

УПРАВЛЕНИЕ, МОДЕЛИРОВАНИЕ, АВТОМАТИЗАЦИЯ

DOI: 10.24143/2072-9502-2017-2-125-135
УДК 574.6.663.1

Ю. Л. Гордеева, Ю. А. Комиссаров, Е. Л. Гордеева, А. Г. Бородкин

АЛГОРИТМ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ УСЛОВИЙ ГУРВИЦА ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ НА УСТОЙЧИВОСТЬ СТАЦИОНАРНЫХ СОСТОЯНИЙ НЕПРЕРЫВНЫХ ПРОЦЕССОВ ФЕРМЕНТАЦИИ С НЕЛИНЕЙНОЙ КИНЕТИКОЙ

Приведен алгоритм оценки устойчивости стационарных состояний процесса микробиологического синтеза на основе математических моделей кинетики, базирующихся на неструктурированном подходе. Объект исследования – непрерывный биотехнологический процесс, в ходе которого помимо биомассы получается целевой продукт. Оценка устойчивости выполнена с использованием матрицы Гурвица. В процессе возможно использование сырья, содержащего компоненты для образования дополнительного количества основного субстрата. Алгоритм включает пять этапов: формирование математической модели, учитывающей биологические и технологические ограничения; определение стационарных состояний (одного или нескольких), для которых необходимо оценить условия устойчивости и осуществить расчет показателей процесса для принятых стационарных состояний в результате решения системы нелинейных алгебраических уравнений математической модели; запись системы уравнений первого приближения (система линейных дифференциальных уравнений первого порядка с постоянными коэффициентами) и оценка коэффициентов, отвечающих принятым стационарным состояниям; формирование матрицы Гурвица и вычисление ее элементов; расчет показателей необходимого и достаточного условия устойчивости на основании матрицы Гурвица. Приведены два варианта вычисления элементов матрицы Гурвица: преобразование системы четырех дифференциальных уравнений первого приближения в одно дифференциальное уравнение четвертого порядка, в ходе которого определяются расчетные соотношения для коэффициентов матрицы, и вычисление коэффициентов в результате решения векторного уравнения по системе первого приближения с введением собственных чисел. Проведена оценка устойчивости двух стационарных состояний (одно из которых оптимальное) процесса микробиологического синтеза получения молочной кислоты из сырья, содержащего компонент, воспроизводящий основной субстрат. Для численных значений констант (из литературных источников) оба стационарных состояния оказались устойчивыми.

Ключевые слова: микробиологический синтез, оценка устойчивости, матрица Гурвица.

Введение

Процесс непрерывного микробиологического синтеза технологически реализуется в стационарных условиях, т. е. показатели процесса не изменяются во времени (концентрация биомассы, субстрата, продукта и т. п.).

При реализации синтеза в процессе всегда имеют место возмущения (отклонения показателей процесса от стационарного значения). Если эти отклонения не приводят к нарушению технологического процесса и с течением времени значения показателей возвращаются к первоначальному, стационарное состояние полагается устойчивым. В противном случае для реализации процесса требуется внешнее управление.

Так как малых возмущений практически избежать не удастся, то, если при малых возмущениях наблюдается нарушение технологического процесса, приводящее к невозможности обеспечить его функциональное назначение, процесс считается неустойчивым в малом.

Математический анализ такого рода устойчивости или неустойчивости в малом получил название «устойчивость первого приближения», оценка которой возможна по условиям Гурвица. Подробный математический анализ в доступной форме приведен в работах [1, 2].

Таким образом, настоящее сообщение будет базироваться на анализе устойчивости первого приближения. Ниже этот подход будет описан подробнее.

Объект исследования

Анализ устойчивости стационарных состояний технологического процесса возможен с использованием математической модели, воспроизводящей с достаточной точностью поведение показателей процесса.

Процессы микробиологического синтеза распространены достаточно широко. Однако здесь речь идет о промышленно значимых процессах получения целевых продуктов [3], в частности о процессах получения пищевых кислот [4].

Рассматриваемые процессы отвечают следующим условиям: в процессе синтеза производится биомасса X , получается целевой продукт P , расходуется основной субстрат S .

Сущность процесса определяется кинетикой роста биомассы, основным показателем которой является удельная скорость роста μ , т. к. биомасса является продуцентом образования продукта. Соотношения для удельной скорости роста сформированы на основе неструктурированного подхода.

Математически удельная скорость роста для рассматриваемого объекта является в общем случае нелинейной функцией X, S, P . Кроме того, в процессе ферментации удельная скорость роста в той или иной степени может быть ингибирована каждым из показателей X, S, P . В этом случае возможность ингибирования включается в математическое соотношение для μ .

Обращаясь к обзорам [5, 6], отметим, что для отдельных штаммов микроорганизмов при ферментации образуются, кроме целевого продукта, побочные, иногда представляющие практическую ценность. При этом таких продуктов образуется, как правило, незначительное количество [7].

