

TECHNICAL SCIENCES

Дячок В.В., Гузлич С.І.

Математичне моделювання біологічних процесів ускладнених масопереносом

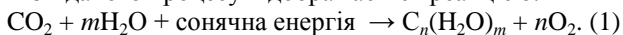
Дячок Василь Володимирович, доктор технічних наук, професор
 Гузлич Сергій Іванович, кандидат технічних наук, старший викладач
 Національний університет «Львівська політехніка», м. Львів, Україна

Анотація. Представлено результати вивчення процесу поглинання вуглекислого газу одноклітинними мікроводоростями. З'ясовано стадії перебігу процесу враховуючи особливості умов культивування, а саме наявності клітинного та міжклітинного середовища. Побудовано математичну модель поглинання вуглекислого газу з повітря клітинами мікроводоростей. Отримані рішення дозволяють моделювати кінетику процесу поглинання вуглекислого газу та прогнозувати обладнання для здійснення технологічного процесу очищення газових викидів за умов реалізації біотехнологічного процесу на практиці.

Ключові слова: фотосинтез, мікроводорості, математична модель, коефіцієнт масопереносу, біомаса, міжклітинне середовище, дифузія

Вступ. У нинішній час людство змушене вирішувати значну кількість екологічних проблем пов'язаних з антропогенним впливом на навколишнє середовище. Тому не є виключенням негативний вплив на атмосферу великої кількості промислових викидів, зокрема, вуглекислого газу. Існує велика кількість методів очищення газових викидів від вуглекислого газу у промислових масштабах, однак варто пам'ятати і про фотосинтетичну активність рослинного світу, яка зменшується в наслідок дедалі активнішого його знищення.

Наука довела здатність природи до поглинання вуглекислого газу з атмосфери рослинами та водоростями та його накопичення у вигляді біомаси [1]. Хімізм даного процесу відображається реакцією:



Аналіз останніх досліджень і публікацій. Мікроводорості є одноклітинними, рослиноподібними організмами, в яких поглинання вуглекислого газу зумовлюється процесом фотосинтезу. Дані організми мають великі переваги над звичайними наземними рослинами, оскільки мікроводорості характеризуються високими темпами приросту, що сприяє швидкому перетворенню вуглекислого газу у біомасу. Вони можуть вирости в закритих системах, зберігаючи всі необхідні властивості, в яких наземні рослини не можуть розвиватися, тому впровадження промислових способів поглинання вуглекислого газу з подальшим фотосинтезом є важливим завданням сучасності [2]. Також не менш важливим завданням є вирішення проблеми розширення меж застосування отриманої біомаси. На сьогоднішній день найдоцільніше переробляти її у вуглеводневі продукти гідротермальною карбонізацією або у біопаливо. Не менш цікавим є анаеробне бродіння, в результаті чого одержується газ-метан [3].

Отже, застосування одноклітинних водоростей, дає можливість реалізовувати біологічні процеси очищення газових викидів від вуглекислого газу. Тому дослідження впливу температури на швидкість поглинання вуглекислого газу мікроводоростями є актуальним завданням сьогодення [4].

Мета роботи полягає у вивченні впливу температури на процеси, які супроводжують поглинання вуглекислого газу із газового середовища клітинами мікроводоростей, або іншими словами у вивченні впливу

температури на процеси, які супроводжують трансформацію вуглекислого газу у біомасу.

Матеріали і методи. Біологічні об'єкти, як правило, дуже складні, а на процеси, що протікають в них, впливають багато факторів, які часто залежать один від одного. Найбільш важливими з яких є температура, ступінь аерації, освітленість, концентрація вуглекислого газу, вміст макро та мікроелементів, лужно-кислотний баланс і т. д. За допомогою кореляції фізико-хімічних величин з біологічними можна одержати більш глибоке розуміння процесів у досліджуваному біологічному об'єкті.

