

УДК 574.6.663.1

Ю. Л. Гордеева, Н. В. Меньшутина, Е. Л. Гордеева, Ю. А. Комиссаров

АЛГОРИТМЫ ОБЕСПЕЧЕНИЯ РЕАЛЬНЫХ УСЛОВИЙ МНОЖЕСТВЕННОСТИ В ПРОЦЕССАХ МИКРОБИОЛОГИЧЕСКОГО СИНТЕЗА ПРИ ЗАДАННОЙ ВЕЛИЧИНЕ ПРОТОКА

Разработаны алгоритмы и приведены результаты расчета показателей стационарных состояний для обеспечения реальных условий множественности, учитывающие технологические ограничения и требования. Алгоритмы включают процедуры оценки необходимых условий возникновения множественности и оценки показателей стационарных состояний в условиях множественности при заданной величине протока. Рассмотрены два алгоритма, ориентированные на два вида технологической постановки задачи. В первом алгоритме задана величина продуктивности по целевому компоненту Q_p . Собственно задание продуктивности подчиняется условию $Q_p < \max Q_p$, где $\max Q_p$ – предварительно вычисленное значение продуктивности в оптимальных условиях. Таким образом, первый алгоритм включает в качестве составляющей части вычисление максимального значения продуктивности. Во втором алгоритме заданы показатели первого стационарного состояния, по которым определяются показатели второго стационарного состояния для одного и того же значения продуктивности. При этом необходимо вычислить координату оптимального состояния S_f^{opt} . Получены численные результаты реализации алгоритмов. По первому алгоритму для величины протока $D = 0,15 \text{ ч}^{-1}$: $\max Q_p = 4,061 \text{ г/(л} \cdot \text{ч)}$; $Q_p = 3,5 \text{ г/(л} \cdot \text{ч)}$; первое стационарное состояние: $S_f^1 = 30,116 \text{ г/л}$; $S^1 = 13,606 \text{ г/л}$; $X^1 = 6,604 \text{ г/л}$; $P^1 = 23,333 \text{ г/л}$; второе стационарное состояние: $S_f^2 = 18,450 \text{ г/л}$; $S^2 = 1,940 \text{ г/л}$; $X^2 = 6,604 \text{ г/л}$; $P^2 = 23,333 \text{ г/л}$. Отмечено, что стационарные состояния различаются только двумя показателями, а именно S_f и S . Аналогичный расчет выполнен для $D = 0,26 \text{ ч}^{-1}$. По второму алгоритму вычисления выполнены для $D = 0,15 \text{ ч}^{-1}$: $S_f^{\text{пред}} = 47,848 \text{ г/л}$; $S_f^{\text{opt}} = 24,296 \text{ г/л}$. Первое стационарное состояние получено для $S_f^1 = 32,99 \text{ г/л}$; $S^1 = 18,839 \text{ г/л}$; $X^1 = 5,66 \text{ г/л}$; $P^1 = 20,0 \text{ г/л}$; $Q_p = 3,0 \text{ г/(л} \cdot \text{ч)}$. Второе стационарное состояние получено для $S_f^2 = 15,55 \text{ г/л}$; $S^2 = 1,401 \text{ г/л}$; $X^2 = 5,66 \text{ г/л}$; $P^2 = 20,0 \text{ г/л}$; $Q_p = 3,0 \text{ г/(л} \cdot \text{ч)}$. Аналогичный расчет выполнен для случая, когда первое стационарное состояние определено значением $S_f^1 = 20,0 \text{ г/л}$.

Ключевые слова: биотехнологические процессы, микробиологический синтез, множественность, алгоритмы обеспечения множественности, стационарное состояние, величина протока, продуктивность.

Введение

Практическая реализация процессов микробиологического синтеза с учетом множественности стационарных состояний базируется на решении уравнений математической модели.

Рассмотрим процесс, математическая модель которого имеет вид [1–3]:

$$-DX + \mu X = 0, \quad (1)$$

$$D(S_f - S) - \frac{1}{Y_{x/s}} \mu X = 0, \quad (2)$$

$$-DP + (\alpha\mu + \beta) X = 0. \quad (3)$$

Кинетическое соотношение:

$$\mu = \mu_m \left(1 - \frac{P}{P_m} \right) \frac{K_i S}{K_m K_i + K_i S + S^2}. \quad (4)$$

Решение системы (1)–(4):

$$S = \frac{B}{2A} + \sqrt{\left(\frac{B}{2A}\right)^2 + \frac{C}{A}}, \quad (5)$$

$$S = \frac{B}{2A} - \sqrt{\left(\frac{B}{2A}\right)^2 + \frac{C}{A}}, \quad (6)$$

где

$$\left. \begin{aligned} A &= a_1 - a_2 D^2 \\ B &= a_1 S_f - a_2 a_3 D \\ C &= a_2 D^2 K_m K_i \end{aligned} \right\}, \quad (7)$$

$$\left. \begin{aligned} a_1 &= \alpha D + \beta \\ a_2 &= P_m / m \\ a_3 &= K_i (\mu_m - D) \\ m &= K_i Y_{x/s} \mu_m \end{aligned} \right\}. \quad (8)$$

В соотношениях (1)–(8) обозначено: μ – удельная скорость роста, ч^{-1} ; μ_m – максимальная удельная скорость роста, ч^{-1} ; P_m – константа насыщения продукта, г/л; K_m – константа насыщения субстрата, г/л; K_i – константа ингибирования, г/л; P , S , X – концентрация продукта, субстрата и биомассы соответственно, г/л; S_f – концентрация субстрата в поступающем потоке, г/л; $D = Q/V$ – скорость разбавления (величина протока), ч^{-1} ; Q – объемная скорость потока через аппарат, л/ч; V – объем заполнения реактора, л; $Y_{x/s}$, г/г; α , г/г; β , ч^{-1} – константы.

Реализация процесса синтеза связана с выполнением ряда ограничений, накладываемых на входные переменные S_f и D .