С другой стороны, т. к. сырье является наиболее расходной статьёй процесса, имеется тенденция [5, 6] использовать воспроизводимое сырье. Это отмечено в работах [8–10].

Особенность использования воспроизводимого сырья проявляется в том, что в этом сырье могут быть компоненты, которые в процессе организации технологии дают дополнительное количество основного субстрата S . Так, например, пшеничная мука (whole-wheat flour, wheat flour) в качестве сырья для ферментации содержит мальтозу, которая в процессе генерирует дополнительно основной субстрат – глюкозу, что повышает уровень эффективности использования сырьевых ресурсов. Схема такого процесса приведена на рисунке [10].

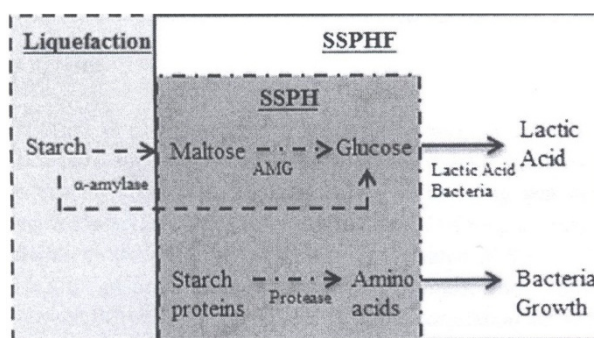


Схема процесса ферментации с получением дополнительного количества основного субстрата

Учет этой составляющей, а также составляющей побочного продукта позволяет записать обобщенную математическую модель рассматриваемого объекта в виде системы дифференциальных уравнений, представляющих материальный баланс по четырем компонентам – S, X, P, M , где M есть концентрация побочного продукта или концентрация компонента, использование которого дает дополнительное количество основного субстрата.

Система уравнений записывается для нестационарных условий процесса, организованного по непрерывной схеме:

$$\frac{dS}{dt} = F_1(S, X, P, M), \quad (1)$$

$$\frac{dX}{dt} = F_2(S, X, P, M), \quad (2)$$

$$\frac{dP}{dt} = F_3(S, X, P, M), \quad (3)$$

$$\frac{dM}{dt} = F_4(S, X, P, M), \quad (4)$$

где F_1, F_2, F_3, F_4 – нелинейные функции показателей процесса (S, X, P, M); S, X, P – концентрации субстрата, биомассы, продукта соответственно; M – концентрация побочного продукта или компонента сырья, деградирующего в основной субстрат (в последнем случае M в соотношениях (2) и (3) отсутствует, соотношение (4) значительно упрощается (будет показано ниже)).

Таким образом, объектом нашего исследования является процесс микробиологического синтеза, оформленный по непрерывному способу. Цель процесса – получение продукта в результате жизнедеятельности микроорганизмов. Математическая модель объекта представляет собой четыре уравнения материального баланса по компонентам: основному субстрату, биомассе, продукту, побочному продукту или компоненту сырья, восполняющему количество основного субстрата. Если в сырье отсутствует побочный продукт или компонент, дополнительно воспроизводящий основной субстрат, уравнения материального баланса записываются только по трем компонентам: S, X, P .

С учетом вышеизложенного система уравнений математической модели в общем виде представлена уравнениями (1)–(4).

Наиболее полно этому описанию объекта соответствует процесс получения молочной кислоты по непрерывному способу из пшеничной муки (wheat flour) [8].

Обращаясь к понятию «устойчивость первого приближения», запишем математические соотношения, определяющие это понятие.

Система уравнений математической модели (1)–(4) преобразуется в систему линейных дифференциальных уравнений первого порядка с постоянными коэффициентами, записанных для малых отклонений от стационарных значений.

Значения переменных представляются в следующем виде: $S = S_{ст} + \delta_1$; $X = X_{ст} + \delta_2$; $P = P_{ст} + \delta_3$; $M = M_{ст} + \delta_4$, где $S_{ст}, X_{ст}, P_{ст}, M_{ст}$ – значения показателей для конкретного стационарного состояния; $\delta_1, \delta_2, \delta_3, \delta_4$ – малые отклонения от стационарных состояний.

Нелинейные функции F_i в правой части системы (1)–(4) представлены рядом Тейлора по малым отклонениям с сохранением только двух первых членов ряда (в этом смысл первого приближения). Так, для функции F_1 (1) имеем

$$F_1 = F_{1ст} + \left(\frac{\partial F_1}{\partial S} \right)_{ст} \delta_1 + \left(\frac{\partial F_1}{\partial X} \right)_{ст} \delta_2 + \left(\frac{\partial F_1}{\partial P} \right)_{ст} \delta_3 + \left(\frac{\partial F_1}{\partial M} \right)_{ст} \delta_4,$$

где частные производные вычисляются для конкретного стационарного состояния, т. е. они являются константами. В наших условиях $F_{1ст} = 0$.

