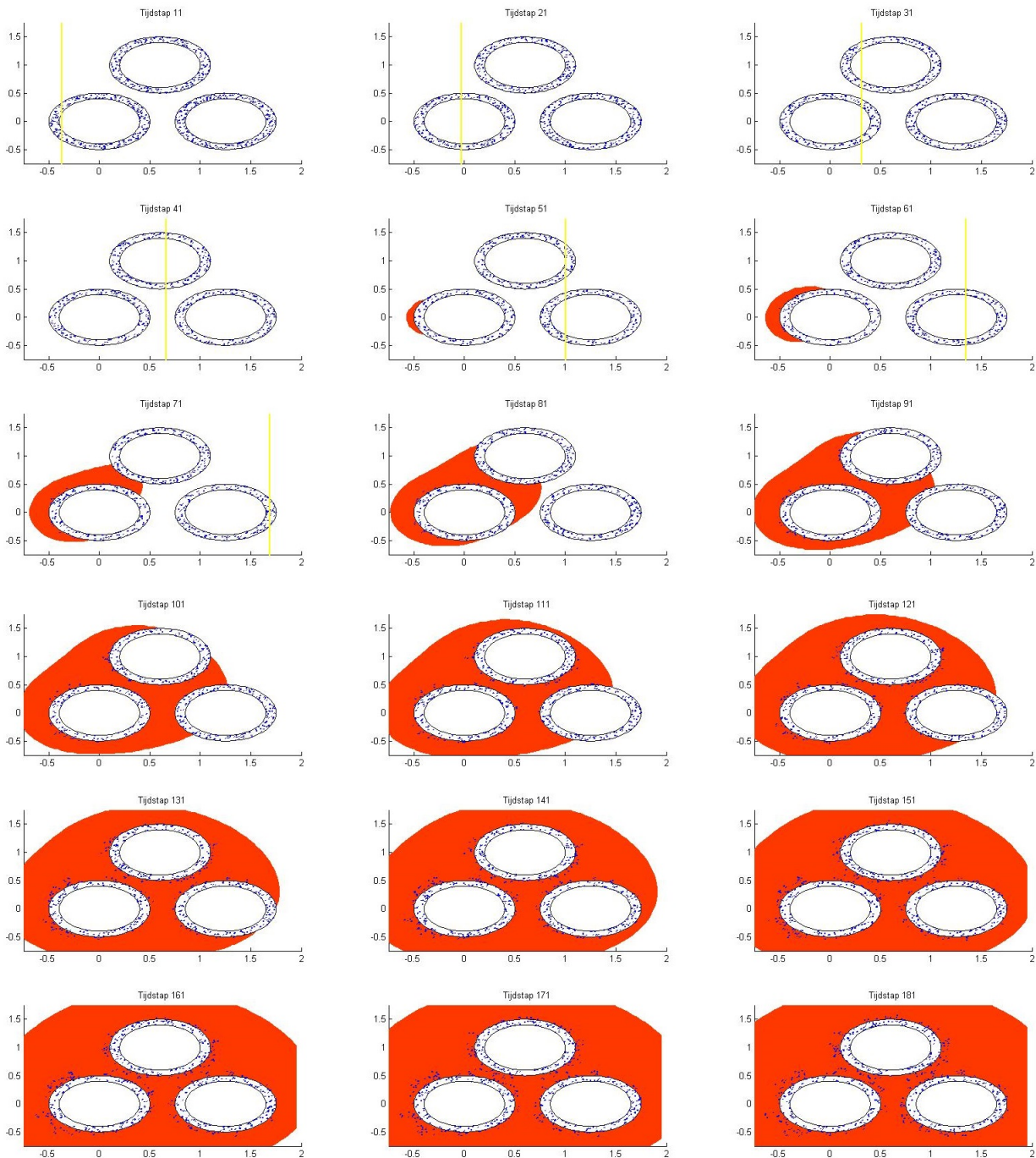
In afbeelding 4.5 tot en met 4.7 zijn de resultaten zichtbaar van een simulatie waarbij de sterftekans van de bacteriën van 0.01 is verdubbeld tot 0.02 per tijdstap. Duidelijk zichtbaar is dat de populatie bacteriën significant kleiner is. Doordat de bacteriën daardoor meer ruimte hebben stabiliseert de afname wel en groeit de populatie, weliswaar langzamer, mee met het uitharden van het kalk zoals ook in de voorgaande simulaties zichtbaar is. Een kleinere populatie bacteriën zorgt logischerwijs ook voor minder afscheiding van carbonaat en dus minder kalkneerslag, maar uiteindelijk worden de zandkorrels ook hier aan elkaar vastgehecht.



Figuur 4.5: Bacteriepopulatie bij simulatie met hogere sterftekans van de bacteriën van 0.02 per tijdstap.



Figuur 4.6: Percentuele uitharding bij simulatie met hogere sterftekans van de bacteriën van 0.02 per tijdstap.