Приведем некоторые результаты анализа, необходимые для формирования условий множественности.

Отметим ограничения, невыполнение которых приводит к невозможности технологической реализации процесса.

По соотношениям (5) и (6) значение S будет больше нуля для $A > 0$. Если же $A < 0$, условие $S > 0$ выполняется только если $B < 0$. В последнем случае требуется еще учесть и условие неотрицательности дискриминанта в (5) и (6), т. к. значение C всегда больше нуля.

Знак A определяется величиной D . Условие $A = 0$ будет при $D = D^*$, где

$$D^* = \frac{\alpha}{2a_2} + \sqrt{\left(\frac{\alpha}{2a_2}\right)^2 + \frac{\beta}{a_2}}. \quad (9)$$

Таким образом, $A > 0$, если $D < D^*$, и $A < 0$, если $D > D^*$.

Далее, если в процессе ферментации значение S в аппарате равно S_f (т. е. концентрации субстрата на входе), очевидно, что процесс синтеза не протекает. Это условие определяется величиной $D = D^{\text{пред}}$, которое получаем из (4) при условии $\mu = D$ по (1). Так как процесс синтеза не протекает, то P в (4) равно нулю.

Из (4) получаем:

$$D^{\text{пред}} = \frac{\mu_m K_i S_f}{K_m K_i + K_i S_f + S_f^2}, \quad (10)$$

откуда следует, что значение D по технологии должно удовлетворять неравенству

$$D < D^{\text{пред}}.$$

Максимально возможное значение $D^{\text{пред}}$ для любого значения S_f получаем по необходимости условию экстремума функции $D^{\text{пред}}(S_f)$:

$$\max(D^{\text{пред}}) = \frac{\mu_m}{1 + 2\left(\frac{K_m}{K_i}\right)^{1/2}}. \quad (11)$$

Соотношение (11) означает, что для любого значения S_f значение D должно удовлетворять условию

$$D < \max(D^{\text{пред}}).$$

Значение $\max(D^{\text{пред}})$ получено для $S_f = (K_m K_i)^{1/2}$.

Соотношение (10) дает возможность оценить предельное значение S_f (обозначим $S_f^{\text{пред}}$) для любого значения D . Это значение вычисляется по формуле

$$S_f^{\text{пред}} = \frac{a_3}{2D} + \sqrt{\left(\frac{a_3}{2D}\right)^2 - K_m K_i}. \quad (12)$$

Следовательно, если для реализации процесса принято значение D , то значение S_f необходимо принять по условию

$$S_f < S_f^{\text{пред}}.$$

Если для реализации процесса задано значение S_f , величина D должна быть принята по условию

$$D < D^{\text{пред}} < \max(D^{\text{пред}}).$$

Выполнение вышеприведенных ограничений дает возможность получить решения уравнений математической модели, отвечающие условиям практической реализации процесса синтеза.

Условия множественности

Понятие множественности стационарных состояний используется при анализе биотехнологических процессов [3–5], что дает возможность выбора альтернативного варианта организации процесса.

С математической точки зрения при использовании математического моделирования появление множественности связано с получением двух или более решений уравнений математической модели, приводящих к выполнению одинаковых требований, предъявляемых к процессу. Возможность появления множественности решений заложена в нелинейности кинетических соотношений.

С биологической точки зрения множественность можно объяснить изменением структуры метаболических цепей под влиянием внешних воздействий, таких как величина протока D и концентрация субстрата в поступающем потоке S_f . Различная комбинация численных значений D и S_f может давать одинаковые значения продуктивности по целевому компоненту Q_p .

Более точное содержание понятия множественности формулируется следующим образом: множественность существует, если при заданном значении D (с учетом всех ограничений) найдется неединственное значение S_f , обеспечивающее одно и то же значение продуктивности $Q_p = PD$.

И наоборот, множественность существует, если при заданном значении S_f найдется неединственное значение D , обеспечивающее одинаковое значение продуктивности Q_p .

Необходимое условие существования множественности теоретически обосновано для первого варианта (т. е. для S_f при заданном D) [3, 5] и сводится, по существу, к условию существования экстремума Q_p в области значений S_f , отвечающих технологическим требованиям.

Рассмотрим зависимость Q_p от концентрации субстрата S_f , полученную решением уравнений (1)–(6) для $D = 0,15 \text{ ч}^{-1}$ (рис. 1).

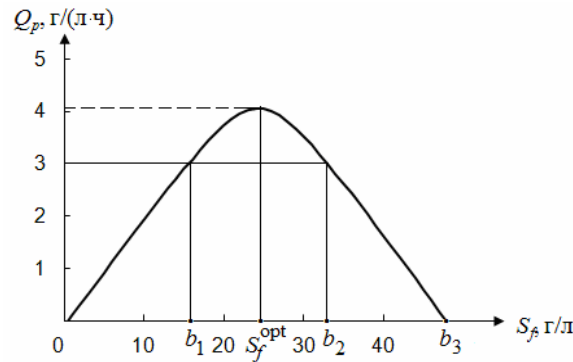


Рис. 1. Зависимость продуктивности от концентрации субстрата в поступающем потоке при $D = 0,15 \text{ ч}^{-1}$: $b_1 = 15,55 \text{ г/л}$; $b_2 = 32,99 \text{ г/л}$; $b_3 = 47,85 \text{ г/л}$; $S_f^{\text{opt}} = 24,296 \text{ г/л}$; $\max Q_p = 4,06 \text{ г/(л} \cdot \text{ч)}$
 Расчет выполнен по данным таблицы [2–5].