В итоге, обозначив:

$$a_1 = \left(\frac{\partial F_1}{\partial S} \right)_{ст}; \quad b_1 = \left(\frac{\partial F_1}{\partial X} \right)_{ст}; \quad c_1 = \left(\frac{\partial F_1}{\partial P} \right)_{ст}; \quad d_1 = \left(\frac{\partial F_1}{\partial M} \right)_{ст}$$

и используя эти обозначения для остальных уравнений системы (1)–(4), получим систему уравнений первого приближения:

$$\frac{d\delta_1}{dt} = a_1\delta_1 + b_1\delta_2 + c_1\delta_3 + d_1\delta_4, \quad (5)$$

$$\frac{d\delta_2}{dt} = a_2\delta_1 + b_2\delta_2 + c_2\delta_3 + d_2\delta_4, \quad (6)$$

$$\frac{d\delta_3}{dt} = a_3\delta_1 + b_3\delta_2 + c_3\delta_3 + d_3\delta_4, \quad (7)$$

$$\frac{d\delta_4}{dt} = a_4\delta_1 + b_4\delta_2 + c_4\delta_3 + d_4\delta_4. \quad (8)$$

В соответствии с [1, 2], если какое-либо решение системы устойчиво, устойчива и вся система.

Таким образом, система (5)–(8) служит основой для получения заключения об устойчивости первого приближения для любого рассматриваемого стационарного состояния.

Цель настоящей работы – получить алгоритм, выполнение которого позволит оценить условия устойчивости первого приближения для объекта микробиологического синтеза, описанного выше.

Описание алгоритма

Алгоритм включает пять последовательно выполняемых этапов, что обеспечивает решение поставленной задачи, т. е. получение возможности оценить устойчивость первого приближения принятого стационарного состояния.

Этап 1 является определяющим в формировании условий для математического обеспечения решения задачи.

Записываются система уравнений математической модели (1)–(4) и соотношение для удельной скорости роста μ с учетом возможного ингибирования по разным показателям процесса (уравнения получают с использованием источников [5, 6]).

Записываются численные значения констант.

Определяются пределы изменения входных показателей процесса $S_{\min} - S_{\max}$; $M_{\min} - M_{\max}$ (по возможностям сырьевого обеспечения).

Определяются значения величины протока D : D_{\min} и D_{\max} .

Значение D_{\max} вычисляется по условию $D_{\max} < D_{\text{пред}}$, где $D_{\text{пред}}$ есть значение протока, при котором исходный субстрат концентрацией S_0 полностью вымывается из аппарата.

Так как по материальному балансу по X имеем уравнение для непрерывного процесса в виде $D = \mu$, значение $D_{\text{пред}}$ будет равно μ , в котором $S = S_0$; $X = 0$; $P = 0$; $M = 0$.

В результате имеется система уравнений математической модели, ограничения по входным показателям процесса, численные значения констант.

На **этапе 2** определяются стационарные состояния (одно или несколько), для которых необходимо оценить условия устойчивости.

Стационарные состояния определяются заданием численных значений входных показателей S_0 , M_0 и D , естественно, в заданных пределах.

Для принятых стационарных состояний вычисляются показатели процесса $S_{\text{ст}}$, $X_{\text{ст}}$, $P_{\text{ст}}$, $M_{\text{ст}}$ по решению системы линейных алгебраических уравнений вида

$$\left. \begin{aligned} F_1 &= 0 \\ F_2 &= 0 \\ F_3 &= 0 \\ F_4 &= 0 \end{aligned} \right\}$$

На **этапе 3** формируется система линейных дифференциальных уравнений первого порядка с постоянными коэффициентами на основе уравнений математической модели – система первого приближения.

Оцениваются значения коэффициентов системы для каждого принятого стационарного состояния.

Система уравнений первого приближения для рассматриваемого объекта имеет вид (5)–(8). Коэффициенты уравнений вычисляются разложением функций F_i в ряд Тейлора с использованием первых двух членов ряда, если иметь в виду, что в стационарном состоянии

$$F_{1ст} = F_{2ст} = F_{3ст} = F_{4ст} = 0.$$

Таким образом, коэффициенты a_i, b_i, c_i, d_i вычисляются по следующим формулам:

$$a_i = \left(\frac{\partial F_i}{\partial S} \right)_{ст}; \quad b_i = \left(\frac{\partial F_i}{\partial X} \right)_{ст}; \quad c_i = \left(\frac{\partial F_i}{\partial P} \right)_{ст}; \quad d_i = \left(\frac{\partial F_i}{\partial M} \right)_{ст}.$$

Значения частных производных получаем с использованием значений $S_{ст}, X_{ст}, P_{ст}, M_{ст}$ для каждого принятого стационарного состояния. Эти значения получены на этапе 2.

