

УДК 519.95+62-501.72+574.6

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ БИОЛОГИЧЕСКИХ И БИОТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ

© А.А. Арзамасцев

Ключевые слова: математическая модель; биологический объект; параметрическая идентификация; вычислительный эксперимент.

Приведены впервые разработанные автором математические модели различных биологических и биотехнологических объектов. Данные модели были использованы для получения новой информации в научной и производственной сферах.

§ 1. Математическая модель информационной системы и ее использование для объяснения возможной причины четырехбуквенности генетического кода

В различных естественных и искусственных информационных системах имеется различное число букв. Например, лингвистические системы: в русском языке 33 буквы, английском – 26, а в 40-томном словаре китайского языка «Чжунвэнь дацзидянь» приведено 49905 иероглифов. Компьютерные системы базируются на двухбуквенном алфавите, но известны компьютеры, работающие в троичной системе счисления. Информационная система живых организмов базируется на записи информации в цепочках ДНК (РНК) с помощью четырехбуквенного алфавита, буквами которого являются химические основания – нуклеотиды: аденин, цитозин, гуанин, тимин (урацил).

Возникает естественный вопрос: почему в той или иной информационной системе имеется определенное число букв? Попробуем ответить на него при помощи построения простой математической модели информационной системы и ее анализа.

Любая информационная система состоит как минимум из двух компонент – информационной последовательности (программы), в которой с помощью знаков (букв) используемого алфавита записывается информация, и декодирующей машины, переводящей данное сообщение на язык конечного пользователя. Наличие этих компонент прослеживается во всех известных информационных системах – компьютерной, лингвистических, биологической.

Возникает необходимость в нахождении компромисса между малым количеством букв в алфавите (n), что упрощает декодирующую машину, но приводит к большим по длине информационным последовательностям, и большим n , что сокращает длину последовательности, но усложняет информационную машину. Общим итогом такой оптимизации (компромисса) является получение минимума одного из параметров суммарной информационной компоненты, представляющей собой сумму соответствующих параметров декодирующей машины и самой программы (рис. 1.1).

Пусть необходимо закодировать в информационную последовательность N различных возможностей.

Если для этой цели будет использован n -буквенный алфавит, то длину информационной последовательности можно вычислить по формуле:

$$L = \log_n(N) = \ln(N)/\ln(n). \quad (1.1)$$

Объем записи (программы) на носителе пропорционален ее длине, то есть:

$$V_i = k_1 / \ln(n). \quad (1.2)$$

Сложность, а следовательно, и объем информационной машины, осуществляющей расшифровку информации, тем больше, чем больше n . Предполагая,

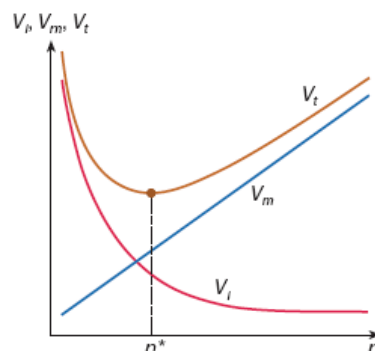


Рис. 1.1. Зависимости объемов V_i , V_m и общего объема информационной составляющей V_t (по оси ординат), от числа букв n в алфавите

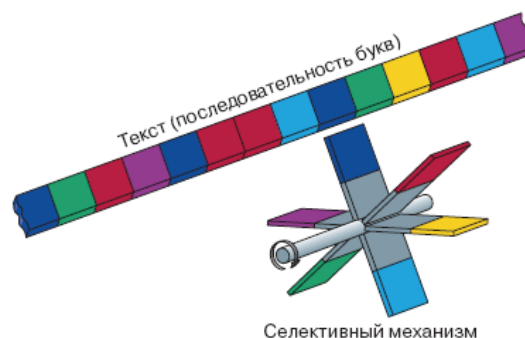


Рис. 1.2. Конструкция декодирующей машины

что такая машина устроена по принципу револьверного барабана, т. е. имеется n селективных элементов, каждый из которых настроен на идентификацию определенной буквы, получим, что объем машины:

$$V_m = k_2 n. \quad (1.3)$$

«Конструкция» такой машины схематично показана на рис. 1.2. Буквы условно показаны различными цветами. Их идентификация заключается в повороте вала селективного механизма до совпадения цветов в последовательности и селективном механизме.

В уравнениях (1.2) и (1.3) k_1 , k_2 – константы пропорциональности, зависящие от способа реализации информационной системы.

Полный объем, занимаемый информационной системой, будет:

$$V_i = V_i + V_m = k_1 \ln(n) + k_2 n. \quad (1.4)$$

Зависимости от n двух составляющих (V_i и V_m) показаны на графиках (рис. 1.1). Из графиков видно, что зависимость $V_i(n)$ является убывающей, в то время как $V_m(n)$ возрастает, так что суммарная зависимость $V_i(n)$ всегда является унимодальной, имеющей один минимум, соответствующий наиболее компактной реализации информационной системы.

Таким образом, существует оптимальное число букв в алфавите информационной системы – n^* (рис. 1.1), обеспечивающее ее наиболее компактную реализацию.

Замечания. 1) Общая картина, показанная на рис. 1.1, сохранится и в случае нелинейной зависимости $V_m(n)$; важно, чтобы эта зависимость являлась во всех случаях возрастающей. 2) Коэффициент k_1 зависит от общего числа возможностей N , закодированных в программе. Это означает, что при использовании одной декодирующей машины оптимальное количество букв в алфавите информационной системы зависит от длины сообщения. 3) По всей видимости, для многих информационных систем компактность их реализации может означать не только «экономия свободного пространства», но и такие важные факторы, как энерго- и материалоемкость системы, а также относительную долю используемого пространства для случая, когда информационная система представляет собой часть объекта, для нужд которого она создана.

В качестве примера для иллюстрации изложенных здесь принципов покажем, что информационная система биологических объектов, по всей видимости, имеет оптимальное число букв [2, 3]. Напомним, что информационной последовательностью в биологической информационной системе является последовательность нуклеотидов в ДНК, а декодирующей машиной рибосома [1, 4].

Покажем, что минимум суммарного объема информационной составляющей для некоторых биологических объектов приходится на $n = 4$. Если окажется, что это так, то, следовательно, Природа, проектируя молекулярный механизм передачи информации, пыталась осуществить его компактную реализацию, решая таким образом задачу одномерной оптимизации.

Проведем идентификацию параметров и коэффициентов уравнений (1.2) – (1.4) на основе известных дан-

ных так, чтобы уравнение (1.4) представляло собой функцию только одной переменной – n . Коэффициент k_1 определим из рассмотрения вторичной структуры ДНК (радиус цилиндра равен примерно 1 нм, а длина ДНК, приходящаяся на один нуклеотид, составляет 0,34 нм) [1, 5]. Поскольку информационной клеткой является рибосома, линейный размер которой составляет примерно $18 \cdot 10^{-9}$ м, а объем $3 \cdot 10^{-24}$ м³ [8], найдем и k_2 . С учетом этих значений получим окончательное выражение для V_i :

$$V_i = [10^{-3} \ln(N) / \ln(n) + 0,75 n] \cdot 10^{-24}. \quad (1.5)$$

Функция, представленная уравнением (5), имеет минимум тогда, когда минимально выражение, стоящее в квадратных скобках. Найдем, при каком n это выражение минимально. Для этого определим производную dV_i/dn и приравняем ее к нулю

$$\frac{dV_i}{dn} = -\frac{10^{-3} \ln(N)}{n \cdot \ln^2(n)} + 0,75 = 0. \quad (1.6)$$

Последнее уравнение возможно решить лишь численными методами, и если доверить это дело компьютеру, то при $\ln(N) = 5765$ действительно получим $n \sim 4$.

Теперь стоит обсудить приведенную здесь величину $\ln(N)$. Напомним, что N представляет собой общее количество закодированных в геноме возможностей. Нетрудно показать, что приведенная величина $\ln(N)$ соответствует цепочке ДНК длиной примерно 4200 пар нуклеотидов (букв). Программа такой длины характерна для простейших организмов, ДНК митохондрий и некоторых вирусов. Значения суммарного объема V_i , соответствующие значениям n , равным 3, 4 и 5, практически одинаковы, т. е. чувствительность V_i к n при $3 < n < 5$ крайне мала. Поэтому могло бы быть выбрано практически любое значение n из этой области. Реализация выбора в пользу $n = 4$ позволяет получить дополнительную степень свободы при небольших изменениях длины цепи ДНК, без нарушения общей оптимальности. Так, при значениях параметров, принятых в этой статье, минимум выражений (1.4) и (1.5) достигается при $n = 4$ (при условии, что n – целое, если длина цепочки ДНК изменяется в довольно широких пределах – от 3100 до 5400 оснований или пар оснований).

Таким образом, исходя из самых общих соображений о конструкции информационной системы, показано, что в алфавите любой информационной системы существует оптимальное число букв, обеспечивающее ее наиболее компактную реализацию. Показано также, что четырехбуквенный код, имеющий место в информационных последовательностях ДНК, является оптимальным в смысле минимума объема суммарной информационной «начинки» клетки. Указанная оптимальность выполняется лишь для простейших ДНК. Этот факт может служить косвенным доказательством того, что именно такие ДНК (а не более сложные) являлись объектом «проектирования» на одном из ранних этапов биологической эволюции.

ЛИТЕРАТУРА К § 1

1. Албертс Б., Брей Д., Льюис Дж., Рэфф М., Робертс К., Уотсон Дж. Молекулярная биология клетки. Т. 1–5. М.: Мир, 1986.

2. Арзамасцев А.А. Почему код ДНК содержит четыре буквы? // Журнал Общей Биологии. 1995. Т. 56. № 4. С. 405-410.
3. Арзамасцев А.А. Природа оптимальности кода ДНК // Биофизика. 1997. Т. 42. Вып. 3. С. 611-614.
4. Волькенштейн М.В. Биофизика. М.: Наука, 1988.
5. Флиндрт Р. Биология в цифрах. М.: Мир, 1992.

§ 2. Математические модели аутостабилизации температуры в биотехнологических объектах¹

Модель саморегулирования температуры в непрерывном биореакторе. Математическая модель, которая использована в данном разделе, описана в работах (Arzamastsev A.A. and Kristapson M.G. 1993, Арзамасцев А.А. 1996). Ранее ее применяли для анализа периодических режимов. В данной диссертации с ее помощью будут исследованы непрерывные режимы работы биореактора.

Модель имеет следующий вид:

$$\frac{dT}{dt} = \mu_r \frac{XH}{c\rho} - \frac{kp(T - T_{ext})}{c\rho V} + Q_T \quad (2.1)$$

$$\frac{dX}{dt} = \mu_r X + Q_X \quad (2.2)$$

$$\frac{dS}{dt} = -\frac{\mu_r}{Y} X + Q_S \quad (2.3)$$

$$\frac{d\mu'_m}{dt} = \begin{cases} \left[\mu_m(T) - \mu'_m \right] / \Theta_1, & \frac{d\mu'_m}{dt} \geq 0 \\ \left[\mu_m(T) - \mu'_m \right] / \Theta_2, & \frac{d\mu'_m}{dt} < 0 \end{cases} \quad (2.4)$$

$$\frac{dC}{dt} = K_L a (C^* - C) - q_{O_2} + Q_C \quad (2.5)$$

с начальными условиями:

$$T(0) = T_0, \quad X(0) = X_0, \quad S(0) = S_0, \\ \mu'_m(0) = \mu'_{m0}, \quad C(0) = C_0. \quad (2.6)$$

$$\mu_r = \frac{\mu'_m SC}{(S + K_S)(C + K_C)} \quad (2.7)$$

$$q_{O_2} = X(\mu_r \beta + a) \quad (2.8)$$

$$\mu_m(T) = a_1 \exp(-E_1/RT) - a_2 \exp(-E_2/RT) \quad (2.9)$$

$$Y(T) = 1,4765 - 0,02353(T - 273,15) \quad (2.10)$$

$$C^*(T) = 14,438 - 0,34755 \cdot T + \\ + 4,6557 \cdot 10^{-3} \cdot T^2 - 2,62965 \cdot 10^{-5} \cdot T^3 \quad (2.11)$$

¹ Данный раздел написан совместно с аспиранткой Е.Н. Альбицкой.

$$Q_T = F(T_{in} - T)/V = D(T_{in} - T) \quad (2.12)$$

$$Q_X = F(X_{in} - X)/V = D(X_{in} - X) \quad (2.13)$$

$$Q_S = F(S_{in} - S)/V = D(S_{in} - S) \quad (2.14)$$

$$Q_C = F(C_{in} - C)/V = D(C_{in} - C) \quad (2.15)$$

Идентификация параметров математической модели произведена в работах (Arzamastsev A.A. and Kristapson M.G. 1993, Арзамасцев А.А. 1996) на основе экспериментальных данных (Рылкин С.С. и др. 1973). Параметры модели приведены в табл. 2.1.

В модели использовали следующие начальные условия: $T_0 = 32^\circ\text{C}$, $X_0 = 15$ г/л, $S_0 = 50$ г/л, $\mu_0' = 0$ ч⁻¹, $C_0 = 7,22$ мг/л и концентрации биомассы и кислорода во входном потоке биореактора: $X_{in} = 0$ г/л, $C_{in} = 0$ мг/л.

Математическая модель реализована в виде программы на языке Borland Delphi. Для решения системы дифференциальных уравнений использовали метод Рунге – Кутты четвертого порядка с постоянным шагом. Шаг был выбран из соображений необходимой погрешности решения дифференциальных уравнений.

Исследовали поведение объекта в условиях различных температур во входном потоке, внешних температур, концентраций субстрата во входном потоке и удельных разбавлений.

На рис. 2.1 представлена зависимость температуры в биореакторе от времени при различных значениях температуры во входном потоке при: а) – $T_{ext} = 33^\circ\text{C}$ и б) – $T_{ext} = 20^\circ\text{C}$. Из рисунков видно, что аутостабилизация температуры в непрерывном режиме имеет место не во всех случаях.

Таблица 2.1

Параметры	Обозначения	Значения	Единицы измерения
Суммарный тепловой эффект биохимической реакции	H	17000	кДж/кг
Константы Михаэлиса для:			
- субстрата,	K_S	1,5	г/л
- кислорода	K_C	0,9	г/л
Постоянные времени:	Θ_1	10,5	ч
	Θ_2	0,2	ч
Предэкспоненциальные множители:	a_1	$4,432 \cdot 10^{15}$	ч ⁻¹
	a_2	$2,712 \cdot 10^{31}$	ч ⁻¹
Энергии активации:	E_1	95000	кДж/кмоль
	E_2	190000	кДж/кмоль
Удельная теплоемкость жидкой фазы	c	4,19	кДж/кг·К
Плотность жидкой фазы	ρ	1000	кг/м ³
Объем биореактора	V	$1,5 \cdot 10^{-3}$	м ³
Коэффициент теплопередачи через стенку	k	7,733	кДж/ч·К
Поверхность теплообмена реактора	P	0,073	м ²
Потребление кислорода на:			
- эндогенное дыхание,	α	0,24	мг/г·ч
- экзогенное дыхание	β	1150	мг/г
Объемный коэффициент теплопередачи	$K_L a$	250	ч ⁻¹

Так, в случае 1 (рис. 2.1 а) саморегулирование наблюдается, начиная с нулевой температуры во входном потоке, что фактически соответствует замерзанию жидкой фазы. Однако выход реактора на режим аутостабилизации достаточно длителен и составляет около 10 часов. Время выхода на режим аутостабилизации сокращается по мере увеличения температуры жидкости во входном потоке. В некоторых случаях, в частности при температурах во входном потоке 0–20 °С, наблюдается первоначальное снижение температуры в реакторе, и только после того как биологический объект выходит на активный режим по скорости процесса, температура вновь поднимается.

При высоких температурах жидкой фазы во входном потоке (30 °С и выше) температура в биореакторе начинает повышаться сразу. Наблюдается перерегулирование, т. е. сначала температура превышает супраоптимальную температуру в биореакторе примерно на 1,5–2 °С, а затем выходит на ее уровень. При температурах жидкой фазы во входном потоке 50 °С и выше биологический объект «не справляется» со значительным количеством тепла, приходящего извне, и наблюдаемая в реакторе температура превышает температуру саморегулирования, составляющую в данном случае 40,5 °С. Однако на кривых 5, 6 также заметна тенденция биологического объекта к выравниванию температуры. Эта способность теряется при $T_{in} = 60$ °С (кривая 7).

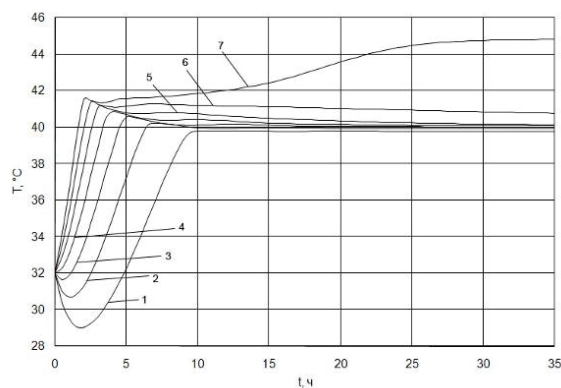
Таким образом можно сделать заключение, что при довольно значительных изменениях температуры во входном потоке – от 0 до 50 °С биологический объект обладает способностью к самопроизвольному выравниванию этого фактора.

Рис. 2.1 б) отличается от рис. 2.1 а) значением величины внешней температуры. Видно, что при $T_{ext} = 20$ °С в случае 1 при малом значении температуры во входном потоке биореактор не выходит на режим аутостабилизации. А при значениях T_{in} от 2 до 60 °С объект имеет способность к саморегулированию температуры. Далее, при $T_{in} = 60$ °С и выше эта способность теряется.

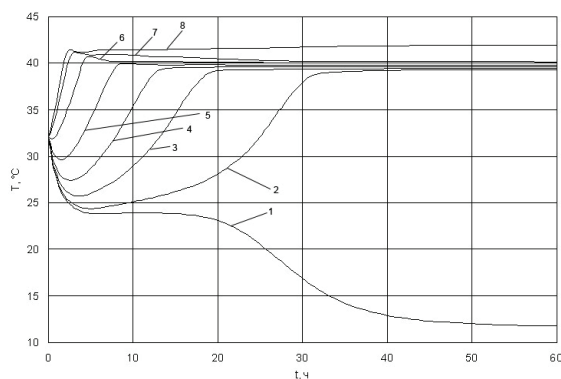
В целом, для зависимостей, приведенных на рис. 2.1 а), время выхода на режим саморегулирования при одинаковых значениях прочих параметров меньше, чем для рис. 2.1 б).

На рис. 2.2 показано, как меняется температура в биореакторе при различных внешних температурах. Видно, что при значении внешней температуры 5 °С биологический объект не справляется с ее выравниванием внутри биореактора, хотя такая тенденция наблюдается во временном интервале от 5 до 15 часов. Кривая 2, соответствующая $T_{ext} = 10$ °С (рис. 2.2), показывает, что вначале температура биологического объекта также начинает снижаться. Однако по мере активизации ферментных систем микроорганизмов, биологический объект справляется с неблагоприятными воздействиями внешней среды и выравнивает температуру до заданного уровня. Такая же тенденция наблюдается и при температурах 20–30 °С. При больших температурах биологический объект стремится выравнивать температуру в сторону снижения. Это заметно на кривых 4–6 при температурах внешней среды 30–50 °С. На кривой 7, когда температура внешней среды становится более 60 °С, видно, что биологический объект «не справляется» и температура в реакторе возрастает.

На рис. 2.3 а) показана обобщенная зависимость температуры внутри реактора от внешней температуры, полученная на основе 14 вычислительных экспериментов. В качестве температуры внутри реактора брали ее значение в установившемся режиме, который в вычислительных экспериментах наблюдался при $t > 180$ ч.



