

# Информационные технологии, моделирование и управление

---

УДК 636.095

Докторант А.В. Дранников, ассистент А.В. Пономарев,  
аспирант Н.Ю. Ситников,  
(Воронеж. гос. ун-т. инж. технол.) кафедра технологии хранения и переработки зерна,  
тел. (473) 255-65-11  
доцент **И.О. Павлов,**  
(Воронеж. гос. ун-т. инж. технол.) кафедра информационных технологий  
моделирования и управления, тел. (473) 255-25-50

## Алгоритмическое и программное обеспечение процесса культивирования сине-зеленых микроводорослей в пленочном биореакторе

Представлено математическое описание процесса культивирования сине-зеленых микроводорослей в пленочном биореакторе. Полученная модель позволяет выбрать рациональные и геометрические параметры биореактора.

The mathematical description of process cultivation blue-green micro seaweed in the film bioreactor is presented. The received model allows to choose rational and geometrical parameters of the bioreactor.

*Ключевые слова:* модель, процесс культивирования, микроводоросли, биореактор.

Одной из важнейших задач комбикормовой промышленности является выработка продукции, которая сочетала бы в себе одновременно низкую цену и гарантированно высокое продуктивное действие. Этим требованиям в полной мере отвечают природные биологически активные добавки – суспензии сине-зеленых микроскопических водорослей (хлорелла, спирулина и др.). Их действие основано на естественном сочетании природных стимулирующих и биологически активных веществ, выделяемых клетками в культуральную среду (суспензию). Ранее стимулирующий эффект микроводорослей не использовался вследствие скормливания их в виде пасты или порошка. Получаемая белково-углеводная масса является трудноусвояемой из-за значительной толщины клеточных стенок (до 1 мкм при диаметре клетки 1,5...10 мкм), для разрушения которых требуется термическая обработка, повышающая энергозатраты и снижающая биологическую ценность продукта.

Поэтому перспективным является использование суспензии сине-зеленых водорослей, содержащих аминокислоты, витамины, ферменты и другие вещества, выделение которых клетками наиболее интенсивно в начальном периоде роста.

Получение суспензии целесообразно осуществлять в биореакторах пленочного типа, в которых она стекает по внутренней поверхности цилиндрических прозрачных трубок с одновременным подводом углекислого газа и световой энергии [1].

Нами разработан экспериментальный биореактор, позволяющий осуществлять процесс культивирования суспензии микроводорослей в широком диапазоне изменения технологических параметров [5, 7].

Цель исследований – выбор рациональных технологических и геометрических параметров биореактора методами математического моделирования.

Математическая постановка задачи моделирования определялась однопараметрической диффузионной моделью [2, 3, 4], учитывающей в общем случае распределение компонентов питания и микробных клеток по высоте трубок пленочного биореактора, основным параметром которой является коэффициент продольного перемешивания или критерий Пекле

$$Pe = W \bar{t} / D_f,$$

где  $W$  – средняя скорости течения пленки;  $H$  – высота аппарата;  $D_H$  – коэффициент диффузии.

При этом предполагалось, что радиальное перемешивание среды в колонне незначительно и концентрация вещества является непрерывной функцией пространственной координаты. Для установившегося процесса в биохимическом реакторе модель представлена в следующем виде:

$$D_f \frac{d^2 C}{dz^2} - W \frac{dC}{dz} \pm \bar{t} R(C) = 0, \quad (1)$$

с граничными условиями третьего рода на левой границе участка

$$z = 0: WC_0 = WC - D_f \frac{dC}{dz},$$

$$z = \bar{t} : \frac{dC}{dz} = 0,$$

где (+) – относится к «источнику», (–) – к «стоку»;  $C$  – концентрация распределяемого вещества;  $\bar{t}$  – среднее время пребывания суспензии в аппарате;  $R(C)$  – скорость потребления вещества из среды в процессе биосинтеза.