В результате имеем систему линейных дифференциальных уравнений первого порядка с известными постоянными коэффициентами.

Реализация *этапа 4* позволяет вычислить элементы матрицы Гурвица, которая является основной оценки условий устойчивости. Матрица Гурвица для рассматриваемого объекта имеет вид

$$A = \begin{pmatrix} P_1 & P_0 & 0 & 0 \\ P_3 & P_2 & P_1 & P_0 \\ 0 & P_4 & P_3 & P_2 \\ 0 & 0 & 0 & P_4 \end{pmatrix}. \quad (9)$$

Приведем два варианта вычисления элементов матрицы Гурвица P_1, P_2, P_3, P_4 .

Первый вариант реализуется путем преобразования системы четырех дифференциальных уравнений первого порядка с постоянными коэффициентами в одно дифференциальное уравнение четвертого порядка, т. е. система (6)–(9) преобразуется в уравнение

$$\frac{d^4 \delta_1}{dt^4} + P_1 \frac{d^3 \delta_1}{dt^3} + P_2 \frac{d^2 \delta_1}{dt^2} + P_3 \frac{d \delta_1}{dt} + P_4 \delta_1 = 0. \quad (10)$$

Уравнение (10) записано относительно переменной δ_1 . Отметим, что преобразование возможно по любой из переменных.

Элементы матрицы Гурвица P_i вычисляются по формулам, приведенным в табл. 1.

Соотношения табл. 1 получены в последовательности преобразования (5)–(8) в уравнение четвертого порядка (последовательность преобразования не приводится).

Таблица 1

Соотношения для расчета коэффициентов P_0, P_1, P_2, P_3, P_4

Соотношение
$a_i = \left(\frac{\partial F_i}{\partial S} \right)_{ст}; \quad b_i = \left(\frac{\partial F_i}{\partial X} \right)_{ст}; \quad c_i = \left(\frac{\partial F_i}{\partial P} \right)_{ст}; \quad d_i = \left(\frac{\partial F_i}{\partial M} \right)_{ст}$
$M_1 = b_1 a_2 + c_1 a_3 + d_1 a_4; \quad M_2 = b_1 b_2 + c_1 b_3 + d_1 b_4; \quad M_3 = b_1 c_2 + c_1 c_3 + d_1 c_4; \quad M_4 = b_1 d_2 + c_1 d_3 + d_1 d_4$
$N_1 = M_2 a_2 + M_3 a_3 + M_4 a_4; \quad N_2 = M_2 b_2 + M_3 b_3 + M_4 b_4; \quad N_3 = M_2 c_2 + M_3 c_3 + M_4 c_4; \quad N_4 = M_2 d_2 + M_3 d_3 + M_4 d_4$
$L_1 = N_2 a_2 + N_3 a_3 + N_4 a_4; \quad L_2 = N_2 b_2 + N_3 b_3 + N_4 b_4; \quad L_3 = N_2 c_2 + N_3 c_3 + N_4 c_4; \quad L_4 = N_2 d_2 + N_3 d_3 + N_4 d_4$
$K_1 = M_2 + b_1 a_1; \quad K_2 = M_1 b_1 - M_2 a_1; \quad K_3 = M_3 b_1 - M_2 c_1; \quad K_4 = M_4 b_1 - M_2 d_1$
$R_1 = M_1 b_1 + N_2; \quad R_2 = N_1 b_1 - N_2 a_1; \quad R_3 = N_3 b_1 - N_2 c_1; \quad R_4 = N_4 b_1 - N_2 d_1$
$S_1 = N_1 b_1 + L_2; \quad S_2 = L_1 b_1 - L_2 a_1; \quad S_3 = L_3 b_1 - L_2 c_1; \quad S_4 = L_4 b_1 - L_2 d_1$
$G_1 = R_3 b_1 + K_3 a_1 b_1; \quad G_2 = K_3 R_1 - K_1 R_3; \quad G_3 = K_3 R_2 - K_2 R_3; \quad G_4 = K_3 R_4 - K_4 R_3$
$F_1 = S_3 b_1 + M_1 K_3 b_1; \quad F_2 = K_3 S_1 - K_1 S_3; \quad F_3 = K_3 S_2 - K_2 S_3; \quad F_4 = K_3 S_4 - K_4 S_3$
$P_0 = K_3 G_4 b_1; \quad P_1 = -(K_3 F_4 b_1 + K_3 G_4 a_1 b_1); \quad P_2 = -(G_4 F_1 - G_1 F_4); \quad P_3 = -(G_4 F_2 - G_2 F_4); \quad P_4 = -(G_4 F_3 - G_3 F_4)$
$P_1 = P_1 / P_0; \quad P_2 = P_2 / P_0; \quad P_3 = P_3 / P_0; \quad P_4 = P_4 / P_0; \quad P_0 = 1$

Второй вариант реализуется следующим образом.