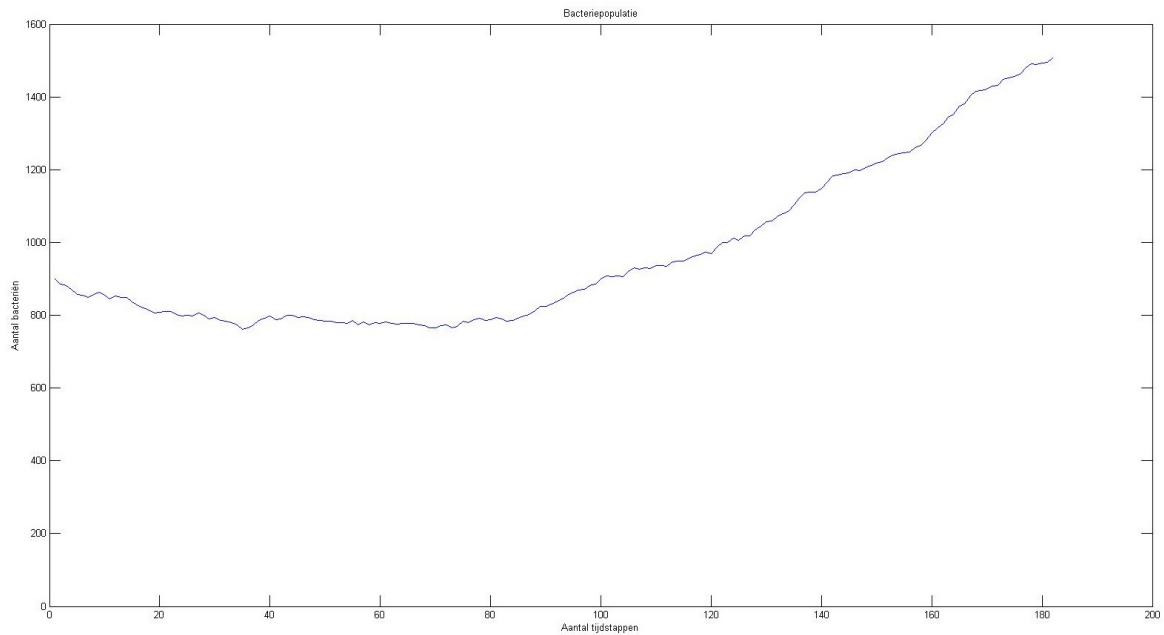


Figuur 4.7: De gele lijn laat zien hoe het ureum stroomt van links naar rechts, het rode vlak geeft de kalkneerslag weer en bacteriën worden weergegeven door de kleine blauwe cirkels. De sterftekans van de bacteriën is verhoogd tot 0.02 per tijdstap.

