

Bioreaktoriaus valdymo matematinis modeliavimas taikant nelokalias sąlygas ir nelokalias kraštines sąlygas

Doktorantūros tyrimų ataskaita
Doktorantūros pradžios ir pabaigos metai: 2016–2020

Anatolij Nečiporenko
anatolij.neciporenko@mif.vu.lt
anatolij.neciporenko@outlook.com

Darbo vadovas
prof. habil. dr. Feliksas Ivanauskas
Konsultantas
prof. dr. Tadas Meškauskas

2021 m. birželis

Planas: straipsniai

- Iš viso parašyti **keturi** moksliniai straipsniai:
 - **2** moksliniai straipsniai yra paskelbti;
 - **1** yra priimtas ir patvirtintas (angl. *accepted for publication*), laukia publikacijos;
 - **1** yra žurnalo redakcijoje (angl. *under review*).

Planas: konferencijos

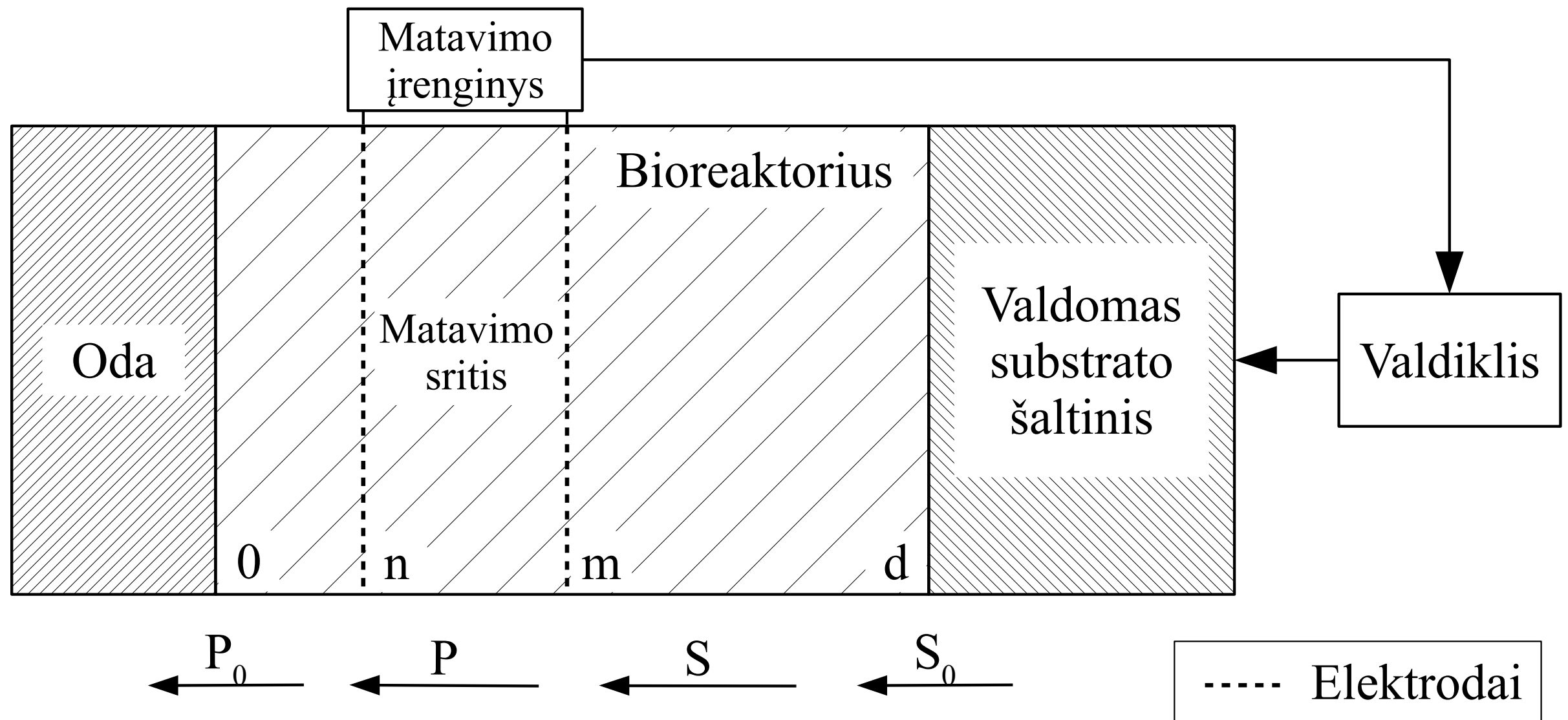
- Skaityti du pranešimai tarptautinėse mokslinėse konferencijose
 - Kopenhagoje (*Technical University of Denmark*) *30th Nordic Seminar on Computational Mechanics (NSCM30)*, 2017;
 - Kroatijoje (*Ruđer Bošković Institute*) *3rd NESUS Winter School and PhD Symposium on Data Science and Heterogeneous Computing*, 2018.
- Skaityti du pranešimai mokslinėse konferencijose Lietuvoje:
 - 7-oje jaunųjų mokslininkų konferencijoje „Fizinių ir technologijos mokslų tarpdalykiniai tyrimai“, 2017;
 - 10-oje jaunųjų mokslininkų konferencijoje „Fizinių ir technologijos mokslų tarpdalykiniai tyrimai“, 2020.

Planas: recenzijos

- Abiejų recenzijų atsiliepimai teigiami.
- Tenkina gamtos mokslų srities informatikos krypties (N 009) daktaro disertacijoms keliamus reikalavimus ir gali būti ginamas mokslo krypties gynimo taryboje.