Предложено рассматривать распределение концентрации абсолютно сухой биомассы суспензии в безразмерном виде вдоль одномерной области:

$$\frac{1}{Pe} \frac{d^2 x}{dZ^2} - \frac{dx}{dZ} + \bar{t} (\varepsilon x - \beta x^2) = 0, \quad (2)$$

где  $\varepsilon$  – коэффициент скорости роста культуры;  $\beta$  – кинетический параметр; с граничными условиями:

$$Z = 0: \frac{1}{Pe} \frac{dx}{dZ} = x, \quad (3)$$

$$Z = 1: \frac{dx}{dZ} = 0, \quad (4)$$

где  $x$  – безразмерная концентрация распределяемого вещества,  $x = C/C_0$ ;  $Z = z/\bar{t}$  – безразмерная пространственная координата.

Нами было использовано сочетание метода конечных элементов и метода Галёркина [6] для решения дифференциального уравнения (2) с заданными краевыми условиями задачи (3) – (4). Это позволило получить приближенное решение дифференциального уравнения (2) при выполнении условия: разность между приближенным и точным решениями должна быть ортогональна функциям, используемым при аппроксимации [6].

В соответствии с [6] представим дифференциальное уравнение (2) в неявном виде:

$$Lu - f = 0,$$

где  $L$  – дифференциальный оператор, а приближенное решение найдем по формуле

$$\bar{u} = \sum N_i U_i,$$

тогда

$$Lu - f = \xi,$$

где  $\xi$  – ошибка результатов моделирования.

Для получения минимального значения  $\xi$  для каждой из базисных функций  $N_i$ , ортогональных ошибке по области  $R$ , требуется выполнение равенства

$$\int_R N_i \xi dR = 0. \quad (5)$$

В соответствии с методами Галёркина и конечных элементов получили уравнения в виде

$$\int_R N_\beta L\{\varphi\} dR = 0, \quad \beta = i, j, k, \dots, \quad (6)$$

где  $\varphi$  – искомая величина, которая аппроксимируется соотношением

$$\varphi = N_i \hat{O}_i + N_j \Phi_j = [N]\{\hat{O}\}, \quad (7)$$

где  $[N] = [N_i N_j]$  – матричная строка;

$\{\hat{O}\} = \left\{ \begin{matrix} \hat{O}_i \\ \hat{O}_j \end{matrix} \right\}$  – вектор-столбец.

Высший порядок производных в  $L(\varphi)$  не ограничен и на единицу больше порядка непрерывности интерполяционных соотношений. Поскольку рассматриваемые интерполяционные соотношения (7) нулевого порядка непрерывности (непрерывна  $\varphi$ , но не ее первая производная), то в уравнения (6) включены производные порядка не выше первого. Это ограничение может вызвать сложности построения алгоритма, которые преодолены

сокращением порядка  $L(\varphi)$ , интегрированием по частям.

Для решения модели объекта исследования (2) – (4) методом конечных элементов задана система дифференциальных уравнений в частных производных. Для упрощения описания алгоритма расчета уравнение (1) перепишем с заменой переменных

$$\frac{d^2 x}{dZ^2} - a \frac{dx}{dZ} + b x = 0 \quad (8)$$

с граничными условиями

$$Z = 0: \frac{dx}{dZ} = A; \quad (9)$$

$$Z = 1: \frac{dx}{dZ} = 0, \quad (10)$$

где  $a = \text{Pe}$ ;  $b = \text{Pe} \varepsilon$ ;  $A = \text{Pe} x_0$ .

Применение метода Галёркина к дифференциальному уравнению (8) заключалось в решении интегрального уравнения

$$\int_0^1 [N]^T \left( \frac{d^2 x}{dZ^2} - a \frac{dx}{dZ} + b x \right) dZ = 0. \quad (11)$$

Интерполяционная функция для  $x$  определена на отдельном элементе, поэтому уравнение (11) записано для суммы

$$\sum_{e=1}^{NE} \int_{L^{(e)}} [N^{(e)}]^T \left( \frac{d^2 x^{(e)}}{dZ^2} - a \frac{dx^{(e)}}{dZ} + b x^{(e)} \right) dZ = 0, \quad (12)$$

где  $NE$  – число элементов;  $L^{(e)}$  – длина отдельного элемента.