а)



б)

Рис. 2.1. Зависимость температуры в биореакторе от времени при различных значениях температуры во входном потоке. $D = 0,07$ ч⁻¹, $S_m = 50$ г/л. а) – $T_{ext} = 33$ °С. Номера линий соответствуют различным значениям T_{in} : 1 – 0, 2 – 10, 3 – 20, 4 – 30, 5 – 40, 6 – 50, 7 – 60 °С. б) – $T_{ext} = 20$ °С. Номера линий соответствуют различным значениям T_{in} : 1 – 1, 2 – 2, 3 – 5, 4 – 10, 5 – 20, 6 – 40, 7 – 60, 8 – 70 °С

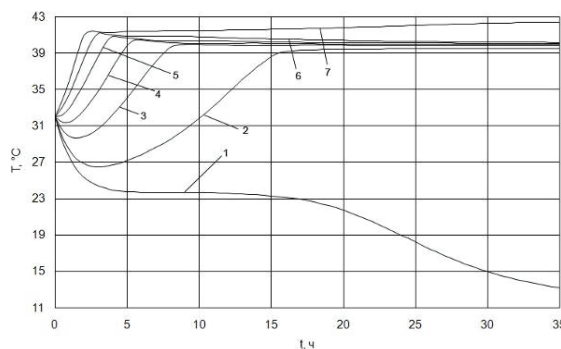


Рис. 2.2. Зависимость температуры в биореакторе от времени при различных значениях внешней температуры. $T_{in} = 20$ °С, $D = 0,07$ ч⁻¹, $S_m = 50$ г/л. Номера линий соответствуют различным значениям T_{ext} : 1 – 5, 2 – 10, 3 – 20, 4 – 30, 5 – 40, 6 – 50, 7 – 60 °С

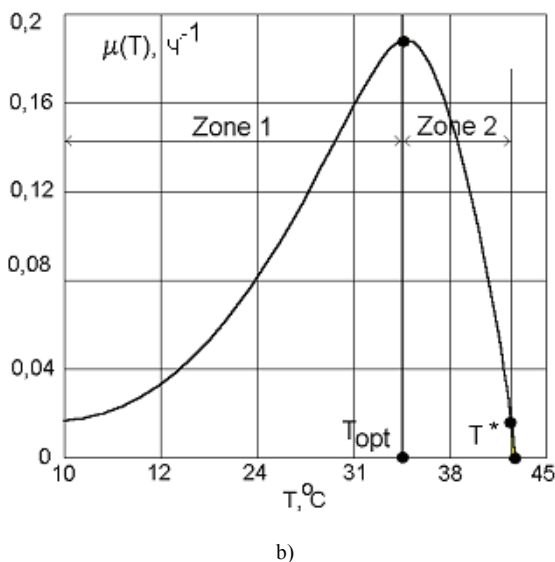
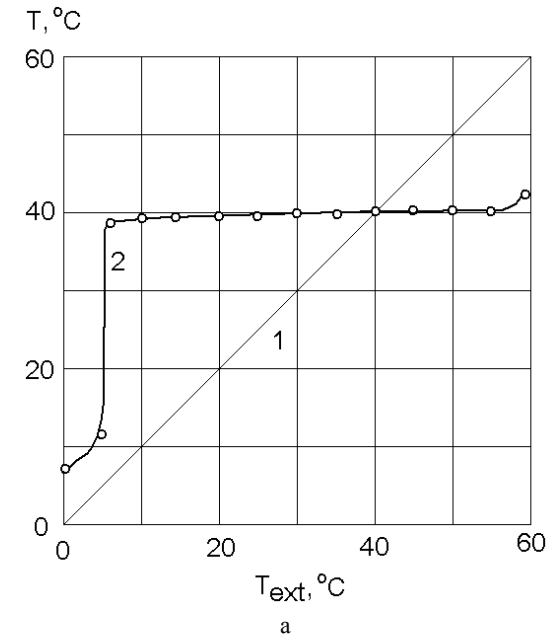


Рис. 2.3. а) – Зависимость температуры внутри биореактора от внешней температуры. $T_{in} = 20^\circ\text{C}$, $D = 0,07\text{ ч}^{-1}$, $S_{in} = 50\text{ г/л}$. б) – Зависимость максимальной удельной скорости роста микроорганизмов от температуры (уравнение (9) при $a_1 = 4,432 \cdot 10^{15}\text{ ч}^{-1}$, $a_2 = 2,712 \cdot 10^{31}\text{ ч}^{-1}$, $E_1 = 95000\text{ кДж/кмоль}$, $E_2 = 190000\text{ кДж/кмоль}$). T^* – супраоптимальная температура

Прямая линия 1 соответствует полностью инертному объекту, линия 2 – объекту, способному самопроизвольно поддерживать температуру на уровне $39,5\text{--}40^\circ\text{C}$. Анализ этого рисунка позволяет сделать вывод о том, что биологический объект сохраняет способность к саморегулированию при внешних температурах от 6 до 55°C , в то время как диапазон активного роста таких микроорганизмов составляет $24\text{--}42^\circ\text{C}$ – рис. 2.3 б). Отметим, что супраоптимальная температура примерно на $5,5^\circ\text{C}$ превышает температуру, необходимую для максимальной скорости роста таких микроорганизмов.

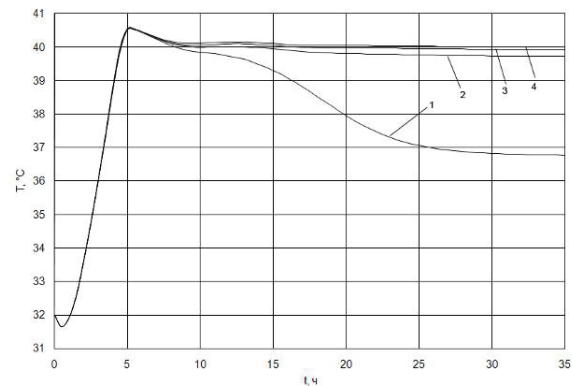


Рис. 2.4. Зависимость температуры в биореакторе от времени при различных значениях концентрации субстрата во входном потоке. $T_{ext} = 33^\circ\text{C}$, $T_{in} = 20^\circ\text{C}$, $D = 0,07\text{ ч}^{-1}$. Номера линий соответствуют различным значениям S_{in} : 1 – 10, 2 – 20, 3 – 30, 4 – 50 г/л

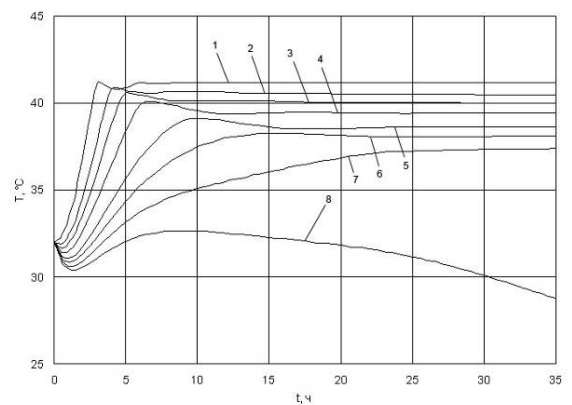


Рис. 2.5. Зависимость температуры в биореакторе от времени при различных значениях удельного разбавления. $T_{ext} = 33^\circ\text{C}$, $T_{in} = 20^\circ\text{C}$, $S_{in} = 50\text{ г/л}$. Номера линий соответствуют различным значениям D : 1 – 0,01, 2 – 0,05, 3 – 0,07, 4 – 0,09, 5 – 0,11, 6 – 0,12, 7 – 0,13, 8 – 0,14 ч⁻¹

Очевидно, что на процесс саморегулирования температуры в биореакторе существенным образом должна влиять концентрация субстрата во входном потоке – основного источника энергии. На рис. 2.4 показана зависимость температуры в биореакторе от времени при различных значениях концентрации субстрата во входном потоке. Видно, что объект обладает способностью к саморегулированию при концентрации субстрата, начиная с 20 г/л . При больших концентрациях S_{in} кривые имеют идентичный характер. Однако при низких значениях концентрации субстрата (10 г/л), в результате лимитирования скорости процесса и скорости тепловыделения этим фактором, биологический объект сначала выходит на заданный температурный режим, а потом, ввиду ограниченности скорости тепловыделения, температура в реакторе начинает снижаться и достигает уровня, не соответствующего температуре аутостабилизации. В других случаях, при концентрации субстрата $20\text{--}50\text{ г/л}$ во входном потоке, объект выходит на квазистатический режим и сам поддерживает температуру.

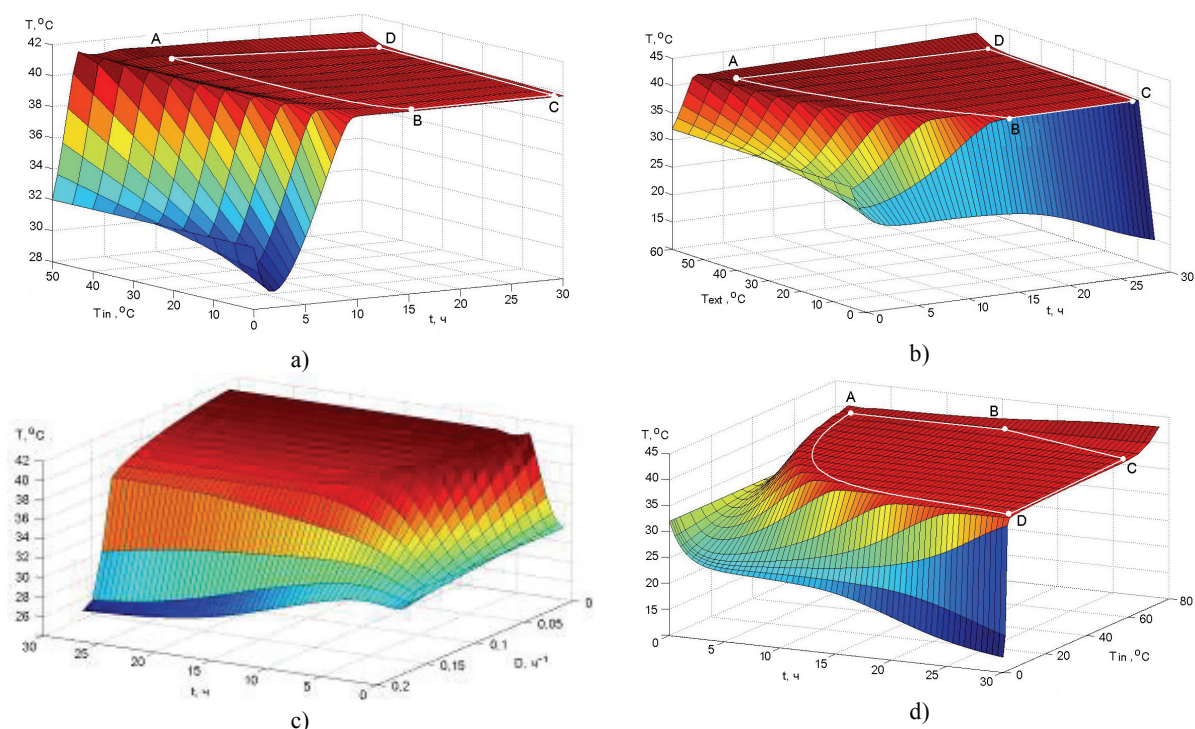


Рис. 2.6. Зависимость температуры в биореакторе от времени и других факторов: а) – температуры во входном потоке при $T_{ext} = 33\text{ }^{\circ}\text{C}$, $D = 0,07\text{ ч}^{-1}$, $S_{in} = 50\text{ г/л}$; б) – внешней температуры при $T_{in} = 20\text{ }^{\circ}\text{C}$, $D = 0,07\text{ ч}^{-1}$, $S_{in} = 50\text{ г/л}$; в) – удельного разбавления при $T_{ext} = 33\text{ }^{\circ}\text{C}$, $T_{in} = 20\text{ }^{\circ}\text{C}$, $S_{in} = 50\text{ г/л}$; д) – температуры во входном потоке при $T_{ext} = 20\text{ }^{\circ}\text{C}$, $D = 0,07\text{ ч}^{-1}$, $S_{in} = 50\text{ г/л}$

Удельным разбавлением называется отношение расхода жидкой фазы (субстрата) через биореактор, работающий в непрерывном режиме, к его объему. Поскольку эта величина обратно пропорциональна среднему времени пребывания жидкой фазы в реакторе, то способность биообъекта к саморегулированию температуры должна существенным образом зависеть от этого параметра.

На рис. 2.5 показана зависимость температуры в биореакторе от времени при различных значениях удельных разбавлений. Видно, что с увеличением удельного разбавления значение супраоптимальной температуры может снижаться, что не наблюдалось при исследовании саморегулирования в периодическом режиме.

Данный вывод является очень важным, поскольку супраоптимальная температура, наблюдаемая для биологического объекта в периодическом режиме, существенно отличается от температуры, соответствующей максимальной скорости роста микроорганизмов (Arzamastsev A.A. and Kristapson M.G. 1993, Арзамасцев А.А. 1996) (см. также рис. 2.3 б). Это отличие составляет в среднем $8,8\text{ }^{\circ}\text{C}$ для прокариот и $12,5\text{ }^{\circ}\text{C}$ для эукариот (Arzamastsev A.A. 1994). Данное обстоятельство не позволяет непосредственно использовать способность биологических объектов к саморегулированию для управления технологическими процессами. Однако, учитывая, что, например, при $D = 0,13\text{ 1/ч}$ (кривая 7 (рис. 2.5)) супраоптимальная температура становится равной $37,5\text{ }^{\circ}\text{C}$, можно сказать, что этот режим обеспечивает одновременно и максимальную скорость роста микроорганизмов (см. рис. 2.3 б). Указанное обстоятельство в принципе позволяет непосредственно ис-

пользовать саморегулирование температуры для ее поддержания в технологических процессах.

На рис. 2.6 а) – д) показаны зависимости температуры внутри биореактора от времени и других параметров процесса. Часть горизонтальной плоскости, ограниченная линией ABCD, представляет на этих рисунках область, в которой наблюдается саморегулирование. Интересно отметить, что лишь при различных удельных разбавлениях D (рис. 2.6 в) такая плоскость не является горизонтальной, а наклонена под некоторым углом к оси D , что свидетельствует о существовании зависимости супраоптимальной температуры от этого параметра. Из рис. 2.6 а) и б) видно, что характер выхода на режим аутостабилизации различен. В некоторых случаях сначала наблюдается снижение температуры, а затем ее рост до значения T^* , в то время как в других случаях сразу наблюдается повышение температуры с последующим выходом на значение T^* .

Как было установлено из рис. 2.5 и рис. 2.3 б), в отличие от биореактора периодического типа (Arzamastsev A.A. and Kristapson M.G. 1993, Арзамасцев А.А. 1996), в биореакторе непрерывного типа в процессе аутостабилизации могут наблюдаться различные супраоптимальные температуры. Например, из рис. 2.6 в) видно, что при различных удельных разбавлениях температура может быть в принципе снижена с $41,5$ до $37,5\text{ }^{\circ}\text{C}$. Эта супраоптимальная температура ($37,5\text{ }^{\circ}\text{C}$) в значительно большей степени соответствует максимальной скорости роста указанных биологических объектов и как следствие удельной продуктивности процесса. Поскольку биохимические реакторы непрерывного типа обычно работают в статическом режиме, было бы желательно проанализировать статические

режимы по основным параметрам, таким как концентрация биомассы, субстрата, растворенного кислорода, а также удельная продуктивность для этого реактора. На рис. 2.7 и рис. 2.8 показаны расчеты статических элементов, определенных по модели (2.1) – (2.15) при $\frac{dX}{dt} = \frac{dC}{dt} = \frac{dS}{dt} = 0$. На рис. 2.7 эти статические режимы представлены для случая принудительного поддержания температуры на уровне, соответствующем максимальной скорости роста (см. рис. 2.3 б). На рис. 2.8 представлены те же характеристики, но при условии, что биохимический реактор сам поддерживает температуру внутри реакционного объема.

На рис. 2.7 а) и рис. 2.8 а) показана зависимость концентрации биомассы от удельного разбавления. Видно, что в режиме принудительного поддержания температуры концентрационная характеристика принимает положительные значения при значениях удельного разбавления более $0,15 \text{ ч}^{-1}$, в то время как на рис. 2.8 соответствующая характеристика принимает нулевое значение уже при D примерно $0,135 \text{ ч}^{-1}$, что соответствует режиму полного вымывания биологических объектов из биореактора. На рис. 2.7 б) и рис. 2.8 б) так же хорошо видно, что концентрационная характеристика в режиме саморегулирования температуры имеет более крутой наклон, что, в общем-то, свидетельствует о высокой скорости протекания процесса. На рис. 2.7 с), рис. 2.8 с) видно, что в режиме, когда температура поддерживается на заданном значении, концентрация растворенного кислорода при соответствующих D значительно меньше, чем на рис. 2.8 с). Это свидетельствует о том, что биохимический процесс идет более эффективно, когда температура поддерживается с помощью средств регулирования. На рис. 2.7 д), рис. 2.8 д) показаны температурные зависимости. Видно, что в первом случае температура постоянна, что совершенно естественно, поскольку она поддерживается средствами автоматизации. Во втором случае видно, что температура снижается, и при $D = 0,14 \text{ ч}^{-1}$ она принимает значение практически равное температуре на входе. Учитывая зависимость скорости роста биологических объектов от температур, показанную на рис. 2.3 б), можно констатировать, что рабочей точкой процесса в случае аутостабилизации было бы удельное разбавление = примерно $0,125 \text{ ч}^{-1}$. Однако при этом существует опасность того, что при некотором увеличении разбавления биологические объекты будут полностью вымываться из биохимического реактора. На рис. 2.4 е), 2.5 е) показаны значения удельной продуктивности, т. е. количество выработанной биомассы биологического объекта в единицу времени на единицу объема. Видно, что эти характеристики сильно различаются. В частности при принудительном термостатировании максимальное значения удельной продуктивности практически в два раза больше, чем максимальное значение удельной продуктивности в случае аутостабилизации температуры, и оно наблюдается при меньших удельных разбавлениях $0,05 \text{ ч}^{-1}$, в то время как при аутостабилизации температуры оптимальным с точки зрения удельной продуктивности является значение удельного разбавления примерно $0,125 \text{ ч}^{-1}$. Однако можно сделать вывод, что, по сравнению с биохимическим реактором периодического типа, удельная продуктивность снижа-

ется всего лишь в два раза, что в принципе делает возможным использовать самопроизвольную способность биологического объекта в поддержании температуры в различных технологиях.

На рис. 2.9 и 2.10 – а) показано изменение концентрации биомассы в реакторе в режиме аутостабилизации при различных внешних температурах (28 и 38 °C). Основное отличие наблюдается в критических значениях удельного разбавления, при котором концентрация биомассы становится равной нулю. При внешней температуре 28 °C это значение равно $0,125 \text{ ч}^{-1}$, в то время как при внешней температуре 38 °C оно увеличивается и составляет $0,15 \text{ ч}^{-1}$. Что касается уровней концентраций (рис. 2.9 и рис. 2.10 – а), то видно, что при малых значениях удельного разбавления концентрационная зависимость $X(D)$ при $T_{ext} = 28 \text{ °C}$ проходит выше, чем при $T_{ext} = 38 \text{ °C}$, т. е. в этом случае в биореакторе реализуются более высокие концентрации биомассы. Противоположные по знаку зависимости получены для концентрации субстрата. Видно, что при $T_{ext} = 28 \text{ °C}$ концентрационная кривая по субстрату проходит ниже концентрационной кривой по субстрату для $T_{ext} = 38 \text{ °C}$. Критические точки для удельного разбавления $0,125 \text{ ч}^{-1}$ и $0,15 \text{ ч}^{-1}$ аналогичны для зависимостей $X(D)$ и $S(D)$. На рис. 2.9, 2.10 с) показаны графики для концентрации растворенного кислорода. На рис. 2.9 с) зависимость $C(D)$ проходит ниже, чем на рис. 2.10 с), что говорит о более интенсивном режиме работы реактора. Это так же видно на рис. 2.9 и 2.10 – е) по удельным продуктивностям биомассы. На рис. 2.9, 2.10 – д) показаны графики изменения температуры, которая находится в обоих случаях на уровне аутостабилизации.

На рис. 2.11 и 2.12 – а) показано изменение концентрации биомассы в реакторе в режиме аутостабилизации при различных значениях температуры во входном потоке (15 и 25 °C). Основное отличие здесь также наблюдается в критических значениях удельного разбавления, при котором концентрация биомассы становится равной нулю. При температуре во входном потоке 15 °C это значение равно $0,125 \text{ ч}^{-1}$, в то время как при температуре во входном потоке 25 °C оно увеличивается и составляет $0,15 \text{ ч}^{-1}$. Уровни концентраций $X(D)$ и $S(D)$ (рис. 2.11 и рис. 2.12 – а, б) различаются несущественно, в то время как интенсивность работы реактора в первом случае выше, что можно видеть по графикам удельной продуктивности (рис. 2.11, 2.12 – е) и концентрации растворенного кислорода (рис. 2.11, 2.12 – с).

Таким образом, в данном разделе осуществлено исследование саморегулирования (аутостабилизации) температуры микроорганизмами в биореакторе непрерывного типа:

- проведен анализ явления при различных значениях параметров: внешней температуре, температуре жидкой фазы во входном потоке, концентрации субстрата и т. д., в ходе которого определены границы существования этого явления;

- обнаружено, что в периодическом режиме работы биореактора температуры, наблюдаемые в процессе саморегулирования, вполне могут соответствовать температурам, доставляющим максимальную удельную скорость роста используемых микроорганизмов; это

обстоятельство позволяет надеяться на возможность практического использования явления саморегулирования;

– поскольку непрерывный биохимический реактор может представлять собой (по крайней мере, в пла-

не температурного режима) упрощенную модель живой клетки (*Arzamastsev A.A. 1995*), полученные выводы с определенной долей вероятности можно экстраполировать и на режимы температурного гомеостаза отдельной живой клетки (например, клетки ткани).