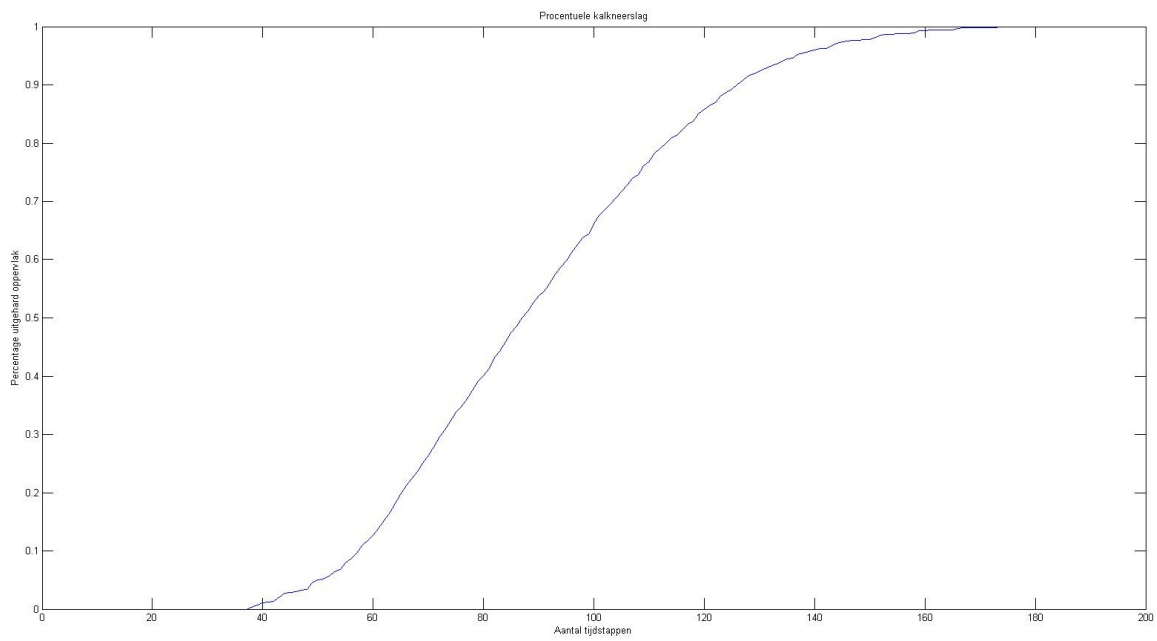


### 4.4.2 Bacteriemobiliteit

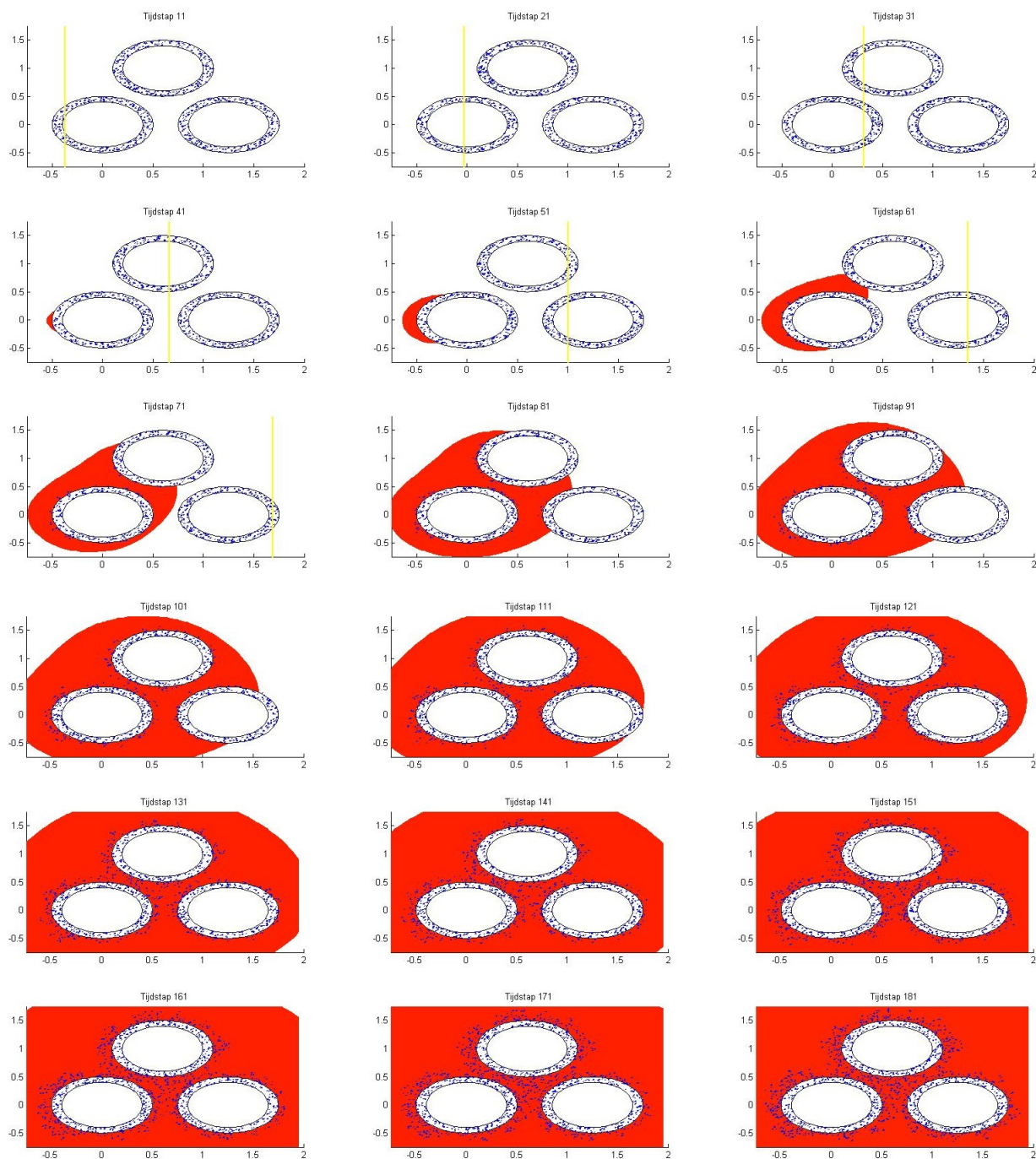
In afbeeldingen 4.8 tot en met 4.10 zijn simulaties weergegeven waarbij de mobiliteit van de bacteriën vertweevoudigd is. Zowel de mobiliteitsparameter  $a$  voor de passieve migratie als ook de diffusiviteit van de bacteriën  $D_{bact}$  zijn aangepast. De waarde voor  $a$  is in deze simulatie 2 en voor  $D_{bact}$  is  $2 \cdot 10^{-5}$  gekozen. Bij hogere mobiliteit zou je kunnen verwachten dat doordat de brontermen van de carbonaatafscheiding beter verspreid zijn, de kalk gelijkmatiger en daardoor ook sneller uithard. Dit is niet heel duidelijk zichtbaar in de afbeeldingen en hoewel de kalk inderdaad een fractie sneller uithard is dit voornamelijk te verklaren doordat de bacteriepopulatie groter is. Dit is ook een logisch gevolg, aangezien een betere spreiding van de bacteriën in dit model ook voor hogere dekkingsgraden en lagere sterftekansen zorgt.



Figuur 4.8: Bacteriepopulatie bij simulatie met een verdubbeling van de mobiliteit van de bacteriën.



Figuur 4.9: Percentuele uitharding bij simulatie met een verdubbeling van de mobiliteit van de bacteriën.



Figuur 4.10: De gele lijn laat zien hoe het ureum stroomt van links naar rechts, het rode vlak geeft de kalkneerslag weer en bacteriën worden weergegeven door de kleine blauwe cirkels. De mobiliteit van de bacteriën is hier tweemaal zo groot.



# Hoofdstuk 5

## Conclusie

Als basis van dit onderzoek is de volgende vraag opgesteld:

*‘Is het mogelijk een realistische weergave te geven van het Biogroutproces aan de hand van een semi-stochastisch deeltjes-model op de schaal van bacteriën?’*

In het bijzonder moet in het achterhoofd gehouden worden dat het Biogroutproces reeds in diverse andere onderzoeken is gemodelleerd. Ten opzichte van de eerdere modellen van Van Wijngaarden en Bergwerff, wordt in dit project een deeltjes-model opgesteld vanuit het perspectief van de bacteriën geprobeerd hetzelfde proces te beschrijven. De schaal waarop dit wordt bekeken is gelijk aan die van Bergwerff, op porieschaal, en daarmee onderscheiden deze beide modellen zich van het model van Van Wijngaarden. Als eerste model bevat dit project een stochastisch element in de vorm van de implementatie van de beweging van bacteriën. Hiermee zit ook in het resultaat een zekere variantie.

