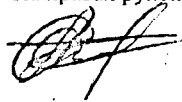


На правах рукописи



Солонинов Денис Александрович

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИКИ ЯВЛЕНИЙ
ПЕРЕНОСА ПРИ БИОСИНТЕЗЕ БИОХИМИЧЕСКИХ СИСТЕМ В РЕАКТОРАХ
ПЕРИОДИЧЕСКОГО ДЕЙСТВИЯ С ПЕРЕМЕШИВАНИЕМ**

05.13.18 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата технических наук

Ставрополь - 2010

Работа выполнена
в Северо-Кавказском государственном техническом университете
на кафедре «Информационные системы и технологии».

Научный руководитель: кандидат физико-математических наук, доцент
Мезенцева Оксана Станиславовна

Официальные оппоненты: доктор технических наук, профессор Ряжских
Виктор Иванович,
доктор химических наук, профессор Валюхов Дмитрий Петрович

Ведущая организация: Воронежский государственный технический
университет, г. Воронеж.

Защита состоится 29 января 2010г. в 16 часов на заседании диссертационного
совета Д 212.245.09 при Северо-Кавказском государственном техническом
университете по адресу: 355028 г. Ставрополь, пр. Кулакова, 2, аудитория 305.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Северо-Кавказского
государственного технического университета.

Автореферат разослан «22» Декабря 2009г.

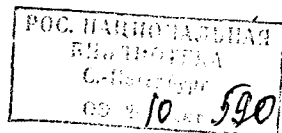
Ученый секретарь
диссертационного совета
к.ф.-м.н., доцент



О.С. Мезенцева

2010А
14749

Общая характеристика работы



Актуальность работы. Одним из основных методов исследования сложных биохимических систем (БХС) является математическое моделирование, опирающееся на широкое применение компьютеров. Оно открыло перед исследователями большие возможности в разработке математических описаний и моделей биохимических процессов.

Поиск рациональных режимов проведения биохимических реакций при существующих технологиях и прогнозирование реализации вновь создаваемых, в настоящее время невозможны без использования методов математического моделирования.

Из-за многопараметричности и сопряжённости явлений, сопровождающих биосинтез, пока не удастся его формализовать в виде моделей с распределёнными параметрами на основе фундаментальных законов массообмена и гидродинамики, а имеющиеся статистические и балансовые подходы носят ограниченный характер. Дополнительным осложняющим фактором являются также наличие неиндифицируемых биохимических превращений, что вносит элемент стохастичности в физико-химические представления.

Эти обстоятельства диктуют необходимость применения класса математических моделей с сосредоточенными параметрами, или, так называемых, кинетических моделей. Однако их широкое использование сдерживается необходимостью определения кинетических коэффициентов и принятия допущений о гидротермической структуре в биореакторах. Несмотря на это, отечественные и зарубежные ученые (М. Михаэлис, Б.А. Устинников, В.Л. Яровенко, И.М. Левин, Н.Г. Черевко, Р.М. Леппо, Л.А. Ровинский, В.М. Клепников, А.Г. Забродский и др.) показали на конкретных предметно-ориентированных задачах результативность такого подхода и пути повышения его адекватности за счёт учёта взаимосвязи массообмена между различными уровнями детализации биохимических систем. Однако далеко не все модели качественно раскрывают механизм описываемого процесса, учитывая все компоненты, участвующие в нём.

В связи с этим разработка новых кинетических моделей, основывающихся на взаимообусловленных микро и макро балансах при биосинтезе, является

актуальной. Реализация такого подхода демонстрируется на примере моделирования процесса осахаривания крахмалсодержащего сырья, что позволит управлять этим процессом, автоматизировать и оптимизировать его.

Объектом диссертационной работы являются явления переноса при биосинтезе биохимических систем в реакторах периодического действия с перемешиванием.

Предметом исследований являются математические модели массообменных процессов в биореакторах периодического действия с перемешиванием.

Цель работы заключается в синтезе математических моделей биохимических превращений с использованием кинетики массопереноса при изотермических условиях в биореакторах периодического действия с перемешиванием на примере осахаривания крахмалсодержащего сырья и разработка на ее основе рекомендаций по рациональному ведению процесса.

Для достижения поставленной цели сформулированы следующие частные задачи:

1. На основе кинетических представлений о массопереносе в биохимических системах разработать математическую модель метаболизма в биореакторах периодического действия с перемешиванием.

2. Разработать математическую модель процесса осахаривания крахмалсодержащего сырья в условиях избыточности ферментов.

3. Разработать математическую модель процесса осахаривания крахмалсодержащего сырья в условиях недостаточности ферментов

4. Разработать методику определения кинетических параметров модели и их количественное определение с использованием имеющихся теоретических и экспериментальных данных.

5. Разработать алгоритм численного интегрирования уравнений модели и прикладной программный комплекс, провести вычислительный эксперимент по определению динамики изменения основных характеристик биохимической системы в непроточном биореакторе с перемешиванием.

6. Провести натурные эксперименты на автоматизированной пилотной установке для контроля степени осахаривания крахмалсодержащего сырья и установить адекватность предложенной модели.

7. Реализовать практические возможности разработанной математической модели в научной и производственной деятельности.

Методы исследования. При выполнении диссертационной работы использовалась методология математического моделирования, теория дифференциальных уравнений, численные методы, системный анализ, методы оптимизации.

Достоверность и обоснованность полученных в диссертационной работе результатов и формулируемых на их основе выводов обеспечиваются использованием фундаментальных законов явлений переноса, апробированных методик расчетов и обработки данных, а также согласованностью с экспериментальными данными.