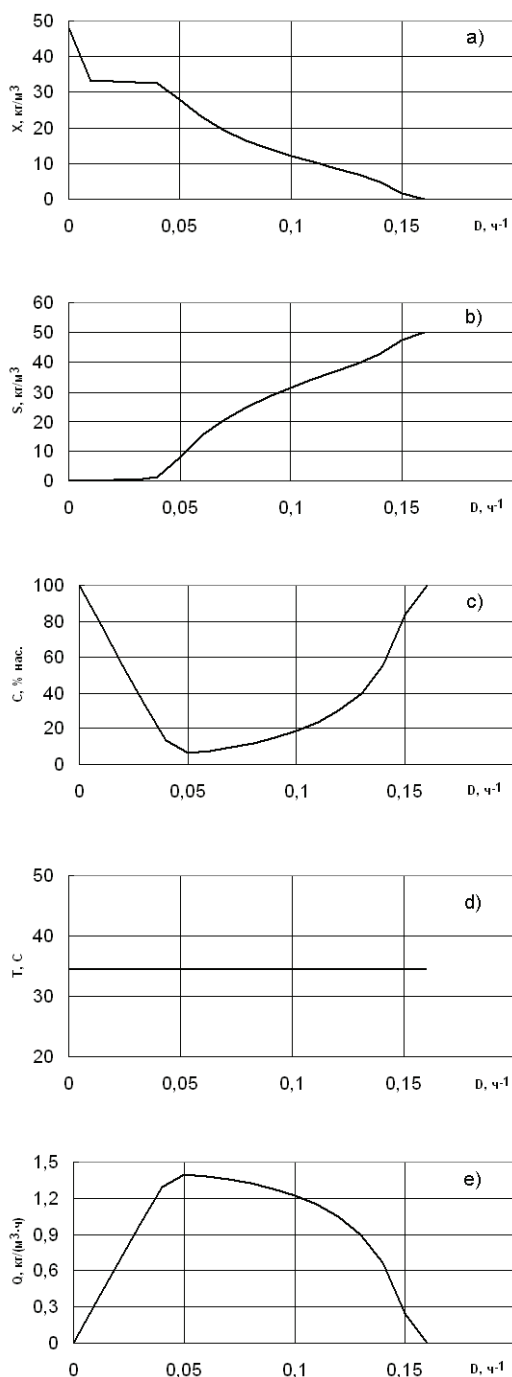


Рис. 2.7. Статические характеристики биореактора, работающего при постоянной температуре $T = 34,5\text{ }^{\circ}\text{C}$ при различных удельных разбавлениях $D, \text{ч}^{-1}$: а) – концентрация биомассы, б) – концентрация субстрата, с) – концентрация растворенного кислорода, д) – температура, е) – удельная продуктивность. Значения параметров процесса: $X_{in} = 0\text{ г/л}$, $S_{in} = 50\text{ кг/м}^3$, $C_{in} = 0\text{ мг/л}$, $T_{in} = 20\text{ }^{\circ}\text{C}$, $T_{ext} = 33\text{ }^{\circ}\text{C}$, $K_La = 250\text{ ч}^{-1}$

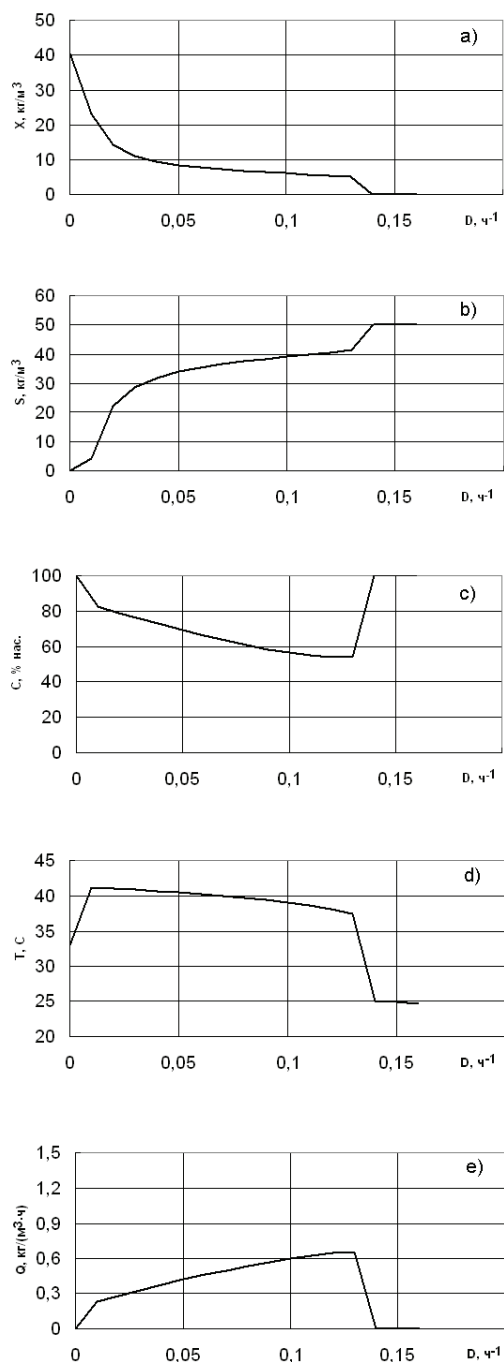


Рис. 2.8. Статические характеристики биореактора, работающего в режиме аутостабилизации температуры, при различных удельных разбавлениях $D, \text{ч}^{-1}$: а) – концентрация биомассы, б) – концентрация субстрата, с) – концентрация растворенного кислорода, д) – температура, е) – удельная продуктивность. Значения параметров процесса: $X_{in} = 0\text{ г/л}$, $S_{in} = 50\text{ кг/м}^3$, $C_{in} = 0\text{ мг/л}$, $T_{in} = 20\text{ }^{\circ}\text{C}$, $T_{ext} = 33\text{ }^{\circ}\text{C}$, $K_La = 250\text{ ч}^{-1}$

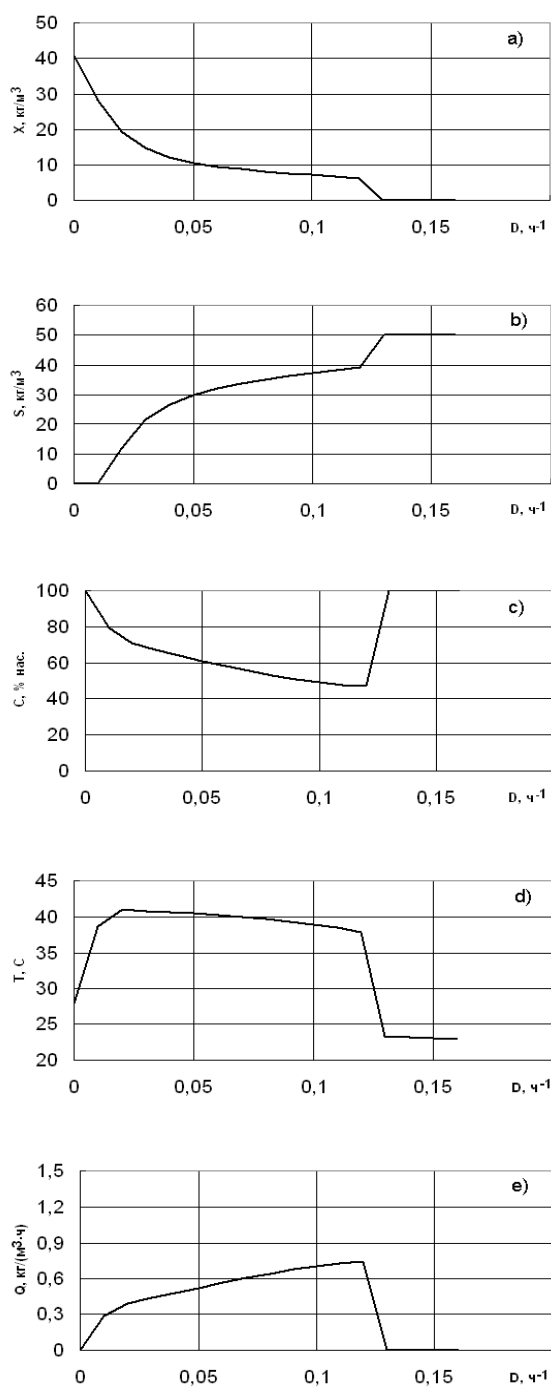


Рис. 2.9. Статические характеристики биореактора, работающего в режиме аутостабилизации температуры, при различных удельных разбавлениях D , ч^{-1} : а) – концентрация биомассы, б) – концентрация субстрата, в) – концентрация растворенного кислорода, д) – температура, е) – удельная продуктивность. Значения параметров процесса: $X_{in} = 0$ г/л, $S_{in} = 50$ кг/м³, $C_{in} = 0$ мг/л, $T_{in} = 20$ $^{\circ}\text{C}$, $T_{ext} = 28$ $^{\circ}\text{C}$, $K_{La} = 250$ ч^{-1}

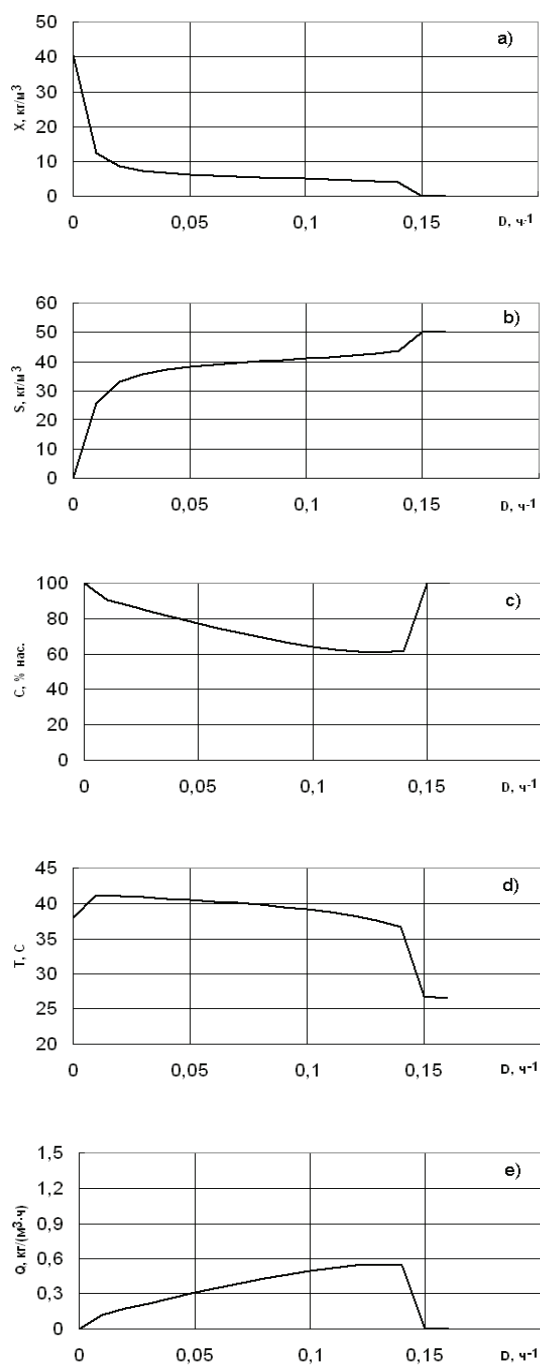


Рис. 2.10. Статические характеристики биореактора, работающего в режиме аутостабилизации температуры, при различных удельных разбавлениях D , ч^{-1} : а) – концентрация биомассы, б) – концентрация субстрата, в) – концентрация растворенного кислорода, д) – температура, е) – удельная продуктивность. Значения параметров процесса: $X_{in} = 0$ г/л, $S_{in} = 50$ кг/м³, $C_{in} = 0$ мг/л, $T_{in} = 20$ $^{\circ}\text{C}$, $T_{ext} = 38$ $^{\circ}\text{C}$, $K_{La} = 250$ ч^{-1}

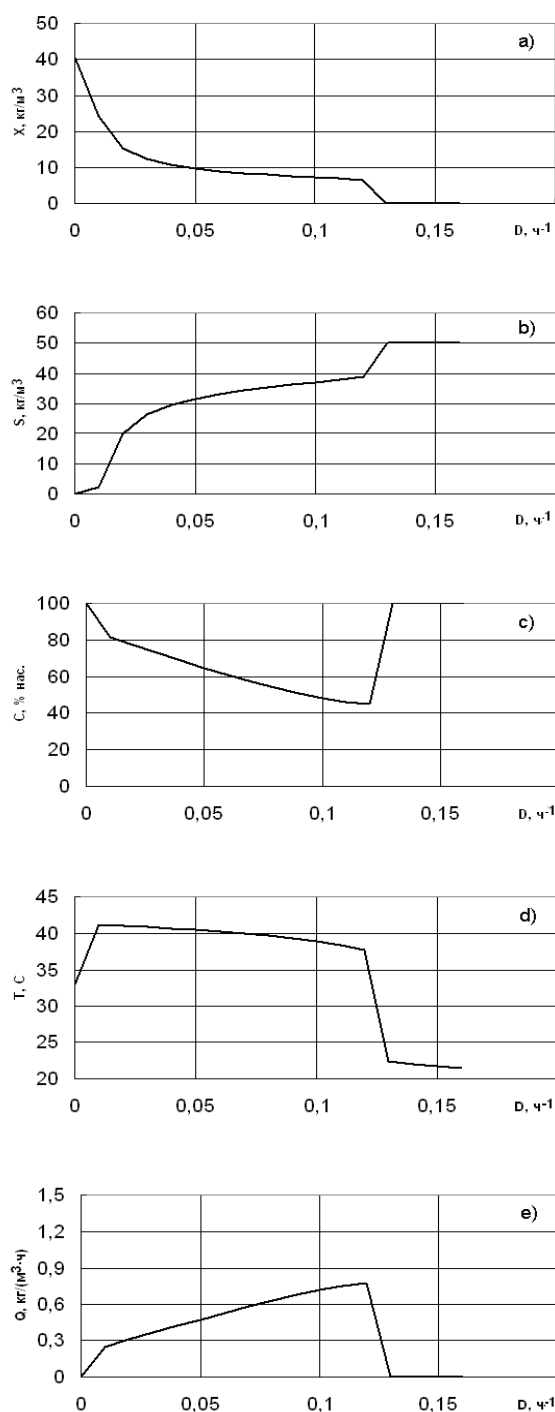


Рис. 2.11. Статические характеристики биореактора, работающего в режиме аутостабилизации температуры, при различных удельных разбавлениях D , ч^{-1} : а) – концентрация биомассы, б) – концентрация субстрата, в) – концентрация растворенного кислорода, д) – температура, е) – удельная продуктивность. Значения параметров процесса: $X_{in} = 0$ г/л, $S_{in} = 50$ кг/м³, $C_{in} = 0$ мг/л, $T_{in} = 15$ $^{\circ}\text{C}$, $T_{ext} = 33$ $^{\circ}\text{C}$, $K_L a = 250$ ч^{-1}

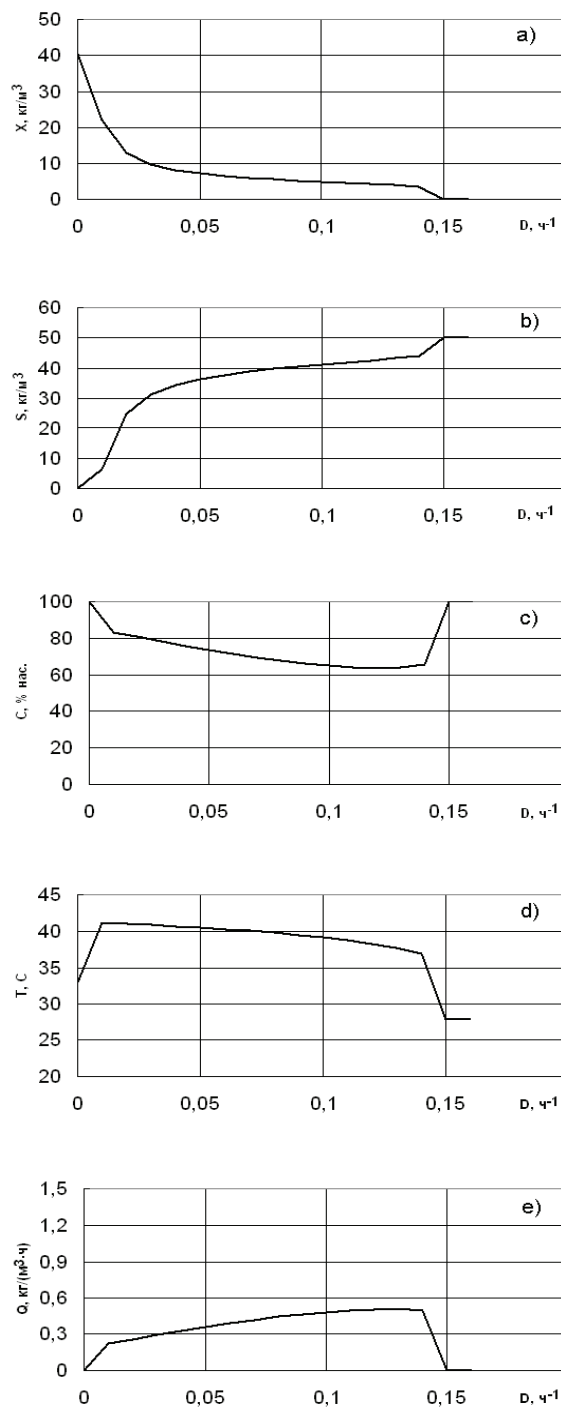


Рис. 2.12. Статические характеристики биореактора, работающего в режиме аутостабилизации температуры, при различных удельных разбавлениях D , ч^{-1} : а) – концентрация биомассы, б) – концентрация субстрата, в) – концентрация растворенного кислорода, д) – температура, е) – удельная продуктивность. Значения параметров процесса: $X_{in} = 0$ г/л, $S_{in} = 50$ кг/м³, $C_{in} = 0$ мг/л, $T_{in} = 25$ $^{\circ}\text{C}$, $T_{ext} = 33$ $^{\circ}\text{C}$, $K_L a = 250$ ч^{-1}

Математическое моделирование аутостабилизации температуры в смешанной популяции, состоящей из двух различных видов микроорганизмов. Ранее нами изучены эффекты, возникающие при аутостабилизации (саморегулировании) температуры микроорганизмами одного вида, находящимися в биореакторе [1–3]. Такой объект является упрощенным, т. к. в промышленных ферментациях часто используются смешанные культуры микроорганизмов.

Поэтому в данной работе рассматривается математическая модель объекта, представляющего собой биореактор с двумя видами микроорганизмов, различающимися такими характеристиками, как скорость роста, энергия активации, их зависимость от температуры и т. д. При этом обе популяции непосредственно не взаимодействуют друг с другом, а лишь конкурируют за общий субстрат. Основные допущения, которые использованы для построения математической модели, аналогичны модели, используемой в работах [1–3]. Математическая модель такого объекта имеет следующий вид:

$$\frac{dT}{dt} = \mu_{r1} \frac{X_1 H_1}{c_p} + \mu_{r2} \frac{X_2 H_2}{c_p} - \frac{kp(T - T_{ext})}{c_p V} + Q_T \quad (2.16)$$

$$\frac{dX_1}{dt} = \mu_{r1} X_1 + Q_{X_1} \quad (2.17)$$

$$\frac{dX_2}{dt} = \mu_{r2} X_2 + Q_{X_2} \quad (2.18)$$

$$\frac{dS}{dt} = -\frac{\mu_{r1}}{Y_1} \cdot X_1 - \frac{\mu_{r2}}{Y_2} \cdot X_2 + Q_S \quad (2.19)$$

$$\frac{dC}{dt} = K_L a (C^* - C) - q_{1O_2} - q_{2O_2} + Q_C \quad (2.20)$$

с начальными условиями:

$$\begin{aligned} T(0) &= T_0, \quad X_1(0) = X_{10}, \quad X_2(0) = X_{20}, \\ S(0) &= S_0, \quad C(0) = C_0. \end{aligned} \quad (2.21)$$

$$\mu_{r1} = \frac{\mu_{m1}(T) SC}{(S + K_{S1})(C + K_{C1})} \quad (2.22)$$

$$\mu_{r2} = \frac{\mu_{m2}(T) SC}{(S + K_{S2})(C + K_{C2})} \quad (2.23)$$

$$q_{1O_2} = X_1(\mu_{r1}\beta_1 + \alpha_1) \quad (2.24)$$

$$q_{2O_2} = X_2(\mu_{r2}\beta_2 + \alpha_2) \quad (2.25)$$

$$\begin{aligned} \mu_{m1}(T) &= \\ &= a_{11} \exp(-E_{11}/RT) - a_{21} \exp(-E_{21}/RT) \end{aligned} \quad (2.26)$$

$$\begin{aligned} \mu_{m2}(T) &= \\ &= a_{12} \exp(-E_{12}/RT) - a_{22} \exp(-E_{22}/RT) \end{aligned} \quad (2.27)$$

$$\begin{aligned} C^*(T) &= 14,438 - 0,34755 \cdot T + \\ &+ 4,6557 \cdot 10^{-3} \cdot T^2 - 2,62965 \cdot 10^{-5} \cdot T^3 \end{aligned} \quad (2.28)$$

$$Q_T = F(T_{in} - T)/V = D(T_{in} - T) \quad (2.29)$$

$$Q_{X_1} = F(X_{1in} - X_1)/V = D(X_{1in} - X_1) \quad (2.30)$$

$$Q_{X_2} = F(X_{2in} - X_2)/V = D(X_{2in} - X_2) \quad (2.31)$$

$$Q_S = F(S_{in} - S)/V = D(S_{in} - S) \quad (2.32)$$

$$Q_C = F(C_{in} - C)/V = D(C_{in} - C) \quad (2.33)$$

Биологические объекты для модели (2.16) – (2.17) подобраны таким образом, чтобы зависимости скорости роста от температуры для них имели максимум при различных значениях температуры 28 и 61 °С (рис. 2.13 Б, В). Данные взяты из работы [4]. Одна зависимость соответствует бактериям *Pseudomonas* [5], другая – *Bacillus sp.* [6]. Остальные параметры модели взяты из работ [2, 3]. Из рис. 2.13 А–Е следует, что общий вид

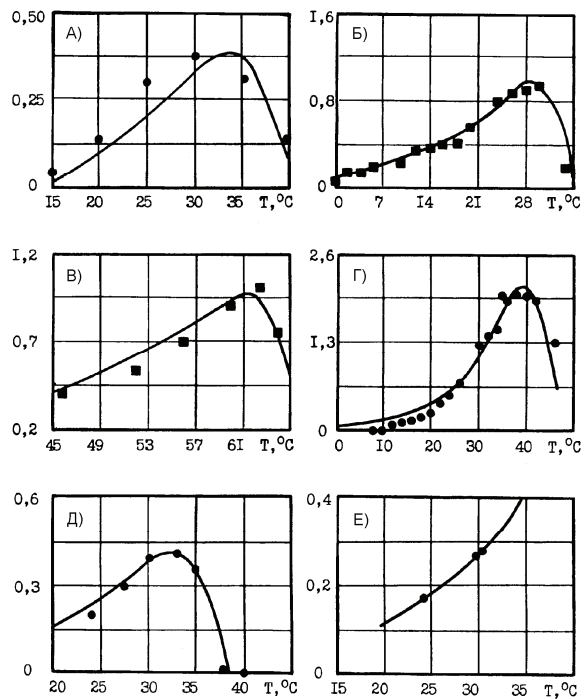


Рис. 2.13. Температурные зависимости удельных скоростей роста различных биообъектов в реакторе (ч^{-1}). Точки – экспериментальные данные, линии – расчет по уравнению Аррениуса: А) – смешанная культура *Pseudomonas* [7] – $a_1 = 9,427 \cdot 10^{15} \text{ ч}^{-1}$, $a_2 = 5,776 \cdot 10^{31} \text{ ч}^{-1}$, $E_1 = 95000 \text{ кДж/кмоль}$, $E_2 = 190000 \text{ кДж/кмоль}$; Б) – *Pseudomonas* [5] – $a_1 = 1,363 \cdot 10^{12} \text{ ч}^{-1}$, $a_2 = 8,23 \cdot 10^{35} \text{ ч}^{-1}$, $E_1 = 69325 \text{ кДж/кмоль}$, $E_2 = 210000 \text{ кДж/кмоль}$; В) – *Bacillus sp.* [6] – $a_1 = 5,498 \cdot 10^9 \text{ ч}^{-1}$, $a_2 = 4,917 \cdot 10^{44} \text{ ч}^{-1}$, $E_1 = 62000 \text{ кДж/кмоль}$, $E_2 = 290000 \text{ кДж/кмоль}$; Г) – *Escherichia coli* на богатой среде [8] – $a_1 = 3,117 \cdot 10^{16} \text{ ч}^{-1}$, $a_2 = 5,382 \cdot 10^{33} \text{ ч}^{-1}$, $E_1 = 95000 \text{ кДж/кмоль}$, $E_2 = 200000 \text{ кДж/кмоль}$; Д) – *Candida tropicalis* [9]; Е) – смешанная культура дрожжей [10] – $a_1 = 1,4687 \cdot 10^{11} \text{ ч}^{-1}$, $E_1 = 68000 \text{ кДж/кмоль}$ (только левая часть кривой). Идентификация энергий активации и предэкспоненциальных множителей для всех данных [4]

зависимостей скорости роста от температуры является идентичным для различных микроорганизмов. Отличия касаются лишь $\mu^{\max}$ и температуры, соответствующей $\mu^{\max}$. Указанное обстоятельство позволяет надеяться на то, что результаты моделирования обладают значительной общностью.