In het model zoals het gemaakt is, vertonen de bacteriën in het gedrag geen heel gekke patronen. De stochastiek in de beweging komt duidelijk naar voren zoals verwacht bij bacteriën. De deling en sterfte, hoewel nog op niet complexe wijze geïmplementeerd, zorgt wel voor de gewenste resultaten. Naast de beweging van de bacteriën zorgt ook de kalkvorming voor de gewenste resultaten. In het algemeen kan gesteld worden dat de kern van het Biogroutproces in het gemaakte model bevat is. Na verloop van tijd na injectie van het ureum komt duidelijk uit de simulaties de diffusie van carbonaat naar voren die vervolgens reageert tot kalksteen en zo de zandkorrels aan elkaar hecht.

**Conclusie: Een methode op basis van een deeltjes-model kan in beginsel worden gebruikt voor een beschrijving van Biogrout.**

Ondanks dat het model zoals gemaakt in dit project in grote lijnen een goede omschrijving geeft van Biogrout op kleine schaal, is het verder nog erg simplistisch. Voordat dit model ook gebruikt kan worden in praktische situaties om voorspellingen te doen, moet er nog veel verbeterd worden. Zo kan voor de beschrijving van de bacteriën nog veel verbeterd worden in de weergave van de levensloop van de bacteriën. De chemische processen zijn in dit model ook nog op erg eenvoudige wijze geïmplementeerd. De diffusie is nog op een versimpelde manier voorgesteld en er kan nog wel nader onderzoek worden gedaan om de chemische reacties beter te simuleren om ook hier aan nauwkeurigheid van het gehele model te winnen. Bij de injectie van het ureum is misschien nog wel het meeste te winnen ten opzichte van de implementatie in het huidige model.

**Conclusie: Het model staat nog in de kinderschoenen; wil het bruikbaar zijn om**

**naast een eenvoudige beschrijving ook nuttige informatie voor de praktijk geven, dan moet er nog veel aan verbeterd worden.**

Hoewel het model nu nog zeer beperkt is, zou het op den duur kunnen dienen als alternatief naast de huidige modellen. In dit project is duidelijk geworden dat het deeltjes-model genoeg mogelijkheden heeft om verder verbeterd te worden, waarmee het zijn waarde zou kunnen bewijzen naast de reeds bestaande modellen. Het stochastische element zou een welkome aanvulling kunnen zijn op de modellen die er reeds zijn.

**Conclusie: Het model zou na verder onderzoek kunnen dienen als alternatief naast de huidige modellen; het stochastische element zou mogelijk zijn waarde kunnen bewijzen ter aanvulling van de bestaande modellen.**

## Hoofdstuk 6

# Discussie

In het model is een aantal aannames gedaan om in eerste instantie een eenvoudig model op te stellen dat in grote lijnen een correcte weergave van Biogrout weergeeft. Uiteindelijk was het doel van dit project om in algemene lijnen te kijken of een model voor Biogrout ook vanuit een deeltjesmodel gemaakt kan worden. Zoals ook in de conclusie genoemd, betekent dat voor dit model dat het eigenlijk nog in de kinderschoenen staat voor eventuele praktische toepassingen. Vanzelfsprekend kunnen er bij dit model nog een aantal kanttekeningen gezet worden, aangezien de eenvoud in sommige opzichten nog niet voor het meest realistische beeld zorgt. Voor eventueel verder onderzoek zijn dit ook punten die in ieder geval de moeite van het heroverwegen waard zijn. Verder wordt in dit hoofdstuk ook een aantal punten genoemd waar het model uitgebreid zou kunnen worden in een eventueel volgend project.

- **Diffusievergelijking.** Wat betreft de diffusievergelijking zoals geïmplementeerd in dit model, zijn er twee kanttekeningen te maken. Allereerst is er aangenomen dat de diffusiecoëfficiënt constant is. Dit zorgt ervoor dat een analytische oplossing mogelijk is, maar de diffusiecoëfficiënt zou realistisch gezien afhankelijk moeten zijn van de porositeit van bijvoorbeeld de zandkorrels. Ook de porositeit tussen de zandkorrels is natuurlijk veranderlijk al naar gelang er meer of minder kalk aanwezig is. Door gebruik te maken van andere numerieke methodes zou er gewerkt kunnen worden met een diffusiecoëfficiënt die niet constant is.

Een tweede punt wat betreft de diffusievergelijking is, dat in dit model geen rekening wordt gehouden met het verlies van carbonaat - een negatieve bronterm afhankelijk van de concentratie - doordat een deel van het carbonaat reageert tot kalksteen. Hoewel in deze reactie natuurlijk wel de stof ter plekke aanwezig blijft, is dit zeker een punt om te herevalueren. Met behulp van een schaduwconcentratie zoals in dit model gebruikt is wordt dit probleem gedeeltelijk ondervangen, maar wellicht zijn er betere alternatieven.

- **Chemische reactie.** Voor de chemische reactie is uiteindelijk gekozen voor een vereenvoudigde reactie. Zo wordt ervan uitgegaan dat het calcium onbeperkt aanwezig is en zijn de reactiesnelheden alleen afhankelijk van de huidige concentraties carbonaat en kalksteen. Hoewel de groei in kalksteen zo wel wordt afgeremd, blijft de totale hoeveelheid kalksteen nog wel onbeperkt stijgen. Interessant zou het kunnen zijn om hier ook verzadiging in mee te nemen.
- **Parameters.** De parameters in dit model zijn nog vrij ruw gekozen. Verder onderzoek om de nauwkeurigheid van de verschillende parameters te verhogen kan geen kwaad. Ook zouden er dan wat betreft de tijdschaal meer conclusies aan verbonden kunnen worden.