Научная новизна:

1. С применением кинетического подхода к биохимической модели декомпозиции в гидродинамических условиях, близких к идеальному перемешиванию, синтезирована математическая модель биохимических превращений в виде нелинейно-алгебраической системы дифференциальных уравнений, отличающаяся от известных тем, что комплексно учитывает все компоненты, участвующие в процессе.

2. Найден способ сокращения числа кинетических параметров предложенной математической модели путем рассмотрения асимптотических режимов, соответствующих физическому смыслу задачи, а именно, в одном случае избытку ферментов в системе, в другом их недостатку. Это дало возможность наметить пути верификации кинетических параметров через конечные значения глюкозы и мальтозы в рассматриваемом в качестве примера процессе осахаривания крахмалсодержащего сырья.

3. Разработана математическая модель процесса осахаривания крахмалсодержащего сырья в условиях избыточности ферментов и получено

аналитическое решение линеаризированной системы уравнений, ее составляющих, в предположении эквивалентности скоростей разложения крахмала на декстрины, глюкозу и мальтозу.

4. Разработана математическая модель процесса осахаривания крахмалсодержащего сырья в условиях недостаточности ферментов и получено приближенное решение системы уравнений модели с учетом того, что скорости потери активности ферментов одного порядка.

5. На основе сопоставления вычислительного и натурного экспериментов изучена динамика изменения крахмала, мальтозы, декстринов, белков и других компонентов фермент-субстратного комплекса при осахаривании крахмалсодержащего сырья, позволившая уточнить кинетические коэффициенты модели, обеспечивающие адекватное описание процесса.

6. Разработана автоматизированная экспериментальная установка для проведения исследований зависимости между количеством потребляемой двигателем энергии и степенью осахаривания крахмалсодержащего сырья и предложен новый способ оперативного контроля за процессом осахаривания по изменению расходуемой мощности на перемешивание субстрата, позволяющий свести к минимуму использование трудоемких и длительных измерений химическими и биохимическими методами.

7. Предложена схема мониторинга процесса осахаривания и принципы управления им с использованием разработанной математической модели.

Практическая значимость работы. Полученные соотношения позволяют прогнозировать и контролировать динамику процесса биохимических превращений с использованием кинетики массопереноса при изотермических условиях в биореакторах периодического действия с перемешиванием на примере осахаривания крахмалсодержащего сырья. Разработанные на их основе рекомендации по рациональному ведению процесса позволяют снизить потери на производстве и увеличить выход конечной продукции.

Апробация работы. Основные положения работы были доложены на III Международной научно-технической конференции «Инфокоммуникационные

технологии в науке, производстве и образовании» (Кисловодск, 2008 г.), VIII Всероссийском симпозиуме по прикладной и промышленной математике (Сочи-Адлер, 2007г.), VII Международной научно-практической конференции «Методы и алгоритмы прикладной математики в технике, медицине и экономике» (Новочеркасск, 2007г.), Всероссийской научно-практической конференции «Проблемы обеспечения устойчивого экономического роста аграрного сектора экономики» (Ставрополь, 2006г.).

Положения, выносимые на защиту:

1. Математическая модель биохимических превращений с использованием кинетики массопереноса при изотермических условиях в биореакторах периодического действия с перемешиванием на примере осахаривания крахмалсодержащего сырья.

2. Математическая модель процесса осахаривания крахмалсодержащего сырья в условиях избыточности ферментов.

3. Математическая модель процесса осахаривания крахмалсодержащего сырья в условиях недостаточности ферментов.

4. Результаты вычислительного эксперимента по исследованию кинетики процесса явлений переноса при биосинтезе биохимических систем в реакторах периодического действия с перемешиванием в условиях избыточности и недостаточности ферментов.

5. Рекомендации по рациональному проведению процесса осахаривания крахмалсодержащего сырья с использованием комплекса разработанных математических моделей и предлагаемого способа оперативного контроля степени осахаривания крахмалсодержащего сырья.

Публикации. По теме диссертационной работы опубликовано 9 печатных работ, в том числе 2 – в научных журналах из перечня ВАК РФ, 3 работы депонированы в ВИНТИ, 2 работы опубликованы в сборниках научных трудов Всероссийских конференций, 2 работы – в сборниках научных трудов Международных конференций. Получен патент на изобретение №2339933 "Способ

контроля степени осахаривания крахмалсодержащего сырья" от 27 ноября 2008 г.

Структура диссертации. Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, заключения. Содержит 105 страниц, 1 таблицу, 37 рисунков, 2 приложения. Список литературы содержит 120 наименований.

Реализация результатов. Основные результаты диссертационных исследований внедрены в производственную деятельность ЗАО «ТУЛАСПИРТ» (акт о внедрении от 20.12.2007г.), ООО «Новоалександровский спирто-дрожжевой комбинат» (акт о внедрении от 4.03.2008г.).

Краткое содержание работы

Во введении обоснована актуальность исследований по разработке математических моделей биохимических систем с сосредоточенными параметрами, основывающихся на учёте взаимосвязи массообмена между различными уровнями детализации.

Первая глава посвящена анализу современного состояния проблемы математического моделирования биологических объектов.

Несмотря на разнообразие подходов по описанию функционирования биохимических систем, можно выделить среди них три основных класса: статистические модели, модели с сосредоточенными параметрами и модели с распределёнными параметрами.

В связи с отличительными признаками биохимических систем от неживых систем – рост, самоограничение роста, способность переключения к нескольким стационарным режимам, наличие автоколебательных состояний, пространственная неоднородность, квазистохастичность, отсутствие феноменологических законов для описания явлений переноса, которые заменены совокупностью полуэмпирических закономерностей, остаются неясными пути по выбору наиболее приемлемого подхода к синтезу математических моделей.