Необходимо отметить также, что поскольку данную математическую модель мы планируем использовать лишь для предварительных расчетов температурного режима (на качественном уровне), здесь не ставилась задача проверки ее адекватности и потому не используются уравнения, учитывающие инерционность скоростей роста при изменении температуры.

В модели использовано следующее начальное условие: $C_0 = 7,22$ мг/л и концентрации биомассы и кислорода во входном потоке биореактора: $X_{1in} = 0$ г/л, $X_{2in} = 0$ г/л, $C_{in} = 0$ мг/л. Другие параметры модели (2.16) – (2.33) приведены в табл. 2.2.

Для численного решения уравнений математической модели (2.16) – (2.33) разработали специальную программу, использующую метод Рунге – Кутты четвертого порядка с автоматическим выбором шага.

На рис. 2.14 показаны динамические характеристики биореактора с двумя биообъектами при различных значениях S_0 . В качестве биообъектов были взяты микроорганизмы, зависимости скорости роста от температуры которых показаны на рис. 2.13 Б) и В).

На рис. 2.14 а) изображен график изменения температуры. Как только температура достигает уровня 29°C , что происходит примерно через 1 час, видно, что первый биообъект практически «выключается» (рис. 2.14 б), в это же время наблюдается экспоненциальный рост второй популяции, что видно на рис. 2.14 в). О прекращении роста биообъекта свидетельствует горизонтальная линия на рис. 2.14 б), начиная примерно с 1,5 часов. При этом наблюдается интенсивный рост второго биообъекта (рис. 2.14 в). Это происходит до тех пор, пока температура в биореакторе (рис. 2.14 а) не достигнет 65°C . Этот момент соответствует примерно 9 часам от начала вычислительного эксперимента. После этого наблюдается линейный рост второго биообъекта (рис. 2.14 в), что соответствует режиму аутостабилизации температуры [3, 11]. Момент времени 16 ч соответствует полному исчерпанию субстрата при $S_0 = 80$ г/л (рис. 2.14 д). В этот момент наблюдается снижение температуры в биореакторе от 69°C до внешней температуры, которая равна 33°C (рис. 2.14 а). Свойства первого и второго биообъектов не восстанавливаются, поскольку субстрат уже исчерпан. На графике, показывающем концентрацию кислорода от времени (рис. 2.14 д), видно, что в начальный момент времени, когда первая и вторая культура растут наиболее быстро, концентрация кислорода падает практически до нуля. В тот момент, когда рост первой культуры останавливается вследствие повышенной температуры, наблюдается всплеск концентрации кислорода. Однако после этого, в момент времени примерно 2,5 часа, когда концентрация биомассы первого объекта становится достаточно большой, концентрация кислорода снова падает. Это означает, что вторая культура развивается очень интенсивно. Момент времени, равный примерно 9 часам, соответствует выходу биореактора на режим аутостабилизации температуры. Концентрация кислорода от этого момента и до полного исчерпания суб-

страта стабилизируется на постоянном уровне примерно 15 % от насыщения. После того как субстрат полностью исчерпан, что соответствует 16 часам, концентрация кислорода снова достигает насыщения. Указанные рассуждения верны для кривой 5, т. е. для $S_0 = 80$ г/л. При других S_0 (рис. 2.14 линии 1, 2, 3, 4) графики имеют идентичный характер, но их временные характеристики смещаются в меньшую сторону, поскольку субстрат исчерпывается быстрее.

На рис. 2.15 показаны те же зависимости, что и на рис. 2.14, но при большей начальной температуре $T_0 = 35^\circ\text{C}$. Видно, что данные зависимости имеют существенное отличие от аналогичных зависимостей, показанных на рис. 2.14. Во-первых, поскольку начальная температура велика, то второй биообъект оказывается подавленным с самого начала. На рис. 2.15 б) видно, что концентрация второго биообъекта равна постоянному значению, которое фактически совпадает со значением в начальный момент времени. На концентрационных зависимостях для кислорода видно, что отсутствует локальный минимум, тот который был на рис. 2.14 е).

Таблица 2.2

Параметры	Обозначения	Значения	Единицы измерения
Для первого биологического объекта			
Суммарный тепловой эффект биохимической реакции	H_1	17000	кДж/кг
Константы Михаэлиса для:			
- субстрата,	K_{S1}	1,5	г/л
- кислорода	K_{C1}	0,9	г/л
Предэкспоненциальные множители:	a_{11} a_{21}	$1,363 \cdot 10^{12}$ $8,23 \cdot 10^{35}$	ч^{-1} ч^{-1}
Энергии активации:	E_{11} E_{21}	69325 210000	кДж/кмоль кДж/кмоль
Потребление кислорода на:			
- эндогенное дыхание,	α_1	0,24	мг/г·ч
- экзогенное дыхание	β_1	1150	мг/г
Экономический коэффициент	Y_1	0,4	
Для второго биологического объекта			
Суммарный тепловой эффект биохимической реакции	H_2	17000	кДж/кг
Константы Михаэлиса для:			
- субстрата,	K_{S2}	1,5	г/л
- кислорода	K_{C2}	0,9	г/л
Предэкспоненциальные множители:	a_{12} a_{22}	$5,498 \cdot 10^9$ $4,917 \cdot 10^{44}$	ч^{-1} ч^{-1}
Энергии активации:	E_{12} E_{22}	62000 290000	кДж/кмоль кДж/кмоль
Потребление кислорода на:			
- эндогенное дыхание,	α_2	0,24	мг/г·ч
- экзогенное дыхание	β_2	1150	мг/г
Экономический коэффициент	Y_2	0,4	
Значения параметров реактора и жидкой фазы			
Удельная теплоемкость жидкой фазы	c	4,19	кДж/кг·К
Плотность жидкой фазы	ρ	1000	кг/м ³
Объем биореактора	V	$1,5 \cdot 10^{-3}$	м ³
Коэффициент теплопередачи через стенку	k	7,733	кДж/ч·К
Поверхность теплообмена реактора	P	0,073	м ²
Объемный коэффициент теплопередачи	K_{La}	250	ч^{-1}

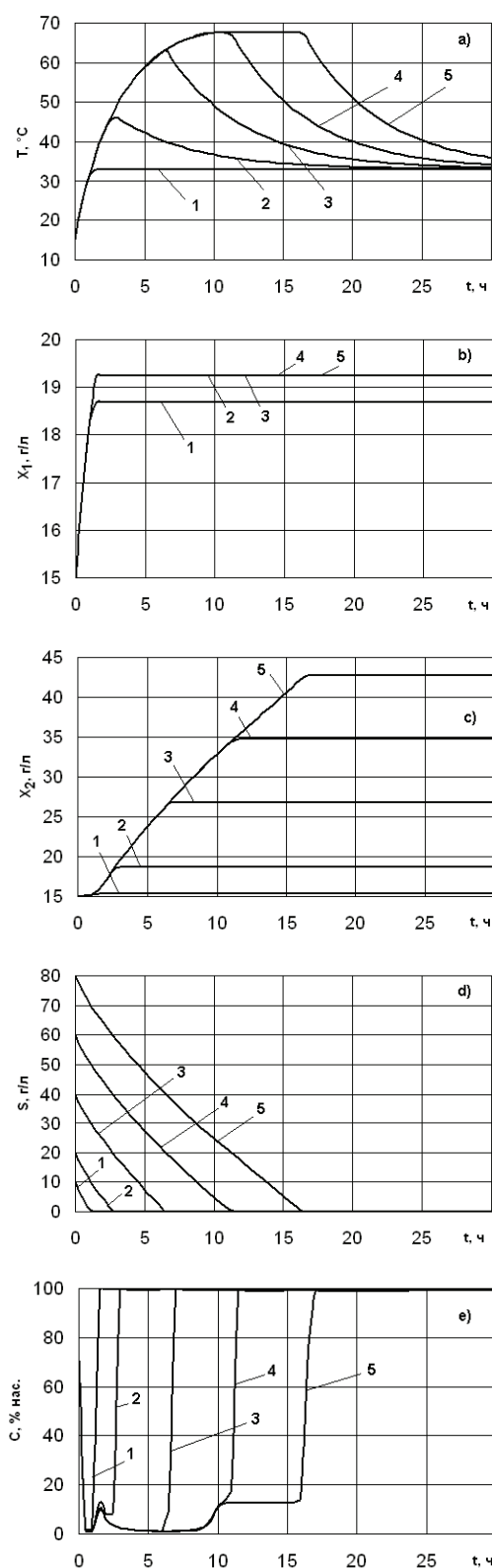


Рис. 2.14. Динамические характеристики биореактора с двумя биообъектами в периодическом режиме ($D = 0$) при $T_0 = 15^\circ\text{C}$, $X_{10} = 15 \text{ г/л}$, $X_{20} = 15 \text{ г/л}$, $T_{ext} = 33^\circ\text{C}$. Номера линий соответствуют различным значениям S_0 : 1 – 10, 2 – 20, 3 – 40, 4 – 60, 5 – 80 г/л. а) – температура, б) – концентрация биомассы первого биообъекта, в) – концентрация биомассы второго биообъекта, д) – концентрация субстрата, е) – концентрация растворенного кислорода

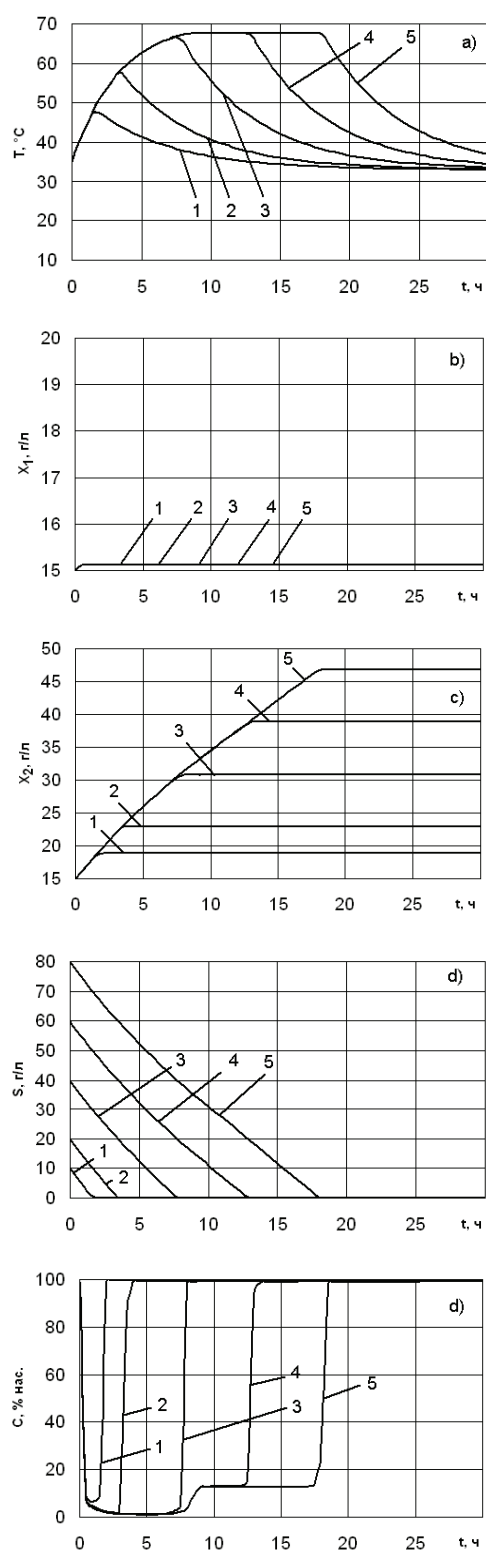


Рис. 2.15. Динамические характеристики биореактора с двумя биообъектами в периодическом режиме ($D = 0$) при $T_0 = 35^\circ\text{C}$, $X_{10} = 15 \text{ г/л}$, $X_{20} = 15 \text{ г/л}$, $T_{ext} = 33^\circ\text{C}$. Номера линий соответствуют различным значениям S_0 : 1 – 10, 2 – 20, 3 – 40, 4 – 60, 5 – 80 г/л. а) – температура, б) – концентрация биомассы первого биообъекта, в) – концентрация биомассы второго биообъекта, д) – концентрация субстрата, е) – концентрация растворенного кислорода

В данном случае биореактор ведет себя фактически как биореактор с одним биологическим объектом.

Таким образом, в данной работе осуществлено исследование саморегулирования (аутостабилизации) температуры в биореакторе с двумя биообъектами в периодическом режиме:

– проведен анализ явления при различных значениях параметров: начальной концентрации субстрата, начальной температуре;

– обнаружено, что при низких начальных температурах через определенный промежуток времени одна из популяций «подавляет» другую, т. е. в определенный момент времени рост одной из популяций полностью прекращается, а концентрация популяции в этот момент начинает интенсивно возрастать;

– обнаружено, что при более высоких начальных температурах биореактор с двумя популяциями ведет себя фактически так же, как биореактор с одним биообъектом за счет того, что вымирание одной из популяций происходит практически мгновенно.

ЛИТЕРАТУРА К § 2

1. Арзамасцев А.А., Альбицкая Е.Н. Математическое моделирование саморегулирования температуры в популяциях микроорганизмов: непрерывный процесс // Вестн. Тамб. ун-та. Сер. Естеств. и техн. науки. Тамбов, 2007. Т. 12. Вып. 6. С. 709-714.
2. Arzamastsev A.A., Kristapson M.G. Computer simulation of temperature autostabilization: an analysis of phenomenon // Appl. Microbiol. Biotechnol. 1993. V. 40. P. 77-81.
3. Арзамасцев А.А. Компьютерное моделирование саморегулирования температуры в популяциях микроорганизмов. Сообщение 1: периодический режим // Вестн. Тамб. ун-та. Сер. Естеств. и техн. науки. Тамбов, 1996. Т. 1. Вып. 1. С. 71-77.
4. Арзамасцев А.А. Разработка научно-обоснованной ресурсосберегающей технологии и аппаратов утилизации отходов производства этанола: дис. ... д-ра техн. наук. Тамбов, 1998.
5. Перт С.Дж. Основы культивирования микроорганизмов и клеток. М.: Мир, 1978.
6. Matsche N.F., Andrews J.F. // Adv. Microbiol. Eng. Part 1. N. Y.; L.: John Wiley & Sons, Inc., 1973. P. 77.
7. Арзамасцев А.А., Бодров В.И., Попов Н.С. Кинетика роста микроорганизмов рода *Pseudomonas* на мелассной послеспиртовой барде // Микробиология. 1983. Т. 52. Вып. 6. С. 929-934.
8. Ingraham J.L. // J. Bacteriol. 1958. V. 78. № 3. P. 75.
9. Музыченко Л.А., Гуркин В.А., Кантере В.М., Минкевич И.Г. О температурной зависимости кинетики микробиологического синтеза // Микробиологическая пром-сть. 1971. Вып. 5. С. 10-14.
10. Арзамасцев А.А. Влияние температуры и кислотности среды на рост некоторых смешанных культур микроорганизмов // Научные достижения – производству: тез. докл. обл. науч. конф. М., 1987. С. 19.
11. Печуркин Н.С., Шкидченко А.Н. Явление аутостабилизации факторов, ограничивающих рост микробных популяций в открытых системах // Докл. АН СССР. 1976. Т. 227. № 3. С. 719-722.

§ 3. Математические модели для оптимизации биотехнологического процесса²

Рассматриваемый биотехнологический процесс представляет собой комплексную технологию утилизации отхода производства этанола с выработкой на этой основе бактериальной биомассы.

Общая постановка задачи проектирования данного процесса может быть сформулирована как разработка новой экономически оправданной технологии для утилизации отхода производства этанола, пригодной для практического использования.

² Данный раздел написан совместно с аспиранткой Ю.В. Плотноковой.

Объект исследования, моделирования и оптимизации. На рис. 3.1 показана общая схема проектируемого биотехнологического процесса.

Описание данного технологического процесса приведено в работах [1, 2]. Мелассная послеспиртовая барда (далее субстрат) поступает со спиртового производства и направляется вначале на теплообменник, где происходит ее охлаждение. Затем субстрат поступает на участок дрожжегенерации, где на его основе производится продукт – пекарские дрожжи *Saccharomyces cerevisiae*. Далее частично очищенный субстрат поступает на участок производства белковой биомассы (бактериальные клетки рода *Pseudomonas*), где происходит практически полная утилизация содержащихся в нем органических веществ и выработка гранулированной белковой биомассы.

В табл. 3.1–3.3 приведена информация об основных свойствах отхода производства этанола, а также биологических объектах, использование которых позволяет получить высокую степень конверсии отхода в целевой продукт – биомассу.

На рис. 3.2 показана упрощенная схема участка производства бактериальной биомассы, являющегося объектом оптимального проектирования и экономической оптимизации. Основными технологическими единицами являются: биореактор, в котором осуществляется выработка биомассы, термофлотатор, служащий для ее концентрирования, и сушилка-гранулятор, в которой биомасса высушивается и приобретает товарный вид.