Difuzijos-reakcijos lygčių sistema
su nelokalia kraštine sąlyga

Bioreaktorius



Matematinis modelis

Netiesinių diferencialinių lygčių sistema

$$\begin{cases} \frac{\partial S}{\partial t} = \mathcal{D}_S \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} - \frac{V_{max} S}{K_M + S}, \\ \frac{\partial P}{\partial t} = \mathcal{D}_P \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \frac{V_{max} S}{K_M + S}. \end{cases}$$

Matematinis modelis

Nelokali kraštinė sąlyga (PID valdymo algoritmas)

$$\left\{ \begin{array}{l} e(t) = Q(t) - \frac{2\mathcal{D}_p}{m^2 - n^2} \int_n^m P(x, t) dx, \\ S(d, t) = \mathcal{K}_p e(t) + \mathcal{K}_i \int_0^t e(\tau) d\tau + \mathcal{K}_d \frac{de(t)}{dt}, \\ 0 < m, n < d, \quad 0 < t \leq T. \end{array} \right.$$

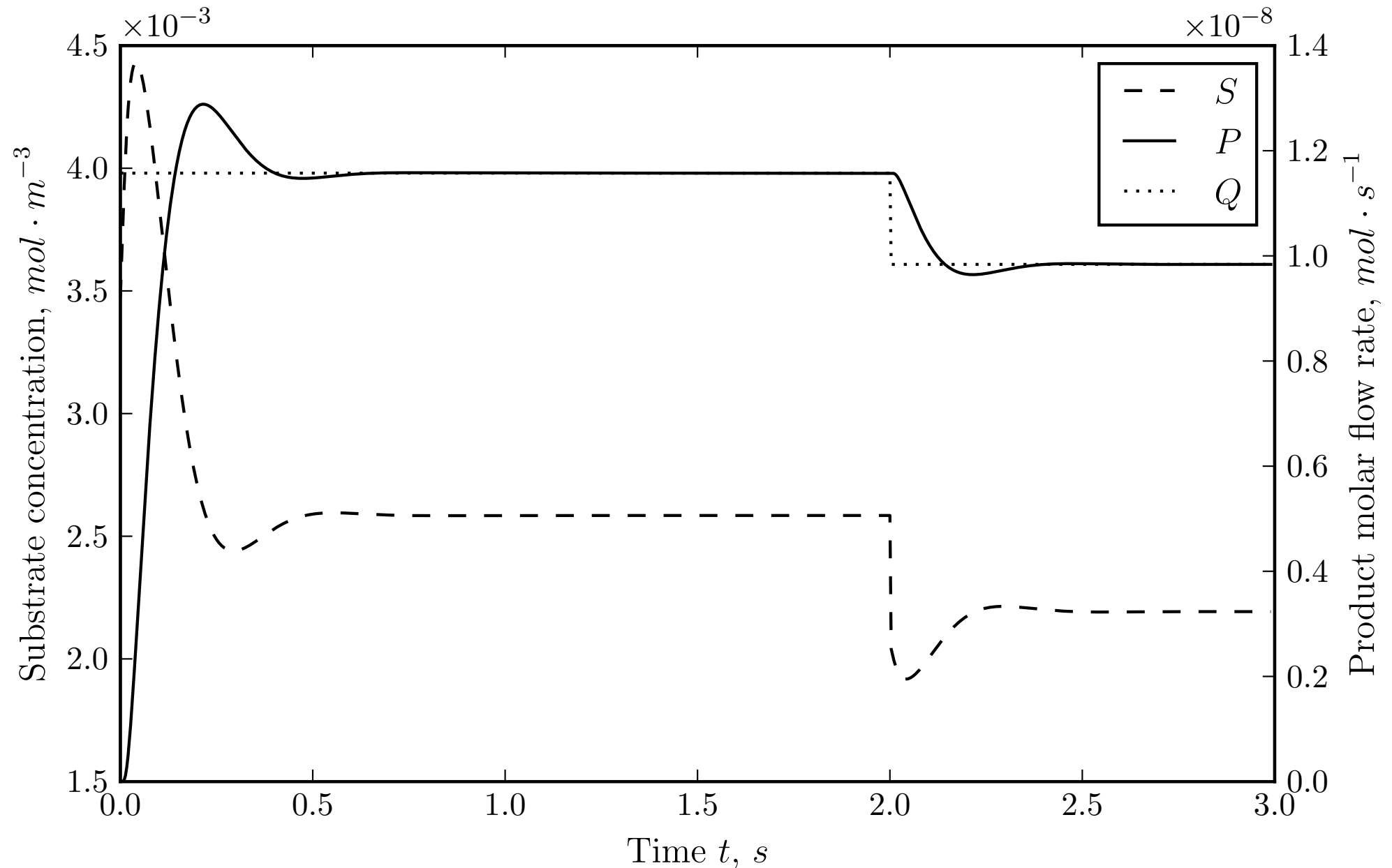
Ištekančio mišinio sudėties kontrolė

- Substrato patekimas į organizmą ne visada naudingas (gali būti kenksmingas);
- Modelio parametrai optimizuojami **P/S** santykiui $1/10^3$ — $1/10^4$;
- Didinome bioreaktoriaus storį, tyrėme $V_{\max}$ įtaką.

Bioreaktoriaus ilgio įtaka valdymui

- Modeliavome įvairių ilgių bioreaktorius, padidinę ilgį iki 5 cm, bioreaktoriaus modelis ilgai užtrunka stabilizuodamas valdymą;
- Eksperimentiniai skaičiavimai parodė efektyvų valdymą esant 1 cm ilgiui.