Неинформативность статистического подхода в смысле учёта внутренней структуры биохимических систем и неясность физического смысла параметров переноса в распределённых моделях выдвигает на современном этапе использование кинетического подхода для исследований. Существующие

кинетические модели описывают кинетику изменения основных параметров биосинтеза, однако, не учитывают все компоненты, присутствующие в системе.

Во второй главе с использованием биохимической модели деструкции крахмалсодержащего сырья в гидродинамических условиях, близких к идеальному перемешиванию, а, также, с применением кинетического подхода синтезирована математическая модель биохимических превращений, представленная нелинейно-алгебраической системой дифференциальных уравнений в обыкновенных производных в виде задачи Коши (1-11) с начальными условиями (12).

$$dK(\theta)/d\theta = -\{F_{\alpha}(\theta)[F_{\alpha}(\theta) + K(\theta)] + N_M F_{\beta}(\theta)[F_{\beta}(\theta) + K(\theta)] + N_D F_{\gamma}(\theta)[F_{\gamma}(\theta) + K(\theta)]\}K(\theta); \quad (1)$$

$$dD(\theta)/d\theta = -\{E_G F_{\alpha}(\theta)[F_{\alpha}(\theta) + D(\theta)] + E_M F_{\beta}(\theta)[F_{\beta}(\theta) + D(\theta)]\}D(\theta); \quad (2)$$

$$dF_{\alpha}(\theta)/d\theta = -\{\Phi_{\alpha G} G(\theta)[G(\theta) + F_{\alpha}(\theta)] + \Phi_{\alpha M} M(\theta)[M(\theta) + F_{\alpha}(\theta)]\}F_{\alpha}(\theta); \quad (3)$$

$$dF_{\beta}(\theta)/d\theta = -\{\Phi_{\beta G} G(\theta)[G(\theta) + F_{\beta}(\theta)] + \Phi_{\beta M} M(\theta)[M(\theta) + F_{\beta}(\theta)]\}F_{\beta}(\theta); \quad (4)$$

$$dF_{\gamma}(\theta)/d\theta = -\Phi_{\gamma} D(\theta)F_{\gamma}(\theta)[D(\theta) + F_{\gamma}(\theta)]; \quad (5)$$

$$dG(\theta)/d\theta = F_{\alpha}(\theta)K(\theta)[F_{\alpha}(\theta) + K(\theta)] + E_G F_{\alpha}(\theta)D(\theta)[F_{\alpha}(\theta) + D(\theta)]; \quad (6)$$

$$dM(\theta)/d\theta = N_M F_{\beta}(\theta)K(\theta)[F_{\beta}(\theta) + K(\theta)] + E_M F_{\beta}(\theta)D(\theta)[F_{\beta}(\theta) + D(\theta)]; \quad (7)$$

$$dP(\theta)/d\theta = -N_P F_{\pi}(\theta)P(\theta)[F_{\pi}(\theta) + P(\theta)]; \quad (8)$$

$$dA(\theta)/d\theta = N_A P(\theta)A(\theta)[P(\theta) + A(\theta)]; \quad (9)$$

$$K(\theta) + D(\theta) + F_{\alpha}(\theta) + F_{\beta}(\theta) + F_{\gamma}(\theta) + G(\theta) + M(\theta) = 1; \quad (10)$$

$$P(\theta) + F_{\pi}(\theta) + A(\theta) = 1; \quad (11)$$

$$K(0) = K_0; D(0) = D_0; F_{\alpha}(0) = F_{\alpha_0}; F_{\beta}(0) = F_{\beta_0}; F_{\gamma}(0) = F_{\gamma_0}; G(0) = M(0) = 0; P(0) = P_0; \quad (12)$$

$$F_{\pi}(0) = F_{\pi_0}; A(0) = 0.$$

Относительные параметры модели:

$$\theta = \eta_G \tau, \quad K(\theta) = k(\tau)/C_1; \quad D(\theta) = d(\tau)/C_1; \quad F_{\alpha}(\theta) = f_{\alpha}(\tau)/C_1; \quad F_{\beta}(\theta) = f_{\beta}(\tau)/C_1;$$

$$F_{\gamma}(\theta) = f_{\gamma}(\tau)/C_1;$$

$$G(\theta) = g(\tau)/C_1; \quad M(\theta) = m(\tau)/C_1; \quad P(\theta) = p(\tau)/C_2; \quad F_{\pi}(\theta) = f_{\pi}(\tau)/C_2; \quad (13)$$

$$A(\theta) = a(\tau)/C_2; \quad N_M = \eta_M/\eta_G; \quad N_D = \eta_D/\eta_G; \quad E_G = \xi_G/\eta_G; \quad E_M = \xi_M/\eta_G;$$

$$\begin{aligned} \Phi_{\alpha G} &= \varphi_{\alpha G} / \eta_G; \quad \Phi_{\alpha M} = \varphi_{\alpha M} / \eta_G; \quad \Phi_{\beta G} = \varphi_{\beta G} / \eta_G; \quad \Phi_{\beta M} = \varphi_{\beta M} / \eta_G; \quad \Phi_{\gamma} = \varphi_{\gamma} / \eta_G; \\ N_P &= \eta_P / \eta_G; \quad \Phi_{\pi} = \varphi_{\pi} / \eta_G; \quad N_A = \eta_A / \eta_G; \end{aligned} \quad (14)$$

$$C_1 = k(\tau) + d(\tau) + f_{\alpha}(\tau) + f_{\beta}(\tau) + f_{\gamma}(\tau) + g(\tau) + m(\tau) = \text{const};$$