Численные значения констант

$\mu_m, \text{ч}^{-1}$	$P_m, \text{г/л}$	$K_m, \text{г/л}$	$K_i, \text{г/л}$	$Y_{X/S}, \text{г/г}$	$\alpha, \text{г/л}$	$\beta, \text{ч}^{-1}$
0,48	50	1,2	22	0,4	2,2	0,2

Максимальное значение Q_p ($\max Q_p$) вычислялось с использованием зависимости (4):

$$Q_p = PD = P_m D \left(1 - \frac{D}{\mu_m} \frac{K_m K_i + K_i S + S^2}{K_i S} \right). \quad (13)$$

По необходимому условию экстремума

$$\frac{dQ_p}{dS} = 0; \quad S^{\text{opt}} = (K_m K_i)^{1/2}. \quad (14)$$

Далее вычисляем $\max Q_p$ с подстановкой S^{opt} в (13):

$$\max Q_p = PD = P_m D \left(1 - \frac{D}{\mu_m} \left[2 \left(\frac{K_m}{K_i} \right)^{1/2} + 1 \right] \right).$$

Значение S_f^{opt} вычисляем, используя уравнение материального баланса:

$$S = \frac{B}{2A} \pm \sqrt{\left(\frac{B}{2A} \right)^2 + \frac{C}{A}},$$

в которое подставляем значение $S = S^{\text{opt}}$, найденное по (14).

Получаем:

$$AK_m K_i - B(K_m K_i)^{1/2} - C = 0.$$

По соотношениям (13) запишем:

$$(a_1 - 2a_2 D^2)(K_m K_i)^{1/2} + a_2 a_3 D = a_1 S_f^{\text{opt}}.$$

Значение S_f для оптимальных условий:

$$S_f^{\text{opt}} = \left[1 - \frac{2a_2 D^2}{a_1} \right] (K_m K_i)^{1/2} + \frac{a_2 a_3}{a_1} D. \quad (15)$$

На рис. 1 видно, что существуют два значения S_f , обеспечивающие одинаковое значение $Q_p < \max Q_p$. Эти значения определяются условиями $S_f^1 < S_f^{\text{opt}}$ и $S_f^2 > S_f^{\text{opt}}$. Так, для $Q_p = 3,0$ г/(л · ч) значения S_f^1 и S_f^2 будут: $b_1 = S_f^1 = 15,55$ г/л и $b_2 = S_f^2 = 32,99$ г/л. Для вычисления координат двух стационарных значений (S_f^1 и S_f^2) использовались соотношения, полученные по (13), (1)–(3) для заданного Q_p :

$$S^1 = \frac{a_4}{2} - \sqrt{\left(\frac{a_4}{2}\right)^2 - K_m K_i}, \quad (16)$$

$$S^2 = \frac{a_4}{2} + \sqrt{\left(\frac{a_4}{2}\right)^2 - K_m K_i}, \quad (17)$$

где

$$a_4 = K_i \left(\frac{P_m D - Q_p}{D^2 P_m} \mu_m - 1 \right) \quad (18)$$

и далее

$$S_f^1 = \frac{Q_p + (\alpha D + \beta) Y_{x/s} S^1}{(\alpha D + \beta) Y_{x/s}}; \quad (19)$$

$$S_f^2 = \frac{Q_p + (\alpha D + \beta) Y_{x/s} S^2}{(\alpha D + \beta) Y_{x/s}}. \quad (20)$$

По формулам (16)–(20) для каждого значения Q_p ($Q_p < \max Q_p$) получаем два значения S : S^1 и S^2 и, соответственно, два значения S_f : S_f^1 и S_f^2 , по которым вычисляются остальные показатели для двух стационарных состояний по (1)–(3).

Для числового примера при $Q_p = 3,0$ г/(л · ч) (рис. 1) было получено:

$$S^1 = 18,84 \text{ г/л}; \quad S_f^1 = 32,99 \text{ г/л};$$

$$S^2 = 1,40 \text{ г/л}; \quad S_f^2 = 15,55 \text{ г/л}.$$

Обратимся к условиям, выполнение которых дает возможность оценить существование множественности по S_f . Будем полагать, что по технологическим требованиям задано максимальное значение S_f : $\max S_f$ и, естественно, задано значение D с учетом ранее обозначенных ограничений.

Если $S_f^{\text{opt}} > \max S_f$, множественность для любого $S_f \leq \max S_f$ не существует, т. е. стационарное состояние будет единственным.

В случае $\max S_f = S_f^{\text{opt}}$ единственное стационарное состояние будет оптимальным, т. е. $Q_p = \max Q_p$.

Таким образом, множественность существует при выполнении одного из неравенств:

$$S_f^{\text{opt}} < S_f^{\text{пред}} \leq \max S_f, \quad (21)$$

$$S_f^{\text{opt}} < \max S_f \leq S_f^{\text{пред}}. \quad (22)$$

Область существования множественности по S_f зависит от численного соотношения между $\max S_f$, $S_f^{\text{пред}}$ и S_f^{opt} .

Если выполняется неравенство (21), то множественность имеет место для всех значений S_f :

$$0 < S_f < S_f^{\text{opt}} \text{ и } S_f^{\text{opt}} < S_f \leq S_f^{\text{пред}}.$$

Если выполняется неравенство (22), то множественность имеет место для всех значений S_f :

$$S_f^0 \leq S_f < S_f^{\text{opt}} \text{ и } S_f^{\text{opt}} < S_f \leq \max S_f. \quad (23)$$

В соотношении (23) значение S_f^0 есть значение $S_f < S_f^{\text{opt}}$, при котором значение Q_p то же самое, что и значение Q_p для $\max S_f$.

Для вычисления S_f^0 , т. е. границы области существования множественности слева от S_f^{opt} , необходимо выполнить следующий расчет.

Для значений $\max S_f$ и D вычисляется S по (5) или (6) в зависимости от соотношения между D и D^* , где S_f в (7) равно $\max S_f$.

Вычисляется Q_p по соотношению

$$Q_p = (\alpha D + \beta) Y_{x/s} (\max S_f - S). \quad (24)$$

Так как нижняя граница множественности слева от S_f^{opt} есть S_f^0 , запишем условие для одного и того же значения Q_p :

$$Q_p = (\alpha D + \beta) Y_{x/s} (S_f^0 - S). \quad (25)$$

Здесь S вычисляется по (5) и (6) с учетом соотношения между D и D^* , где S_f в (7) равно S_f^0 .