Система уравнений (5)–(8) записывается в векторной форме:

$$\bar{\delta}' = A \cdot \delta,$$

где A – матрица коэффициентов уравнений системы (5)–(8):

$$A = \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & c_1 & d_1 \\ a_2 & b_2 & c_2 & d_2 \\ a_3 & b_3 & c_3 & d_3 \\ a_4 & b_4 & c_4 & d_4 \end{pmatrix}.$$

Используя собственные числа λ и матрицу A , записываем характеристическое уравнение в виде

$$\begin{vmatrix} a_1 - \lambda & b_1 & c_1 & d_1 \\ a_2 & b_2 - \lambda & c_2 & d_2 \\ a_3 & b_3 & c_3 - \lambda & d_3 \\ a_4 & b_4 & c_4 & d_4 - \lambda \end{vmatrix} = 0.$$

Раскрывая определитель, получаем уравнение вида

$$\lambda^4 + P_1\lambda^3 + P_2\lambda^2 + P_3\lambda + P_4 = 0.$$

На этом завершается этап 4.

Этап 5 является завершающим в описании алгоритма, который дает ответ на вопрос об устойчивости или неустойчивости рассматриваемых стационарных состояний.

Заполняется матрица Гурвица (10) и вычисляются следующие определители:

$$A_1 = |P_1|; \quad A_2 = \begin{vmatrix} P_1 & P_0 \\ P_3 & P_2 \end{vmatrix}; \quad A_3 = \begin{vmatrix} P_1 & P_0 & 0 \\ P_3 & P_2 & P_1 \\ 0 & P_4 & P_3 \end{vmatrix}; \quad A_4 = \begin{vmatrix} P_1 & P_0 & 0 & 0 \\ P_3 & P_2 & P_1 & P_0 \\ 0 & P_4 & P_3 & P_2 \\ 0 & 0 & 0 & P_4 \end{vmatrix}. \quad (11)$$

Необходимое и достаточное условие устойчивости

$$A_i > 0, \quad i = \overline{1, 4}.$$

Если какое-либо из $A_i < 0$, стационарное состояние неустойчиво.

Использование алгоритма приведено в следующем разделе.

Анализ устойчивости стационарных состояний процесса получения молочной кислоты из пшеничной муки

Исходные данные для моделирования в достаточно полном объеме представлены в работе [10].

Уравнения математической модели для нестационарных условий процесса по непрерывной технологии:

$$\frac{dS}{dt} = -\frac{1}{Y_S} \mu X + K_M M + D(S_0 - S), \quad (12)$$

$$\frac{dX}{dt} = \mu X - DX, \quad (13)$$

$$\frac{dP}{dt} = \frac{Y_P}{Y_S} \mu X - DP, \quad (14)$$

$$\frac{dM}{dt} = -K_M M + D(M_0 - M). \quad (15)$$

Уравнение для удельной скорости роста записано в виде

$$\mu = \mu_{\max} \left(\frac{S}{K_S + S} \right) \left(1 - \frac{P}{P_{\max}} \right)^n. \quad (16)$$

Учитывая, что $K_S \ll S$ (в результате оценок по эксперименту) соотношение (16) используется в виде

$$\mu = \mu_{\max} \left(1 - \frac{P}{P_{\max}} \right)^n.$$

В соотношениях (12)–(16) μ , μ_{\max} – удельная и максимальная скорость роста, ч^{-1} ; S , X , P , M – концентрация компонентов, г/л; S_0 , M_0 – концентрация компонентов во входном потоке, г/л; D – величина протока, ч^{-1} ; Y_S , Y_P – стехиометрические коэффициенты, безразм.; K_M , P_{\max} , n – константы.

Численные значения констант: $\mu_{\max} = 0,28 \text{ ч}^{-1}$; $P_{\max} = 98,6 \text{ г/л}$; $K_S = 0,5 \text{ г/л}$; $Y_S = 0,053$; $Y_P = 0,52$; $K_M = 0,035$; $n = 3,0$.

Область задания S_0 , M_0 и D : $S_0 = 50\text{--}120 \text{ г/л}$; $M_0 = 20\text{--}80 \text{ г/л}$; $D_{\text{пред}} = 0,28 \text{ ч}^{-1}$ (определено по условию материального баланса по X).

К рассмотрению принято два стационарных состояния: первое – произвольное в допустимых пределах по S_0 , M_0 и D ; второе – для оптимальных условий, которые определены для максимальной продуктивности $Q_p = DP = \max Q_p$ по величине протока $D_{\text{опт}}$.

На этом этап 1 завершен.

Стационарное состояние 1. Значения показателей получены решением уравнений (12)–(15) по условию

$$\frac{dS}{dt} = \frac{dX}{dt} = \frac{dP}{dt} = \frac{dM}{dt} = 0.$$

Условия на входе: $S_0 = 100 \text{ г/л}$; $M_0 = 50 \text{ г/л}$; $D = 0,15 \text{ ч}^{-1}$.