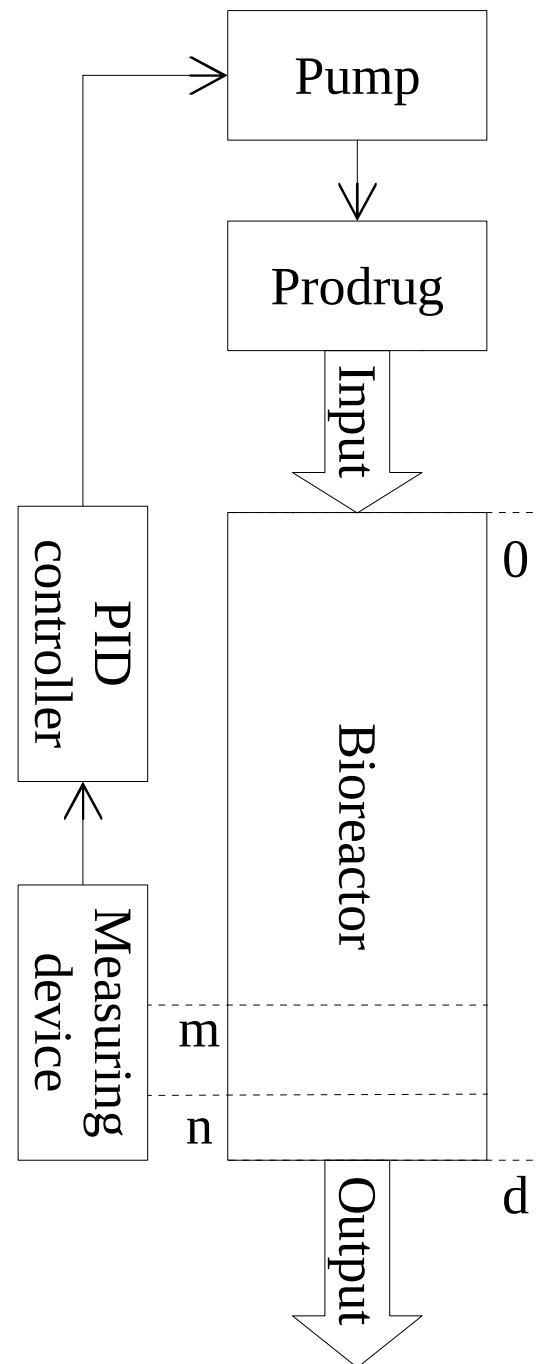
Rezultatai



Stepwise treatment protocol. Substrate (S) concentration $S(d, t)$, product (P) molar flow rate and set-point (Q) function $Q(t)$.
 Parameters $\mathcal{K}_p = 3 \times 10^5$, $\mathcal{K}_i = 4 \times 10^6$, $\mathcal{K}_d = 1.2 \times 10^7$.

Konvekcijos-difuzijos-reakcijos
lygčių sistema su nelokalia sąlyga

Bioreaktorius



Matematinis modelis

Bioreaktoriaus valdymas kontroliuojant slėgį

$$\begin{cases} \frac{\partial S}{\partial t} = \mathcal{D}_S \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} + \alpha \frac{\partial S}{\partial x} - \frac{V_{max} S}{K_M + S}, \\ \frac{\partial P}{\partial t} = \mathcal{D}_P \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \alpha \frac{\partial P}{\partial x} + \frac{V_{max} S}{K_M + S}, \end{cases}$$

Matematinis modelis

Nelokali kraštinė sąlyga (PID valdymo algoritmas)

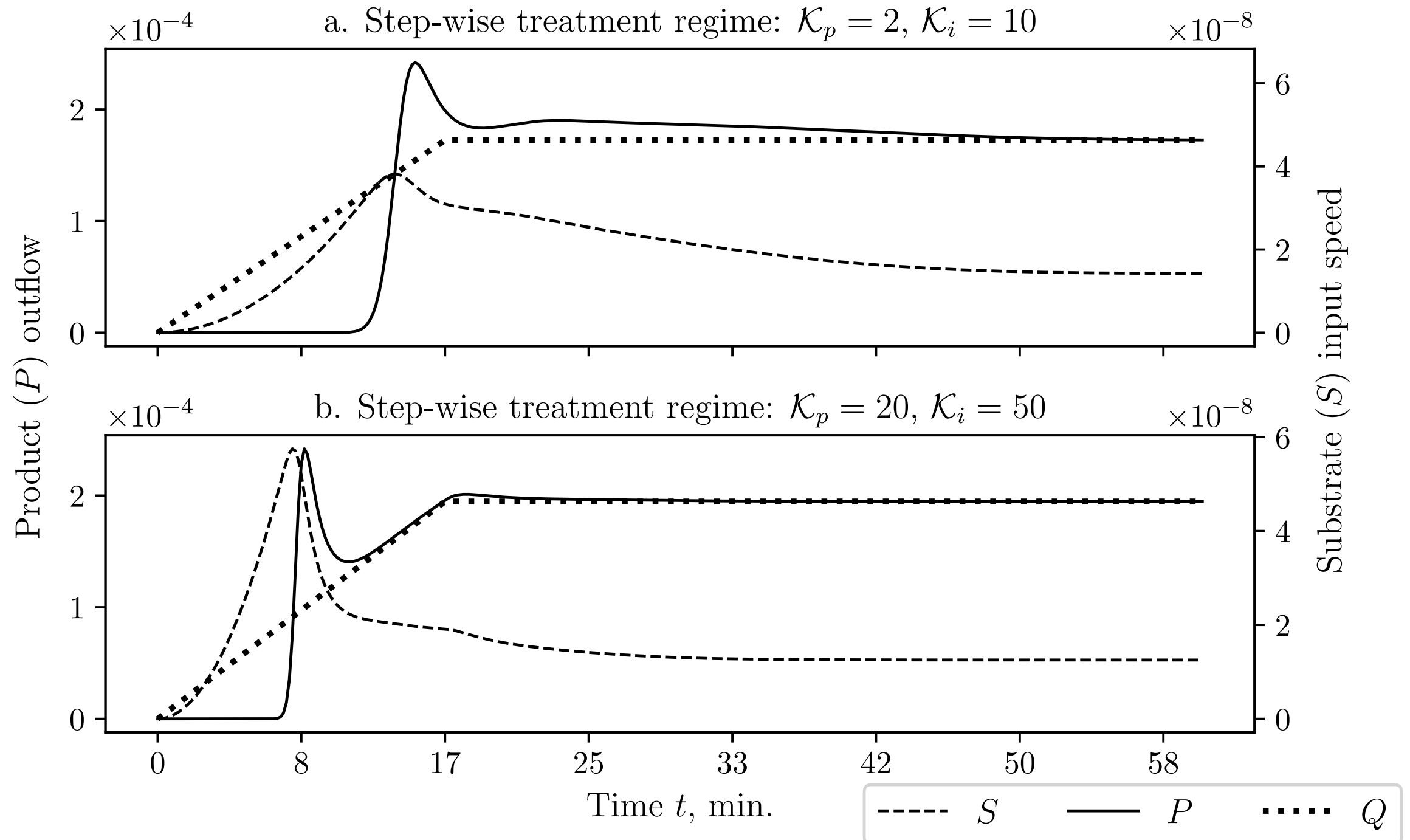
$$\left\{ \begin{array}{l} e(t) = Q(t) - \frac{2\mathcal{D}_p}{m^2 - n^2} \int_n^m P(x, t) dx, \\ S(d, t) = \mathcal{K}_p e(t) + \mathcal{K}_i \int_0^t e(\tau) d\tau + \mathcal{K}_d \frac{de(t)}{dt}, \\ 0 < m, n < d, \quad 0 < t \leq T. \end{array} \right.$$