Основою сучасної стратегії кінетичного дослідження та опису біологічних процесів, ускладнених масопереносом, є роздільне кількісне вивчення впливу кінетичних і дифузійних факторів та пошук такого режиму проведення процесу, коли вплив масопереносу незначний або може бути знехтуваний.

Процес поглинання вуглекислого газу мікроводоростями за умов його барботування через водний розчин умовно можна поділити на чотири стадії [5]:

– *перша стадія*; підведення вуглекислого газу з основного об'єму розчину до поверхні колоній біомаси мікроводоростей. Кількісно цей процес описується рівнянням масовіддачі:

$$dM/dt = \beta F(C - C_n); \quad (2)$$

де β – коефіцієнт масовіддачі від основного об'єму розчину до поверхні границі колоній мікроводоростей; M – маса вуглекислого газу, що перейшла з основного об'єму розчину до поверхні границі колоній мікроводоростей; t – час; F – площа поверхні масообміну; C , C_n – концентрація вуглекислого газу в основному об'ємі розчину і на поверхні границі колоній мікроводоростей.

– *друга стадія*; дифузія вуглекислого газу від поверхні границі колоній мікроводоростей, через міжклітинне середовище до поверхні мембран клітин мікроводоростей. Проникнення розчиненого в рідкій фазі вуглекислого газу до поверхні мембрани клітини проходить шляхом молекулярної дифузії з подальшим транспортом його через клітинну мембрану у внутрішній об'єм. Кількісно процес міжклітинного масопереносу описується рівнянням:

$$D_m = \varepsilon \cdot D; \quad (3)$$

де ε – коефіцієнт, що визначає пористість колоній мікроводоростей; D_m – коефіцієнт дифузії вуглекислого газу в міжклітинному середовищі колоній мікроводоростей; D – коефіцієнт дифузії вуглекислого газу у воді:

– *третья стадія*; проникнення вуглекислого газу через клітинну мембрану у внутрішній об'єм клітини мікроводорості. Проникнення вуглекислого газу через клітинну мембрану може здійснюватися, як за рахунок активного, так і пасивного транспорту. У випадку пасивного транспорту процес має дифузійний характер, та може бути представлений рівнянням:

$$\gamma = -D_c \text{grad} C_m; \quad (4)$$

де γ – густина об'ємного потоку вуглекислого газу через клітинну мембрану; C_m – концентрація вуглекислого газу в міжклітинному середовищі; D_c – коефіцієнт дифузії вуглекислого газу через клітинну мембрану.

– *четверта стадія*; фотосинтез. Шлях дифузії закінчується в хлоропластах, тут вуглекислий газ вступає в біохімічну реакцію фотосинтезу. Кінетика фотосинтезу описується рівнянням:

$$\frac{dC}{dt} = k C_{CO_2} C_{H_2O}; \quad (5)$$

де k – константа швидкості біохімічної реакції фотосинтезу.

Згідно правила адитивності сумарний коефіцієнт масопереносу – K визначається:

$$K = \frac{1}{\frac{1}{\beta} + \frac{l}{D_m} + \frac{\delta}{D_c} + \frac{1}{k}}; \quad (6)$$

де l – умовний середній розмір колоній мікроводоростей; δ – товщина мембрани клітини мікроводорості; D_c – коефіцієнт дифузії вуглекислого газу через клітинну мембрану; k – константа швидкості біохімічної реакції фотосинтезу.

Через клітинну мембрану концентрація вуглекислого газу зменшується за лінійним законом від C_o до C_B . Швидкість транспорту вуглекислого газу через одиницю площі – F клітинної мембрани:

$$\frac{dm}{dt} = u = D_c F \frac{C_o - C_B}{\delta}; \quad (7)$$

де C_o та C_B – концентрація вуглекислого газу на зовнішній та внутрішній поверхні мембрани клітини мікроводорості відповідно.