Показатели стационарного состояния: $S_{\text{ст}} = 86,8731 \text{ г/л}$; $X_{\text{ст}} = 1,1971 \text{ г/л}$; $P_{\text{ст}} = 18,5205 \text{ г/л}$; $M_{\text{ст}} = 40,5405 \text{ г/л}$; $Q_p = 2,7781 \text{ г/(л} \cdot \text{ч)}$.

Стационарное состояние 2. Получено по решению задачи оптимизации для тех же исходных значений S_0 и M_0 . Оптимальное значение $D_{\text{опт}} = 0,1181 \text{ ч}^{-1}$.

Значения показателей в стационарных условиях: $S_{\text{ст}} = 81,3675 \text{ г/л}$; $X_{\text{ст}} = 1,5932 \text{ г/л}$; $P_{\text{ст}} = 24,65 \text{ г/л}$; $M_{\text{ст}} = 38,5714 \text{ г/л}$; $\max Q_p = 2,9118 \text{ г/(л} \cdot \text{ч)}$.

Завершается этап 2.

Далее вычисляются коэффициенты системы уравнений первого приближения (5)–(8) a_i , b_i , c_i , d_i . Для вычисления коэффициентов составляем табл. 2.

Стационарное состояние 1:

$$a_1 = -0,15; b_1 = -2,8302; c_1 = 0,1269; d_1 = 0,035;$$

$$a_2 = 0,0; b_2 = 0,0; c_2 = -0,006727; d_2 = 0,0;$$

$$a_3 = 0,0; b_3 = 2,3207; c_3 = -0,25407; d_3 = 0,0;$$

$$a_4 = 0,0; b_4 = 0,0; c_4 = 0,0; d_4 = -0,185.$$

Стационарное состояние 2:

$$a_1 = -0,118125; b_1 = -2,2288; c_1 = 0,14405; d_1 = 0,035;$$

$$a_2 = 0,0; b_2 = 0,0; c_2 = -0,0076347; d_2 = 0,0;$$

$$a_3 = 0,0; b_3 = 1,8276; c_3 = -0,2369; d_3 = 0,0;$$

$$a_4 = 0,0; b_4 = 0,0; c_4 = 0,0; d_4 = -0,1531.$$

Соотношения для вычисления коэффициентов a_i, b_i, c_i, d_i

$a_1 = -D$	$b_1 = -\frac{D}{Y_S}$	$c_1 = \frac{nDX_{\text{ст}}}{Y_S(P_{\text{max}} - P_{\text{ст}})}$	$d_1 = K_M$
$a_2 = 0,0$	$b_2 = 0,0$	$c_2 = -\frac{nDX_{\text{ст}}}{Y_S(P_{\text{max}} - P_{\text{ст}})}$	$d_2 = 0,0$
$a_3 = 0,0$	$b_3 = \frac{Y_p}{Y_S} D$	$c_3 = -\frac{Y_p}{Y_S} \frac{nDX_{\text{ст}}}{(P_{\text{max}} - P_{\text{ст}})} - D$	$d_3 = 0,0$
$a_4 = 0,0$	$b_4 = 0,0$	$c_4 = 0,0$	$d_4 = -(K_M + D)$

Завершен этап 3.

Для вычисления элементов матрицы Гурвица использует второй вариант расчета.

Для системы уравнений первого приближения вида (5)–(8) матрица A с учетом численных значений констант a_i, b_i, c_i, d_i имеет вид

$$A = \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & c_1 & d_1 \\ 0 & 0 & c_2 & 0 \\ 0 & b_3 & c_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d_4 \end{pmatrix}.$$

Характеристическое уравнение:

$$\begin{vmatrix} a_1 - \lambda & b_1 & c_1 & d_1 \\ 0 & -\lambda & c_2 & 0 \\ 0 & b_3 & c_3 - \lambda & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d_4 - \lambda \end{vmatrix} = 0.$$

или $\lambda^4 + P_1\lambda^3 + P_2\lambda^2 + P_3\lambda + P_4 = 0$, где $P_0 = 1$; $P_1 = -(a_1 + c_3 + d_4)$; $P_2 = a_1(c_3 + d_4) + (c_3d_4 - b_3c_2)$; $P_3 = a_1(b_3c_2 - c_3d_4) + b_3c_2d_4$; $P_4 = -a_1b_3c_2d_4$.

Таким образом, для первого стационарного состояния имеем: $a_1 = -0,15$; $c_2 = -0,006727$; $b_3 = 2,3207$; $c_3 = -0,25407$; $d_4 = -0,185$; $P_0 = 1,0$; $P_1 = 0,58907$; $P_2 = 0,12807$; $P_3 = 0,01228$; $P_4 = 0,0004332$.