Таблица 3.1

Химический состав отхода производства этанола

Вещества	Содержание, %
Сухие вещества	8,0–8,5
Зола	2,5–3,2
Редуцирующие вещества	0,8–0,4
Нелетучие карбоновые кислоты	1,2–1,8
Летучие кислоты	0,25–0,3
Глицерин	0,4–0,5
Азот общий	0,45–0,5
Азот аминный	0,25–0,3
Окись кальция (CaO), не более	0,2–0,3
Сернистый ангидрид (SO ₄), не более	0,005–0,01
Нитраты, не более	0,005–0,015
Химическое потребление кислорода, ХПК мгО ₂ /л	25000–52000
Биохимическое потребление кислорода, БПК ₅ мгО ₂ /л	12000–27000

Таблица 3.2

Количество ассимилируемых углеродосодержащих веществ в отходе

Вещества	Содержание, %
Общее количество ассимилируемых углеродосодержащих веществ отхода с концентрацией 8–9 % сухих веществ	2,7–3,5
В том числе:	
карбоновые кислоты	1,5–2,0
аминокислоты	0,4–0,7
глицерин	0,5–0,6
сахара	0,1–0,2
прочие	0,1–0,2

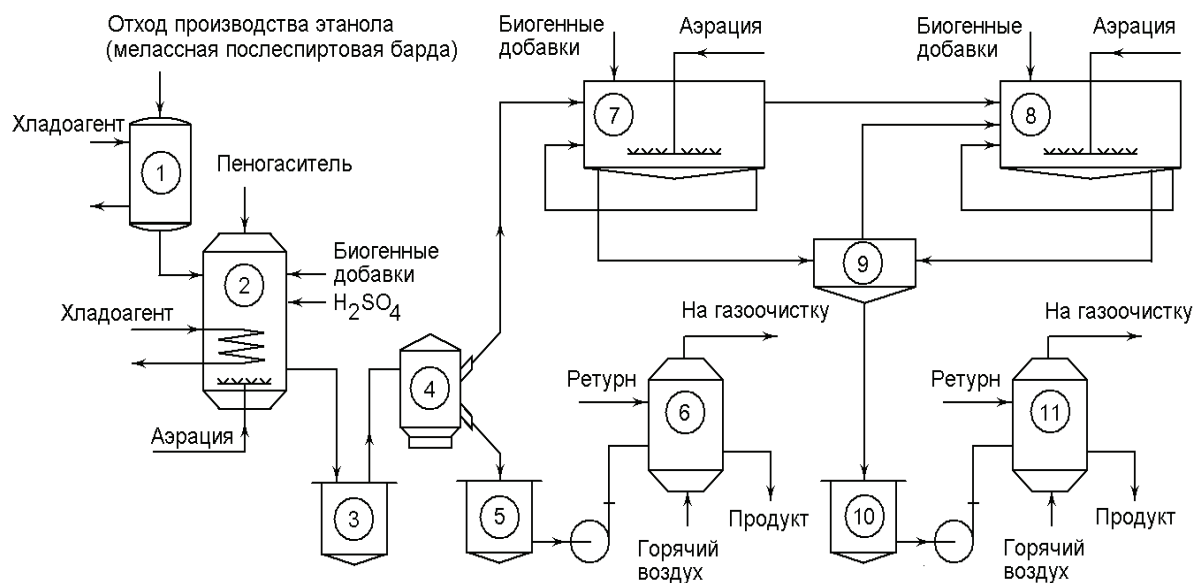


Рис. 3.1. Схема биотехнологического процесса утилизации отходов производства этанола с выработкой белковой биомассы. 1 – теплообменник; 2 – биохимический реактор для производства дрожжей; 3 – резервуар; 4 – сепаратор; 5 – резервуар; 6 – сушилка-гранулятор; 7, 8 – биохимические реакторы для производства белковой биомассы; 9 – термофлотатор; 10 – резервуар для белкового концентрата; 11 – сушилка-гранулятор

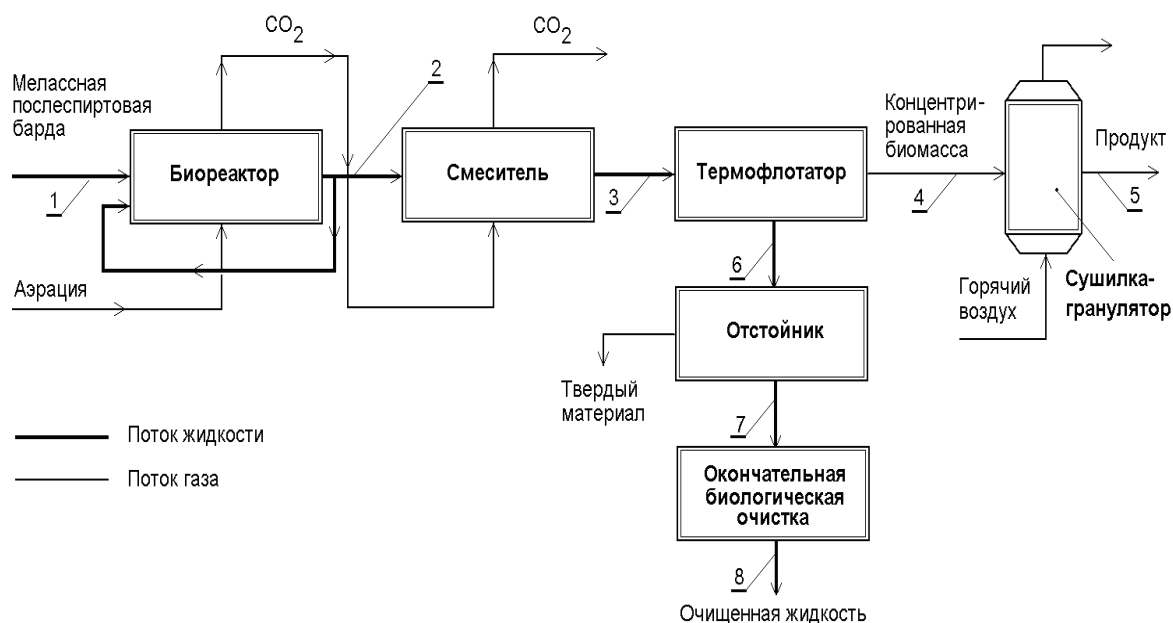


Рис. 3.2. Упрощенная схема биотехнологического процесса с указанием основных потоков. 1 – отход производства этанола – субстрат (ХПК $\approx 55000\text{--}60000$ мгО₂/л, БПК₅ $\approx 25000\text{--}32000$ мгО₂/л; сухих веществ 8–12 %, объемный расход 10 м³/ч); 2 – биомасса и остаточный субстрат (концентрация биомассы 10–20 кг/м³, концентрация остаточного субстрата ХПК $\approx 1000\text{--}3000$ мгО₂/л, БПК₅ $\approx 200\text{--}500$ мгО₂/л; объемный расход 10 м³/ч); 3 – биомасса, обогащенная двуокисью углерода; 4 – концентрированная биомасса (концентрация до 25–40 кг/м³); 5 – готовый продукт (выработка 1–1,6 т/сут., зольность – не более 26 %, содержание протеина – не менее 47 %); 6 – осветленный сток на биологическую очистку; 7 – осветленный сток после окончательного отделения биомассы; 8 – очищенная жидкость (ХПК не более 3000 мгО₂/л, БПК₅ не более 200–500 мгО₂/л)

Таблица 3.3

Биообъекты, используемые для организации биотехнологического процесса

Группа	Названия биообъектов, входящих в данную группу	Примечание
1 группа	<i>Pseudomonas chlororapchis</i> , <i>Pseudomonas fragi</i> , <i>Pseudomonas liquefaciens</i> , <i>Pseudomonas fluorescens</i>	Смешанная культура бактериальных клеток
2 группа	<i>Oidium</i> , <i>Trichosporon cutaneum</i> , <i>Candida scotti</i>	Смешанная культура дрожжей и дрожжеподобных грибов
3 группа	<i>Candida utilis</i> , <i>Torulopsis pinus</i> , <i>Trichosporon cutaneum</i>	Смешанная культура дрожжей и дрожжеподобных грибов



Рис. 3.3. Основные этапы оптимального проектирования и оптимизации биотехнологического процесса при использовании математического моделирования

Решение задач оптимального проектирования и оптимизации биотехнологического процесса предполагается выполнить в соответствии с основными этапами, показанными в виде схемы на рис. 3.3.

Из анализа схем технологического процесса (рис. 3.1–3.2) и основных этапов оптимального проектирования (рис. 3.3) видно, что для реализации проекта необходимо будет разработать математические модели следующего биотехнологического оборудования: биохимического реактора, сепарирующего устройства – термофлотатора, предназначенного для концентрирования биомассы, а также сушилки-гранулятора. Однако, для того чтобы определиться со структурой этих математических моделей, степенью их детализации,

методологией разработки и т. д., необходимо осуществить математическую постановку задач оптимального проектирования и оптимизации.

Математическая постановка задачи оптимального проектирования биотехнологического процесса. В соответствии с традиционным представлением объекта моделирования в обобщенном виде задача его оптимизации может быть сформулирована следующим образом. Для заданного вектора возмущений w необходимо найти такой вектор независимых варьируемых переменных u , который минимизирует значение некоторой целевой функции $Q(w, u, y)$ так, что выполняется соотношение:

$$Q^*(w, u^*, y) = \min_{u \in U(w)} Q(w, u, y) \quad (3.1)$$

где y – вектор выходных переменных объекта, U – допустимая область для варьируемых переменных.

При этом должны выполняться уравнения связи, характеризуемые математической моделью объекта

$$y = \Psi(w, u, p), \quad (3.2)$$

ограничения, наложенные на независимые варьируемые параметры

$$\begin{aligned} R_1(w, u) &\geq 0 \\ R_2(w, u) &\geq 0 \\ &\vdots \\ R_k(w, u) &\geq 0 \end{aligned} \quad (3.3)$$

и выходные переменные

$$\begin{aligned} L_1(y) &\geq 0 \\ L_2(y) &\geq 0 \\ &\vdots \\ L_m(y) &\geq 0 \end{aligned} \quad (3.4)$$

где p – вектор параметров математической модели, $\Psi, R, i = 1, \dots, k, L, i = 1, \dots, m$ – операторы связи.

Значения независимых варьируемых переменных, которым соответствует минимум целевой функции Q^* , будем называть оптимальным, а само значение Q^* также оптимальным.

При решении задач оптимального проектирования и оптимизации биотехнологического процесса будем использовать в качестве целевой функции Q приведенные затраты. Использование такой целевой функции приводит к снижению себестоимости продукции, тем самым обеспечивая ее конкурентную способность на рынке, повышает экономию природных, энергетических и иных ресурсов, снижает затраты на монтаж и эксплуатацию оборудования. При решении задач оптимизации будем стремиться к минимизации данной целевой функции.

Вектором возмущений w в нашем случае является концентрация органических веществ в отходе производства этанола и его объемный расход.

Вектор независимых варьируемых переменных u при решении задачи оптимального проектирования представляет собой совокупность конструктивных (геометрические размеры аппаратуры, используемые материалы, варианты размещения и т. д.), технологических (условия проведения процессов, варианты управления и т. д.) и управленческих (используемое сырье, материалы, организационные решения) параметров.

Уравнения связи вида $y = \Psi(w, u, p)$ будут представлены в нашем случае математическими моделями процессов в основных технологических единицах: биохимическом реакторе, термофлотаторе, грануляторе.

Ограничения (3) определяют допустимую область изменения независимых варьируемых переменных u ,

что при решении наших задач означает выполнение условий их физической реализуемости, нахождение параметров процессов в диапазонах, необходимых для обеспечения их работоспособности и т. д. Отметим, что в общем случае такие ограничения, как правило, зависят и от вектора возмущений w .

Ограничения (3.4) задают диапазоны изменения выходных показателей процессов: количества вырабатываемого продукта, его качественных характеристик и т. д.

Задача (3.1) – (3.4) представляет собой задачу нелинейного программирования с ограничениями типа равенств и неравенств значительной размерности. Для решения таких задач разработаны специальные численные методы [3, 4].

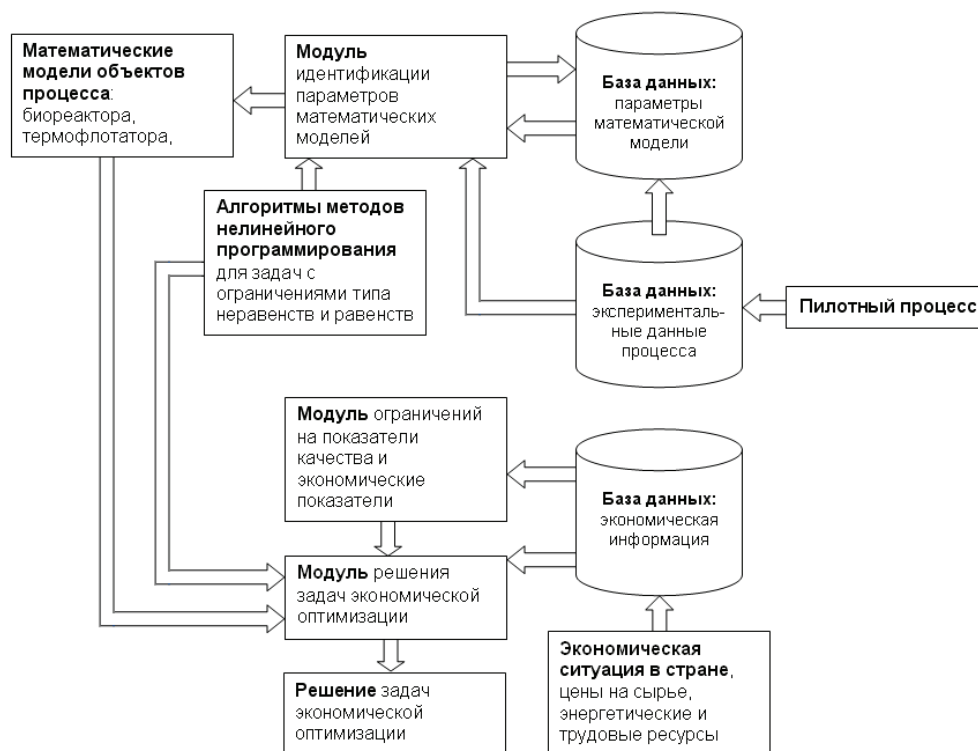


Рис. 3.4. Структура информационной системы

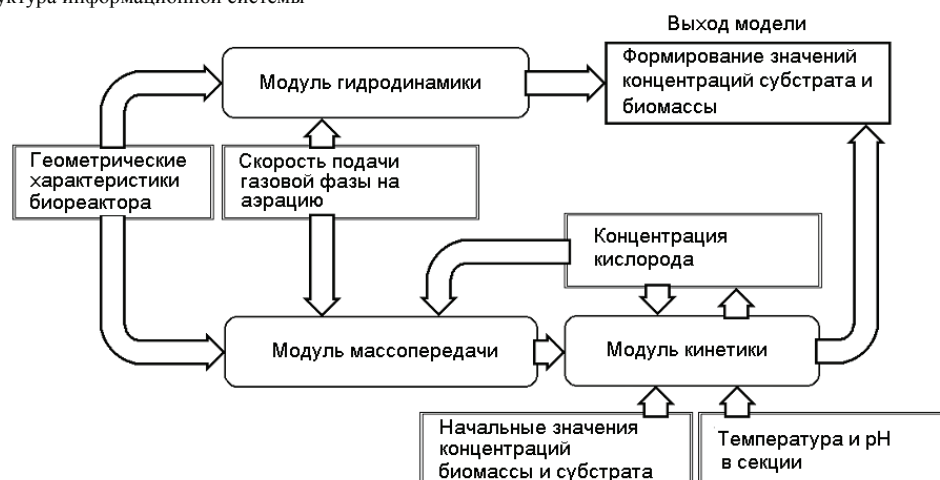


Рис. 3.5. Информационная модель процессов в биореакторе. Взаимодействие модулей математической модели

Структура информационной системы. Поскольку поиск оптимальных решений предполагается осуществ-

лять с помощью современных информационных технологий – методов математического моделирования, не-

линейного программирования, с использованием современных средств разработки систем управления базами данных, можно говорить о создании и использовании соответствующей информационной системы.

Основой всей информационной системы является хранилище информации, включающее три базы данных: с экспериментальными данными, полученными с пилотного процесса, параметрами математических моделей, экономической информацией.

Главными задачами, решаемыми информационной системой, являются: параметрическая идентификация математических моделей, которая осуществляется при использовании методом нелинейного программирования и экспериментальных данных, полученных с пилотного процесса; экономическая оптимизация, которая осуществляется при использовании адекватных моделей, ограничений и данных по экономической информации.

Математическая модель биореактора [1, 2]. Биореактор имеет секционированный корпус. Каждая секция представляет собой реакционную емкость, перемешивание и аэрация которой осуществляется барботажом. Подробно конструкция секций приведена в работах [1, 2].

При разработке математической модели были сделаны следующие основные допущения:

- каждая секция представляет собой объект с промежуточным уровнем перемешивания; данный уровень зависит от скорости подачи газовой фазы на аэрацию;
- факторами, лимитирующими скорость роста микроорганизмов, являются концентрации субстрата и растворенного кислорода;
- рассматривается изотермический процесс;
- кинетика процесса выражается уравнением Моно.

Информационная модель взаимосвязи основных переменных процесса показана на рис. 3.5. С этой точки зрения математическая модель биореактора содержит три основных модуля: кинетики, гидродинамики и массопередачи. Математическое описание трех модулей согласно основным предположениям представлено ниже.

Модуль кинетики имеет следующий вид:

$$\frac{dX_i(t)}{dt} = \mu_m(T, pH) \frac{S_i(t)}{S_i(t) + K_S} \cdot \frac{C_i}{C_i + K_C} \cdot X_i(t) \quad (3.5)$$

$$\frac{dS_i(t)}{dt} = -\frac{1}{Y} \cdot \frac{dX_i(t)}{dt} \quad (3.6)$$

с начальными условиями:

$$\left. \begin{aligned} X_i(0) &= \frac{F_R X_H}{F_R + F_0} \\ S_i(0) &= \frac{F_R S_K + F_0 S_0}{F_R + F_0} \end{aligned} \right\} (i=1),$$

$$\left. \begin{aligned} X_i(0) &= \bar{X}_{i-1} \\ S_i(0) &= \bar{S}_{i-1} \end{aligned} \right\} (i \neq 1), \quad (3.7)$$

где μ_m , K_S , Y – кинетические параметры, являющиеся функциями температуры и pH в жидкой фазе:

$$\mu_m(T, pH) = A_1 \exp\left(-\frac{E_1}{R} \left(1 - \frac{T}{T_1}\right)^2\right) \exp\left(-B(pH - pH_{opt})^2\right) \quad (3.8)$$

$$Y = Y_0 + k(T - T_1), \quad (3.9)$$

$$K_S = A_2 \exp\left(-\frac{E_2}{RT}\right). \quad (3.10)$$

Модуль гидродинамики имеет вид:

$$\tilde{P}_i(t) = f(F_i, V_i, \tilde{P}_i(\Theta, G_g)) \quad (3.11)$$

$$\tilde{P}_i(\Theta, W_g) = \left(\frac{K}{D}\right)^K \Theta^{K-1} \exp\left(-\frac{K\Theta}{D}\right) / (K-1)! \quad (3.12)$$

$$\bar{X}_i = \int_0^{t^{\max}} X_i(t) \cdot \tilde{P}(t) dt, \quad (3.13)$$

$$\bar{S}_i = \int_0^{t^{\max}} S_i(t) \cdot \tilde{P}(t) dt. \quad (3.14)$$

Уравнения массопередачи имеют следующий вид:

$$C_i = \frac{-\xi_2 + (\xi_2^2 - 4\xi_1\xi_3)^{1/2}}{2\xi_1}, \quad (3.15)$$

$$\xi_1 = K_V + \frac{F_i}{V_i}, \quad (3.16)$$

$$\xi_2 = \bar{X}_i \left(a + \frac{b\mu_m \bar{S}_i}{\bar{S}_i + K_S} \right) + K_C \left(K_V + \frac{F_i}{V_i} \right) - K_V C^* \beta, \quad (3.17)$$

$$\xi_3 = K_C (\bar{X}_i a - C^* \beta K_V), \quad (3.18)$$

$$K_V = \frac{18K_L G_g (P_0 + \rho_a g H_a)^{2/3} [(P_0 + \rho_a g H_a)^{1/3} - P_0^{1/3}]}{d_b W_b \rho_a g V_a} \gamma_1, \quad (3.19)$$

если $0,05 < W_g < 0,11$ м/с.

$$K_V = \frac{6K_L G_g (P_0 + \rho_a g H_a) \ln\left(\frac{P_0 + \rho_a g H_a}{P_0}\right) \int_0^{d^{\max}} d_b^2 \varphi(d_b) d(d_b)}{W_b \rho_a g V_a \int_0^{d^{\max}} d_b^3 \varphi(d_b) d(d_b)} \gamma_2 \quad (3.20)$$

если $W_g \geq 0,11$ м/с.

Объяснение параметров математической модели приведено в табл. 3.4, а значения параметров приведены в табл. 3.5.

Таблица 3.4

Параметр	Описание
X, S, C	концентрации биомассы, субстрата и растворенного кислорода
μ^m, K_S, K_C, Y, a, b	кинетические параметры
t	время процесса
F_0, F_R	потоки: входной и рецикла
$X_H, \bar{X}$	концентрации биомассы: в потоке рецикла и среднее значение
$S_0, \bar{S}$	концентрации субстрата: во входном потоке и среднее значение
A	предэкспоненциальный множитель
E	энергия активации
R	универсальная газовая постоянная
T	температура
B, Y_0, k, T_1	константы
$\tilde{P}(\cdot)$	функция плотности распределения времени пребывания времени реакционной смеси в реакторе
V	объем секции
F	поток реакционной смеси через секцию реактора
Θ	нормированное время пребывания реакционной смеси в секции реактора
W_g, G_g	скорость и поток газовой фазы внутри реактора
t^{max}	максимальное время пребывания реакционной смеси в реакторе
K, D	коэффициенты распределения Эрланга
ξ_1, ξ_2, ξ_3	вспомогательные коэффициенты
K_V, K_L	объемный коэффициент массопередачи и коэффициент массопередачи
C^*	концентрация насыщения для кислорода
β	корректирующий коэффициент, который учитывает снижение C^* в реальной жидкости по сравнению с чистой водой
P_0	нормальное атмосферное давление
ρ_a	плотность аэрированной жидкой фазы внутри реактора
H_a, V_a	высота и объем столба жидкости аэрируемой фазы внутри реактора
g	ускорение свободного падения
d_b	диаметр газовых пузырей
W_b	скорость всплывания газовых пузырей
$\varphi(\cdot)$	функция плотности распределения пузырьков по диаметрам
γ_1, γ_2	корректирующие коэффициенты
Индексы:	
i	соответствует номеру секции i
S	соответствует концентрации субстрата
C	соответствует концентрации кислорода
θ	соответствует начальным значениям
R	соответствует потоку рецикла
H	соответствует концентрации биомассы в потоке рецикла

Система уравнений (3.5) – (3.20) совместно с дополнительными уравнениями для расчета параметров

математических моделей является замкнутой и позволяет определить концентрации биомассы и субстрата в каждой секции биореактора.

Алгоритм расчета уравнений математической модели представлен на рис. 3.5.

Алгоритм является итерационным. Выходными параметрами являются концентрации субстрата и биомассы в конце процесса. Для решения дифференциальных уравнений использован метод Рунге – Кутты четвертого порядка. Данная модель реализована в среде программирования Borland Delphi.

Проверку модуля кинетики осуществляли путем сравнения экспериментальных концентраций биомассы и субстрата ($X^{экс}$ и $S^{экс}$), полученных в одной из рабочих секций аппарата в периодическом режиме с концентрациями X и S , полученными интегрированием уравнений кинетики. На рис. 3.7 показан график зависимости концентрации биомассы от температуры при одинаковых начальных условиях. Точками показаны экспериментальные данные. Средняя относительная погрешность 2,1 %.

На рис. 3.8 показан график зависимости концентрации субстрата от температуры при одинаковых начальных условиях, аналогично графику роста биомассы. Точками также показаны экспериментальные данные. Относительная погрешность при расчете концентрации субстрата не превышает 9 %.