Чтобы различить значения S в (24) и (25) обозначим S в (24) как $\max S$, в (25) – $\min S$.

Используя (24) и (25), получаем:

$$\max S_f - \max S = S_f^0 - \min S. \quad (26)$$

Левую часть (26) обозначим как M , величина которой известна, т. к. известно значение $\max S_f$. Получаем:

$$M = \max S_f - \max S,$$

и, следовательно, по (26),

$$M = S_f^0 - \min S.$$

В результате S_f^0 вычисляется по следующим соотношениям:

$$S_f^0 = M + \frac{1}{a} \left(1 - \sqrt{1 - a^2 K_m K_i} \right), \quad (27)$$

где

$$a = \frac{2[A - (\alpha D + \beta)]}{(\alpha D + \beta)M + N}; \quad A = a_1 - a_2 D^2; \quad N = \frac{DP_m}{Y_{x/s}} \left(\frac{D}{\mu_m} - 1 \right). \quad (28)$$

Рассмотрим общий случай вычисления показателей стационарного состояния для условий множественности. Этот вариант предполагает, что задано одно (первое) стационарное состояние в области существования множественности: S_f^1 и D . При этом S_f^1 может быть больше S_f^{opt} или меньше.

По заданному значению S_f^1 вычисляем S^1 , используя (5) или (6) в зависимости от соотношения D и D^* , при этом в (7) необходимо подставить $S_f = S_f^1$.

Далее вычисляем значение M :

$$M = S_f^1 - S^1.$$

Значение S_f^2 (координата второго стационарного состояния) вычисляется в зависимости от следующих условий:

$$\text{если } S_f^1 < S_f^{\text{opt}}, \quad S_f^2 = M + \frac{1}{a} \left(1 + \sqrt{1 - a^2 K_m K_i} \right); \quad (29)$$

$$\text{если } S_f^1 > S_f^{\text{opt}}, \quad S_f^2 = M + \frac{1}{a} \left(1 - \sqrt{1 - a^2 K_m K_i} \right), \quad (30)$$

где значение a вычисляется по (28).

Таким образом, мы получили возможность по данным одного стационарного состояния оценить показатели второго стационарного состояния в условиях множественности.

Алгоритмы расчета показателей стационарных состояний в условиях множественности практически ориентированы на два вида технологической постановки задачи.

По первому варианту показатели вычисляются для заданного значения Q_p , при этом собственно значение Q_p принимается (или задается) в процессе реализации алгоритма по условию $Q_p < \max Q_p$, если $\max S_f \geq S_f^{\text{пред}}$, или $Q_p(\max S) \leq Q_p < \max Q_p$, если $S_f^{\text{opt}} < \max S_f < S_f^{\text{пред}}$.

По второму варианту задается первое стационарное состояние (т. е. S_f и D) с учетом реальных условий организации процесса. Затем вычисляются показатели второго стационарного состояния, обеспечивающие значение Q_p такое же, как и для первого стационарного состояния.

Реализация обоих алгоритмов требует предварительных вычислений: вычисляется максимум $D^{\text{пред}}$, по которому задается значение $D < \max D^{\text{пред}}$; вычисляются S_f^{opt} и $S_f^{\text{пред}}$ для принятого D , которые вносятся в исходные данные. В исходные данные вносятся также $\max S_f$.

Алгоритмы расчета показателей процесса в условиях множественности

Для формирования задания на вычисление показателей процесса в условиях множественности необходимо выполнить предварительные расчеты показателей, обеспечивающих достаточность условий существования множественности для реального процесса.

$$1. \text{ Для выбора величины } D \text{ вычисляется } \max D^{\text{пред}} \text{ по (11), т. е. } \max(D^{\text{пред}}) = \frac{\mu_m}{1 + 2 \left(\frac{K_m}{K_i} \right)^{1/2}}.$$

Значение D принимается по условию $D < \max D^{\text{пред}}$.

2. Для принятого значения D вычисляются значения $S_f^{\text{пред}}$ (по (12)) и S_f^{opt} (по (15)), для вычисления которых рассчитываются a_1, a_2, a_3 (по (8)), т. е.

$$a_1 = \alpha D + \beta; \quad a_2 = P_m / m; \quad a_3 = K_i (\mu_m - D),$$

затем:

$$S_f^{\text{пред}} = \frac{a_3}{2D} + \sqrt{\left(\frac{a_3}{2D} \right)^2 - K_m K_i};$$

$$S_f^{\text{opt}} = \left[1 - \frac{2a_2 D^2}{a_1} \right] (K_m K_i)^{1/2} + \frac{a_2 a_3}{a_1} D.$$

Полученные значения определяют условия существования множественности.

Рассмотрим два алгоритма оценки показателей стационарных состояний в условиях множественности в соответствии с технологическим заданием. **По первому алгоритму** задается величина продуктивности Q_p , для которой вычисляются показатели стационарных состояний.

Задаваемое значение Q_p принимается в процессе реализации алгоритма по условию

$$Q_p < \max Q_p,$$

где $\max Q_p$ вычисляется в процессе реализации алгоритма.

В связи с этим в алгоритм включены процедуры вычисления показателей для оптимальных условий, в том числе вычисления $\max Q_p$.

Блок-схема алгоритма приведена на рис. 2.

В блок-схеме (рис. 2) пунктиром выделена часть, относящаяся к вычислению показателей процесса для оптимальных условий. Полученный результат используется в алгоритме для задания $Q_p < \max Q_p$.

Однако если по технологическим требованиям выполняется условие $\max S_f < S_f^{\text{пред}}$, то необходимо вычислять нижнюю границу задания Q_p . Эта часть вычисления также реализована в алгоритме.

Результаты вычислений представлены тремя группами показателей: группа показателей для оптимальных условий и две группы показателей для стационарных состояний в условиях множественности при заданном значении Q_p .

Ниже приведен пример численных результатов реализации алгоритма.