Для вычисления выбраны функции формы и преобразован интеграл (12) таким образом, что он содержит производные порядка не выше первого.

Ограничимся линейной моделью для  $x$

$$x = N_i X_i + N_j X_j =$$

$$= \left[ \left( 1 - \frac{Z}{L} \right), \frac{Z}{L} \right] \begin{Bmatrix} X_i \\ X_j \end{Bmatrix} = [N^{(e)}] \{X\}$$

интеграл

$$\int_{L^{(e)}} [N^{(e)}]^T \frac{d^2 x}{dZ^2} dZ$$

преобразуем путем интегрирования по частям

$$\int_{L^{(e)}} [N^{(e)}]^T \frac{d^2 x}{dZ^2} dZ = [N^{(e)}]^T \frac{dx}{dZ} \Big|_{Z_i}^{Z_j} - \int_{L^{(e)}} \frac{dN^{(e)}}{dZ} \frac{dx}{dZ} dZ. \quad (13)$$

Подставляя (13) в (11) и группируя подобные члены, получаем

$$\begin{aligned} & [N^{(e)}]^T \frac{dx}{dZ} \Big|_{Z_i}^{Z_j} - \\ & - \int_{L^{(e)}} \left[ \frac{d[N^{(e)}]^T}{dZ} + a [N^{(e)}]^T \right] \frac{dx}{dZ} dZ + \\ & + b \int_{L^{(e)}} [N^{(e)}]^T x dZ. \end{aligned} \quad (14)$$

Сумма интегралов в (1.14) представляет собой матрицу коэффициентов элемента  $[k^{(e)}]$  в уравнении

$$[k^{(e)}] \{X\} = \{f^{(e)}\}.$$

Первое слагаемое в выражении (14) соответствует вектор–столбцу  $\{F\}$  и определяет производную  $dy/dx$  (наклон) на каждом конце конечного элемента. При неизвестном наклоне элемента в узловых точках первое слагаемое в (14) не учитывается.

Вычислим производные в выражении первого интеграла (14):

$$\frac{d}{dZ} [N]^T = \frac{d}{dZ} \begin{Bmatrix} 1 - \frac{Z}{L} \\ \frac{Z}{L} \end{Bmatrix} = \frac{1}{L} \begin{Bmatrix} -1 \\ 1 \end{Bmatrix},$$

$$\frac{dx}{dZ} = \frac{d}{dZ} \{N\} \{X\} = \frac{1}{L} [-1; 1] \begin{Bmatrix} X_i \\ X_j \end{Bmatrix},$$

и после подстановки получим

$$\begin{aligned} & \int_0^L \left[ \frac{d}{dZ} [N]^T + a [N]^T \right] \frac{dx}{dZ} dZ = \\ & = \begin{bmatrix} \frac{1}{L} - \frac{a}{2} & -\frac{1}{L} + \frac{a}{2} \\ -\frac{1}{L} - \frac{a}{2} & \frac{1}{L} + \frac{a}{2} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} X_i \\ X_j \end{Bmatrix}. \end{aligned}$$

Вычислим второй интеграл в (14)

$$b \int_{L^{(e)}} [N]^T x dZ = b \int_{L^{(e)}} [N]^T x dZ =$$

$$= b \begin{bmatrix} \frac{L}{3} & \frac{L}{6} \\ \frac{L}{6} & \frac{L}{3} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} X_i \\ X_j \end{Bmatrix}.$$

Верхние индексы отброшены, так как рассматривается отдельный элемент. Интегрирование выполняется в пределах от нуля до  $L$ , так как функции формы в (5) выражены в местной системе координат с центром в  $i$ -м узле,  $L$  – длина элемента.

Алгоритм решения задачи моделирования (8). Разобьем аппарат по длине на  $NE = 5$  элементов (рис. 1), построенных на множестве узлов

$$\Omega: \{X_1, X_2, \dots, X_6\},$$

$$X_i = (i-1) \cdot L, i = 1, \dots, NP, \quad NP = NE + 1,$$

$L = 1/NE$ . Пронумеруем элементы и узлы таким образом, чтобы каждый элемент  $e$  был ограничен сверху узлом  $i$ , а снизу – узлом  $j$ , причем  $i < j$ .