Matematinis modelis

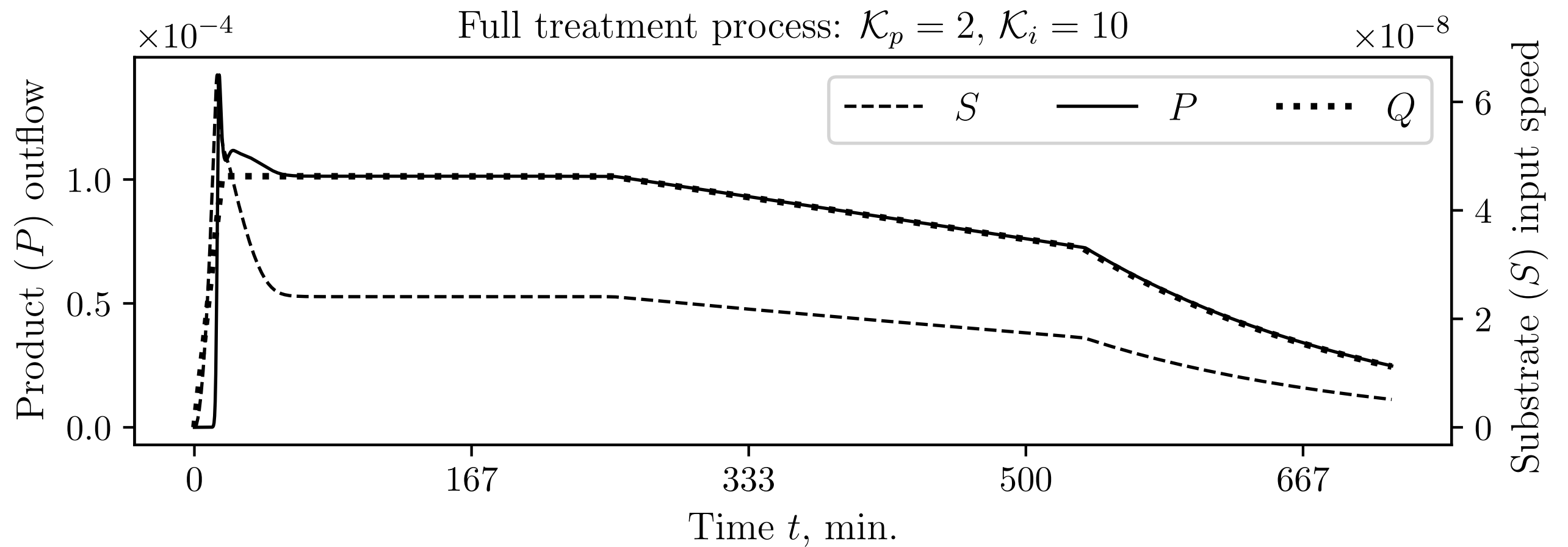
Nelokali sąlyga, PID valdymo algoritmas

$$\left\{ \begin{array}{l} e(t) = Q(t) - \frac{2\mathcal{D}_p}{m^2 - n^2} \int_n^m P(x, t) dx, \\ \alpha(t) = \mathcal{K}_p e(t) + \mathcal{K}_i \int_0^t e(\tau) d\tau + \mathcal{K}_d \frac{de(t)}{dt}, \\ 0 < m, n < d, \quad 0 < t \leq T. \end{array} \right.$$

