

*Лапин Е. Д., Белоусов В. В., Юрина О. А.*

## **МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ БИОТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ**

*Работа выполнена под руководством к.т.н., доц. Иванова О. О.*

*ТГТУ, Кафедра «Технологическое оборудование  
и пищевые технологии»*

Особенностью современной биотехнологии, процессы которой протекают с высокими скоростями, при различных температурных режимах в многофазных системах является их большая сложность, обусловливаемая нелинейностью, большим числом переменных, определяющих течение процессов, внутренних связей между переменными и их взаимным влиянием. В результате, объем перерабатываемой информации при расчетах достаточно велик, и для того, чтобы воспринять и проанализировать эту информацию, мы вынуждены уменьшать этот объем и тем самым ограничивать количество возможностей, между которыми делается выбор. Это достигается познанием процесса через модели, которые отражают важные стороны явлений изучаемого процесса [1].

С учетом тех конкретных задач, которые ставятся перед исследователем, а также специфики моделируемого объекта различают три типа математических моделей: поисковую, портретную и исследовательскую.

Поисковая модель строится в том случае, когда исследователь, не располагая сведениями о механизме наблюдаемого явления, имеет лишь информацию о реакции системы (черного ящика) на возмущающие воздействия. Недостатком данного типа модели является возможность ошибочного суждения о справедливости выдвинутой при моделировании гипотезы или механизме изучаемого явления.

Портретная (копирующая) модель строится в тех случаях, когда механизм изучаемого явления хотя и известен, но постановка эксперимента затруднительна. Оценка адекватности такой модели проблематична.

Исследовательская модель служит для установления и описания особенностей моделируемого объекта, прогнозирования результатов, оптимизации, выяснения роли возмущающих воздействий [2].

Математические модели, часто используемые при описании биотехнологических процессов, рассмотрены ниже.

Большое разнообразие видов источников сырья обуславливает различные технологические процессы его подготовки для культивирования микроорганизмов. Описание процесса ферментативного гидролиза представляет собой сложную задачу в связи с тем, что исходное сырье является полисубстратной системой. Согласно схеме на рис. 1 исходное сырье

может быть представлено как полисубстратный комплекс, состоящий из молекул крахмала и декстринов  $Z$ , характеризующихся определенным количеством  $\alpha$  – связей  $Z_1$ . Под действием фермента  $\alpha$  – амилазы и происходит образование молекул глюкозы  $S$  и предельных декстринов  $Z_D$ . Константы скоростей реакций составляют:  $K_1$  – для реакции превращения  $Z_1 \rightarrow Z_2$ ;  $K_2$  – для реакции  $Z \rightarrow S$ , катализируемой  $\gamma$  – амилазой,  $K_3$  – для ингибирования продуктом реакции.

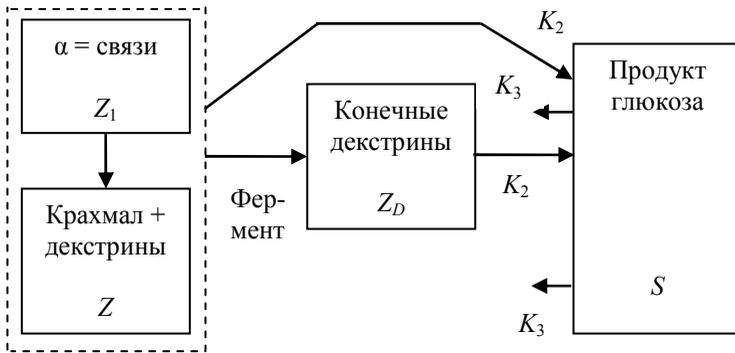


Рис. 1. Упрощенная структурная схема кинетики процесса гидролиза углеводного субстрата

Система уравнений, описывающая скорость изменения количеств указанных в схеме веществ, имеет вид:

$$\left. \begin{aligned} \frac{dZ_1}{dt} &= -K_1 Z_1 \\ \frac{dZ}{dt} &= -\frac{dZ_1}{dt} - m_1 \int Z_1 dt - b_1 \int S dt \\ \frac{dZ_D}{dt} &= m_2 \int Z_1 dt - b_2 \int S dt - K_2 Z_D \\ \frac{dS}{dt} &= K_2 (Z + Z_D) - K_3 S \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

где  $m_1$  – число  $\alpha$  – связей в молекуле субстрата  $Z_1$ ;  $b$  – среднее число глюкозных единиц в  $Z_1$ .