- **Levensloop bacteriën.** In dit model is gekozen voor een simplistische weergave van de levensloop van bacteriën; hier wordt ervan uitgegaan dat ze ongeacht leeftijd allemaal een gelijke kans op sterven en delen hebben en dat ze niet groeien tijdens hun leven. In dat opzicht kan er nog veel worden toegevoegd aan het model voor de beschrijving van de levensloop van de bacteriën. Ook bijvoorbeeld de carbonaatafscheiding zou op die manier afhankelijk gemaakt kunnen worden van de leeftijd, wat een realistische aanname zou zijn.
- **Koloniegrootte bacteriën.** In dit model wordt gekeken naar enkele honderden bacteriën. Daadwerkelijk zijn de hoeveelheden bacteriën vele malen groter. Met meer rekenkracht en -tijd zou dit wellicht opgeschaald kunnen worden, hoewel dit voor een discreet model toch lastig blijft. Voor veel grotere schaal zal je waarschijnlijk toch terug moeten grijpen naar continue modellen.
- **2-dimensionaal** Het model is gemaakt in twee dimensies. Hoewel dit voor een bruikbare beschrijving voor nu wel volstaat, valt er natuurlijk nog een stap te maken naar een 3-dimensionaal model. Met name grafisch is dit nog een aardige uitdaging.
- **Injectie en stroom ureum.** In dit model stroomt het ureum even gemakkelijk door de zandkorrels heen als door de tussengelegen ruimte. Voor een nauwkeuriger beschrijving van het Biogroutproces en voor een betere waarneming van de invloed van de injectiemethode, zou het nuttig zijn om deze stromen beter te beschrijven. Met behulp van Navier-Stokes-vergelijkingen zou dit beter geïmplementeerd kunnen worden.
- **Zandkorrels.** De zandkorrels zijn in dit model van gelijke grootte en statisch gekozen. Het zou interessant kunnen zijn om ook beweging aan de zandkorrels toe te kunnen voegen, bijvoorbeeld onder invloed van de stroom van het geïnjecteerde ureum.
- **Injectie bacterie-kolonie.** Voor dit project was aangenomen dat de nodige bacteriën reeds aanwezig waren. Als je ook de mogelijkheid van injectie van bacteriën zou willen meenemen, zou je daarvoor een afzonderlijk model moeten ontwikkelen.



# Bibliografie

- [1] Wijngaarden, van, W.K.; Vermolen, F.J.; Meurs, van, G.A.M.; Vuik, C.: *A mathematical model for Biogrout, Bacterial placement and soil reinforcement*. Computation Geosciences, Volume 17, Issue 3, pp. 463-478, (2013).
- [2] Kim, Yeong-Chul: *Diffusivity of Bacteria*. Korean Journal of Chemical Engineering, Volume 13, Issue 3, pp. 282-287, (1996).
- [3] Wijngaarden, van, W.K.; Vermolen, F.J.; Meurs, van, G.A.M.; Vuik, C.: *Modelling Biogrout: A New Ground Improvement Method Based on Microbial-Induced Carbonate Precipitation*. Transport in Porous Media, Volume 87, Issue 2, pp. 397-420, (2011).
- [4] Vermolen, F.J.; Gefen, A.: *Wound Healing: Multi-Scale Modeling*. Studies in Mechanobiology, Tissue Engineering and Biomaterials, Volume 14, pp. 321-345, (2013).
- [5] Vermolen, F.J.; Gefen, A.: *A semi-stochastic cell-based formalism to model the dynamics of migration of cells in colonies*. Biomechanics and Modeling in Mechanobiology, Volume 11, Issue 1-2, pp. 183-195, (2012).
- [6] Bergwerff, Luke; van Paassen, Leon A.; Picioreanu, Cristian; van Loosdrecht, Mark C.M.: *Investigation of Biogrout processes by numerical analysis at pore scale*. European geosciences union general assembly, (2013).
- [7] <http://www.deltares.nl/nl/product/340639/biogrout>, bezocht op 25 augustus 2014.
- [8] <http://www.ewi.tudelft.nl/actueel/blik-op-ewi/biogrout-en-numerieke-wiskunde-een-sterke-combinatie/>, bezocht op 25 augustus 2014.