$$C_2 = p(\tau) + f_{\pi}(\tau) + \alpha(\tau) = \text{const};$$

где $g(\tau)$, $m(\tau)$, $d(\tau)$, $\alpha(\tau)$, $p(\tau)$, $k(\tau)$ – текущие массовые концентрации соответственно глюкозы, мальтозы, декстринов, аминокислот, белков и исходного сырья (крахмала), кг/м³; $f_{\alpha}(\tau)$, $f_{\beta}(\tau)$, $f_{\gamma}(\tau)$, $f_{\pi}(\tau)$ – текущие массовые концентрации «активных» α , β , γ , π – ферментов, кг/м³; η_G , η_M , η_D , η_A , η_P – кинетические коэффициенты, характеризующие скорость образования глюкозы, мальтозы, декстринов из крахмала, аминокислот и пептидов из белка и скорость расщепления белкового компонента, соответственно, с⁻¹; τ – время, с; $\varphi_{\alpha G}$, $\varphi_{\alpha M}$, $\varphi_{\beta G}$, $\varphi_{\beta M}$, φ_{γ} , φ_{π} – кинетические коэффициенты, характеризующие скорость расходования α -фермента и β -фермента при расщеплении биомолекул до глюкозы и мальтозы, γ -фермента при расщеплении биомолекул до декстринов, π – фермента при расщеплении белкового компонента, соответственно, с⁻¹; ξ_G , ξ_M – кинетические коэффициенты, характеризующие скорость образования глюкозы и мальтозы из декстринов, с⁻¹.

Для сокращения числа кинетических параметров математической модели исследованы асимптотические режимы, соответствующие физическому смыслу задачи.

Для случая избыточности ферментов ($F_{\alpha} \wedge F_{\beta} \wedge F_{\gamma} \gg (K \wedge D)$) была разработана математическая модель (15-21).

$$K(\theta) = K_0 \exp(-3\theta); \quad (15)$$

$$D(\theta) = D_0 \exp[-E_G(1+X)\theta]; \quad (16)$$

$$G(\theta) = \frac{1}{3} K_0 [1 - \exp(-3\theta)] + \frac{D_0}{1+X} \{1 - \exp[-E_G(1+X)\theta]\}, \quad (17)$$

$$M(\theta) = C_\varepsilon - K_0 \exp(-3\theta) - D_0 \exp[-E_G(1+X)\theta] - \frac{1}{3} K_0 [1 - \exp(-3\theta)] - \quad (18)$$

$$-\frac{D_0}{1+X} \{1 - \exp[-E_G(1+X)\theta]\}$$

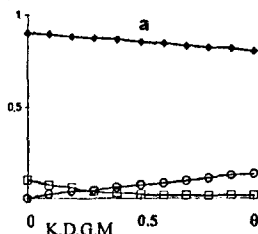
$$A(\theta) = 1 + P_0^2 N^{*2} \exp(-2N^* \theta) - P_0 N^* \exp(-N^* \theta), \quad (19)$$

$$K(\theta) + D(\theta) + G(\theta) + M(\theta) = C_\varepsilon, \quad (20)$$

$$P(\theta) = P_0 \exp(-N_P \theta), \quad (21)$$

где C_ε – массовая доля в общем балансе системы; $X = E_M / E_G$, $N_A \approx N_P \approx N^*$.

K.D.G.M



K.D.G.M

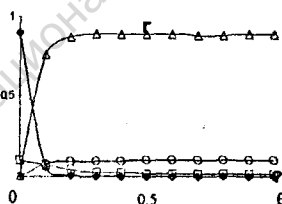
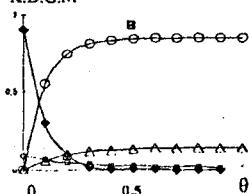
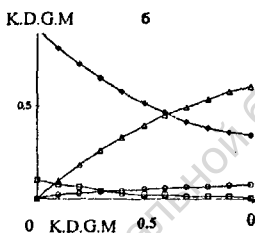


Рисунок 1 – Кинетика процесса при избыточности ферментов для $K_0=0.1$, $D_0=0.9$:
а – $X=0.1$, $E_G=0.1$; б – $X=10$; $E_G=0.1$; в – $X=0.1$, $E_G=10$; г – $X=10$, $E_G=10$.

где \square – K \bullet – D \circ – G \triangle – M

Как показал вычислительный эксперимент, замедление процесса происходит, если скорость образования мальтозы из декстринов меньше скорости образования из них глюкозы (1 – а). В этом случае процесс протекает неэффективно в смысле его продолжительности. Такая ситуация может возникать, например, при нерациональных температурных режимах, когда активность ферментов неоптимальна, или же недостаточна степень перемешивания биохимической системы в реакторе. Если скорость образования мальтозы из декстринов существенно возрастает по сравнению со скоростью образования глюкозы из

декстринов при сохранении условия $\xi_G \langle \eta_G$ (рис.1 – б), то уровень присутствия глюкозы в биохимической системе остается практически таким же, что и в предыдущем случае, но увеличивается содержание мальтозы. Такая же ситуация повторяется с ускорением процесса деструкции ($\xi_G \rangle \eta_G$), что свидетельствует о нечувствительности модели к ξ_G . Наибольшее влияние на качественную картину процесса оказывает величина X .