Для второго: $a_1 = -0,118125$; $c_2 = -0,0076347$; $b_3 = 1,8276$; $c_3 = -0,2369$; $d_4 = -0,1531$; $P_0 = 1,0$; $P_1 = 0,508125$; $P_2 = 0,096291$; $P_3 = 0,008069$; $P_4 = 0,000252$.

Завершен этап 4.

Используя P_i , записываем матрицу Гурвица:

$$G = \begin{pmatrix} P_1 & 1 & 0 & 0 \\ P_3 & P_2 & P_1 & 1 \\ 0 & P_4 & P_3 & P_2 \\ 0 & 0 & 0 & P_4 \end{pmatrix}.$$

По матрице Гурвица вычисляются определители (11):

– для первого стационарного состояния: $A_1 = 0,58907$; $A_2 = 0,0634$; $A_3 = 0,000628$; $A_4 = 2,72 \cdot 10^{-7}$;

– для второго стационарного состояния: $A_1 = 0,50125$; $A_2 = 0,04086$; $A_3 = 2,646 \cdot 10^{-4}$; $A_4 = 6,6684 \cdot 10^{-8}$.

Поскольку определители для первого и второго состояния положительны, по необходимому и достаточному условию [1, 2] оба стационарных состояния устойчивы по первому приближению.

Заключение

В заключение отметим, что разработанный алгоритм может использоваться вне зависимости от сложности математического представления кинетических соотношений и числа уравнений математической модели.

Единственным ограничением является то, что анализ проводится для условий первого приближения, т. е. в малой окрестности стационарного состояния, что в целом не позволяет делать заключение об устойчивости процесса при наличии больших возмущающих воздействий.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Демидович Б. П. Лекции по математической теории устойчивости. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1998. 480 с.
2. Жукова Г. С., Митрохин С. И., Дарсалия В. Ш. Дифференциальные уравнения. М.: РХТУ им. Д. И. Менделеева, 1999. 366 с.
3. Бирюков В. В. Основы промышленной биотехнологии. М.: КолосС; Химия, 2004. 296 с.
4. Смирнов В. А. Пищевые кислоты. М.: Легкая и пищ. пром-сть, 1983. 240 с.
5. Гордеев Л. С., Кознов А. В., Скичко А. С., Гордеева Ю. Л. Неструктурированные математические модели кинетики биосинтеза молочной кислоты. Обзор // Теоретические основы химической технологии. 2017. Т. 51, № 2. С. 8–25.
6. Гордеева Ю. Л., Рудаковская Е. Г., Гордеева Е. Л., Бородкин А. Г. Математическое моделирование биотехнологического процесса периодической ферментации получения молочной кислоты. Обзор // Теоретические основы химической технологии. 2017. Т. 51, № 3. С. 1–18.
7. Vazquez J. A., Murado M. A. Unstructured mathematical model for biomass, lactic and bacteriocin productions by lactic acid bacteria in batch fermentation // J. Chem. Technol. Biotechnol. 2008. Vol. 83. P. 91–96.
8. Åkerberg C., Hofvendahl K., Zacchi G., Hahn-Hägerdal B. Modelling the influence of pH, temperature, glucose and lactic acid concentrations on the kinetics of lactic acid production by *Lactococcus lactis* ssp. *lactis* ATCC 19435 in whole-wheat flour // Appl. Microbiol. Biotechnol. 1998. Vol. 49, no. 6. P. 682–690.
9. Hofvendahl K., Hahn-Hägerdal B. L-lactic acid production from whole wheat flour hydrolysate using strains of *Lactobacilli* and *Lactococci* // Enzyme Microb. Technol. 1997. Vol. 20, no 4. P. 301–307.
10. Gonzales K., Tebbano S., Lapes F., Thorigne A., Givry S., Dumar D., Pareau D. Modeling the continuous lactic acid production process from wheat flour // Appl. Microbiol. Biotechnol. 2016. Vol. 100, no. 1. P. 147–159.

Статья поступила в редакцию 19.01.2017

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 информационных технологий, математики и физики; l.s.gordeev@yandex.ru.

Комиссаров Юрий Алексеевич – Россия, 125047, Москва; Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева, г-р техн. наук, профессор; профессор кафедры электротехники и электроники; komiss@muctr.ru.

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

Бородкин Алексей Георгиевич – Россия, 125047, Москва; Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева; доцент кафедры процессов и аппаратов химической технологии, l.s.gordeev@yandex.ru.