# Appendix

## .1 Matlab-code model

```
% 'Semi-stochastisch cell-based model voor BioGrout'  
% Code Bachelor Eindproject  
  
% Willem van Loenen  
% Augustus 2014  
  
clc; clear all; tic;  
  
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%  
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%% PARAMETERS %%%%%%%%%  
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%  
  
dimensie = 2;           % dimensie waarin we werken  
dt = 1;                 % standaard tijdsverschil per stap (s)  
  
Dbac = 10^-5;          % diffusiviteit van een bacterie (cm^2/s)  
sigma = sqrt(2*Dbac);  % gemiddelde snelheid bacterin  
Rkorrel = .5;          % straal van een zandkorrel (mm)  
Rbact = 0.005;         % straal van een bacterie (mm)  
sterftekans = 0.01;    % kans dat een bacterie gedurende een tijdstap sterft  
deelkans = 0.04;      % kans dat een bacterie gedurende een tijdstap deelt  
  
Eb = 0.5;              % elasticiteit bacterie (kPa)  
a = 1;                 % mobiliteitsparameter (m^3/Ns)  
  
gamma = .006;          % bronterm diffusievergelijking (mol/m^3/s)  
Dcoff = .01;           % diffusiecoefficient  
c_kalk_grenswaarde = 10; % grenswaarde voor kalkneerslag in het model  
                        % afgeleid van verzadegingsconstante = 10 mol/m^3  
  
alpha = .05;           % coefficienten reactie (mol/m^3/s)  
beta = .02;            % coefficienten reactie (mol/m^3/s)  
  
% Zandkorrels in het model met, vaste, gekozen posities  
korrel(1,:) = [0,0];  
korrel(2,:) = [1.25,0];  
korrel(3,:) = [.6,1];
```



```

for n = 1:Nbeginpos

    % Random Walk

    % posities (0,0) zijn gereserveerd en worden er dus uitgefilterd
    indicesB = beginpos(:,1,n)~=0 | beginpos(:,2,n)~=0;
    % sigma dW, ( dW = IID ~N(0,dt) )
    randomwalk = sigma * sqrt(dt) * randn(nnz(indicesB),2);

    % Afstoting

    afstandmatrix1 = squareform(pdist(beginpos(indicesB,:,n)));
    Xafst = squareform(pdist(beginpos(indicesB,1,n)));
    Yafst = squareform(pdist(beginpos(indicesB,2,n)));

    h = .5 * max(2 * Rbact - afstandmatrix1 , 0);
    h = h - eye(nnz(indicesB)) * Rbact;
    botsenergie = 4 * Eb / (15 * sqrt(2 * pi)) * ( h / Rbact ) .^ (5/2);
    afstoting = zeros(nnz(indicesB),2);
    % nulwaardes eruit filteren
    Xnul = Xafst == 0; Ynul = Yafst == 0;
    Xafst(Xnul) = 1; Yafst(Ynul) = 1;
    botsenergie(Xnul) = 0; botsenergie(Ynul) = 0;

    % richting van afstoting
    hulpmatrix = triu(ones(nnz(indicesB)),1) - tril(ones(nnz(indicesB)),-1);
    Xrichting = squareform(pdist(beginpos(indicesB,1,n),distfun)) .* hulpmatrix;
    Yrichting = squareform(pdist(beginpos(indicesB,2,n),distfun)) .* hulpmatrix;

    afstoting(:,1) = sum( Xrichting .* botsenergie .* ...
        sqrt(1 ./ (1 + (Yafst./Xafst).^2)),2);
    afstoting(:,2) = sum( Yrichting .* botsenergie .* ...
        sqrt(1 ./ (1 + (Xafst./Yafst).^2)),2);

    % Indicator om te voorkomen dat de bacterie de zandkorrel of het ...
    % neergeslagen kalk verlaat
    indPos = beginpos(indicesB,:,n) + randomwalk + a * afstoting * dt;
    indicator = sum((repmat(indPos(:,1),[1 size(korrel,1)]) - ...
        repmat(korrel(:,1)',[nnz(indicesB) 1])).^2 + ...
        (repmat(indPos(:,2),[1 size(korrel,1)]) - ...
        repmat(korrel(:,2)',[nnz(indicesB) 1])).^2 <= Rkorrel^2,2) & ...
        sum((repmat(indPos(:,1),[1 size(korrel,1)]) - ...
        repmat(korrel(:,1)',[nnz(indicesB) 1])).^2 + ...
        (repmat(indPos(:,2),[1 size(korrel,1)]) - ...
        repmat(korrel(:,2)',[nnz(indicesB) 1])).^2 <= (0.8*Rkorrel)^2,2) == 0;
    beginpos(indicesB,:,n+1) = beginpos(indicesB,:,n) + ...
        [indicator,indicator] .* ( randomwalk + afstoting ) * dt;

```

```

end

% beginpositie van alle bacterin op het moment dat ureum wordt toegevoegd
clear pos
pos(:, :, 1) = beginpos(:, :, end);
c_kalkgrid = zeros(length(gridpos), N+1);
Nalle = [];
clear indicesBkalk

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%% BEGIN MODEL %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
for n = 1:N

    n

    % Kalksteenproductie

        % posities (0,0) zijn gereserveerd en worden er dus uitgefilterd
indicesB = pos(:, 1, n)~=0 | pos(:, 2, n)~=0;
        % indicator functie voor aanwezigheid ureum
indicesBkalk(:, n) = indicesB & pos(:, 1, n) <= -.75+n*dt/80*2.75;

    % alle posities van bacterin op alle tijdstappen
posAlle = [reshape(pos(:, 1, :), [], 1), reshape(pos(:, 2, :), [], 1)];
indBalle = reshape(indicesBkalk, [], 1);
posAlle = [posAlle(indBalle, 1), posAlle(indBalle, 2)];
afstsq = pdist2(pos(indicesBkalk(:, n), :, n), posAlle).^2;

        % tijdstappen horend bij de respectievelijke brontermen
Nalle = [ones(1, nnz(indicesBkalk(:, n))) , Nalle + 1];

    % grid CO3
afstsqgrid = pdist2(gridpos, posAlle).^2;
Nallesqgrid = ones(length(gridpos), 1)*Nalle;
cgrid(:, n+1) = sum(gamma ./ (4*pi*Dcoeff.*(Nallesqgrid*dt))) .* ...
    exp(- afstsqgrid./(4*Dcoeff.*(Nallesqgrid*dt))) * dt, 2);
    % grid voor CO3, carbonaat
cgrid2(:, n+1) = cgrid(:, n+1) - cgrid(:, n) + (1 - alpha * dt) * ...
    cgrid2(:, n) + beta * dt * c_kalkgrid(:, n);
    % grid voor CaCO3, kalksteen
c_kalkgrid(:, n+1) = alpha * dt * cgrid2(:, n) + (1 - beta * dt) * ...
    c_kalkgrid(:, n);

    % Random Walk

        % sigma dW, ( dW = IID ~N(0,dt) )
randomwalk = sigma * sqrt(dt) * randn(nnz(indicesB), 2);