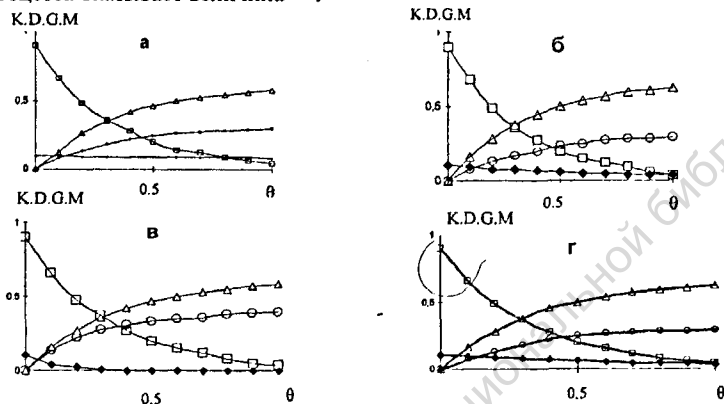


Рисунок 2 – Кинетика процесса при избыточности ферментов для $K_0=0.9, D_0=0.1$:
 а – $X=0,1, E_G=0,1$; б – $X=10, E_G=0,1$; в – $X=0,1, E_G=10$; г – $X=10, E_G=10$.

где \square – К \circ – D \triangle – G \blacklozenge – M

В случае $K_0 > D_0$ кинетика процесса менее чувствительна к значению параметров X и E_G (рис. 2). При любых их значениях наблюдается большее значение концентрации мальтозы, чем глюкозы, что совпадает с качественными представлениями о процессе.

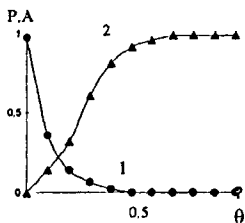


Рисунок 3 – Изменение белковой компоненты P и аминокислот A : 1 – P; и 2 – A.

Изменение белково-аминокислотной составляющей биохимической системы представлено на рис. 3, из которого следует, что выполнение локального баланса в интегральном смысле выполнено, откуда найдено, что $N \approx 10$, т.е. деструкция белка в процессе происходит значительно быстрее скорости образования глюкозы, мальтозы и декстринов.

Во всех расчётах принято для удобства интерпретации значение $C_{\xi} = 1$. Для

случая недостаточности ферментов ($F_{\alpha} \wedge F_{\beta} \wedge F_{\gamma}$) $\ll (K \wedge D)$ была разработана модель (22-28) с учетом предположения (29) и начальными условиями (30-31):

$$dF_{\alpha}(\theta)/d\theta = -\Phi \{ G(\theta) / [G(\theta) + F_{\alpha}(\theta)] + M(\theta) / [M(\theta) + F_{\alpha}(\theta)] \} F_{\alpha}(\theta); \quad (22)$$

$$dF_{\gamma}(\theta)/d\theta = -\Phi F_{\gamma}(\theta); \quad (23)$$

$$dG(\theta)/d\theta = (1 + E_G) F_{\alpha}(\theta); \quad (24)$$

$$dM(\theta)/d\theta = (1 + E_G X) F_{\beta}(\theta); \quad (25)$$

$$F_{\alpha}(\theta) + F_{\beta}(\theta) + F_{\gamma}(\theta) + G(\theta) + M(\theta) = 1. \quad (26)$$

$$dF_{\pi}(\theta)/d\theta = -\Phi_{\pi} A(\theta) F_{\pi}(\theta) / [A(\theta) + F_{\pi}(\theta)]; \quad (27)$$

$$dA(\theta)/d\theta = N_A A(\theta), \quad (28)$$

$$\Phi_{\alpha G} = \Phi_{\alpha M} = \Phi_{\beta G} = \Phi_{\beta M} = \Phi_{\gamma} = \Phi = const. \quad (29)$$

$$F_{\alpha}(0) = F_{\alpha_0}, \quad F_{\beta}(0) = F_{\beta_0}, \quad F_{\gamma}(0) = F_{\gamma_0}, \quad G(0) = M(0) = 0. \quad (30)$$

$$F_{\pi}(0) = F_{\pi_0}, \quad A(0) = A_0, \quad A_0 \ll 1, \quad A_0 \neq 0. \quad (31)$$

Так как математическая модель является нелинейной системой обыкновенных дифференциальных уравнений, то её интегрирование было выполнено численно по методу Рунге-Кутты 4-го порядка точности.

Как показали вычислительные эксперименты (рис. 4) влияние отношения скоростей образования глюкозы и мальтозы из декстринов несущественно. Кроме того отчетливо наблюдается асимптотический режим для глюкозы и мальтозы. Замечено, что структура кинетики кривых для параметров процесса близка к экспериментальному и инверсивно-экспоненциальному виду. Это свидетельствует о слабой нелинейности уравнений (22)-(27).

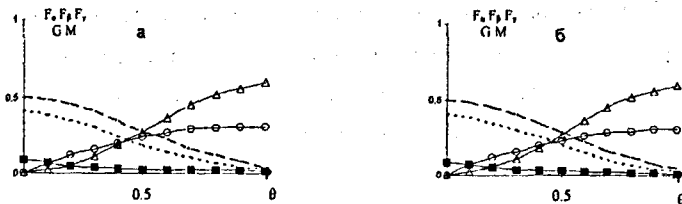


Рисунок 4 – Кинетика процесса при недостаточности ферментов для $\Phi = 5$, $F_{\alpha_0} = 0.5$, $F_{\beta_0} = 0.4$, $F_{\gamma_0} = 0.1$, $a - E_G = 0.1$, $X = 10$; $\delta - E_G = 0.1$, $X = 0.1$;