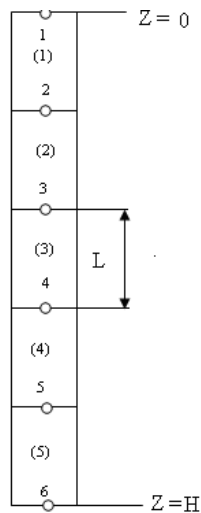


Рис. 1. Область перемещения суспензии сверху вниз: в скобках помечены номер конечного элемента, цифрой (помечен) – узел

Рассмотрим систему уравнений для первого элемента. Из (9) известны значения производных функции  $x$  в узлах 1 и 6  $\frac{dx}{dz}|_{x_1} = A$  и

$$\frac{dx}{dz}|_{x_6} = 0. \text{ В других узлах значение производной}$$

неизвестно, поэтому в них не указывается значение производной, а система уравнений для первого элемента в матричной форме имеет следующий вид:

$$\begin{Bmatrix} 1 - \frac{0}{L} \\ 0 \\ \frac{0}{L} \end{Bmatrix} A + \begin{Bmatrix} 1 - \frac{X_2}{L} \\ \frac{X_2}{L} \end{Bmatrix} \cdot 0 - \begin{bmatrix} \frac{1}{L} - \frac{a}{2} & -\frac{1}{L} + \frac{a}{2} \\ -\frac{1}{L} - \frac{a}{2} & \frac{1}{L} + \frac{a}{2} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} X_1 \\ X_2 \end{Bmatrix} + b \begin{bmatrix} \frac{L}{3} & \frac{L}{6} \\ \frac{L}{6} & \frac{L}{3} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} X_1 \\ X_2 \end{Bmatrix} = 0$$

Для элементов  $n = 2, \dots, NE$ :

$$-\begin{bmatrix} \frac{1}{L} - \frac{a}{2} & -\frac{1}{L} + \frac{a}{2} \\ -\frac{1}{L} - \frac{a}{2} & \frac{1}{L} + \frac{a}{2} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} X_n \\ X_{n+1} \end{Bmatrix} + b \begin{bmatrix} \frac{L}{3} & \frac{L}{6} \\ \frac{L}{6} & \frac{L}{3} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} X_n \\ X_{n+1} \end{Bmatrix} = 0$$

Объединим матрицы элементов, получим систему линейных алгебраических уравнений:

$$\begin{aligned} & -\left(\frac{1}{L} + \frac{a}{2} + \frac{bL}{3}\right)u_1 + \left(\frac{1}{L} - \frac{a}{2} + \frac{bL}{6}\right)u_2 - A = 0; \\ & \left(\frac{1}{L} + \frac{a}{2} + \frac{bL}{6}\right)u_1 + \left(-\frac{2}{L} + \frac{2bL}{3}\right)u_2 + \left(\frac{1}{L} - \frac{a}{2} + \frac{bL}{6}\right)u_3 = 0; \\ & \left(\frac{1}{L} + \frac{a}{2} + \frac{bL}{6}\right)u_2 + \left(-\frac{2}{L} + \frac{2bL}{3}\right)u_3 + \left(\frac{1}{L} - \frac{a}{2} + \frac{bL}{6}\right)u_4 = 0; \\ & \left(\frac{1}{L} + \frac{a}{2} + \frac{bL}{6}\right)u_3 + \left(-\frac{2}{L} + \frac{2bL}{3}\right)u_4 + \left(\frac{1}{L} - \frac{a}{2} + \frac{bL}{6}\right)u_5 = 0; \\ & \left(\frac{1}{L} + \frac{a}{2} + \frac{bL}{6}\right)u_4 + \left(-\frac{2}{L} + \frac{2bL}{3}\right)u_5 + \left(\frac{1}{L} - \frac{a}{2} + \frac{bL}{6}\right)u_6 = 0; \\ & \left(\frac{1}{L} + \frac{a}{2} + \frac{bL}{6}\right)u_5 + \left(-\frac{1}{L} - \frac{a}{2} + \frac{bL}{3}\right)u_6 = 0. \end{aligned} \quad (15)$$