Сравнение представленной модели (1) с экспериментальными данными показало удовлетворительное совпадение [4].

В настоящее время известно большое число математических моделей кинетики роста микробных популяций, рассмотренных в обзорных работах. В связи с этим при описании конкретного микробиологического

процесса важное значение приобретает задача идентификации различных моделей и постановка специальных дискриминирующих экспериментов.

В табл. 1 представлены кинетические модели, наиболее широко применяемые в практических задачах расчета процесса культивирования микроорганизмов.

Т а б л и ц а 1

**Кинетические модели на основе  
обобщенных схем ферментативных реакций**

Схема реакции	Кинетическая зависимость	Примечания
Взаимодействие субстрата $S$ и фермента $E$	$\mu = \frac{K_P[E][S]}{K_{-S} + K_P + [S]} =$ $= \frac{W[S]}{K_S + \frac{K_P}{K_S} + [S]}$	$W = [E]K_P$ $[ES]$ - фермент - субстратный комплекс
Конкурентное ингибирование	$\mu = \mu_m \frac{S'}{K_S + S}$	$P$ - продукт реакции $I$ - ингибитор реакции (продукт метаболизма)
Общая схема взаимодействия субстрата, фермента и ингибитора	$\mu = \mu_m \frac{S}{K_S + S + KI}$	$K_S, K_P, K_{P_2}$ - кинетические коэффициенты
	$\mu = \mu_m \frac{S}{K_S + S + K_P(S_0 - S) + K_{P_2}S(S_0 - S)}$	При малых $K_{P_2}$ - конкурентное ингибирование (а)
	$(a) \mu_S = \mu_m \frac{S}{K_S + S + K_z(S_0 - S)}$	При $K_S = K_P/K_z$ - неконкурентное торможение (б)
	$(b) \mu_S = \mu_m \frac{S}{K_S + S} \cdot \frac{1/K_{P_2}}{1/K_{P_2} + S_0 - S}$	При малых $K_z$ - соединение ингибитора с ферментным комплексом (в)
$(в) \mu_S = \mu_m \frac{S}{K_S + S + K_P S(S_0 - S)}$		

Особенности массообменных эффектов в биотехнологических системах связаны с процессами ферментации, когда одновременно с ростом и развитием популяции микроорганизмов осуществляется перенос массы (транспорт питательных веществ и продуктов метаболизма) и энергии

(поглощение и выделение тепла при биохимических превращениях в многофазной системе).

В общем случае для  $i$ -го компонента питательной среды справедливо балансовое уравнение, определяющее условия транспорта и потребления веществ в объеме  $V$

$$\frac{dC_i}{dt} = vC_0 - R(C)V - vC \quad (2)$$

Еще недостаточно имеется надежных адекватных математических моделей процессов и аппаратов биохимических производств. Работы в этом направлении ведутся во многих научно – исследовательских институтах, идет интенсивное накопление данных по математическим моделям, разработке обобщенных зависимостей для кинетических коэффициентов и т.п.

### Список литературы

1. Дворецкий С.И., Егоров А.Ф., Дворецкий Д.С. Компьютерное моделирование и оптимизация технологических процессов и оборудования: Учеб. пособие, Тамбов: Изд-во Тамб. гос. техн. ун-та, 2003, 224 с.
2. Васильев Н.Н. и др. Моделирование процессов микробиологического синтеза”. М., Лесная промышленность, 1975, 341 с.
3. Кафаров В.В. и др. Моделирование и системный анализ биохимических производств / В.В. Кафаров, А.Ю. Винаров, Л.С. Гордеев – М.: Лесная промышленность, 1985, 280 с.
4. Яровенко В.Л., Равинский Л.А. Моделирование и оптимизация микробиологических процессов спиртового производства. М., Пищевая промышленность, 1978, 247 с.