где — — F_α - - - - F_β ■ — F_γ ;
 ○ — G ▲ — M

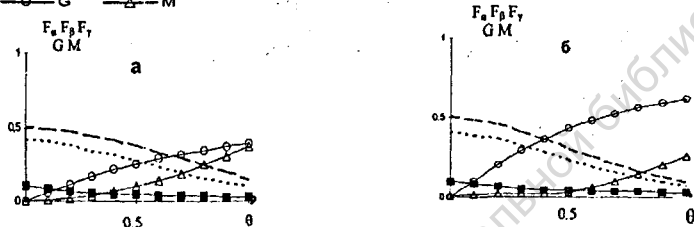


Рисунок 5 – Кинетика процесса при недостаточности ферментов для $\Phi = 3$, $F_{\alpha_0} = 0.5$, $F_{\beta_0} = 0.5$, $F_{\gamma_0} = 0.4$, $F_{\gamma_0} = 0.1$, $a - E_G = 0.1$, $X = 0.1$; $\delta - E_G = 0.1$, $X = 10$;

где — — F_α - - - - F_β ■ — F_γ ;
 ○ — G ▲ — M

Снижение скорости расходования ферментов (уменьшение Φ) приводит к изменению картины процесса (рис.5). Увеличение X приводит к большему выходу глюкозы.

Согласно структуре кинетических зависимостей для $F_\alpha(\theta)$, $F_\beta(\theta)$ по результатам вычислительного эксперимента (рис.5) были получены их приближённые параметрические представления (32):

$$F_\alpha(\theta) = F_{\alpha_0} \exp(-a\theta), \quad F_\beta(\theta) = F_{\beta_0} \exp(-a\theta). \quad (32)$$

Тогда из (24) и (25) следует (33)-(34).

$$G(\theta) = F_{\alpha_0} (1 + E_G) \int_0^\theta \exp(-a\theta) d\theta = \frac{1}{a} F_{\alpha_0} (1 + E_G) [1 - \exp(-a\theta)] \quad (33)$$

$$M(\theta) = F_{\beta_0} (1 + E_M) \int_0^\theta \exp(-a\theta) d\theta = \frac{1}{a} F_{\beta_0} (1 + E_M) [1 - \exp(-a\theta)] \quad (34)$$

После подстановки (32)-(34) в (22) было получено трансцендентное уравнение относительно параметра a :

$$a^2 = \Phi \left\{ \frac{(1 + E_G)[1 - \exp(-a\theta)]}{(1 + E_G)[1 - \exp(-a\theta)] + a \cdot \exp(-a\theta)} + \frac{(1 + E_G X)[1 - \exp(-a\theta)]}{(1 + E_G X)[1 - \exp(-a\theta)] + a \omega \exp(-a\theta)} \right\}, \quad (35)$$

где $\omega = F_{\alpha_0} / F_{\beta_0}$.

Если рассмотреть асимптотический режим ($\theta \rightarrow \infty$), то из (35) $a = \sqrt{2\Phi}$, а из (33) и (34):

$$G_{\infty} = \frac{1}{a} F_{\alpha_0} (1 + E_G), \quad M_{\infty} = \frac{1}{a} F_{\beta_0} (1 + E_G X). \quad (36)$$

В третьей главе разработан алгоритм решения нелинейной системы дифференциальных уравнений. Проведённые вычислительные эксперименты с помощью предметно-ориентированной программы позволили установить качественную адекватность математической модели реальному процессу осахаривания.

Определение кинетических параметров модели проходило на основе эмпирической информации об изменении нескольких составляющих элементов в процессе осахаривания. Были проведены эксперименты на специально разработанной пилотной установке, причём изменения углеводов в процессе контролировалось химическими и биохимическими апробированными на практике методами. По кинетике изменения концентрационных показателей разработана оригинальная методика нахождения ключевых кинетических коэффициентов. Натурными экспериментами определено, что $K_0 = 0.77$, $D_0 = 0.23$, $G_{\infty} = 0.42$. Тогда из (36) $X = 0.408$, а из (15):

$$\eta_G = \frac{1}{3\tau_k} \ln \frac{K^*}{K_0}, \quad (37)$$

где τ_k — время установления неизменности концентрации глюкозы в процессе; K^* — значение концентрации крахмала при τ_k , принимаемое соответственно точности измерения в 1%. Откуда $\eta_G = 6.9 \cdot 10^{-4} \text{ с}^{-1}$, что коррелируется с известными литературными данными. Найденное значение η_G позволяет из (16) путём

логарифмирования по натуральному основанию получить значение E_G в виде

$$E_G = -\frac{1}{(1+X)\theta_\infty} \ln \frac{D_\infty}{D_0},$$

где $\theta_\infty = \tau_k \cdot \mu_G$, D_∞ – концентрация декстринов в установившемся процессе количественной неизменности компонентов осахариваемой смеси, найденная в эксперименте и равная 0.19, тогда $E_G=0,09$. Сравнение вычислительных расчётов по модели с помощью найденных параметров и экспериментальных данных показали количественную адекватность предлагаемого подхода.

Замечено, что из-за деструкции биополимерных молекул в процессе осахаривания изменяются реологические свойства среды. Этот факт позволил разработать новый метод оперативного контроля процесса по изменению расходуемой мощности на перемешивание субстрата.

Установленные значения параметров математической модели позволяют рассчитать изменение основных компонентов субстрата в процессе осахаривания. Это очень важно при сравнительном анализе вычислительных и натурных экспериментов.