Таблица 3.5

Значения параметров математической модели

Параметр	Численное значение	Размерность
F_0	10	$\text{м}^3 \cdot \text{ч}^{-1}$
F_R	1,48	$\text{м}^3 \cdot \text{ч}^{-1}$
S_0	40	$\text{кг} \cdot \text{м}^{-3}$
S_K	0,43	$\text{кг} \cdot \text{м}^{-3}$
X_H	42,2	$\text{кг} \cdot \text{м}^{-3}$
A_1	0,385	ч^{-1}
E_1	6705,96	$\text{кДж} \cdot \text{кмоль}^{-1} \cdot \text{К}^{-1}$
R	8,31	$\text{кДж} \cdot \text{кмоль}^{-1} \cdot \text{К}^{-1}$
T_1	303,15	К
B	0,356	—
pH_{opt}	8,9	—
k	0,001	К^{-1}
Y_0	0,41	—
A_2	0,832	$\text{кг} \cdot \text{м}^{-3}$
E_2	8190	$\text{кДж} \cdot \text{кмоль}^{-1}$
a	$7,07 \cdot 10^{-3}$	$\text{кг} \cdot \text{кг}^{-1} \cdot \text{ч}^{-1}$
b	$142,8 \cdot 10^{-6}$	$\text{кг} \cdot \text{ч}^{-1}$
K_C	$0,032 \cdot 10^{-3}$	$\text{кг} \cdot \text{м}^{-3}$
C^*	$7,486 \cdot 10^{-3}$	$\text{кг} \cdot \text{м}^{-3}$
β	0,96	—
K_L	$7,22 \cdot 10^{-3}$	м·с
γ_1	1,01	—
γ_2	1,09	—
g	9,81	$\text{м} \cdot \text{с}^{-2}$

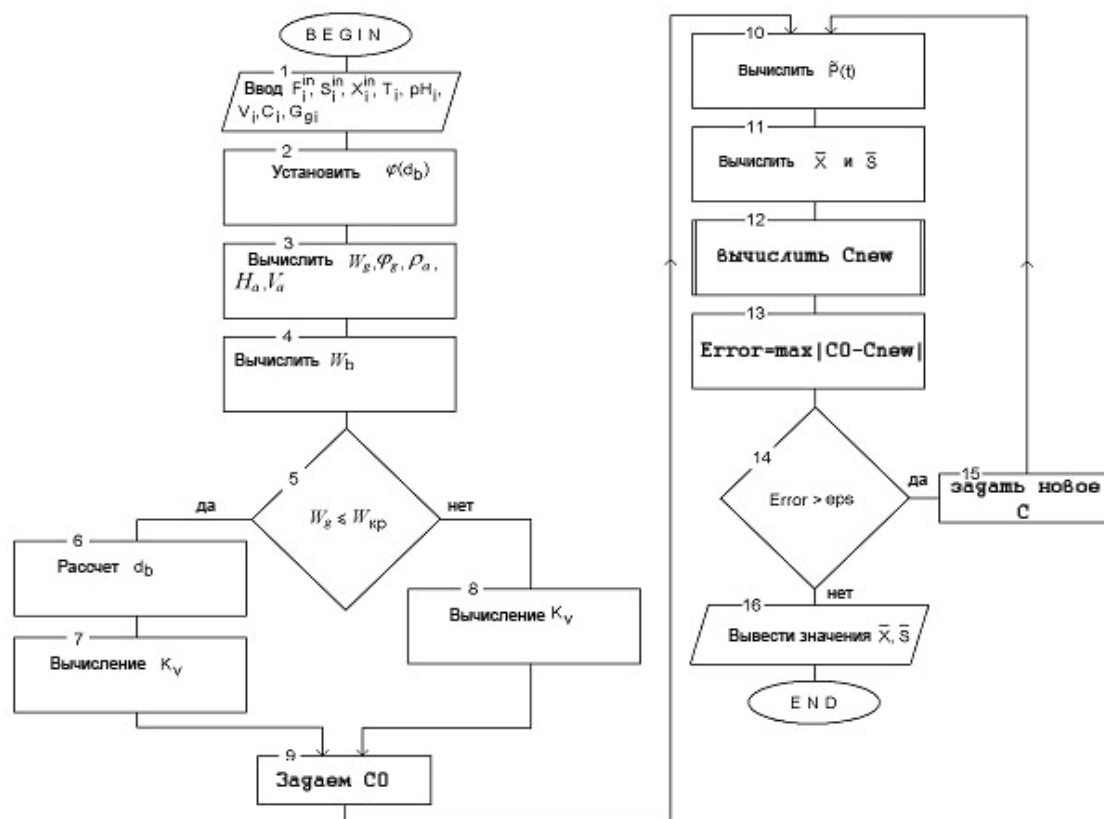
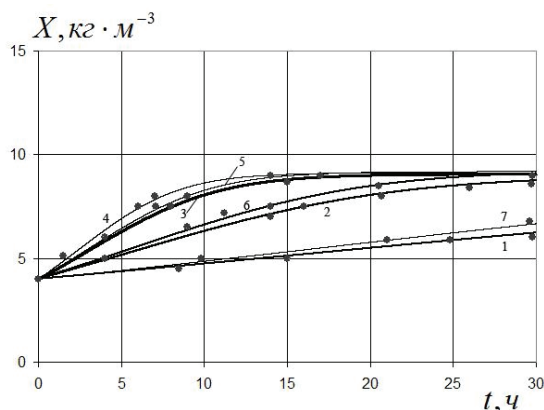
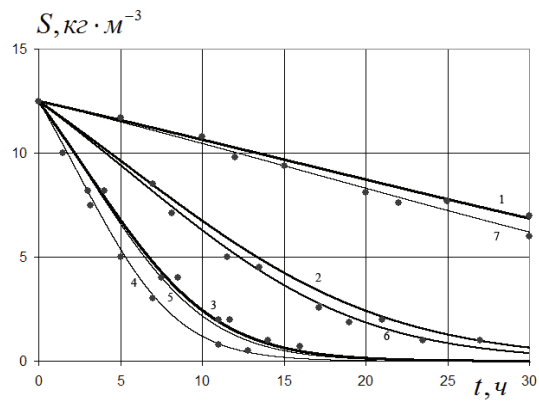


Рис. 3.6. Алгоритм расчета по математической модели (3.5) – (3.20)

Рис. 3.7. Проверка адекватности математической модели биореактора (модуль кинетика). Рост биомассы при кислотности $pH = 8,7$, начальных $X_0 = 4, S_0 = 12,5 \text{ кг·м}^{-3}$ и различной температуре: 1 – 15; 2 – 20; 3 – 25; 4 – 30; 5 – 35; 6 – 40; 7 – 45 °CРис. 3.8. Проверка адекватности математической модели биореактора (модуль кинетика). Утилизация субстрата при кислотности $pH = 8,7$, начальных $X_0 = 4, S_0 = 12,5 \text{ кг·м}^{-3}$ и различной температуре: 1 – 15; 2 – 20; 3 – 25; 4 – 30; 5 – 35; 6 – 40; 7 – 45 °C

В модуле «гидродинамика» исследовали влияние скорости подачи газовой фазы на плотность распределения по времени пребывания (ПРВП) жидкой фазы (рис. 3.9). Из рисунка видно, что при низких скоростях подачи газовой фазы график ПРВП приближается к рассчитанному по модели идеального вытеснения (рис. 3.9, а); с повышением скорости подачи газовой фазы график ПРВП приближается к рассчитанному по модели идеального смешения (рис. 3.9, д).

В модуле «массопередача» исследовали зависимость объемного коэффициента массопередачи K_V от расхода газовой фазы G_g (см. рис. 3.10).

Все модули математической модели были объединены в одну программу, алгоритм работы которой показан на рис. 3.6.

С помощью этой модели проведены вычислительные эксперименты, показывающие поведение основных технологических характеристик в зависимости от удельного разбавления (рис. 3.11–3.12). Под удельным разбавлением будем понимать: $D = \frac{F}{V} \text{ (ч}^{-1}\text{)}$.

Величину $Q = D(x - x_0)$ называют удельной продуктивностью. На рис. 3.12 показан вычислительный

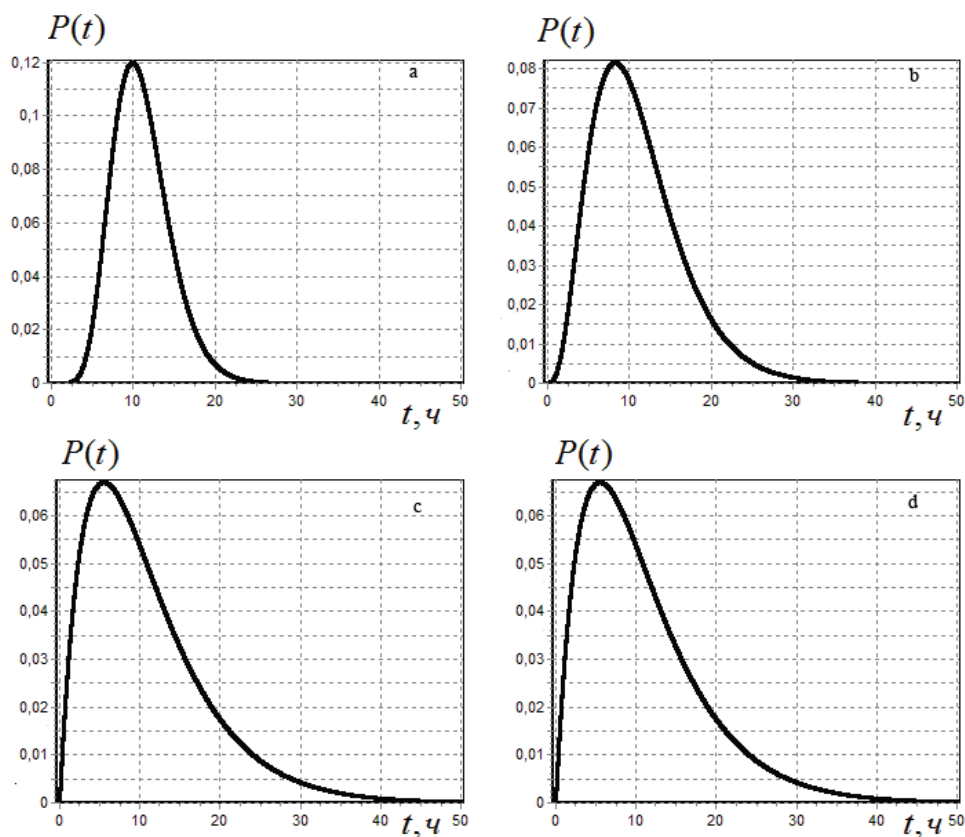


Рис. 3.9. Распределение по времени пребывания жидкой фазы в биореакторе при различных W_g : а) – $W_g = 0,01$ м/с; б) – $W_g = 0,04$ м/с; в) – $W_g = 0,07$ м/с; д) – $W_g = 0,1$ м/с

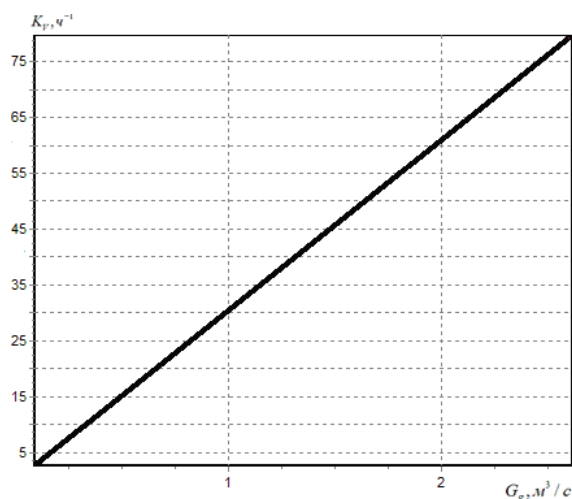


Рис. 3.10. Зависимость объемного коэффициента массопередачи K_V от потока газовой фазы G_g

эксперимент, показывающий зависимость основных параметров процесса в биореакторе от D .

Видно, что максимальная удельная продуктивность возрастает при увеличении начальной концентрации S_0 . Видно, что при начальной концентрации $S_0 = 40$ кг/м³ и при значении $D \approx 0,02$ ч⁻¹ удельная продуктивность достигает своего максимума

$Q = 0,15$ кг/(м³ · ч). Итак, из этого вычислительного эксперимента следует, что удельная продуктивность имеет максимум, т. е. есть такое состояние системы, при котором выход продукта максимален.

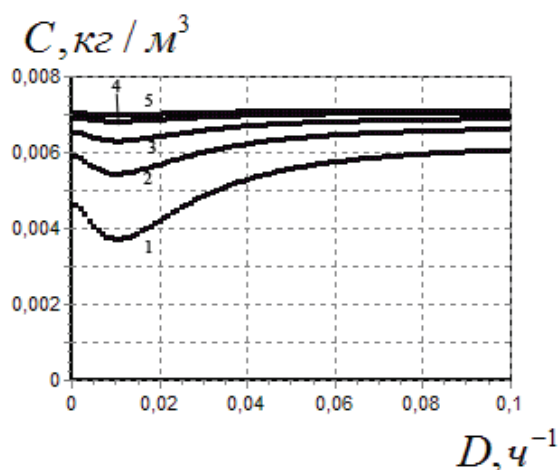


Рис. 3.11. Вычислительный эксперимент. Зависимость концентрации растворенного кислорода (C) от удельного разбавления (D) при различных значениях объемного коэффициента массопередачи K_V . Начальные значения $X_0 = 2$ кг/м³, $S_0 = 40$ кг/м³. Значение K_V : 1 – 50; 2 – 100; 3 – 200; 4 – 500; 5 – 1000 ч⁻¹

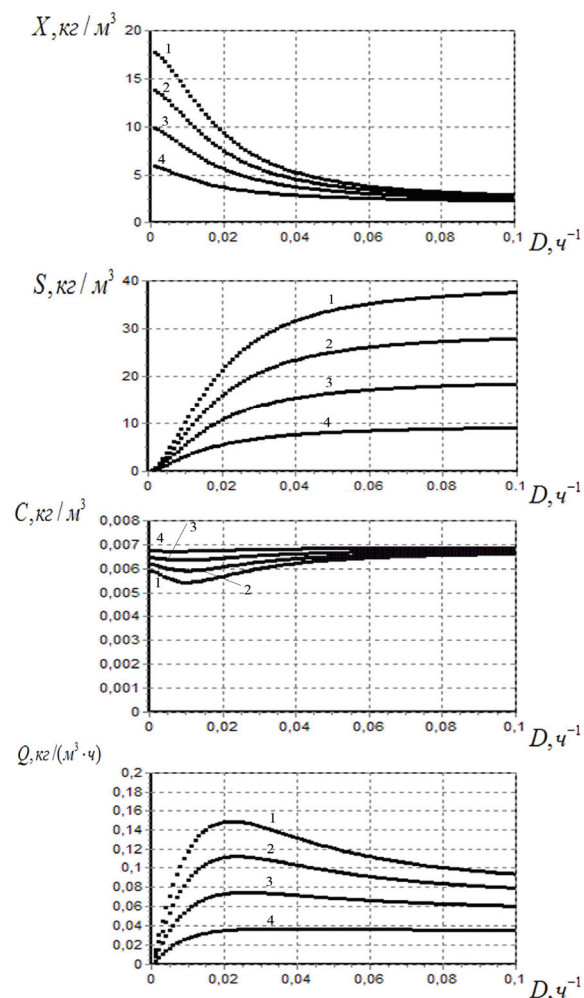


Рис. 3.12. Вычислительный эксперимент. Зависимость концентраций $\bar{X}, \bar{S}, \bar{C}$ и удельной продуктивности Q от D при различных значениях S_0 . Начальные значения $X_0 = 2 \text{ кг/м}^3$, $K_V = 100 \text{ ч}^{-1}$. Значение концентрации S_0 : 1 – 40; 2 – 30; 3 – 20; 4 – 10 кг/м^3

Математическая модель термофлотатора [5, 6]. При разработке математической модели термофлотатора была принята следующая система допущений.

1. Весь объем термофлотатора может быть представлен в виде N ячеек идеального перемешивания (рис. 3.13).

2. Основными компонентами газовой смеси являются углекислый газ (CO_2), кислород (O_2) и азот (N_2).

3. Образование газовых пузырьков, участвующих во флотации, происходит только в нижней (первой) ячейке. Это допущение обосновано тем фактом, что центрами образования пузырьков являются только частицы вновь введенной суспензии, присутствующие лишь в нижней ячейке.

4. Транспорт твердой фазы с пузырьками из $i+1$ в i -ю ($i = 1, 2, \dots, N-1$) примем пропорциональным эффективному количеству пузырьков и концентрации суспензии в i -й ячейке при значениях $x_i \leq x_{кр}$, и пропорциональным только эффективному количеству пузырьков при $x_i > x_{кр}$.

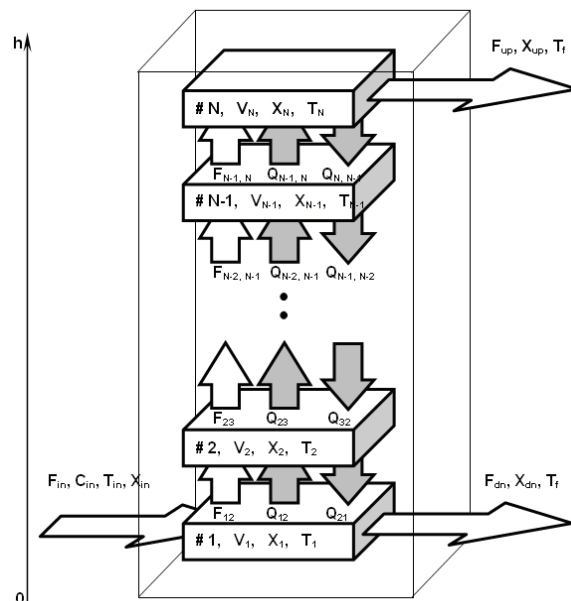


Рис. 3.13. Представление термофлотатора в виде ячеечной модели

5. Транспорт твердой фазы с пузырьками из $i+1$ в i -ю ($i = 1, 2, \dots, N-1$) примем пропорциональным количеству пузырьков, утративших способность к флотации в $i+1$ ячейке. Пузырьки считаются утратившими способность к флотации при выходе их диаметров из диапазона флотируемости.

Информационная модель взаимосвязи основных процессов показана на рис. 3.14. Основными модулями, позволяющими проводить расчет процессов в термофлотаторе, являются: флотируемость твердой фазы, абсорбция-десорбция смеси газов, кинетика роста газового пузырька, транспорт твердой фазы, гидродинамическая обстановка в термофлотаторе.