```

```

% Afstoting

afstandmatrix1 = squareform(pdist(pos(indicesB,:,n)));
Xafst = squareform(pdist(pos(indicesB,1,n)));
Yafst = squareform(pdist(pos(indicesB,2,n)));

h = .5 * max(2 * Rbact - afstandmatrix1 , 0);
h = h - eye(nnz(indicesB)) * Rbact;
botsenergie = 4 * Eb / (15 * sqrt(2 * pi)) * ( h / Rbact) .^ (5/2);
afstoting = zeros(nnz(indicesB),2);
    % nulwaardes eruit filteren
Xnul = Xafst == 0; Ynul = Yafst == 0;
Xafst(Xnul) = 1; Yafst(Ynul) = 1;
botsenergie(Xnul) = 0; botsenergie(Ynul) = 0;

    % richting van afstoting
hulpmatrix = triu(ones(nnz(indicesB)),1) - tril(ones(nnz(indicesB)),-1);
Xrichting = squareform(pdist(pos(indicesB,1,n),distfun)) .* hulpmatrix;
Yrichting = squareform(pdist(pos(indicesB,2,n),distfun)) .* hulpmatrix;

afstoting(:,1) = sum( Xrichting .* botsenergie .* ...
    sqrt(1 ./ (1 + (Yafst./Xafst).^2)),2);
afstoting(:,2) = sum( Yrichting .* botsenergie .* ...
    sqrt(1 ./ (1 + (Xafst./Yafst).^2)),2);

% Indicator om te voorkomen dat de bacterie de zandkorrel of het ...
% neergeslagen kalk verlaat
indPos = pos(indicesB,:,n) + randomwalk + a* afstoting * dt;
    % dichtstbijzijnde gridpunt per bacterie
gridbact = [round((indPos(:,1)-xrand(1))/dgrid)*dgrid+xrand(1) ...
    round((indPos(:,2)-yrand(1))/dgrid)*dgrid+yrand(1)];
    % concentratie kalk per bacterie gecorrigeerd naar positie
c_ind = c_kalkgrid(round(((gridbact(:,1) - xrand(1)) * ...
    ((yrand(2)-yrand(1))/dgrid+1) + dgrid + gridbact(:,2) - ...
    yrand(1)) / dgrid),n+1);
indicator = (sum((repmat(indPos(:,1),[1 size(korrel,1)]) - ...
    repmat(korrel(:,1)',[nnz(indicesB) 1])).^2 + ...
    (repmat(indPos(:,2),[1 size(korrel,1)]) - ...
    repmat(korrel(:,2)',[nnz(indicesB) 1])).^2 <= Rkorrel^2,2) | ...
    c_ind > c_kalk_grenswaarde ) & ...
    sum((repmat(indPos(:,1),[1 size(korrel,1)]) - ...
    repmat(korrel(:,1)',[nnz(indicesB) 1])).^2 + ...
    (repmat(indPos(:,2),[1 size(korrel,1)]) - ...
    repmat(korrel(:,2)',[nnz(indicesB) 1])).^2 <= (0.8*Rkorrel)^2,2) == 0;
pos(indicesB,:,n+1) = pos(indicesB,:,n) + [indicator,indicator] .* ...
    ( randomwalk + afstoting ) * dt;

```

```

% Deling en sterfte

% afstandstabel van alle bacterin onderling
afstandmatrix2 = squareform(pdist(pos(:, :, n+1)));
% dichtheid is # bacterin binnen een straal van 8x zijn straal
dichtheid = (1+sum(afstandmatrix2 < 8*Rbact & afstandmatrix2 ~= 0,2));

% Deling
deelkansafh = 1 - (1 - deelkans./(.5*dichtheid)).^dt;
deling = rand(Nbact, 1) < deelkansafh;
if nnz(deling) ~= 0
    indices = find(pos(:,1,n+1)==0 & pos(:,2,n+1)==0,nnz(deling));
    pos(indices, :, n+1) = pos(deling, :, n+1);
end

% Sterfte
sterftekansafh = 1 - (1 - sterftekans.*(0.5*dichtheid)).^dt;
sterfte = rand(Nbact, 1) > sterftekansafh;
pos(:, :, n+1) = pos(:, :, n+1).*[sterfte,sterfte];

end

c_kalkgridsim(:, :, simulatie) = c_kalkgrid(:, :);
possim(:, :, :, simulatie) = pos(:, :, :);

end

toc;

```

## .2 Matlab-code visualisatie output

```

% 'Semi-stochastisch cell-based model voor BioGrout'
% Code Bachelor Eindproject

% Willem van Loenen
% Augustus 2014

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%% PLOTS %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% Bacteriesporen %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

figure;
clf; hold on;

for i =1:size(korrel,1)