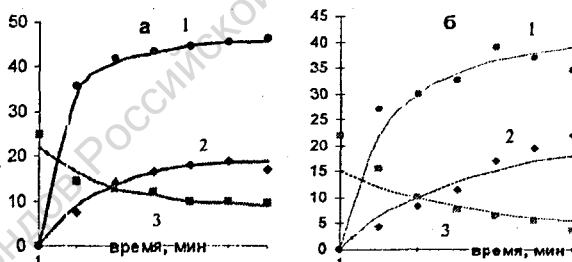


Рисунок 6 – Изменение состава углеводов при осахаривании ячменным солодом (а) и культурой *Asp. oryzae* (б): 1-глюкоза; 2-мальтоза; 3-декстрины;

○, □, ◇ – соответствующие экспериментальные точки. Результаты сравнительного анализа (рис. 6) показывают, что качественно и количественно математическая модель соответствует условиям корректности в целом.

В четвертой главе предложен комплексный косвенный показатель, характеризующий динамику процесса осахаривания крахмалсодержащего сырья – величина потребляемой энергии, оценивающий вязкость зерновых замесов, и

разработана экспериментальная автоматизированная установка для контроля вязкости затора в реальном масштабе времени.

Предложенная экспериментальная автоматизированная установка является своеобразным датчиком процесса осахаривания крахмалсодержащего сырья. Сопоставляя графики зависимости потребляемой мощности от времени (рис. 7), получаемые при использовании установки, и графики, получаемые при решении системы дифференциальных уравнений (рис. 4-6), можно судить о скорости, качестве протекания наблюдаемого процесса, выполнять прогноз и вносить необходимые коррективы.

Использование математической модели в комплексе с экспериментальной автоматизированной установкой позволяет осуществлять управление (рис. 8) и мониторинг процесса осахаривания крахмалсодержащего сырья.

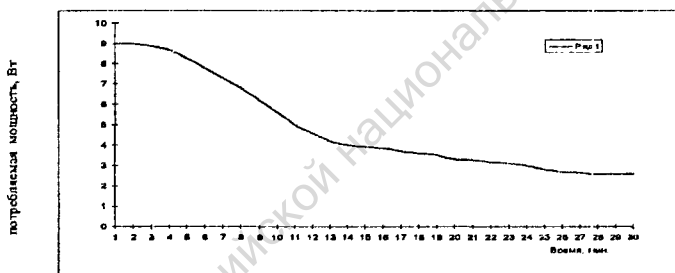


Рисунок 7 – Изменение мощности, затрачиваемой на перемешивание, при внесении ферментов (натурный эксперимент)

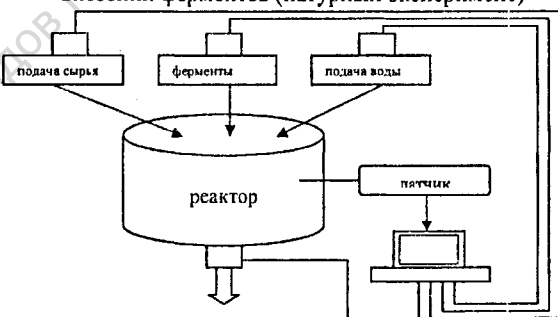


Рисунок 8 – Схема управления процессом осахаривания крахмалсодержащего сырья

Если процесс осахаривания протекает в нормальном режиме, график зависимости потребляемой мощности от времени, косвенно характеризующий

процесс, соответствует эталонному, который может быть получен предварительно при проведении лабораторных опытов в условиях, приближенных к идеальным. Сопоставление с графиками, получаемыми при решении системы дифференциальных уравнений разработанной математической модели, позволяет судить о соотношениях концентраций различных компонентов фермент-субстратного комплекса в любой момент времени. Общая схема мониторинга (рис. 8) включает в себя: наблюдение за ходом процесса осахаривания и факторами, воздействующими на него, с помощью разработанной экспериментальной установки;

- оценка динамики образования глюкозы, мальтозы, белкового компонента на основе расчетов по предлагаемой модели осахаривания крахмалсодержащего сырья;
- прогноз состояния зернового суслу в результате протекания процесса осахаривания, оценка этого состояния и внесение необходимых коррективов с целью оперативного контроля за качеством его протекания.

Заключение

В диссертационной работе проведено математическое моделирование кинетики явлений переноса при биосинтезе биохимических систем в реакторах периодического действия с перемешиванием, комплексно учитывающее все участвующие в процессе компоненты. В итоге получены следующие научные и практические результаты:

1. С использованием кинетического подхода и биохимической модели деструкции крахмалсодержащего сырья в гидродинамических условиях, близких к идеальному перемешиванию, синтезирована математическая модель биохимических превращений, представленная нелинейно-алгебраической системой дифференциальных уравнений в обыкновенных производных в виде задачи Коши.

2. Обоснована необходимость учета при математическом моделировании процесса осахаривания белкового компонента, оказывающего значительное влияние на эффективность процесса осахаривания, а, следовательно, на увеличение выхода спирта и уменьшение количества ферментов.

3. Найден способ сокращения числа кинетических параметров предложенной математической модели путем рассмотрения асимптотических режимов соответствующих физическому смыслу задачи и соответствующих в одном случае избытку ферментов в системе, а в другом их недостатку. Это дало возможность наметить пути верификации кинетических параметров через конечные значения глюкозы и мальтозы в рассматриваемом в качестве примера процессе осахаривания в бродильном производстве.

4. Разработана математическая модель процесса осахаривания крахмалсодержащего сырья в условиях избыточности ферментов и получено аналитическое решение линеаризованной системы уравнений математической модели для случая избытка ферментов в предположении того, что скорости разложения крахмала на декстрины, глюкозу и мальтозу эквивалентны.

5. Разработана математическая модель процесса осахаривания крахмалсодержащего сырья в условиях недостаточности ферментов и получено приближенное решение системы уравнений математической модели для случая недостаточности ферментов с учетом того, что скорости потери активности ферментов одного порядка.