Флотация частиц органического материала возможна лишь пузырьками газа, имеющими размеры от r_{min} до r_{max} . Уравнения (3.21), (3.22) представляют модуль флотируемости.

$$r_{min} = \gamma_1 \left(\frac{3\sigma r_p^2}{2\rho_l g} \right)^{0,25} \quad (3.21)$$

$$r_{max} = \frac{3\sigma \gamma_2}{2r_p \rho_p g} \quad (3.22)$$

Уравнения, полученные на основе закона Генри – (3.23) – (3.33), используются для определения растворимости газовой смеси в жидкости:

$$P = m \cdot y, \quad (3.23)$$

$$y_j = \frac{p_j}{m_j}, \quad (3.24)$$

где индексы соответствуют: 1 – CO_2 , 2 – O_2 , 3 – N_2 .

$$p_j = r_j \cdot k_j \frac{P}{f_j}, \quad (3.25)$$

$$k = \frac{1}{\sum_{j=1}^3 \frac{r_j}{f_j}}, \quad (3.26)$$

$$m_j = a_{0j} + a_{1j}T + a_{2j}T^2 + a_{3j}T^3, \quad (3.27)$$

$$Y_j = \frac{y_j}{1 - \sum_{j=1}^3 y_j}, \quad (3.28)$$

$$Y_{mj} = f_j \frac{y_j}{m_{sr}}, \quad (3.29)$$

$$m_{sr} = \frac{f_0 + \sum_{j=1}^3 f_j \cdot Y_j}{1 + \sum_{j=1}^3 Y_j}, \quad (3.30)$$

$$M_t = \sum_{j=1}^3 Y_{mj} \cdot 1000, \quad (3.31)$$

$$M = \frac{\sum_{j=1}^3 f_j Y_{mj}}{\sum_{j=1}^3 Y_{mj}}. \quad (3.32)$$

Количество газовой смеси можно определить из соотношения:

$$C(T) = \frac{M_t \cdot 22,4 \cdot (T + 273,15) \cdot 100}{293,15 \cdot P \cdot M}. \quad (3.33)$$

Уравнения (3.34) – (3.37) вспомогательные.

$$V_1 = V_2 = \dots V_N = V_a/N \quad (3.34) \quad \Delta h = H_a/N \quad (3.35)$$

$$h_{i\,dn} = \Delta h \cdot (i-1), \quad (3.36) \quad h_{i\,up} = \Delta h \cdot i, \quad (3.37)$$

$$i = 1, \dots, N$$

Уравнения (3.38) – (3.39) позволяют вычислить изменение радиуса газового пузыря по мере его транспорта от нижних слоев к верхним слоям термофлотатора.

$$\frac{dV_b}{dt} = K \Delta P \times$$

$$\times \left(V_b \frac{P_0 + \rho_l g(H_a - h_0)}{P_0 + \rho g(H_a - h_0 - w(t - t_0))} \right)^{2/3} \quad (3.38)$$

$$V_b(t_0) = V_0; \quad R_b = \left(3 \frac{V_b}{4\pi} \right)^{1/3}. \quad (3.39)$$

Если суспензия нагрета от T_{in} до T_f , то произойдет выделение газа в виде пузырьков. Общий объем газа, произведенного в единицу времени:

$$V = F_{in} \psi(\Delta C) = F_{in} \psi[C(T_{in}) - C(T_f)], \quad (3.40)$$

где $\psi(\cdot)$ – функция, обеспечивающая положительность:

$$\psi(\xi) = \begin{cases} \xi, & \xi \geq 0 \\ 0, & \xi < 0 \end{cases}. \quad (3.41)$$

Пусть известен закон распределения $\varphi(r_b)$ образовавшихся пузырьков по размерам. Тогда общее количество пузырьков, образовавшихся в единицу времени, можно определить:

$$n_t = \frac{V}{\frac{4}{3} \pi \int_0^\infty r_b^3 \varphi_1(r_b) dr_b} = \frac{F_{in} \psi[C(T_{in}) - C(T_f)] \gamma_3}{\frac{4}{3} \pi \int_0^\infty r_b^3 \varphi_1(r_b) dr_b}. \quad (3.42)$$

Взаимодействие модулей в модели термофлотации

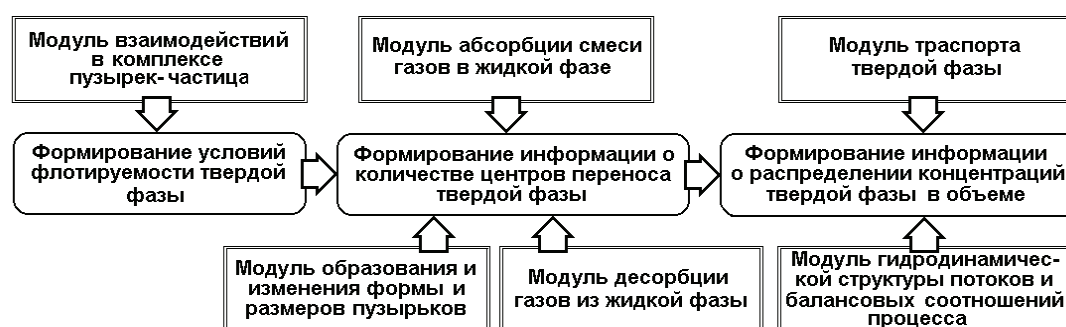


Рис. 3.14. Информационная модель процессов термофлотации. Взаимодействие модулей математической модели

Эффективное количество пузырьков вычисляем по формуле:

$$n_{eff\,i} = \frac{F_{in} \psi[C(T_{in}) - C(T_f)] \gamma_3 \int_{r_{min}}^{r_{max}} \varphi_i(r_b) dr_b}{\frac{4}{3} \pi \int_0^{\infty} r_b^3 \varphi_i(r_b) dr_b \int_0^{\infty} \varphi_i(r_b) dr_b}, \quad i=1, \dots, N-1 \quad (3.43)$$

Определенное число пузырьков в процессе подъема вырастают настолько, что теряют способность удерживать твердую частицу, т. е. $r_b < r_{min}$ или $r_b > r_{max}$. Рассчитать количество пузырьков, утративших флотационную способность в i -й ячейке, можно по формуле:

$$n_{dni} = \frac{F_{in} \psi[C(T_{in}) - C(T_f)] \gamma_3}{\frac{4}{3} \pi \int_0^{\infty} r_b^3 \varphi_i(r_b) dr_b \int_0^{\infty} \varphi_i(r_b) dr_b} \times \left[\int_0^{r_{min}} \varphi_i(r_b) dr_b + \int_{r_{max}}^{\infty} \varphi_i(r_b) dr_b \right], \quad i=2, \dots, N \quad (3.44)$$

Кинетическая составляющая переноса твердой фазы из i -й в $i+1$ -ю ячейку может быть найдена как:

$$Q_{i,i+1} = \begin{cases} k_1 V_i n_{eff\,i}, & x_i \geq x^* \\ k_2 V_i n_{eff\,i} x_i, & 0 \leq x_i < x^* \end{cases}, \quad i=1, \dots, N-1 \quad (3.45)$$

$$\text{где } k_1 = k_2 x^* \quad (3.46)$$

$$Q_{i+1,i} = k_3 V_{i+1} n_{dni\,i+1}, \quad i=2, \dots, N \quad (3.47)$$

Уравнения материального баланса согласно рис. 3.13 выглядят следующим образом:

$$F_{12} = F_{23} = \dots = F_{N-1,N} = F_{up} = F_{in} - F_{dn} \quad (3.48)$$

$$\begin{cases} F_{in} x_{in} - (F_{12} + F_{dn}) x_1 - Q_{12} + Q_{21} = 0 \\ F_{12} x_1 - F_{23} x_2 + Q_{12} - Q_{23} - Q_{21} + Q_{32} = 0 \\ \vdots \\ F_{i-1,i} x_{i-1} - F_{i,i+1} x_i + \\ + Q_{i-1,i} - Q_{i,i+1} - Q_{i,i-1} + Q_{i+1,i} = 0 \\ \vdots \\ F_{N-2,N-1} x_{N-2} - F_{N-1,N} x_{N-1} + \\ + Q_{N-2,N-1} - Q_{N-1,N} - Q_{N-1,N-2} + Q_{N,N-1} = 0 \\ F_{N-1,N} x_{N-1} - F_{up} x_N + Q_{N-1,N} - Q_{N,N-1} = 0 \end{cases} \quad (3.49)$$

Система уравнений (3.21) – (3.49) является замкнутой и позволяет найти концентрацию биомассы в каждой ячейке термофлотатора. Перечень параметров и их числовые значения показаны в табл. 3.6, 3.7.

Таблица 3.6

Параметры математической модели

Параметр	Описание	Единица измерения
a_0, a_1, a_2, a_3	Коэффициенты аппроксимации	Па, Па/°C, Па/°C ² , Па/°C ³
C	Количество газовой смеси	м ³ /м ³
f_j	Молекулярная масса компонента j	—
F	Массовый расход суспензии	м ³ /ч
g	Ускорение свободного падения	м/с ²
k_1, k_2	Коэффициенты пропорциональности	кг/(м ³ ·ч), 1/ч
$k(P - P^*)$	Движущая сила массопередачи	м/с
m_j	Константа фазового равновесия компонента j	Па
N_i	Общее количество пузырьков	—
N_{eff}	Эффективное количество пузырьков	—
N_{dn}	Количество пузырьков, утратившие способность к флотации	—
N	Количество ячеек	—
Δh	Высота одной ячейки	м
H_a	Высота термофлотатора	м
P	Давление компонента над раствором	Па
P_0	Нормальное атмосферное давление	Па
Q	Кинетическая составляющая переноса твердой фазы между ячейками	кг/ч
r_p	Радиус частицы	м
r_{min}	Минимальный радиус пузырька, участвующий во флотации	м
r_{max}	Максимальный радиус пузырька, участвующий во флотации	м
r	Радиус пузырька	м
T	Температура жидкой фазы	°C
t	Время процесса	с
V	Объем ячейки	м ³
V_a	Объем термофлотатора	м ³
V_b	Объем пузырька	м ³
V_0	Начальный объем пузырька	м ³
x	Концентрация биомассы	кг/м ³
y	Мольная доля компонента в растворе	моль/моль
Y	Относительная мольная доля компонент	моль/моль
ρ_p	Плотность материальной частицы	кг/м ³
ρ_l	Плотность жидкости	кг/м ³
γ_1, γ_2	Поправочные коэффициенты, учитывающие отклонение от сферической формы	—
σ	Коэффициент поверхностного натяжения	Н/м

Таблица 3.7

Значения параметров математической модели

F_{in}	3,09	м ³ /ч
F_{up}	1,5	м ³ /ч
V_a	4,8	м ³
x_{in}	42,2	кг/м ³
T_{in}	20–28	°C
T_f	80–95	°C
x	1,1	кг/м ³
σ	$40,97 \cdot 10^{-3}$	Н/м
ρ_p	1090	кг/м ³
ρ_l	999,52	кг/м ³
γ_1	1	–
γ_2	0,24	–
k_1	$0,22 \cdot 10^{-11}$	кг/(м ³ ·ч)
k_2	$0,2 \cdot 10^{-11}$	1/ч

Алгоритм расчета уравнений математической модели приведен на рис. 3.15.

Адекватность модуля абсорбции проверяли на основе экспериментальных данных по растворимости чистых газов и их смеси из работы [7]. Точки на графиках соответствуют экспериментальным данным, а линии – расчет по модели. Средняя абсолютная погрешность составила для CO₂ – 6 %, для O₂ – 6 %, для N₂ – 3,5 %.

Для проверки адекватности всей математической модели использовали коэффициент разделения $\alpha = X_{up} / X_{in}$. Данный коэффициент показывает отношение концентрации на выходе термофлотатора (X_{up}) к входной концентрации (X_{in}) суспензии. На основе экспериментальных данных [2] и данных, полученных по модели, проведен качественный анализ. Результаты показаны на рис. 3.17.

В ходе вычислительных экспериментов рассчитывали плотность распределения газовых пузырьков по радиусам в каждой ячейке термофлотатора. Результаты представлены на рис. 3.18.

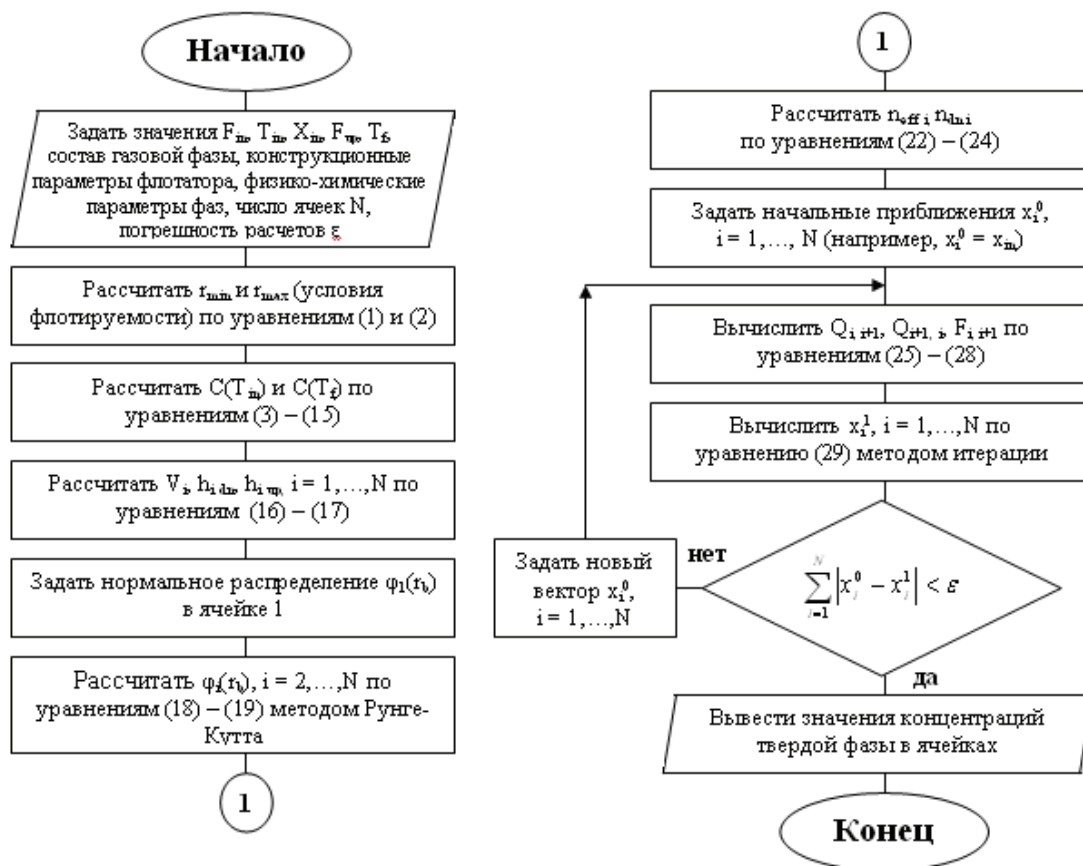
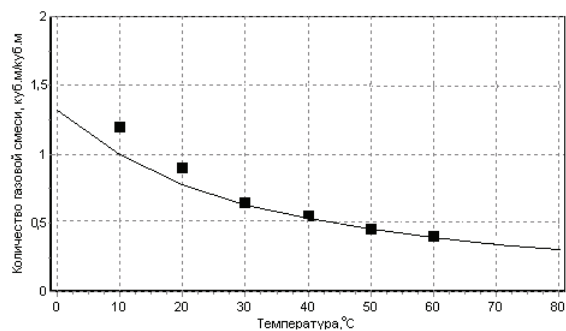
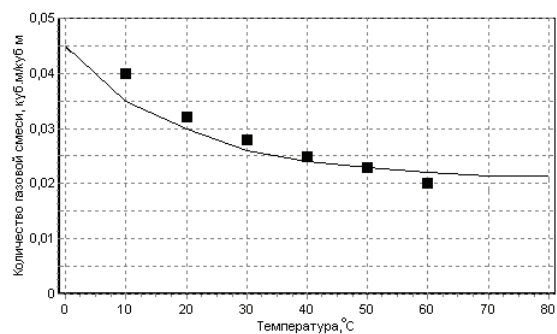


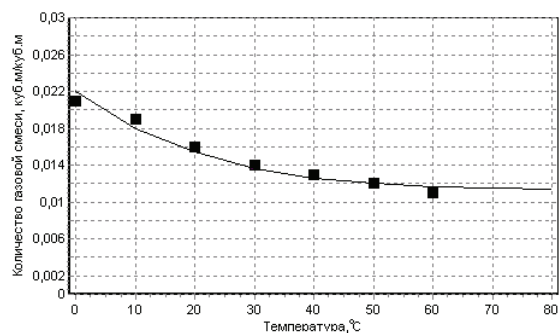
Рис. 3.15. Алгоритм расчета уравнений математической модели



А)

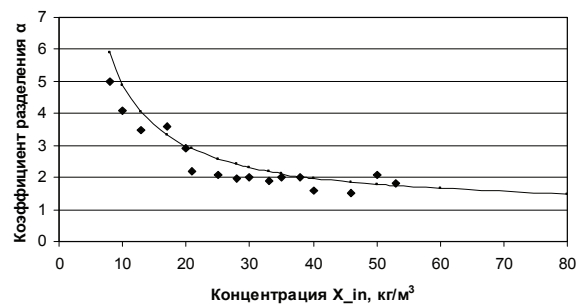


Б)

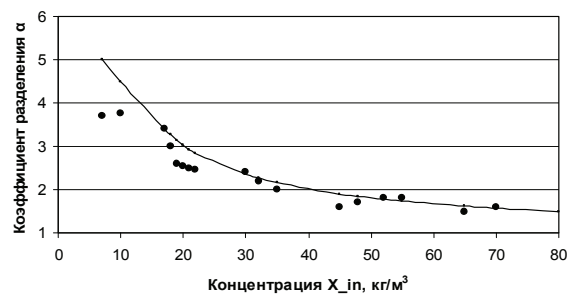


В)

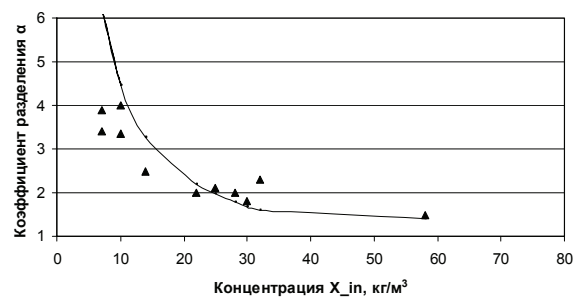
Рис. 3.16. Проверка адекватности процесса абсорбции газовой смеси: А) для CO_2 ; Б) для O_2 ; В) для N_2



А)



Б)



В)

Рис. 3.17. Зависимость коэффициента α от входной концентрации x_{in} при различных температурах термофлотации А) 75–79 °С; Б) 80–84 °С; В) 85–87 °С

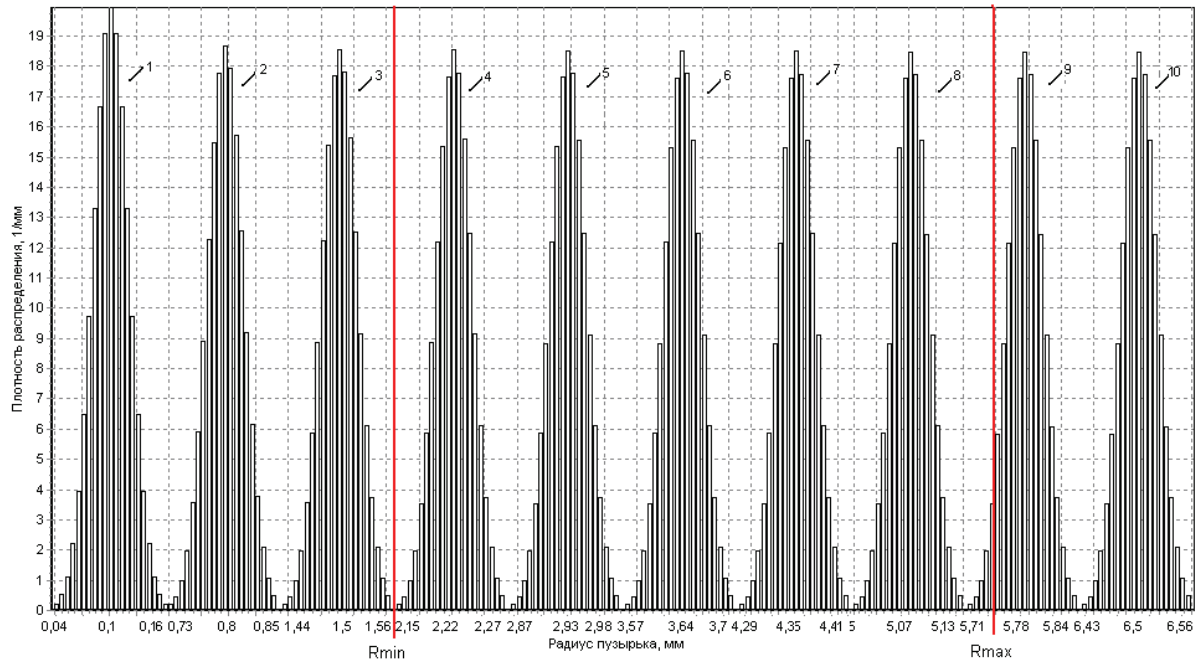


Рис. 3.18. Плотность распределения пузырьков по радиусам, в зависимости от номера ячейки. Цифрами обозначены номера ячеек

Как видно из рис. 3.18, газовый пузырек среднего радиуса 0,1 мм, образовавшийся в первой ячейке, при переходе в верхнюю часть аппарата достигает размера 6,5 мм. Максимальное значение функции плотности распределения уменьшается при переходе в следующую ячейку, поскольку увеличивается дисперсия среднего.

Для частиц с радиусом $r_p = 10^{-3}$ м и $\rho_l = 999,52$ кг/м³, $\rho_p = 1090$ кг/м³, $\sigma = 40,97 \cdot 10^{-3}$ н/м получаем условия флотиремости $r_{min} = 1,58$ мм и $r_{max} = 5,75$ мм.

Общее количество образовавшихся пузырьков в первой ячейке составляет 184 510 728. Как видно из рис. 3.18, пузырьки достигают минимального радиуса флотиремости только в четвертой ячейке, а утрачивают способность к флотации, т. е. выходят из условий флотиремости, в восьмой ячейке.

Изменение числа эффективных пузырьков и пузырьков, утративших способность к флотации, в зависимости от номера ячейки показано на рис. 3.19.

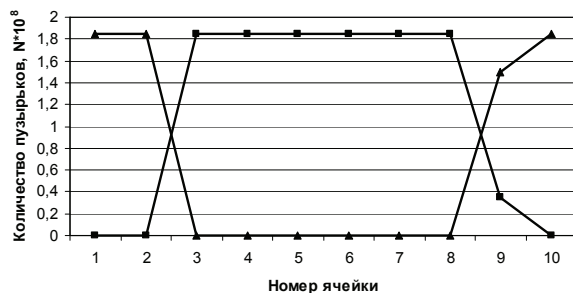


Рис. 3.19. Изменение числа эффективных пузырьков (—■—) и числа пузырьков, потерявших способность к флотации (---▲---)

На рис. 3.20 показано, как меняется концентрация суспензии при различных температурах флотации T_f . Как видно из графика, при увеличении температуры флотации концентрация увеличивается.

На рис. 3.21 показано влияние потока верха — F_{up} на изменение концентрации суспензии. Можно сделать вывод, что при увеличении потока F_{up} разделение суспензии происходит хуже и концентрация на выходе аппарата уменьшается.

На рис. 3.22 показано влияние температуры суспензии на входе в термофлотатор на значение концентраций в ячейках. Из графика видно, что если суспензия нагрета, то концентрации биомассы уменьшаются, соответственно, при больших температурах суспензии на входе в термофлотатор разделение суспензии происходит хуже, чем при малых.

На рис. 3.20–3.22 показано, как меняется концентрация суспензии при различных входных параметрах в зависимости от высоты термофлотатора или номера ячейки. В ячейках 1, 2, 3 пузырьки, образующиеся в процессе термофлотации, имеют малые размеры; они не участвуют в подъеме твердой фазы (рис. 3.20). В этих ячейках транспорт частиц, а следовательно, и концентрирование, происходит за счет конвективных потоков. В ячейках 4–8 начинает проявляться кинетика процесса. Это означает, что транспорт частиц осуществляется вместе с пузырьками. В последних ячейках значительная доля пузырьков утрачивают свою способность к флотации.