Rezultatai

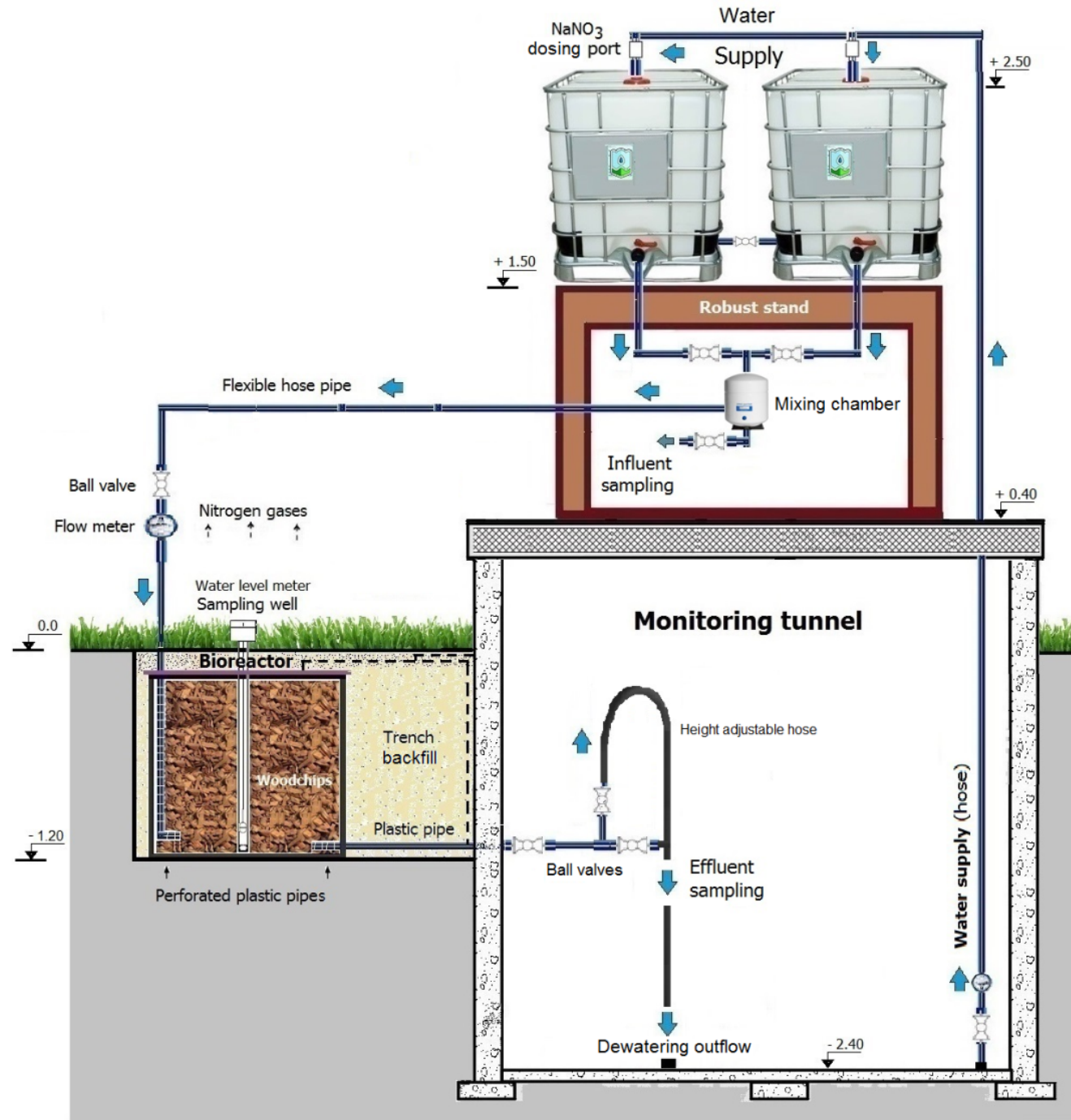


Rezultatai

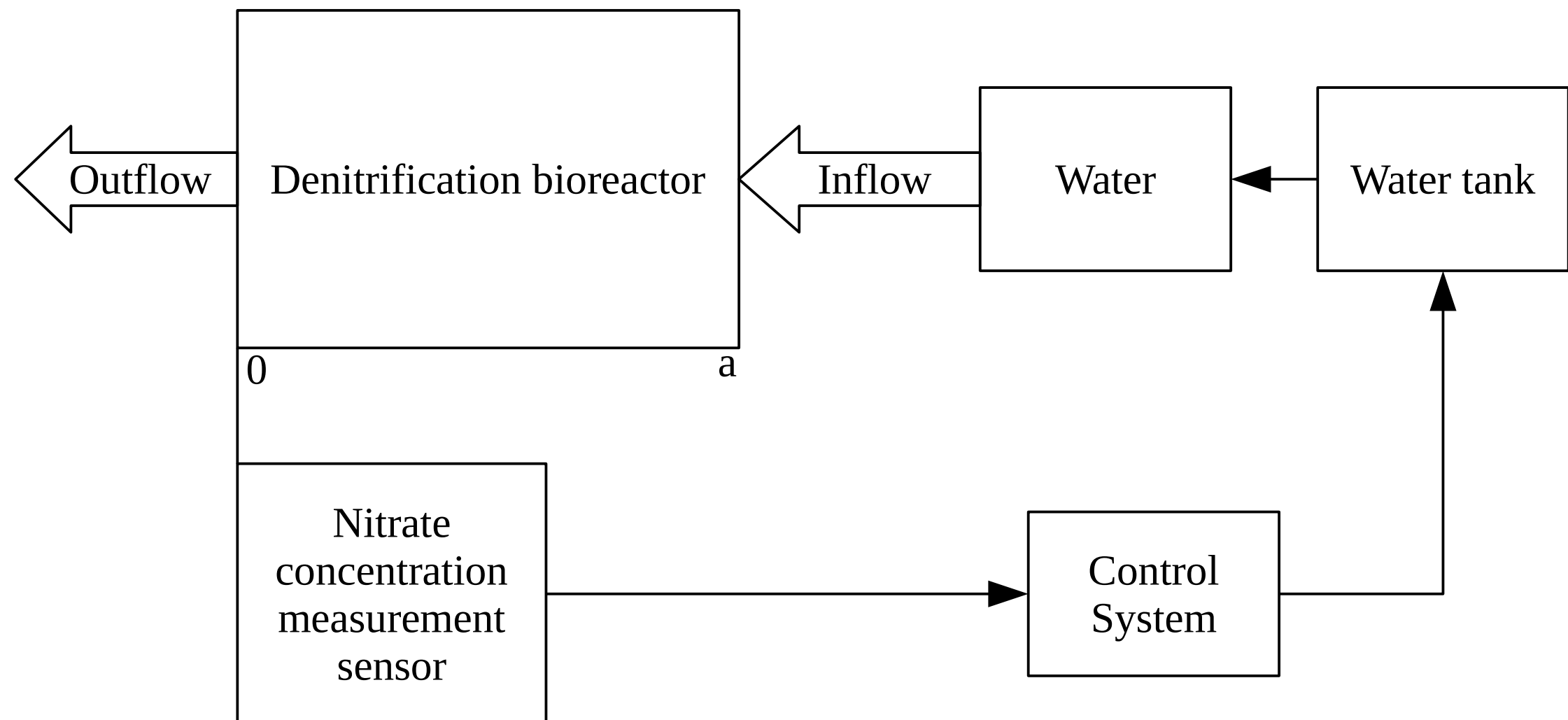


Konvekcijos-reakcijos lygčių
sistema su nelokalia sąlyga

Denitrifikavimo bioreaktorius



Denitrifikavimo bioreaktorius



Matematinis modelis

Konvekcijos–reakcijos netiesinių diferencialinių lygčių sistema