6. Разработанный алгоритм решения нелинейной системы дифференциальных уравнений, которой представляется математическая модель биосинтеза в реакторах периодического действия с перемешиванием, является устойчивым и сходящимся, так как основан на классической схеме интегрирования Рунге - Кутты. Проведённые вычислительные эксперименты с помощью предметно-ориентированной программы позволили установить качественную её адекватность реальному процессу осахаривания.

7. Для идентификации параметров модели были проведены эксперименты на специально разработанной пилотной установке. По кинетике изменения концентрационных показателей разработана оригинальная методика определения ключевых кинетических коэффициентов модели. Сравнение вычислительных расчетов по модели с помощью найденных параметров и экспериментальных данных показали количественную адекватность предлагаемого подхода.

Отклонение экспериментальных и расчетных данных в терминах близости экспериментальных и расчетных кривых не превысило 15%.

8. Осуществленные экспериментальные исследования показали обоснованность гипотезы взаимосвязи между концентрацией крахмала в субстрате и его вязкостью, что дало возможность разработать новый способ оперативного контроля за процессом осахаривания по изменению расходуемой мощности на перемешивание субстрата, позволяющий свести к минимуму использование трудоемких и длительных измерений химическими и биохимическими методами.

9. Предложена схема мониторинга процесса осахаривания и принципы управления им с использованием комплекса разработанных математических моделей.

Список публикаций по теме диссертационной работы

Статьи в периодических научных изданиях, рекомендованных ВАК РФ:

1. Солонинов, Д.А. Моделирование процесса осахаривания крахмалсодержащего сырья с учетом белкового компонента [Текст] / Д.А. Солонинов, О.С. Мезенцева // Обзорение прикладной и промышленной математики. Т.15, вып. 1. – М.: Издательство «ТВП». – 2008. – С. 176-177.

2. Востриков, С.В. Факторы, влияющие на вязкость пшеничных замесов [Текст] / С.В. Востриков, А.Н. Яковлев, М.А. Бушин, Д.А. Солонинов // Производство спирта и ликероводочных изделий. – М.: ООО «Пищпромиздат». – 2006. - №1, С. 32-33.

Публикации в периодических научных изданиях и сборниках по итогам проведения международных и всероссийских научно-практических конференций:

3. Солонинов, Д.А. Математическая модель деструкции зернового сырья при комплексном применении амилолитических и протеолитических ферментов в спиртовом производстве [Текст] / С.В. Кулакова, Д.А. Солонинов, С.В. Востриков, А.Н. Яковлев //Техника и технология. № 6. – 2006. – С. 123 – 128.

4. Солонинов, Д.А. Математическая модель процесса деструкции зернового сырья при комплексном применении амилолитических и протеолитических ферментных препаратов [Текст] / Д.А. Солонинов, О. С. Мезенцева // Проблемы обеспечения

устойчивого экономического роста аграрного сектора экономики. Сборник научных трудов по материалам Всероссийской научно-практической конференции. – Ставрополь: Аргус, 2006. – С. 126-131.

5. Солонинов, Д.А. Исследование и математическое моделирование процесса клейстеризации крахмала [Текст] / Д.А. Солонинов, О. С. Мезенцева // Методы и алгоритмы прикладной математики в технике, медицине и экономике. Материалы VII Международной научно-практической конференции. Ч.1. – Новочеркасск: ЮРГТУ (НПИ), 2007. – С. 46-50.

6. Солонинов, Д.А. Математическая модель процесса осахаривания крахмалсодержащего сырья и реализация ее возможностей в производственной деятельности [Текст] // Инфокоммуникационные технологии в науке, производстве и образовании. Сборник научных трудов по материалам III Международной научно-технической конференции. – Ставрополь: изд-во СевКавГТУ, 2008. – С. 303-308.

Депонированные работы, патенты:

7. Солонинов, Д.А. Математическое моделирование процесса деструкции крахмалсодержащего сырья. Деп. в ВИНТИ №495-В2007. Ставрополь, 2007.– С.1-12.

8. Солонинов, Д.А. Описание программно-технического комплекса контроля процесса осахаривания крахмалсодержащего сырья / Д.А. Солонинов, О. С. Мезенцева // Деп. в ВИНТИ № 496 – В2007. Ставрополь, 2007.– С. 1-20.

9. Солонинов, Д.А. Математическое моделирование кинетики явлений переноса при биосинтезе биохимических систем в реакторах периодического действия с перемешиванием / Д.А. Солонинов // Деп. в ВИНТИ № 560 – В2009. Ставрополь, 2009.– С. 1-17.

10. Пат. 2339933, Российская федерация С 1 G01N 11/4. Способ контроля степени осахаривания крахмалсодержащего сырья / Д.А. Солонинов, С.В. Востриков, М.А. Бушин; заявитель и патентообладатель СевКавГТУ.- №2007105417/28; заявл.13.02.2007; опубл. 27.11.2008, Бюл. № 33 – 7.: ил.

Из фондов Российской национальной библиотеки

Печатается в авторской редакции

Подписано в печать 23.12.2009

Формат 60x84 1/16 Усл. печ. л. – 1,4 Уч.- изд. л. – 0,9

Бумага офсетная. Печать офсетная. Заказ № 415 Тираж 100 экз.
ГОУ ВПО «Северо-Кавказский государственный технический университет»
355028, г. Ставрополь, пр. Кулакова, 2

Издательство Северо-Кавказского государственного
технического университета
Отпечатано в типографии СевКавГТУ

Из фондов Российской национальной библиотеки

10 - 14749

2010A

14749

Из фондов Российской национальной библиотеки