Швидкість біохімічної реакції пропорційна концентрації вуглекислого газу – C_B у внутрішньому об'ємі клітини, оскільки концентрація води у внутрішньому об'ємі клітини є достатньо значною і постійною.

$$u_p = k C_B. \quad (8)$$

В умовах стаціонарного стану кількість вуглекислого газу, що вступає в реакцію фотосинтезу рівна кількості вуглекислого газу, що проникає через клітинну мембрану у внутрішній об'єм клітини:

$$\beta_c (C_o - C_B)_p = k C_B \quad (9)$$

де β_c – коефіцієнт масо провідності через клітинну мембрану.

Визначивши із рівняння (9) C_B та підставивши його у рівняння (8) отримаємо вираз для визначення швидкості реакції фотосинтезу:

$$u_p = C_o \frac{k \beta_c}{k + \beta_c}. \quad (10)$$

Якщо швидкість реакції фотосинтезу більша за швидкість транспорту вуглекислого газу через клітинну мембрану:

$$k \gg \beta_c. \quad (11)$$

Тоді в знаменнику рівняння (10) можна знехтувати величиною – β і швидкість реакції дорівнюватиме:

$$u_p = \beta_c C_o \quad (12)$$

З рівняння (12) випливає, що швидкість реакції фотосинтезу визначається швидкістю дифузії (транспортування) вуглекислого газу через клітинну мембрану (дифузійна кінетика).

Якщо ж швидкість реакції буде значно менша від швидкості транспорту вуглекислого газу через клітинну оболонку:

$$k \ll \beta_c. \quad (13)$$

То в рівнянні (10) можна знехтувати величиною – k , тоді швидкість реакції фотосинтезу дорівнюватиме:

$$u_p = k C_o. \quad (14)$$

Тобто швидкість реакції визначається швидкістю взаємодії вуглекислого газу з водою. Якщо швидкість реакції взаємодії вуглекислого газу з водою дуже велика, тоді концентрація вуглекислого газу у внутрішньому об'ємі клітини рівна нулю, і рівняння (7) переписується:

$$\frac{dm}{dt} = u = \frac{D}{\delta} F C_o. \quad (15)$$

Це просте співвідношення на основі експериментальних даних дає змогу визначити коефіцієнт дифузії вуглекислого газу в клітинній мембрані.

Якщо швидкість реакції визначається швидкістю дифузії вуглекислого газу то для інтенсифікації процесу в цілому доцільно застосовувати перемішування тобто інтенсифікувати гідродинаміку. Якщо ж швидкість реакції залежить від швидкості біохімічної взаємодії, то очевидно інтенсифікація гідродинаміки не дасть бажаних результатів. У цьому випадку слід підвищувати температуру. На дифузійну кінетику підвищення температури впливає значно менше, ніж на швидкість біохімічної реакції.

Для біологічних процесів, швидкість яких залежить від швидкості біохімічної реакції, залежність її від температури описується рівнянням:

$$u = k C^n e^{-\frac{E}{RT}}. \quad (16)$$

де E – енергія активації, n – молекулярність реакції, C – концентрація реагуючих речовин, k – константа швидкості біохімічної реакції.

Залежність константи швидкості біохімічної реакції – k від температури – T має вигляд:

$$k = k_o e^{-\frac{E}{RT}}. \quad (17)$$

Прологарифмувавши рівняння (17) отримаємо:

$$\lg k = \lg k_o - \frac{E}{2,3RT} = \lg k_o - \frac{E}{4,575T}. \quad (18)$$

Позначивши $\lg k_o$ через – B , а $\frac{E}{4,575}$ через – A

дістанемо вираз:

$$\lg k = B - \frac{A}{T} \quad (19)$$

Величини A та B є константами даної реакції. Якщо за експериментальними даними побудувати графік залежності, $\lg k = f\left(\frac{1}{T}\right)$, то дана залежність опишеться прямою лінією, тангенс кута нахилу якої дозволить визначити величину $-A$ (рис. 4). Енергію активації визначали: $E = 4,575A = 4,575tg\alpha$.