Предварительные расчеты: $\max D^{\text{пред}} = 0,32717 \text{ ч}^{-1}$; максимальное значение $\max S_f = 33,0 \text{ г/л}$.

Численный расчет приведен для двух значений D : $D = 0,15 \text{ ч}^{-1}$ и $D = 0,26 \text{ ч}^{-1}$.

Для $D = 0,15 \text{ ч}^{-1}$: $S_f^{\text{пред}} = 47,848 \text{ г/л}$; $S_f^{\text{opt}} = 24,296 \text{ г/л}$.

Для $D = 0,26 \text{ ч}^{-1}$: $S_f^{\text{пред}} = 17,069 \text{ г/л}$; $S_f^{\text{opt}} = 13,782 \text{ г/л}$.

Результаты расчета для $D = 0,15 \text{ ч}^{-1}$:

$D^* = 0,253 \text{ ч}^{-1}$; $D < D^*$.

Оптимальные условия: $S_f^{\text{opt}} = 24,296 \text{ г/л}$; $S^{\text{opt}} = 5,138 \text{ г/л}$; $X^{\text{opt}} = 7,663 \text{ г/л}$; $P^{\text{opt}} = 27,076 \text{ г/л}$; $\max Q_p = 4,061 \text{ г/(л} \cdot \text{ч)}$.

Имеем: $S_f^{\text{пред}} > \max S_f$; вычисляем $Q_p^1 = Q_p(\max S_f)$:

$Q_p^1 = 3,0 \text{ г/(л} \cdot \text{ч)}$. Принимаем Q_p из условия $Q_p^1 \leq Q_p < \max Q_p$: $Q_p = 3,5 \text{ г/(л} \cdot \text{ч)}$.

Стационарное состояние 1:

$S_f^1 = 30,116 \text{ г/л}$; $S^1 = 13,606 \text{ г/л}$; $X^1 = 6,604 \text{ г/л}$; $P^1 = 23,333 \text{ г/л}$; $Q_p = 3,5 \text{ г/(л} \cdot \text{ч)}$.

Стационарное состояние 2: $S_f^2 = 18,450 \text{ г/л}$; $S^2 = 1,940 \text{ г/л}$; $X^2 = 6,604 \text{ г/л}$; $P^2 = 23,333 \text{ г/л}$; $Q_p = 3,5 \text{ г/(л} \cdot \text{ч)}$.

Результаты расчета для $D = 0,26 \text{ ч}^{-1}$:

$D^* = 0,253 \text{ ч}^{-1}$; $D > D^*$.

Оптимальные условия: $S_f^{\text{opt}} = 13,782 \text{ г/л}$; $S^{\text{opt}} = 5,138 \text{ г/л}$; $X^{\text{opt}} = 3,457 \text{ г/л}$; $P^{\text{opt}} = 10,266 \text{ г/л}$; $\max Q_p = 2,669 \text{ г/(л} \cdot \text{ч)}$.

Имеем: $S_f^{\text{пред}} < \max S_f$; принимаем Q_p по условию $Q_p < \max Q_p$: $Q_p = 2,0 \text{ г/(л} \cdot \text{ч)}$.

Стационарное состояние 1:

$S_f^1 = 16,1 \text{ г/л}$; $S^1 = 9,624 \text{ г/л}$; $X^1 = 2,591 \text{ г/л}$; $P^1 = 7,662 \text{ г/л}$; $Q_p = 2,0 \text{ г/(л} \cdot \text{ч)}$.

Стационарное состояние 2:

$S_f^2 = 9,220 \text{ г/л}$; $S^2 = 2,743 \text{ г/л}$; $X^2 = 2,591 \text{ г/л}$; $P^2 = 7,662 \text{ г/л}$; $Q_p = 2,0 \text{ г/(л} \cdot \text{ч)}$.

Отметим, что для варианта $D = 0,15 \text{ ч}^{-1}$ расход субстрата в обоих стационарных состояниях одинаков:

$$D(S_f^1 - S^1) = 2,4765 \text{ г/(л} \cdot \text{ч)};$$

$$D(S_f^2 - S^2) = 2,4765 \text{ г/(л} \cdot \text{ч)}.$$

Таким образом, хотя стационарные состояния различаются, затраты субстрата при одном и том же Q_p одинаковы.

Такая же ситуация имеет место и для $D = 0,26 \text{ ч}^{-1}$:

$$D(S_f^1 - S^1) = 1,6838 \text{ г/(л} \cdot \text{ч)};$$

$$D(S_f^2 - S^2) = 1,6840 \text{ г/(л} \cdot \text{ч)}.$$

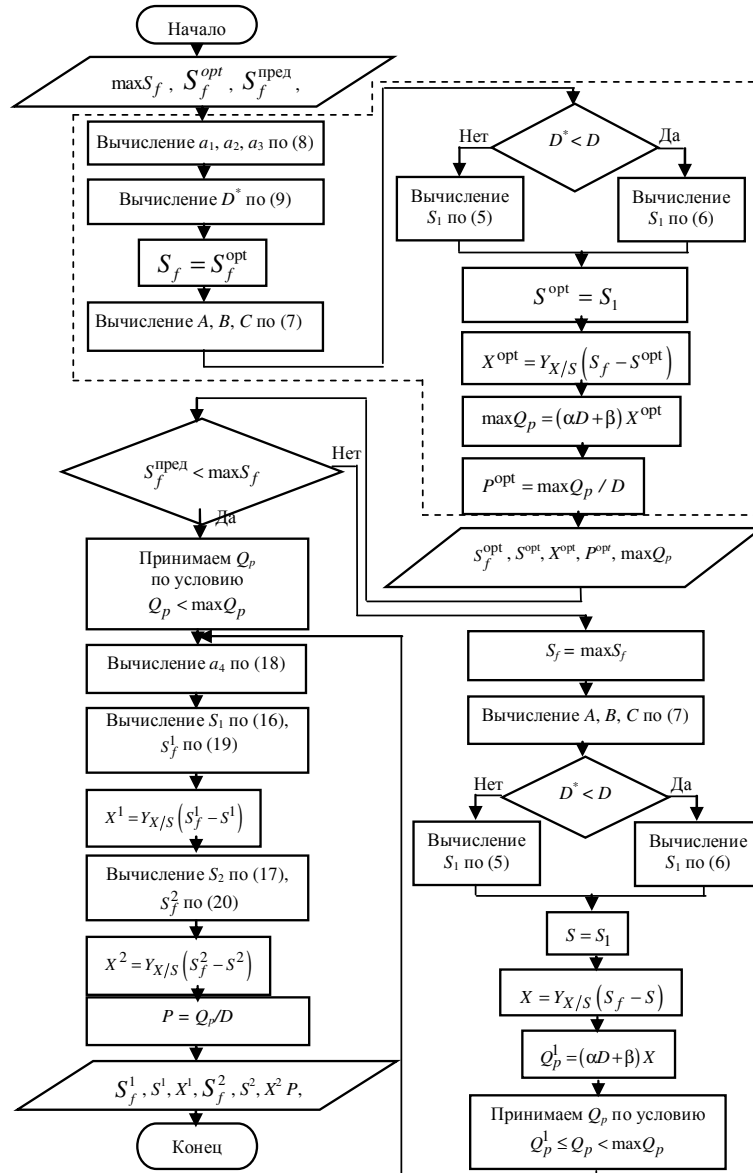


Рис. 2. Блок-схема алгоритма первого варианта

Рассмотрим второй вариант. Блок-схема алгоритма приведена на рис. 3.

По этому варианту необходимо задать первое стационарное состояние, исходные координаты которого S_f^1 и D . Условия задания D известны, и, следовательно, значение S_f^1 необходимо задавать в области существования множественности.

Если имеет место неравенство $S_f^{\text{пред}} < \max S_f$, то значение S_f^1 может быть задано как $S_f^1 < S_f^{\text{opt}}$ или $S_f^1 > S_f^{\text{opt}}$.

В том случае, когда имеется неравенство $S_f^{\text{opt}} < \max S_f \leq S_f^{\text{пред}}$, значение S_f^1 может быть задано как $S_f^{\text{opt}} < S_f^1 \leq \max S_f$ или $S_f^{\text{opt}} > S_f^1 \geq S_f^0$.

Значение S_f^0 вычисляется в процессе реализации алгоритма.

Ниже приведен пример численных результатов реализации алгоритма для $D = 0,15 \text{ ч}^{-1}$.

Предварительные расчеты: $\max D^{\text{пред}} = 0,32717 \text{ ч}^{-1}$; максимальное значение $\max S_f = 50,0 \text{ г/л}$; $S_f^{\text{пред}} = 47,848 \text{ г/л}$; $S_f^{\text{opt}} = 24,296 \text{ г/л}$.

В соответствии с алгоритмом $S_f^{\text{пред}} < \max S_f$.

Принимаем первое стационарное состояние по условию $S_f^1 < S_f^{\text{пред}}$, $S_f^1 = 32,99 \text{ г/л}$.

Вычисленное значение $S^1 = 18,8396 \text{ г/л}$.

Значение $M_1 = 14,15$. Тогда $S_f^2 = 15,55 \text{ г/л}$; $S^2 = 1,401 \text{ г/л}$.

Стационарное состояние 1 (заданное по условию):

$S_f^1 = 32,99 \text{ г/л}$; $S^1 = 18,8395 \text{ г/л}$; $X^1 = 5,66 \text{ г/л}$; $P^1 = 20,0 \text{ г/л}$; $Q_p = 3,0 \text{ г/(л} \cdot \text{ч)}$.