Yu. L. Gordeeva, Yu. A. Komissarov, E. L. Gordeeva, A. G. Borodkin

ALGORITHM OF USING HURWITZ CONDITIONS TO STUDY STABILITY OF STEADY STATES OF CONTINUOUS FERMENTATION PROCESSES WITH NONLINEAR KINETICS

Abstract. The authors of the article produce the algorithm to evaluate the stability of the steady states for microbiological synthesis using mathematical models for kinetics based on the unstructured approach. The object under study is a continuous biotechnological process aiming to obtain a target product, in addition to biomass. The estimation of stability is performed using Hurwitz matrix. In this process the use of raw materials containing components for additional producing of the primary substrate are possible. The algorithm includes five steps: formulation of the mathematical model that takes into account biological and technological limits; definition of steady states (one or several) for which it is necessary to evaluate conditions of stability and to calculate process parameters for the adopted steady states resulted from solving a system of nonlinear algebraic equations of the mathematical model; formulation of the equations of the first approximation (the system of first-order linear differential equations with constant coefficients) and evaluation of the coefficients corresponding to the adopted steady states; formation of Hurwitz matrix and calculation of its items; calculation of necessary and sufficient conditions for stability using Hurwitz matrix. Two methods of calculating Hurwitz matrix have been shown. The first method is implemented by transforming the system of four differential equations of the first approximation into one fourth-order ordinary differential equation. In the course of transformation there were determined calculated ratios for coefficients of the matrix. In the second method the coefficients are calculated by solving vector equation for the system of first approximation with the introduction of eigen values. The algorithm has been used for evaluating steady states of microbiological synthesis for lactic acid production from raw materials containing the component reproducing the main substrate. The estimation has been carried out for two steady states, one of which is optimal. For numerical values of the constants (from the literature) both steady states were stable.

Key words: microbiological synthesis, evaluation of stability, Hurwitz matrix.

REFERENCES

1. Demidovich B. P. *Lektsii po matematicheskoi teorii ustoychivosti* [Lectures on mathematical theory of stability]. Moscow, Izd-vo Moskovskogo universiteta, 1998. 480 p.
2. Zhukova G. S., Mitrokhin S. I., Darsaliia V. Sh. *Differentsial'nye uravneniia* [Differential equations]. Moscow, RKhTU imeni D. I. Mendeleeva, 1999. 366 p.
3. Biriukov V. V. *Osnovy promyshlennoi biotekhnologii* [Introduction into industrial biotechnology]. Moscow, KolosS; Khimii Publ., 2004. 296 p.
4. Smirnov V. A. *Pishchevye kisloty* [Nutritional acids]. Moscow, Legkaia i pishchevaia promyshlennost' Publ., 1983. 240 p.
5. Gordeev L. S., Koznov A. V., Skichko A. S., Gordeeva Iu. L. Nestruturirovannye matematicheskie modeli kinetiki biosinteza molochnoi kisloty. Obzor [unstructured mathematical models of kinetics of lactic acid biosynthesis. Review]. *Teoreticheskie osnovy khimicheskoi tekhnologii*, 2017, vol. 51, no. 2, pp. 8-25.
6. Gordeeva Iu. L., Rudakovskaia E. G., Gordeeva E. L., Borodkin A. G. Matematicheskoe modelirovanie biotekhnologicheskogo protsessa periodicheskoi fermentatsii polucheniia molochnoi kisloty. Obzor [Mathematical modelling of biotechnological process of periodic fermentation for obtaining lactic acid]. *Teoreticheskie osnovy khimicheskoi tekhnologii*, 2017, vol. 51, no. 3, pp. 1-18.
7. Vazquez J. A., Murado M. A. Unstructured mathematical model for biomass, lactic and bacteriocin productions by lactic acid bacteria in batch fermentation. *J. Chem. Technol. Biotechnol.*, 2008, vol. 83, pp. 91-96.
8. Åkerberg C., Hofvendahl K., Zacchi G., Hahn-Hägerdal B. Modelling the influence of pH, temperature, glucose and lactic acid concentrations on the kinetics of lactic acid production by *Lactococcus lactis* ssp. *lactis* ATCC 19435 in whole-wheat flour. *Appl. Microbiol. Biotechnol.*, 1998, vol. 49, no. 6, pp. 682-690.
9. Hofvendahl K., Hahn-Hägerdal B. L-lactic acid production from whole wheat flour hydrolysate using strains of *Lactobacilli* and *Lactococci*. *Enzyme Microb. Technol.*, 1997, vol. 20, no 4, pp. 301-307.
10. Gonzales K., Tebbano S., Lapes F., Thorigne A., Givry S., Dumar D., Pareau D. Modeling the continuous lactic acid production process from wheat flour. *Appl. Microbiol. Biotechnol.*, 2016, vol. 100, no. 1, pp. 147-159.

The article submitted to the editors 19.01.2017

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 of Information Technologies, Mathematics and Physics; l.s.gordeev@yandex.ru.

Komissarov Yuriy Alekseevich – Russia, 125047, Moscow; Mendeleev Russian Chemical and Technological University; Doctor of Technical Sciences, Professor; Professor of the Department of 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 of Higher Mathematics; l.s.gordeev@yandex.ru.

Borodkin Aleksey Georgievich – Russia, 125047, Moscow; Mendeleev Russian Chemical-Technological University; Assistant Professor of the Department of Processes and Apparatus for Chemical Technology; l.s.gordeev@yandex.ru.