Для вивчення впливу температури на процес поглинання вуглекислого газу мікрободоростями проводились експериментальні дослідження у трьох фотобіореакторах. Апаратурне оформлення досліджень забезпечувало достатню кількість вуглекислого газу мікрободоростям у всьому об'ємі фотобіореакторів. Організація перемішування та освітлення сприяло процесу поглинання вуглекислого газу, що супроводжувалось зростанням кількості клітин мікрободоростей (біомаси). Температура середовища культивування у фотобіореакторах становила $20 \pm 1^\circ\text{C}$, $28 \pm 1^\circ\text{C}$, $35 \pm 1^\circ\text{C}$ відповідно. рН середовищ культивування ста-

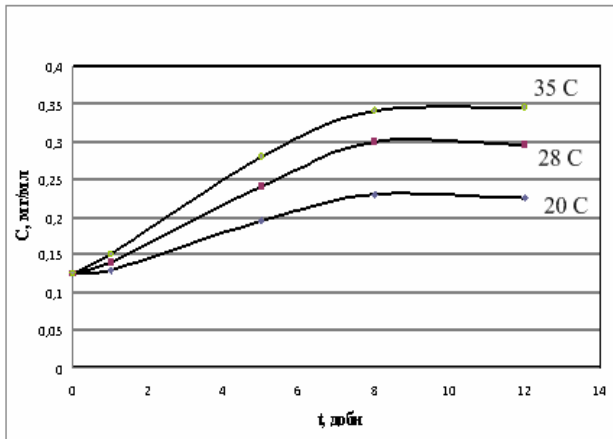


Рис. 1. Кінетичні криві приросту концентрації мікрободоростей від часу за відповідних температур

новила 6,5. Відбір біомаси водоростей здійснювали з встановленим інтервалом часу. Визначення концентрації біомаси водоростей проводили фотокolorиметричним методом.

Результати та обговорення. За умов барботування вуглекислого газу через водний розчин у фотобіореакторах, підвід вуглекислого газу з основного об'єму розчину до поверхні границі колоній мікрободоростей є інтенсивним. Тому коефіцієнт масовіддачі $-\beta$ є відносно значною величиною, а оберненим його значенням (див. (6) можемо знехтувати. Враховуючи пористість колоній мікрободоростей (за умов $\varepsilon=0,4$), допускаємо, що присутній конвективний масоперенос вуглекислого газу в міжклітинному об'ємі колоній, а відтак другим коефіцієнтом знаменнику виразу (6) також нехтуємо. Транспортування вуглекислого газу через клітинну мембрану та біохімічна реакції фотосинтезу супроводжується процесом приросту біомаси, а приріст біомаси пропорційний кількості поглинутого вуглекислого газу (CO_2), тому:

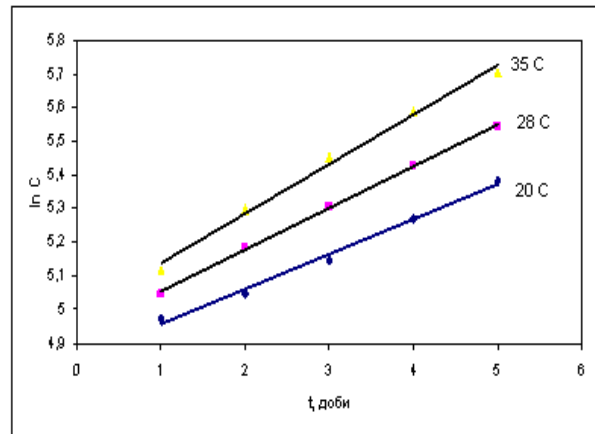


Рис. 2. Кінетичні криві приросту логарифму концентрації мікрободоростей від часу за відповідних температур