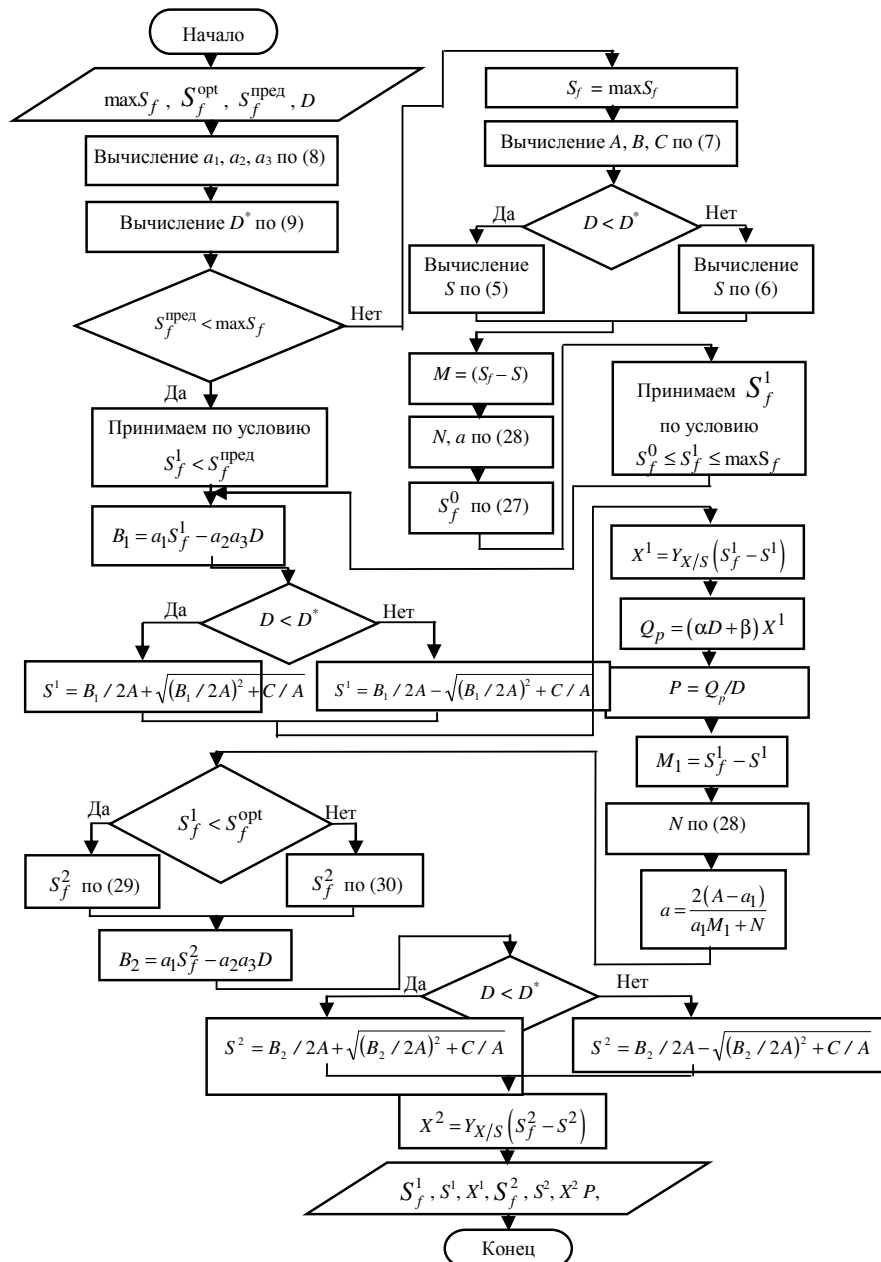


Рис. 3. Блок-схема алгоритма второго варианта

Стационарное состояние 2:

$$S_f^2 = 15,55 \text{ г/л}; S^2 = 1,401 \text{ г/л}; X^2 = 5,66 \text{ г/л}; P^2 = 20,0 \text{ г/л}; Q_p = 3,0 \text{ г/(л} \cdot \text{ч)}.$$

Расчет для условия $\max S_f = 32,992 \text{ г/л}$, т. е. $\max S_f < S_f^{\text{пред}}$.

Значение S_f^0 по алгоритму: $S_f^0 = 15,55 \text{ г/л}$.

Выбираем первое стационарное состояние S_f^1 по условию: $S_f^0 \leq S_f^1 \leq S_f^{\text{opt}}$.

Принимаем $S_f^1 = 20,0 \text{ г/л}$.

Вычисляем: $S^1 = 2,404 \text{ г/л}; M = 17,596; S_f^2 = 28,574 \text{ г/л}; S^2 = 10,978 \text{ г/л}$.

Результат:

Стационарное состояние 1 (заданное по условию):

$$S_f^1 = 20,0 \text{ г/л}; S^1 = 2,404 \text{ г/л}; X^1 = 7,038 \text{ г/л}; P^1 = 24,869 \text{ г/л}; Q_p = 3,73 \text{ г/(л} \cdot \text{ч)}.$$

Стационарное состояние 2:

$$S_f^2 = 28,574 \text{ г/л}; S^2 = 10,978 \text{ г/л}; X^2 = 7,038 \text{ г/л}; P^2 = 24,869 \text{ г/л}; Q_p = 3,0 \text{ г/(л} \cdot \text{ч)}.$$

Заключение

Рассмотренные алгоритмы обеспечивают реальную возможность организации процесса микробиологического синтеза с выбором альтернативных вариантов: оптимального для максимальной продуктивности или одного из двух вариантов для одинакового значения продуктивности. В последнем случае, когда расход субстрата для обоих вариантов одинаков, исходные значения S_f и значения S на выходе из аппарата существенно различаются. Реализация алгоритмов практически не требует применения специальных численных методов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гордеева Ю. Л. Стационарные состояния биотехнологических процессов с нелинейной кинетикой роста микроорганизмов. Множественность при заданной величине протока / Ю. Л. Гордеева, М. Ю. Щербинин, Л. С. Гордеев // Энциклопедия инженера-химика. 2012. № 8. С. 23–27.
2. Гордеева Ю. Л. Моделирование процессов микробиологического синтеза с нелинейной кинетикой роста микроорганизмов / Ю. Л. Гордеева, Ю. А. Ивашкин, Л. С. Гордеев, М. Б. Глебов. М.: РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2011. 100 с.
3. Kumar G. P. Periodic operation of a bioreactor with input multiplicities / G. P. Kumar, J. V. K. Subrahmanya Sastry, M. Chidabaram // Can. J. Chem. Eng. 1993. Vol. 71. P. 766–770.
4. Koppel L. B. Input multiplicities in process control / L. B. Koppel // Chem. Eng. Educ. 1983. Vol. 17, no. 2, pp. 58–92.
5. Гордеева Ю. Л. Алгоритмы расчета показателей процесса микробиологического синтеза с нелинейной кинетикой роста микроорганизмов / Ю. Л. Гордеева, Ю. А. Комиссаров, А. Г. Бородкин // Вестн. Астрахан. гос. техн. ун-та. Сер.: Управление, вычислительная техника и информатика. 2014. № 2. С. 128–137.

Статья поступила в редакцию 7.02.2016

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

Гордеева Юлия Львовна – Россия, 109472, Москва; Московская государственная академия ветеринарной медицины и биотехнологии им. К. И. Скрябина; канд. техн. наук, доцент; доцент кафедры «Информационные технологии, математика и физика»; l.s.gordeev@yandex.ru.

Меньшутина Наталья Васильевна – Россия, 125047, Москва; Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева, г-р техн. наук, профессор; профессор кафедры «Кибернетика химико-технологических процессов»; l.s.gordeev@yandex.ru.

Комиссаров Юрий Алексеевич – Россия, 125047, Москва; Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева, г-р техн. наук, профессор; зав. кафедрой «Электротехника и электроника»; komiss@muctr.ru.

Гордеева Елена Львовна – Россия, 125047, Москва; Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева; канд. техн. наук, доцент; доцент кафедры «Высшая математика»; l.s.gordeev@yandex.ru.