Из рис. 3.20, 3.21 и 3.22 можно сделать вывод, что реальный аппарат представляет собой 2-ячеечную систему. Поэтому созданные ранее 2-ячеечные математические модели могут быть в достаточной степени адекватны реальному процессу [8, 9].

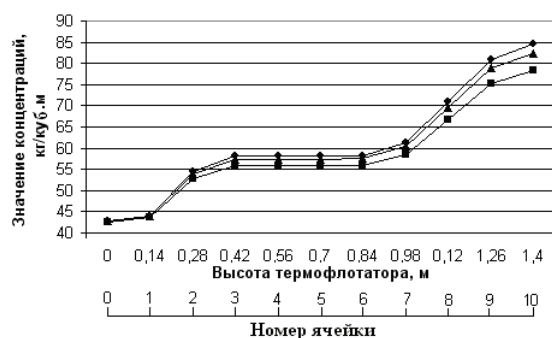


Рис. 3.20. Влияние температуры флотации T_f на изменение концентраций. Линиями указаны: $\blacksquare$ — $T_f = 65$ °C, $\blacktriangle$ — $T_f = 80$ °C, $\bullet$ — $T_f = 95$ °C

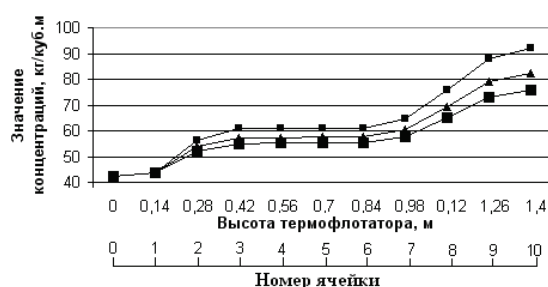


Рис. 3.21. Влияние потока верха $F_{вп}$ на изменение концентраций. Линиями показаны: $\blacksquare$ — $F_{вп} = 1,2$ м³/ч, $\blacktriangle$ — $F_{вп} = 1,5$ м³/ч, $\bullet$ — $F_{вп} = 1,8$ м³/ч

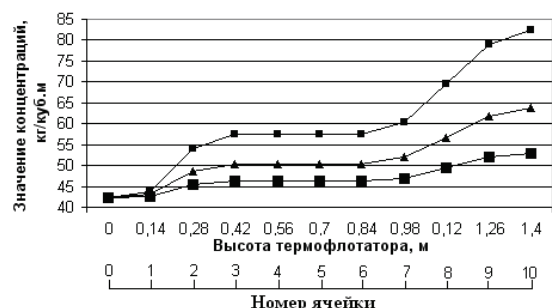


Рис. 3.22. Влияние входной температуры T_{in} на изменение концентраций. Линиями показаны: $\blacksquare$ — $T_{in} = 20$ °C, $\blacktriangle$ — $T_{in} = 35$ °C, $\bullet$ — $T_{in} = 50$ °C

Математическая модель гранулятора. При составлении математического описания процесса были приняты следующие допущения:

- вынос сухого вещества с газовым потоком отсутствует;
- идеальное смешение по поступающей суспензии и гранулам и идеальное вытеснение по газовой фазе;
- вся суспензия поступает на гранулы, находящиеся в аппарате; этот процесс происходит мгновенно; суспензия распределяется по поверхности гранул равномерно;
- испарение влаги происходит только с поверхности гранул;

– процессы дробления и коалесценции гранул отсутствуют;

– твердая (гранулы, ретур), жидкая (суспензия) и газовая фазы перемешиваются в объеме достаточно интенсивно, это создает эффект псевдооживления и дает возможность применять даже к твердой фазе закономерности, характерные для жидкости;

– гранула представляет собой двухслойную конструкцию (рис. 3.23); внутренний слой – это частица ретур; внешний слой – суспензия, вновь попавшая на частицу. Слои имеют круглую форму и представляют собой объекты с сосредоточенными параметрами. После выгрузки такой частицы происходит усреднение в ней температуры и влажности.

Математическое описание кинетики процесса представлено для одной гранулы.

Поскольку вся суспензия распределяется по поверхности гранул равномерно, можно для одной гранулы записать объемный материальный баланс:

$$\frac{dV}{dt} = F_G \cdot \frac{S_g}{\sum S_g} - K_m(P^* - P_g) \cdot S_g, \quad (3.50)$$

где V – объем гранулы, S_g – площадь поверхности гранулы, K_m – коэффициент массопередачи, F_G – массовый расход суспензии.

Площадь одной гранулы равна: $S_g = 4\pi \cdot r^2$, а сумма всех площадей:

$$\sum S_g = N_g \cdot 4\pi \int_{r_{\min}}^{r_{\max}} r_g^2 \cdot \varphi(r_g) dr_g \quad (3.51)$$

где r_g – радиус полученной гранулы, $\varphi(r_g)$ – плотность распределения частиц по радиусам, N_g – количество частиц в аппарате.

Делая замену, получаем:

$$\frac{dV}{dt} = \frac{F_G \cdot 4\pi r^2}{N_g \cdot 4\pi \int_{r_{\min}}^{r_{\max}} r_g^2 \cdot \varphi(r_g) dr_g} - K_m(P^* - P) \cdot 4\pi \cdot r^2 \quad (3.52)$$

Перейдем от объема к радиусу. Объем одной гранулы равен: $V = \frac{4}{3}\pi \cdot r^3$. Отсюда первая производная от

объема по времени: $dV = 4\pi \cdot r^2 dr$. После преобразований получаем:

$$\frac{dr}{dt} = \frac{F_G}{N_g \cdot 4\pi \int_{r_{\min}}^{r_{\max}} r_g^2 \cdot \varphi(r_g) dr_g} - K_m(P^* - P), \quad (3.53)$$

$(P^* - P)$ – движущая сила процесса сушки, представляющая собой разницу парциальных давлений водяного пара внутри гранулы и в ядре потока.

Таблица 3.8

Параметры математической модели гранулятора

Обозначение параметра	Название параметра	Значение параметра	Размерность параметра
F_G	Массовый расход суспензии	1,5	м ³ /ч
x_G	Влагосодержание суспензии	82,5	кг/м ³
ρ_{FG}	Плотность суспензии	1030	кг/м ³
T_{FG}	Температура суспензии	70	°С
N_g	Количество гранул в аппарате	$3 \cdot 10^6$	-
T_6	Температура внутри слоя	105	°С
T_1	Температура подаваемого ретура (н.у.)	20	°С
T_2	Температура внешнего слоя гранулы (н.у.)	70	°С
ρ_1	Плотность ретура	1250	кг/м ³
ρ_2	Плотность внешнего слоя гранулы	1030	кг/м ³
c_1	Теплоемкость ретура	$1,2 \cdot 10^3$	Дж/(кг·К)
c_2	Теплоемкость внешнего слоя гранулы	$4,2 \cdot 10^3$	Дж/(кг·К)
R_{sr}	Среднее значение радиуса ретура (н.у.)	$3 \cdot 10^{-3}$	м
σ	(н.у.)	$0,3 \cdot 10^{-3}$	м
K_{mP}	Коэффициент массопередачи	0,00037	м/ч
K_{T1}	Коэффициент теплопередачи	$5 \cdot 10^5$	Дж/(К·ч·м ²)
K_{T2}	Коэффициент теплопередачи	$2,5 \cdot 10^6$	Дж/(К·ч·м ²)
T_{sr}	Средняя температура в грануле	98	°С
μ	Удельная теплота парообразования	$2258 \cdot 10^3$	Дж/кг

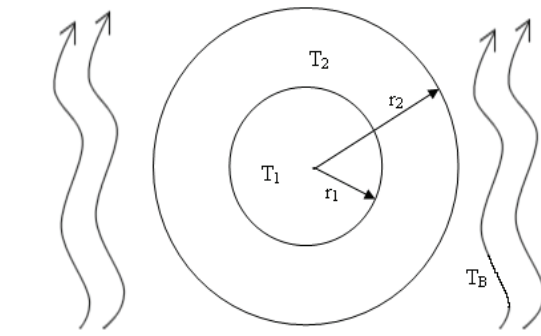


Рис. 3.23. Конструкция гранулы: r_1 и T_1 – соответственно радиус и температура частицы ретура, r_2 и T_2 – радиус и температура полученной частицы

Анализируя (53), делаем вывод о линейном росте гранулы. В результате уравнение примет вид:

$$r_g = r_1 + \left[\frac{F_G}{N_g \cdot 4\pi \int_{r_{\min}}^{r_{\max}} r_g^2 \cdot \varphi(r_g) dr_g} - K_m (P^* - P) \right] \cdot t \quad (3.54)$$

Из уравнения видно, что рост гранулы идет лишь за счет увеличения внешнего слоя.

В связи с отсутствием взаимодействия внутреннего слоя с суспензией теплообмен происходит лишь с внешним слоем. В результате тепловой баланс для внутреннего слоя гранулы запишется следующим образом:

$$\frac{dT_1}{dt} = \frac{(T_2 - T_1) \cdot K_{T1}}{r_1 \cdot \rho_1 \cdot c_1}, \quad (3.55)$$

где r_1 , ρ_1 , c_1 – радиус, плотность и концентрация ретура соответственно; K_{T1} – коэффициент теплопередачи.

В отличие от внутреннего слоя внешний взаимодействует еще и с суспензией. Поэтому тепловой баланс для данного слоя гранулы примет вид:

$$\frac{4}{3} \pi (r_g - r_1)^3 \cdot \rho_2 \cdot c_2 \frac{dT_2}{dt} = \quad (3.56)$$

$$= -4\pi \cdot r_1^2 (T_2 - T_1) \cdot K_{T1} + F_G \cdot$$

$$+ 4\pi \cdot r_g^2 (T_6 - T_2) \cdot K_{T2} - Q$$

$$\text{где } Q = \begin{cases} 0, & \text{если } T_2 \leq T_{\text{кип}} \\ \frac{dV_g}{dt} \cdot \rho_2 \cdot \mu, & \text{при } T_2 > T_{\text{кип}} \end{cases}$$

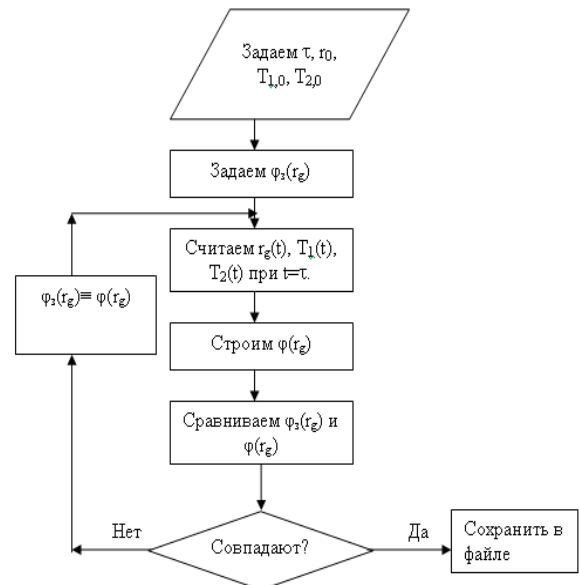


Рис. 3.24. Блок-схема итерационного процесса определения плотности вероятности распределения частиц продукта по радиусам $\varphi(r_g)$

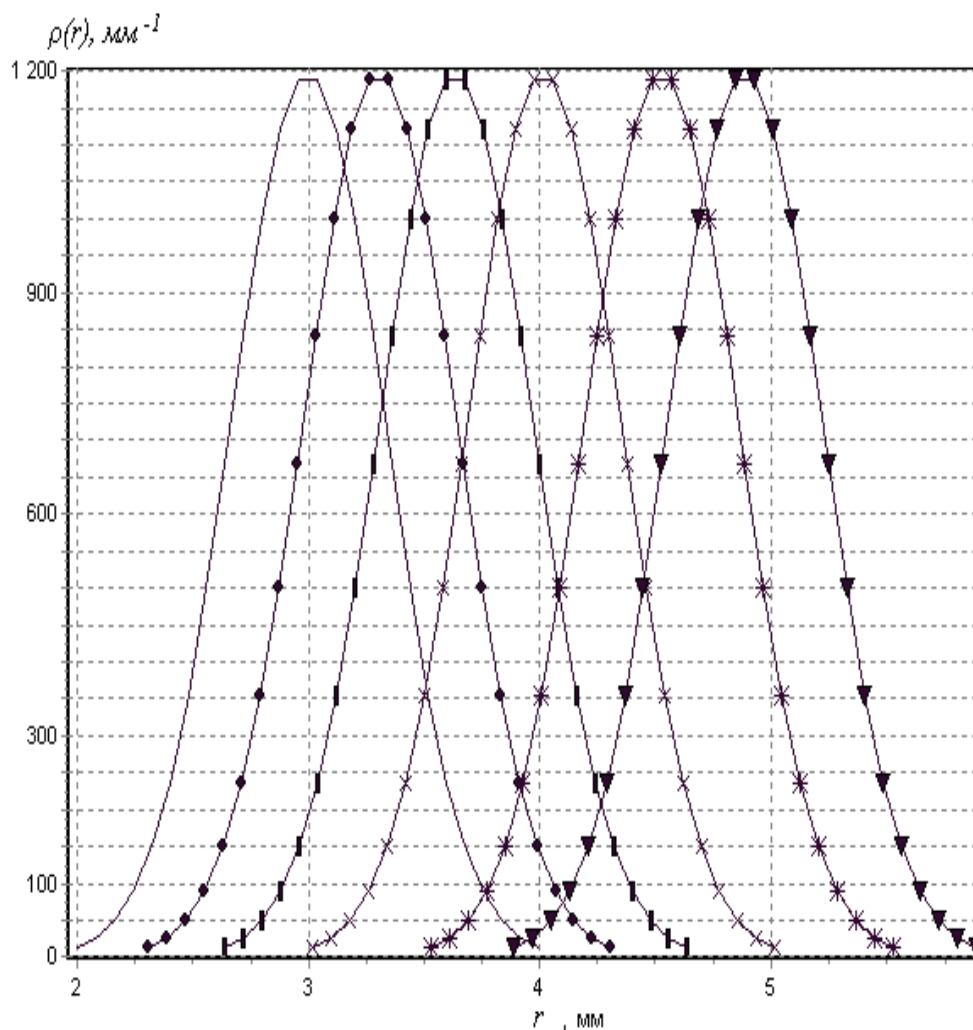


Рис. 3.25. Плотности распределений частиц на выходе гранулятора по радиусам в зависимости от времени пребывания τ ; где: — — начальное распределение; $\bullet$ — распределение частиц на выходе аппарата при $\tau = 6$ мин.; $\blacksquare$ — распределение частиц на выходе аппарата при $\tau = 15$ мин.; $*$ — распределение частиц на выходе аппарата при $\tau = 30$ мин.; $\blacktriangle$ — распределение частиц на выходе аппарата при $\tau = 60$ мин.; $\blacktriangledown$ — распределение частиц на выходе аппарата при $\tau = 90$ мин.

Разделив обе части уравнения на $\frac{4}{3}\pi(r_g - r_1)^3 \cdot \rho_2 \cdot c_2$ и перейдя от объема к радиусу, получим:

$$\frac{dT_2}{dt} = -\frac{3 \cdot r_1^2 (T_2 - T_1) \cdot K_{T_1}}{(r_g(t) - r_1)^3 \cdot \rho_2 \cdot c_2} + \frac{F_G \cdot r_g^2(t) \cdot T_{F_G}}{N_g \cdot \frac{4}{3} \pi (r_g(t) - r_1)^3 \int_{r_{\min}}^{r_{\max}} r_g^2 \cdot \varphi(r_g) dr_g} + \frac{3 \cdot r_g^2(t) (T_\theta - T_2) \cdot K_{T_1}}{(r_g(t) - r_1) \cdot \rho_2 \cdot c_2} - \frac{Q}{\frac{4}{3} \pi (r_g - r_1)^3 \cdot \rho_2 \cdot c_2}, \quad (3.57)$$

где

$$Q = \begin{cases} 0, & \text{если } T_2 \leq T_{\text{кин}} \\ 4\pi \cdot r_1^2 \cdot \rho_2 \cdot \mu \cdot \frac{dr}{dt}, & \text{при } T_2 > T_{\text{кин}} \end{cases}$$

ρ_2, c_2, T_{F_G} — соответственно плотность, концентрация и температура суспензии; T_θ — температура внутри слоя; $T_{\text{кин}}$ — температура кипения; μ — удельная теплота парообразования; $\frac{dr}{dt}$ — правая часть уравнения (3.53).

Первая дробь из уравнения (3.57) соответствует оттоку тепла из внешнего слоя во внутренний. Вторая — определяет тепло, пришедшее в гранулу с потоком суспензии. Третья — характеризует теплообмен с внешней средой. Параметр Q соответствует фазовому переходу — образованию пара из жидкости. Он равен 0, если температура внешнего слоя не превышает температуру кипения. В противном случае, появляется компонента, характеризующая энергию, затрачиваемую на испарение.

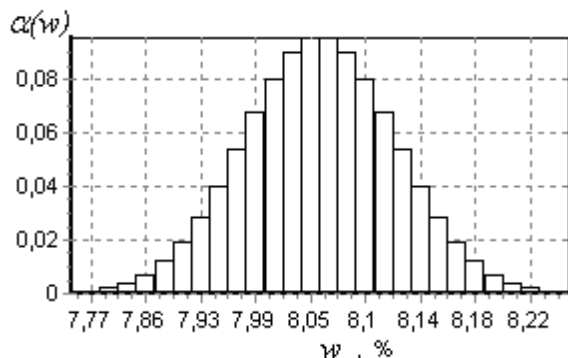


Рис. 3.26. Плотность распределение частиц на выходе гранулятора по влагосодержанию гранул при $\tau = 30$ мин.

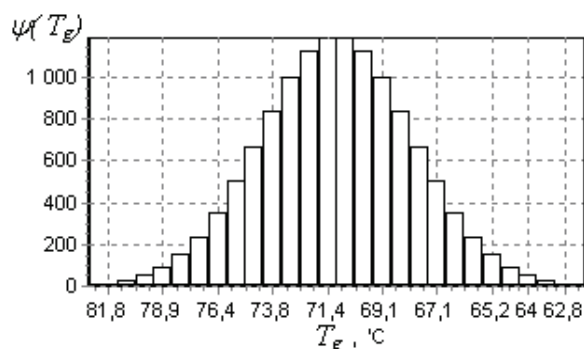


Рис. 3.27. Плотность распределение частиц на выходе аппарата по температуре гранул при $\tau = 30$ мин.

Линейное уравнение (3.54) и систему дифференциальных уравнений (3.55 – 3.56) необходимо решать при следующих начальных условиях:

$$\begin{cases} r(0) = r_1 \\ T_1(0) = T_{1.0} = 20^\circ \text{C} \\ T_2(0) = T_{2.0} = 70^\circ \text{C} \end{cases} \quad (3.58)$$

Будем считать, что коэффициенты K_{T1} , K_{T2} и $K_m(P^* - P)$ мало изменяются в процессе и могут быть найдены в результате параметрической идентификации математической модели на основе экспериментальных данных.

Параметры математической модели гранулятора представлены в табл. 3.8.

Алгоритм расчета уравнений математической модели гранулятора представлен на рис. 3.24.

В ходе вычислительных экспериментов определялись плотности распределений частиц на выходе гранулятора по радиусам в зависимости от времени пребывания в грануляторе, по влагосодержанию гранул и по температуре гранул. Результаты представлены на рис. 3.25 – 3.27.

Таким образом, исследование математических моделей подтвердило их адекватность реальным объектам, а проведенные вычислительные эксперименты выявили наиболее важные зависимости между параметрами процессов.

Расчет экономических показателей производится по специальным уравнениям, позволяющим осуществлять подсчет капитальных, эксплуатационных и приведенных затрат для всех технологических единиц и всего процесса.

Таким образом, в данной статье описаны основные компоненты информационной системы, предназначенной для экономической оптимизации биотехнологического процесса на основе методов математического моделирования.

ЛИТЕРАТУРА К § 3

1. Арзамасцев А.А. // Дис. ... канд. техн. наук. Тамбов: Тамб. ин-т хим. машиностроения, 1984. 298 с.
2. Арзамасцев А.А. // Дис. ... д-ра техн. наук. Тамбов: Тамб. гос. техн. ун-т, 1998. 389 с.
3. Гилл Ф., Мюррей У., Райт М. Практическая оптимизация. М.: Мир, 1985. 509 с.
4. Цирлин А.М. Оптимальное управление технологическими процессами. М.: Энергоатомиздат, 1986. 400 с.
5. Арзамасцев А.А., Дудаков В.П. Компьютерное моделирование и исследование процесса термофлотационного разделения микробных суспензий // Вестн. Тамб. ун-та. Сер. Естеств. и техн. науки. Тамбов, 1996. Т. 2. Вып. 2. С. 94-96.
6. Арзамасцев А.А., Дудаков В.П., Рудобаица С.П. Модель роста газовых пузырьков в процессе флотации // Журнал прикладной химии. 2000. Т. 73. Вып. 1. С. 100-102.
7. Рамм В.М. Абсорбция газов. М.: Химия, 1976. 654 с.
8. Арзамасцев А.А. Термофлотационное разделение микробных суспензий // Ферментная и спиртовая пром-сть. 1984. № 5. С. 37-41.
9. Arzamastsev A. The mathematical model of the bacterial biomass thermoflotation process // Preprints of the 6th International Conference on Computer Application in Biotechnology (IFAC), Garmisch-Partenkirchen, Germany, May 14-17. 1995. P. 278-281.

Поступила в редакцию 26 марта 2009 г.

Arzamastsev A.A. Mathematical models of biological and biotechnological objects. Mathematical models of various biological and biotechnological objects developed by the author for the first time are cited. The given models have been used for reception of the new information in scientific and industrial spheres.

Key words: mathematical model; biological object; parametric identification; calculative experiment.