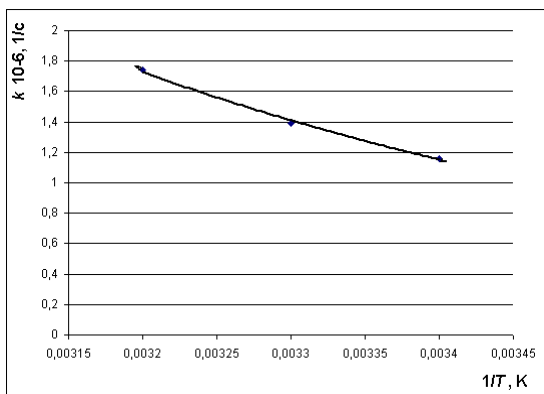


Рис. 3. Залежність коефіцієнту приросту $-k_m$ мікрободоростей від зворотної температури $-T$

$$\frac{dN}{dt} \sim \frac{dM}{dt} \sim \frac{dm_{\text{CO}_2}}{dt} \quad (20)$$

де $\frac{dN}{dt}$ – швидкість приросту клітин мікрободоростей

в середовищі; $\frac{dM}{dt}$ – швидкість приросту маси мі-

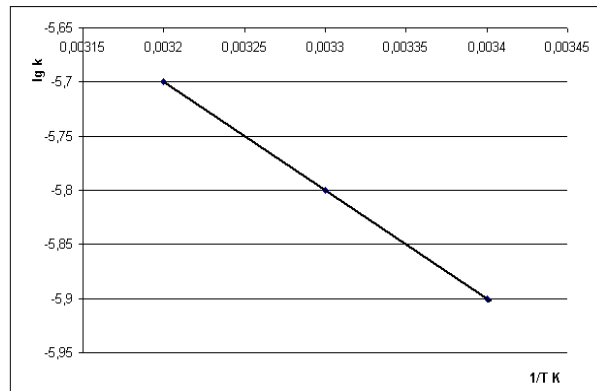


Рис. 4. Залежність логарифма коефіцієнту приросту $-k_m$ мікрободоростей від зворотної температури $-T$

крободоростей в середовищі; $\frac{dm_{\text{CO}_2}}{dt}$ – швидкість поглинання вуглекислого газу.

Таким чином, сумарне значення коефіцієнту масопереносу $-K$ пропорційне сумі цих двох величин знаменника рівняння (6), тобто коефіцієнту приросту біомаси $-k_m$:

$$k_m \sim K. \quad (21)$$

Результати кінетики експериментальних досліджень приросту біомаси мікрободоростей за умов поглинання вуглекислого газу за різних температур представлені на рисунку 1.

Це є типові криві приросту, які мають так звану S-подібну форму і дозволяють виділити чотири фази приросту, які проходять у певній послідовності та виражені більшою або меншою мірою: лаг-фазу, фазу експоненціального росту, стаціонарну фазу, фазу осідання культури.

Як видно з рисунку 1 кінетика приросту суттєво залежить від температури. Отримані експериментальні криві дослідження кінетики добре описуються рівнянням (22):

$$N = N_0 e^{-k_m t}. \quad (22)$$

Дане рівняння в логарифмічних координатах описує пряму лінію тангенс кута нахилу якої дозволяє визначити коефіцієнт приросту $-k_m$ при кожному значенні температури.

$$\ln N = \ln N_0 + k_m t. \quad (23)$$

Результати перетворень зображено на рисунку 2. Коефіцієнт приросту біомаси мікрободоростей за досліджуваних значень температур становив $k_{m20}=0.10$

доба⁻¹; $k_{m28}=0.12$ доба⁻¹; $k_{m35}=0.15$ доба⁻¹ відповідно. Отриманий результат дозволяє встановити залежність коефіцієнту приросту мікрободоростей від температури (рис. 3). Аналітичний вираз якого має вигляд:

$$k_m = 11,35 \cdot 10^{-4} e^{\frac{2073}{T}} \quad (24)$$

Розраховане значення енергії активація за виразом (21) становить $E = 4,57$ кДж/моль (Рис. 4).