Yu. L. Gordeeva, N. V. Menshutina, E. L. Gordeeva, Yu. A. Komissarov

ALGORITHMS ENSURING THE REAL CONDITIONS OF MULTIPLICITY IN THE MICROBIOLOGICAL SYNTHESIS PROCESSES AT THE GIVEN DILUTION RATE

Abstract. The algorithms are developed and the results of calculating the steady state parameters for real conditions of multiplicity, taking into account the technological limitations and requirements, are presented. The algorithms include the assessment of necessary conditions of occurrence of multiplicity and the assessment of the parameters of the steady states in the context of multiple for the given dilution rate. Two algorithms focused on two types of technological formulation of the problem are considered. According to the first case the value of productivity on the target component Q_p is known. The value of productivity is defined from the condition $Q_p < \max Q_p$, where $\max Q_p$ – previously computed value of productivity in optimal conditions. Thus, the first algorithm includes the part of the calculation of the maximum values of productivity. According to the second case the parameters of the first stationary state are known to compute the parameters of the second stationary state for the same values of productivity. Thus, it is necessary to calculate the coordinate of the optimal state S_f^{opt} . The numerical results of the algorithms have been obtained. For the first algorithm for the dilution rate $D = 0.15 \text{ h}^{-1}$: $\max Q_p = 4,061 \text{ g/(l} \cdot \text{h)}$; $Q_p = 3.5 \text{ g/(l} \cdot \text{h)}$; the first stationary state: $S_f^1 = 30,116 \text{ g/l}$; $S^1 = 13,606 \text{ g/l}$; $X^1 = 6,604 \text{ g/l}$; $P^1 = 23,333 \text{ g/l}$; the second stationary state: $S_f^2 = 18,450 \text{ g/l}$; $S^2 = 1,940 \text{ g/l}$; $X^2 = 6,604 \text{ g/l}$; $P^2 = 23,333 \text{ g/l}$. It is noted that the stationary state differ by only two parameters, namely S_f and S . A similar calculation is performed for $D = 0.26 \text{ h}^{-1}$. According to the second algorithm the calculation is executed for $D = 0,15 \text{ h}^{-1}$: the limit value $S_f = 47,848 \text{ g/l}$; $= 24,296 \text{ g/l}$; the first stationary state obtained for $S_f^1 = 32,99 \text{ g/l}$: $S^1 = 18,839 \text{ g/l}$; $X^1 = 5,66 \text{ g/l}$; $P^1 = 20,0 \text{ g/l}$; $Q_p = 3,0 \text{ g/(l} \cdot \text{h)}$; the second stationary state obtained for $S_f^2 = 15,55 \text{ g/l}$: $S^2 = 1,401 \text{ g/l}$; $X^2 = 5,66 \text{ g/l}$; $P^2 = 20,0 \text{ g/l}$; $Q_p = 3,0 \text{ g/(l} \cdot \text{h)}$. Similar calculation is made for the case where the first stationary state determined by the value of $S_f^1 = 20,0 \text{ g/l}$.

Key words: biotechnological processes, microbiological synthesis, multiplicity, algorithms of multiplicity ensuring, steady state, dilution rate, productivity.

REFERENCES

1. Gordeeva Iu. L., Shcherbinin M. Iu., Gordeev L. S. *Stacionarnye sostoianiiia biotekhnologicheskikh protsessov s nelineinoi kinetiko rosta mikroorganizmov. Mnozhestvennost' pri zadannoi velichine protoka* [Stationary states of biotechnological processes with non-linear kinetics of microorganism growth. Multiplicity at the given dilution rate]. *Entsiklopediia inzhenera-khimika*, 2012, no. 8, pp. 23–27.
2. Gordeeva Iu. L., Ivashkin Iu. A., Gordeev L. S., Glebov M. B. *Modelirovanie protsessov mikrobiologicheskogo sinteza s nelineinoi kinetiko rosta mikroorganizmov* [Modeling of the processes of microbiological synthesis with non-linear kinetics of the microorganism growth]. Moscow, Rossiiskii khimiko-tekhnologicheskii universitet imeni D. I. Mendeleeva, 2011. 100 p.
3. Kumar G. P., Subrahmanya Sastry J. V. K., Chidabaram M. Periodic operation of a bioreactor with input multiplicities. *Can. J. Chem. Eng.*, 1993, vol. 71, pp. 766–770.
4. Koppel L. B. Input multiplicities in process control. *Chem. Eng. Educ.*, 1983, vol. 17, no. 2, pp. 58–92.

5. Gordeeva Iu. L., Komissarov Iu. A., Borodkin A. G. Algoritmy rascheta pokazatelei protsessa mikrobiologicheskogo sinteza s nelineinoi kinetikoii rosta mikroorganizmov [Algorithms of calculation of the parameters of microbiological synthesis process with non-linear kinetics of the microorganism growth]. *Vestnik Astrakhan-skogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta. Seriya: Upravlenie, vychislitel'naia tekhnika i informatika*, 2014, no. 2, pp. 128–137.

The article submitted to the editors 7.02.2016

INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

Gordeeva Yulia Lvovna – Russia, 109472, Moscow; Moscow State Academy of Veterinary Medicine and Biotechnology named after K. I. Skryabin; Candidate of Technical Sciences, Assistant Professor; Assistant Professor of the Department "Information Technologies, Mathematics and Physics"; I.s.gordeev@yandex.ru.

Menshutina Nataliya Vasilievna – Russia, 125047, Moscow; Mendeleev Russian Chemical and Technological University; Doctor of Technical Sciences, Professor; Professor of the Department "Cybernetics of Chemical and Technological Processes"; I.s.gordeev@yandex.ru.

Komissarov Yuriy Alekseevich – Russia, 125047, Moscow; Mendeleev Russian Chemical and Technological University; Doctor of Technical Sciences, Professor; Head of the Department "Electrical Engineering and Electronics"; komiss@muctr.ru.

Gordeeva Elena Lvovna – Russia, 125047, Moscow; Mendeleev Russian Chemical and Technological University; Candidate of Technical Sciences, Assistant Professor; Assistant Professor of the Department "Higher Mathematics"; I.s.gordeev@yandex.ru.