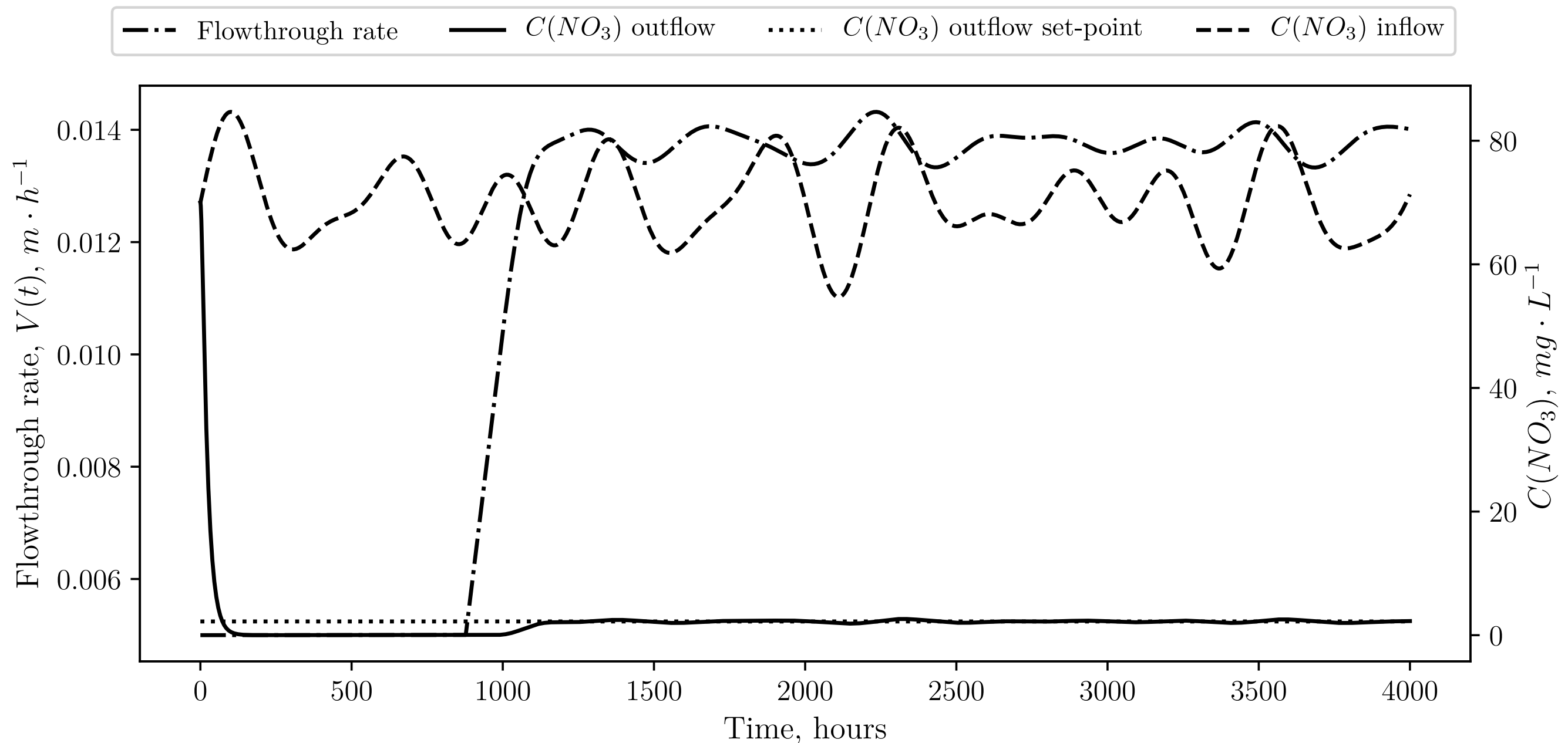
$$\begin{cases} \frac{\partial S}{\partial t} = \alpha \frac{\partial S}{\partial x} - \frac{V_{max}S}{K_M + S}, \\ \frac{\partial P}{\partial t} = \alpha \frac{\partial P}{\partial x} + \frac{V_{max}S}{K_M + S}, \end{cases}$$