На основі отриманих експериментальних даних встановлено, що швидкість приросту біомаси, тобто швидкість поглинання вуглекислого газу та відповідно швидкість реакції фотосинтезу за досліджуваних температур однакового значення в часі, що засвідчує ферментативний механізм досліджуваного процесу, який описується кінетикою ферментативних реакцій Міхаеліса-Ментен.

Висновок. Досліджено процеси, які супроводжують трансформацію вуглекислого газу у біомасу мікрободоростей. Вивчено всі стадії та встановлено лімітуючу стадію процесу поглинання вуглекислого газу із повітря клітинами мікрободоростей. Отримано аналітичну залежність коефіцієнту приросту мікрободоростей від температури та визначено енергію активації реакції фотосинтезу в них.

ЛІТЕРАТУРА

1. Нетрусов А.И., Бонч-Осмоловская Е.А., Горленко В.М. Экология микроорганизмов: Учебник, для студ. Вузов; Под ред. А.И. Нетрусова. - М.: Издат. центр "Академия", 2004.- 272 с.
2. Калюжний С.В. Биотехнология, кинетичні основи мікробіологічних процесів. - М.:ВШ., 2000. -296с.
3. Теппер Е.З., Шильникова В.К., Переверзева Г.И. Практикум по микробиологии. - М.: Дрофа, 2004. - 256 с.
4. Різниченко Н.Ф. Математичні моделі біологічних процесів. - М: МГУ, 1996. - 300 с.
5. Dyachok V. Extraction process of intracellular substance / Chemistry & chemical technology. - 2010. - Vol. 4, № 2. - P. 163-167.

REFERENCES (TRANSLATED AND TRANSLITERATED)

1. Netrusov A.I., Bonch-Osmolovskaya E.A., Gorlenko V.M. Ecology of microorganisms: Textbook for students of universities; Ed. A.I. Netrusov. - M.: Pub. center "Academy", 2004. - 272p.
2. Kalyuzhny S.V. Biotechnology, kinetic bases of mikrobiologic processes. - Moscow: HS, 2000. - 296 p.
3. Tepper E.Z., Shilnikova V.K., Pereversev G.I. Workshop on microbiology. - M.: Bustard, 2004. - 256 p.
4. Riznychenko N.F. Mathematical models of biological processes. - Moscow: Moscow State University, 1996. - 300 p.

Dyachok V., Huhlych S.

The mathematical modeling of biological processes complicated mass transfer

Abstract. The results of the process of absorption carbon dioxide from unicellular microalgae are studied and explored. The characteristics all stages of the process are provided such as culture conditions, the presence of cellular and extracellular environment. The mathematical model of the absorption of carbon dioxide from unicellular microalgae constructed. The solution of kinetics simulation of the process of absorption of carbon dioxide predicted, equipment and conditions for this process are selected.

Keywords: photosynthesis, microalgae, mathematical model, the mass transfer coefficient, biomass, intercellular environment diffusion

Дячок В.В., Гуглич С.И.

Математическое моделирование биологических процес сов усложненных массопереносом

Аннотация. Представлены результаты изучения процесса поглощения углекислого газа одноклеточными микроводорослями. Установлены стадии прохождения процесса с учетом особенностей условий культивирования, а именно наличия клеточной и межклеточной среды. Построена математическая модель поглощения углекислого газа с воздуха клетками микроводорослей. Полученные результаты разрешают прогнозировать кинетику процесса поглощения углекислого газа и предусмотреть оборудование для проведения технологического процесса очистки газовых выбросов в промышленных условиях.

Ключевые слова: фотосинтез, микроводоросли, математическая модель, коэффициент массопереноса, биомасса, межклеточная среда, диффузия