Тестовый пример. Для случая  $a - 4b > 0$  найдено точное решение задачи (8) – (10) для  $a = 1,1$ ;  $b = 0,264$ ;  $A = 0,055$ :

$$\begin{aligned} x(Z) = & \frac{2e^{\left(\frac{a}{2} + \frac{\sqrt{a^2-4b}}{2}\right)Z} A e^{\left(\frac{a}{2} - \frac{\sqrt{a^2-4b}}{2}\right)Z}}{\left(-e^{\left(\frac{a}{2} + \frac{\sqrt{a^2-4b}}{2}\right)Z} + e^{\left(\frac{a}{2} - \frac{\sqrt{a^2-4b}}{2}\right)Z}\right) \left(a + \sqrt{a^2-4b}\right)} + \\ & + \frac{2A e^{\left(\frac{a}{2} + \frac{\sqrt{a^2-4b}}{2}\right)Z} e^{\left(\frac{a}{2} - \frac{\sqrt{a^2-4b}}{2}\right)Z}}{e^{\left(\frac{a}{2} + \frac{\sqrt{a^2-4b}}{2}\right)Z} a - e^{\left(\frac{a}{2} - \frac{\sqrt{a^2-4b}}{2}\right)Z} \sqrt{a^2-4b} - e^{\left(\frac{a}{2} - \frac{\sqrt{a^2-4b}}{2}\right)Z} a + e^{\left(\frac{a}{2} + \frac{\sqrt{a^2-4b}}{2}\right)Z} \sqrt{a^2-4b}} \end{aligned} \quad (16)$$

Решая систему (15), получаем значение концентрации в узловых точках  $u_i, i = 1 \dots 6$ . Текст программы представлен на рис. 2.

```

> restart;
    Число элементов
> NE:=15;
                                         NE:=15

    Число узлов
> NP:=NE+1;
                                         NP:=16

> PR_MKE:=proc(PE,tcp,epsilon,x0,N)
> local a,b,A,u,ur,i,n,L,SYST,PER,rez,Z,U,dr0,drk;
> global S;
> L:=1/N;
> a:=PE;
> b:=PE*tcp*epsilon;
> A:=PE*x0;
    Система алгебраических уравнений
> ur[1]:=(-1/L+a/2)*u[1]+(1/L-a/2)*u[2]+b*L/3*u[1]+b*L/6*u[2]-A;
> for n from 2 to N-1 do
> ur[n]:=(1/L+a/2)*u[n-1]+(-1/L-a/2)*u[n]+b*L/6*u[n-1]+b*L/3*u[n]+(-1/L+a/2)*u[n]+(1/L-a/2)*u[n+1]
+b*L/3*u[n]+b*L/6*u[n+1];
> od;
> ur[N]:=(1/L+a/2)*u[N-1]+(-1/L-a/2)*u[N]+b*L/6*u[N-1]+b*L/3*u[N];
> SYST:={seq(ur[n],n=1..N)};
> PER:={seq(u[n],n=1..N)};
> rez:=fsolve(SYST,PER);
> for i from 1 to N do
> Z[i]:=(i-1)*L; od;
> for i from 1 to N do
> U[i]:=subs(rez,u[i]); od;
> dr0:=(U[2]-U[1])/L;
> drk:=(U[N]-U[N-1])/L;
> printf(" xn= %10.5f A= %10.5f dr0= %10.5f drk= %10.5f \n",U[1],A,dr0,drk);
> S:={seq([Z[i],U[i]],i=1..N)};
> end proc;
> # PE tcp epsilon x0 N
> S1:=PR_MKE(1.1,10,0.3,0.05,100);
xn= 0.00501 A= 0.05500 dr0= 0.05522 drk= 0.00082
> plot([S1]);

```

Рис. 2. Текст программы в языке символьных вычислений Maple

Результаты расчета представлены в виде кривой на рис. 3.