Matematinis modelis

Nelokali sąlyga, PID valdymo algoritmas

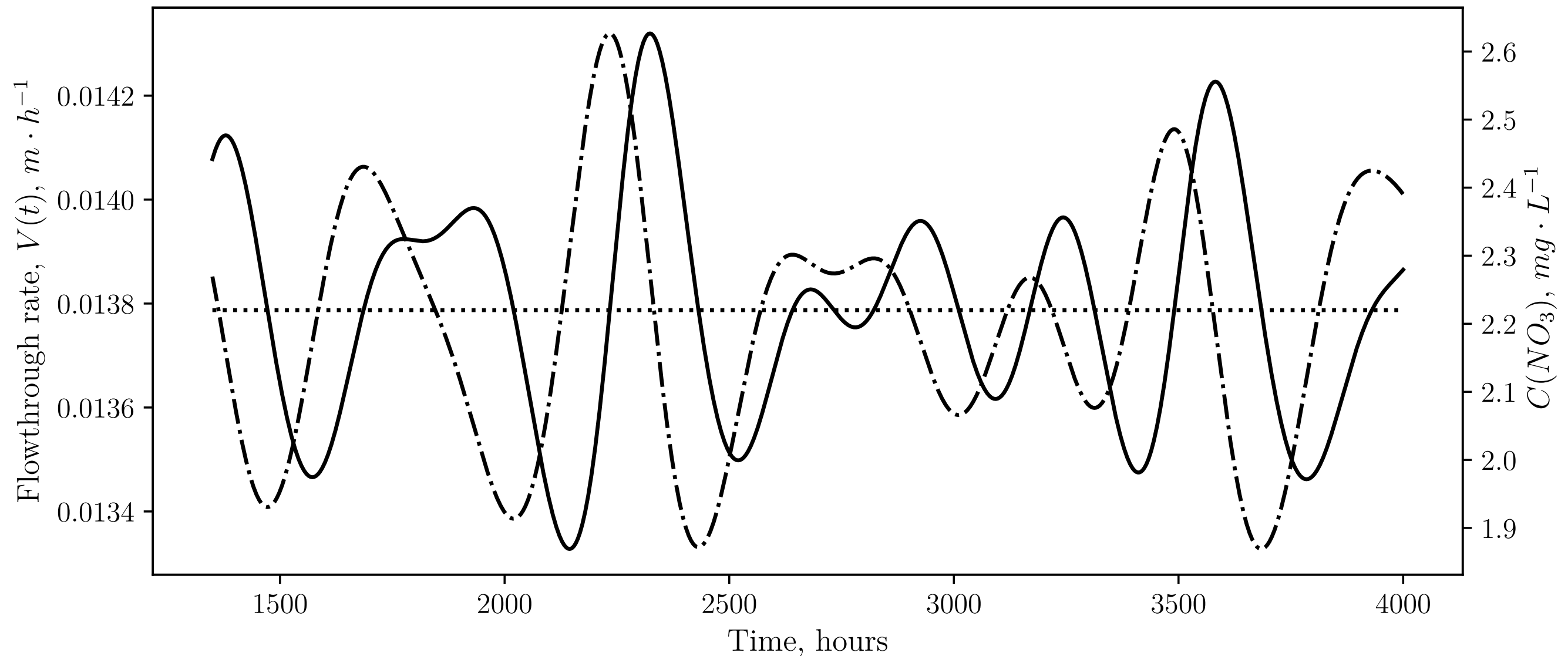
$$\left\{ \begin{array}{l} e(t) = Q(t) - \frac{2\mathcal{D}_p}{m^2 - n^2} \int_n^m P(x, t) dx, \\ \alpha(t) = \mathcal{K}_p e(t) + \mathcal{K}_i \int_0^t e(\tau) d\tau, \\ 0 < m, n < d, \quad 0 < t \leq T. \end{array} \right.$$

Denitrifikacijos bioreaktoriaus valdymas



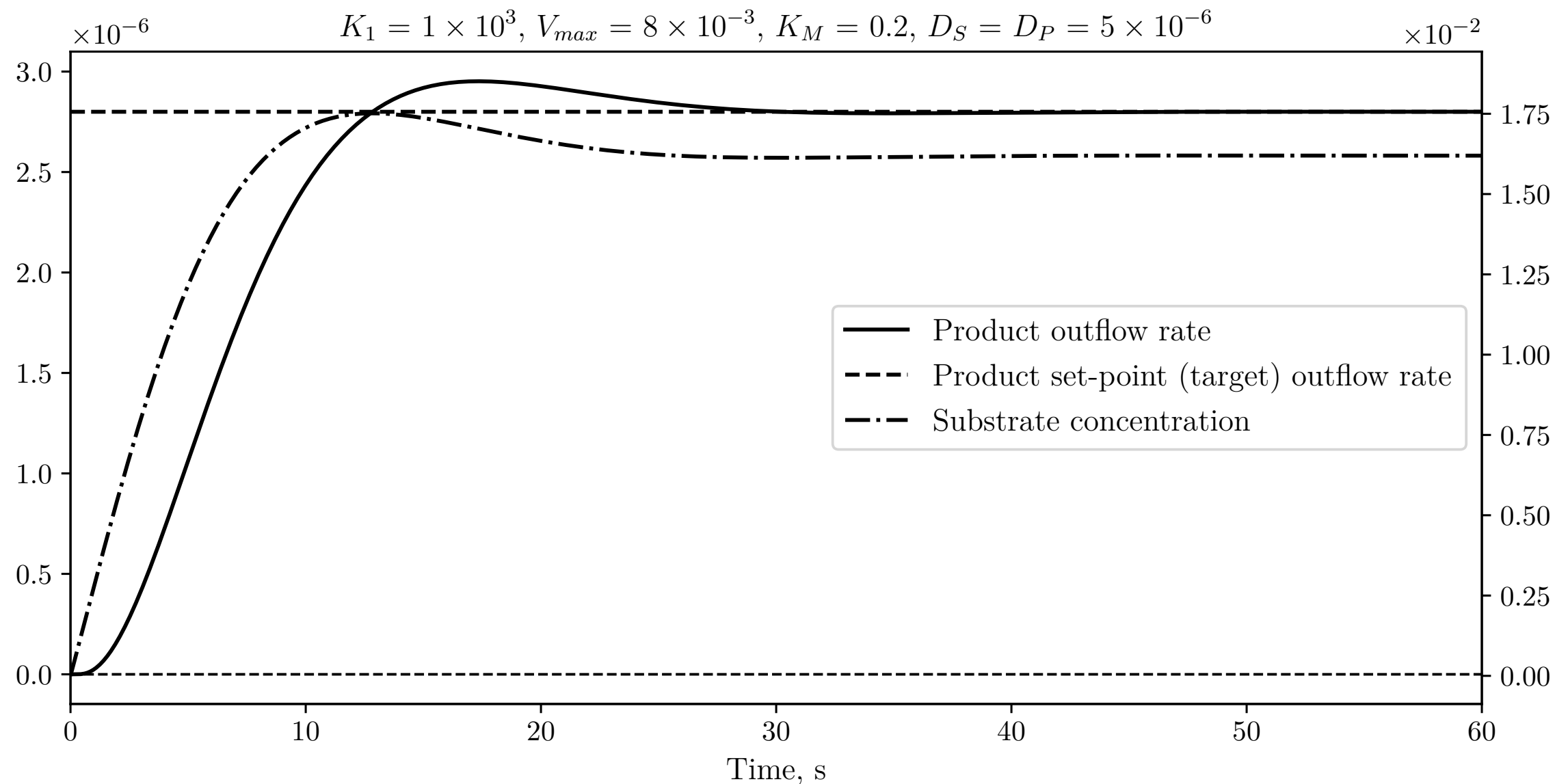
Denitrifikacijos bioreaktoriaus valdymas