```



```

    plotcircle(korrel(i,1),korrel(i,2),Rkorrel)
    plotcircle(korrel(i,1),korrel(i,2),.8*Rkorrel)
end
axis([xrand yrand])
for i = 1:Nbact
    bact = permute(pos(i,:,:),[3 2 1]);
    dood = find(bact(:,1)==0 & bact(:,2)==0);
    if ~isempty(dood)
        plot(bact(1:dood(1)-1,1),bact(1:dood(1)-1,2), 'color', rand(1,3));
        for j = 2:length(dood)
            plot(bact(dood(j-1)+1:dood(j)-1,1), ...
                bact(dood(j-1)+1:dood(j)-1,2), 'color', rand(1,3));
        end
        plot(bact(dood(end)+1:end,1),bact(dood(end)+1:end,2), ...
            'color', rand(1,3));
    end
end
end
xlabel('X');
ylabel('Y');
title('Bacteriesporen'); hold off;

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% Bacteriepopulatie %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

figure;
clf;
plot(1:N+1,permute(sum(pos(:,1,1:N+1)~=0 | pos(:,2,1:N+1)~=0),[3 1 2]))
xlabel('Aantal tijdstappen');
ylabel('Aantal bacterin');
axis([0 200 0 1400])
title('Bacteriepopulatie'); hold off;

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% Bacteriepopulatie verdeling %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

%pos52 bevat 52 simulaties
figure;
clf; hold on;
for i = 1:52
    plot(1:N+1,permute(sum(pos52(:,1,1:N+1,i)~=0 | ...
        pos53(:,2,1:N+1,i)~=0),[3 1 2]))
end
xlabel('Aantal tijdstappen');
ylabel('Aantal bacterin');
axis([0 200 0 1400])
title('Bacteriepopulatie'); hold off;

```

```

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% Kalksteenneerslag %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

xgrid = reshape(gridpos(:,1,1),length(cy),length(cx));
ygrid = reshape(gridpos(:,2,1),length(cy),length(cx));
gridsq = reshape(c_kalkgrid(:,:),length(cy),length(cx),size(c_kalkgrid,2));

figure;
clf;
for i = 2:floor( 1+(N-1)/10 /2)
    subplot(3,3,i-1)
    hold on;
    contourf(xgrid,ygrid,gridsq(:,:,i*10-9),[10 10], 'LineColor','none');
    caxis([min(gridsq(:)), max(gridsq(:))]);
    colormap(autumn)
    for j =1:size(korrel,1)
        fillcircle(korrel(j,1),korrel(j,2),Rkorrel)
        fillcircle(korrel(j,1),korrel(j,2),.8*Rkorrel)
    end
    for k = 1:Nbact
        if pos(k,1,i*10-9) ~= 0 || pos(k,2,i*10-9) ~= 0
            plotcircle(pos(k,1,i*10-9),pos(k,2,i*10-9),Rbact);
        end
    end
    line([-0.75+(i*10-9)*dt/80*2.75 -0.75+(i*10-9)*dt/80*2.75], ...
        [yrand(1) yrand(2)], 'color','y','LineWidth',2)
    axis([xrand yrand])
    str=sprintf('Tijdstap %d', i*10-9);
    title(str)
end
hold off;

figure;
clf;
for i = floor( 1+(N-1)/10 /2)+1:floor( 1+(N-1)/10 )
    subplot(3,3,i-10)
    hold on;
    contourf(xgrid,ygrid,gridsq(:,:,i*10-9),[10 10], 'LineColor','none');
    caxis([min(gridsq(:)), max(gridsq(:))]);
    colormap(autumn)
    for j =1:size(korrel,1)
        fillcircle(korrel(j,1),korrel(j,2),Rkorrel)
        fillcircle(korrel(j,1),korrel(j,2),.8*Rkorrel)
    end
    for k = 1:Nbact
        if pos(k,1,i*10-9) ~= 0 || pos(k,2,i*10-9) ~= 0
            plotcircle(pos(k,1,i*10-9),pos(k,2,i*10-9),Rbact);
        end
    end
end

```

```

end
line([-0.75+(i*10-9)*dt/80*2.75 -0.75+(i*10-9)*dt/80*2.75], ...
      [yrand(1) yrand(2)], 'color','y','LineWidth',2)
axis([xrand yrand])
str=sprintf('Tijdstap %d', i*10-9);
title(str)
end
hold off;

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% Kalksteenneerslag percentueel %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

figure;
clf;
plot(1:N+1,sum(c_kalkgrid(:,1:N+1)>c_kalk_grenswaarde)/length(c_kalkgrid))
xlabel('Aantal tijdstappen');
ylabel('Percentage uitgehard oppervlak');
title('Procentuele kalkneerslag'); hold off;

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% Kalksteenneerslag percentueel verdeling %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

%c_kalkgrid52 bevat 52 simulaties
figure;
clf; hold on;
for i = 1:52
    plot(1:N+1,sum(c_kalkgrid52(:,1:N+1),i)>c_kalk_grenswaarde)...
        /length(c_kalkgrid52));
end
xlabel('Aantal tijdstappen');
ylabel('Percentage uitgehard oppervlak');
title('Procentuele kalkneerslag'); hold off;

```

### .2.1 plotcircle.m

```

function [] = plotcircle(x,y,r)

th = 0:pi/50:2*pi;
xunit = r * cos(th) + x;
yunit = r * sin(th) + y;
plot(xunit, yunit);

end

```

### .2.2 fillcircle.m

```

function [] = fillcircle(x,y,r)

```

```
th = 0:pi/50:2*pi;  
xunit = r * cos(th) + x;  
yunit = r * sin(th) + y;  
fill(xunit, yunit, 'w');  
  
end
```