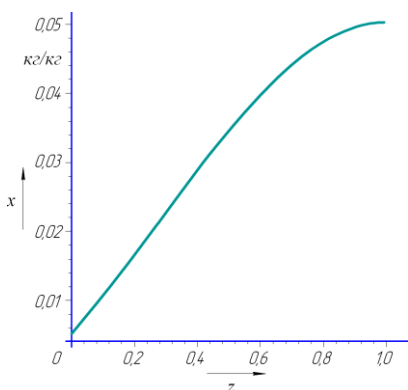


Рис. 3. Расчетная кривая изменения концентрации суспензии по высоте трубки

Из рис. 3 видно, что значение концентрации абсолютно сухих веществ суспензии увеличивается при течении суспензии сверху вниз к нижней точке прозрачной трубки биореактора.

Результаты расчета методом конечных элементов оценивались средней ошибкой аппроксимации:

$$A_N = \frac{100}{n} \sum_{i=1}^n \left| \frac{x_i - x'_i}{x_i} \right|,$$

где  $x_i$ ,  $x'_i$  – точно вычисленное по формуле (16) и вычисленное по методу конечных элементов значение концентрации;  $n$  – число узлов конечно-элементной модели.

При  $NE = 5$  средняя ошибка аппроксимации вычисленной концентрации составила 2,2 %, а при  $NE = 10 - 0,04$  %.

Предлагаем метод моделирования процесса культивирования сине-зеленых микроводорослей, основанный на математической интерпретации концентрации абсолютно сухих веществ суспензии при ее росте по высоте прозрачной трубки в пленочном биореакторе совместным сочетанием методов Галёркина и конечных элементов. Идентификация параметров предлагаемой модели по экспериментальным данным позволила получить удовлетворительную сходимость результатов моделирования и использовать их для определения геометрических размеров биореактора.

При решении задачи моделирования был рассмотрен линейный одномерный симплекс-элемент. Для повышения точности решения потребуется другой подход, который состоит в применении элементов высокого порядка, то есть комплекс или мультиплекс элементов, требующий меньшее количество элементов. Это могут быть квадратичные и кубические элементы [6], что будет следующим этапом при моделировании исследуемого процесса.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Войнов, Н. А. Пленочные биореакторы [Текст] / Н. А. Войнов, Е. В. Сугак, Н. А. Николаев, С. М. Воронин. – Красноярск: БОРГЕС, 2001. – 252 с.

2. Кафаров, В. В. Математическое моделирование основных процессов химических производств [Текст] / В. В. Кафаров, М. Б. Глебов. – М.: Высш. шк., 1991. – 400 с.

3. Кафаров, В. В. Моделирование биохимических реакторов [Текст] / В. В. Кафаров, А. Ю. Викарев, Л. С. Гордеев. – М.: Лесная пром-сть, 1979. – 344 с.

4. Кафаров, В. В. Основы массопередачи [Текст] / В. В. Кафаров. – М.: Высш. школа, 1979. – 439 с.

5. Пат. № 2363728 РФ, МПК7 C12M 1/04 C12M 1/06 B01D 3/28. Пленочный аппарат [Текст] / Шевцов А.А., Шенцова Е.С., Дранников А.В., Пономарев А.В. (РФ) – № 2008118450/13; заявл. 13.05.2008; опубл. 10.08.2009; Бюл. № 22.

6. Сигерлинд, Л. Применение метода конечных элементов [Текст] / Л. Сигерлинд. – М.: Мир, 1979. – 392 с.

7. Шевцов, А.А. Пленочный фотобиореактор [Текст] / А.А. Шевцов, Е.С. Шенцова, А.В. Дранников, А.В. Пономарев // Сборник докладов VI научно-технической конференции с международным участием «Высокоэффективные пищевые технологии, методы и средства их реализации: эффективное использование ресурсов отрасли». – М.: МГУПП, 2008. – С. 186-187.