— · — Flowthrough rate — $C(NO_3)$ outflow ····· $C(NO_3)$ outflow set-point



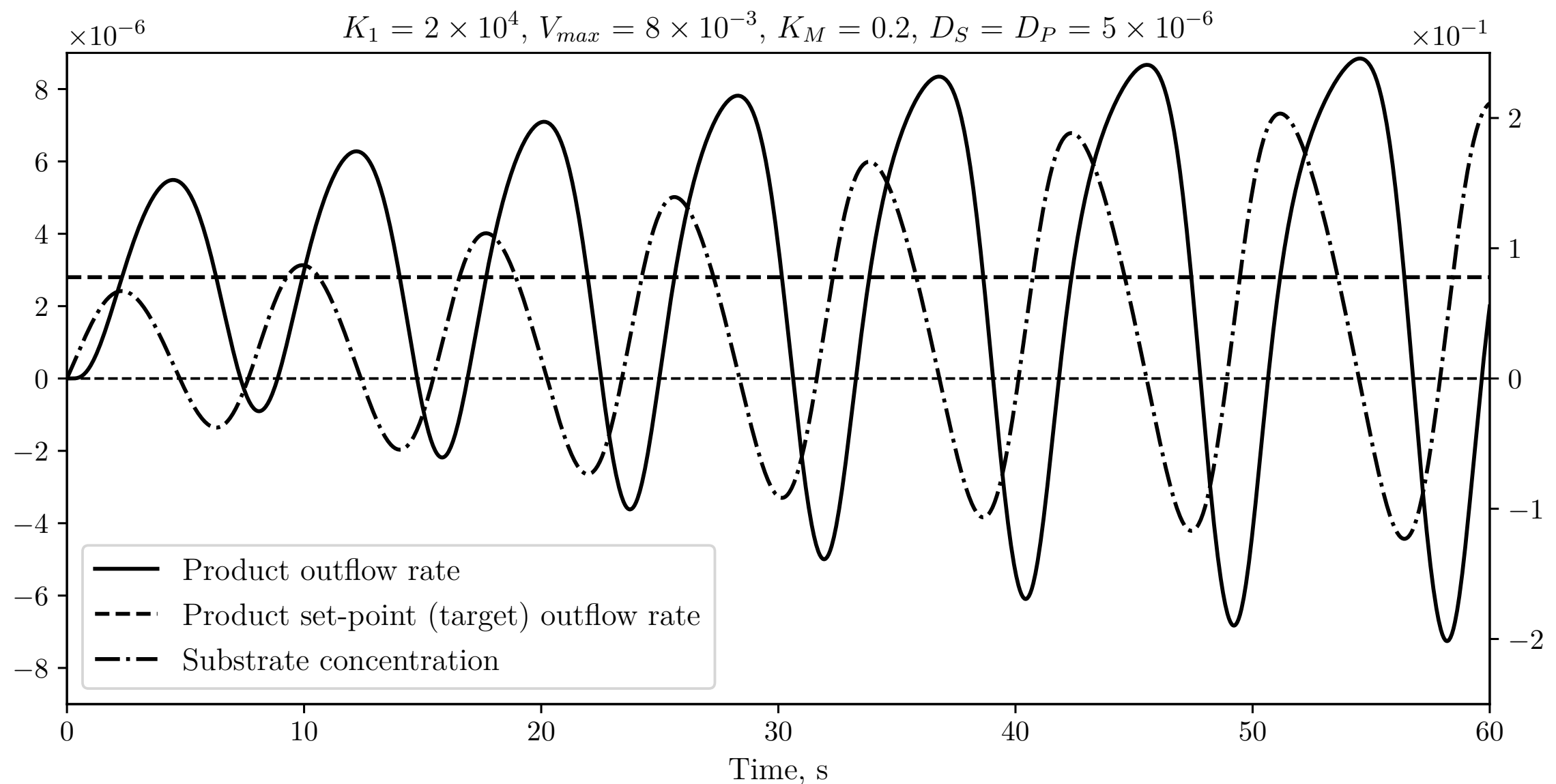
Valdymo rezultatai

Gerai parinktų parametų pavyzdys



Valdymo rezultatai

Neteisingai parinktų parametrų pavyzdys



Išvados

- Siūlomi reakcijos-difuzijos, konvekcijos-reakcijos-difuzijos ir konvekcijos-reakcijos matematiniai modeliai su nelokaliomis kraštinėmis sąlygomis ir nelokaliomis sąlygomis, kurios aprašo PID valdymą (arba jo komponentų poaibį, PI, I), skirti bioreaktoriaus modeliavimui, gali būti taikomi bioreaktorių modeliavimui su valdymu.
- Reakcijos-difuzijos matematinis modelis su nelokalia kraštine sąlyga, aprašančia PID valdiklį, gali būti pritaikytas bioreaktoriaus modeliavimui vaistų įvedimo srityje.

Išvados

- Konvekcijos-reakcijos-difuzijos diferencialinių lygčių sistema su valdymo mechanizmu, aprašytu naudojant nelokalią sąlygą, gali būti naudojama vaisto įvedimo matematiniam modeliavimui, taikomam slėgio kontroliuojamam bioreaktoriui.
- Konvekcijos-reakcijos diferencialinių lygčių sistema su nelokalia sąlyga, aprašančia valdymą, gali būti naudojama nitratams šalinti medienos drožlių denitrifikacijos bioreaktoriuje, valdant vandens srautą.

Děkoju už děmesj