

# Bioreaktoriaus valdymo modeliavimas taikant reakcijos-difuzijos lygčių sistemą su nelokalia kraštine sąlyga

Antrųjų metų doktorantūros tyrimų ataskaita (2016-2020)

Anatolij Nečiporenko

[anatolij.neciporenko@mif.vu.lt](mailto:anatolij.neciporenko@mif.vu.lt)

Darbo vadovas

prof. habil. dr. Feliksas Ivanauskas

Konsultantas

prof. dr. Tadas Meškauskas

2018 m. spalio

# Planas

- Šiais metais buvo suplanuota išlaikyti tris egzaminus: *Skaitiniai metodai*, *Optimizavimo metodai ir jų taikymas* ir *Dirbtiniai neuroniniai tinklai*. Du egzaminai buvo išlaikyti, paskutinis (*Dirbtiniai neuroniniai tinklai*) egzaminas bus išlaikytas iki 2018 metų pabaigos.
- Iš viso yra paskelbtas vienas mokslinis straipsnis. Dar vienas straipsnis įteiktas žurnalui *Chemical Engineering Research and Design*.
- Šiuo metu ruošiamas trečias straipsnis disertacijos tema. Atliekami skaitiniai tyrimai, susiję su skaitinio algoritmo stabilumo tyrimais.

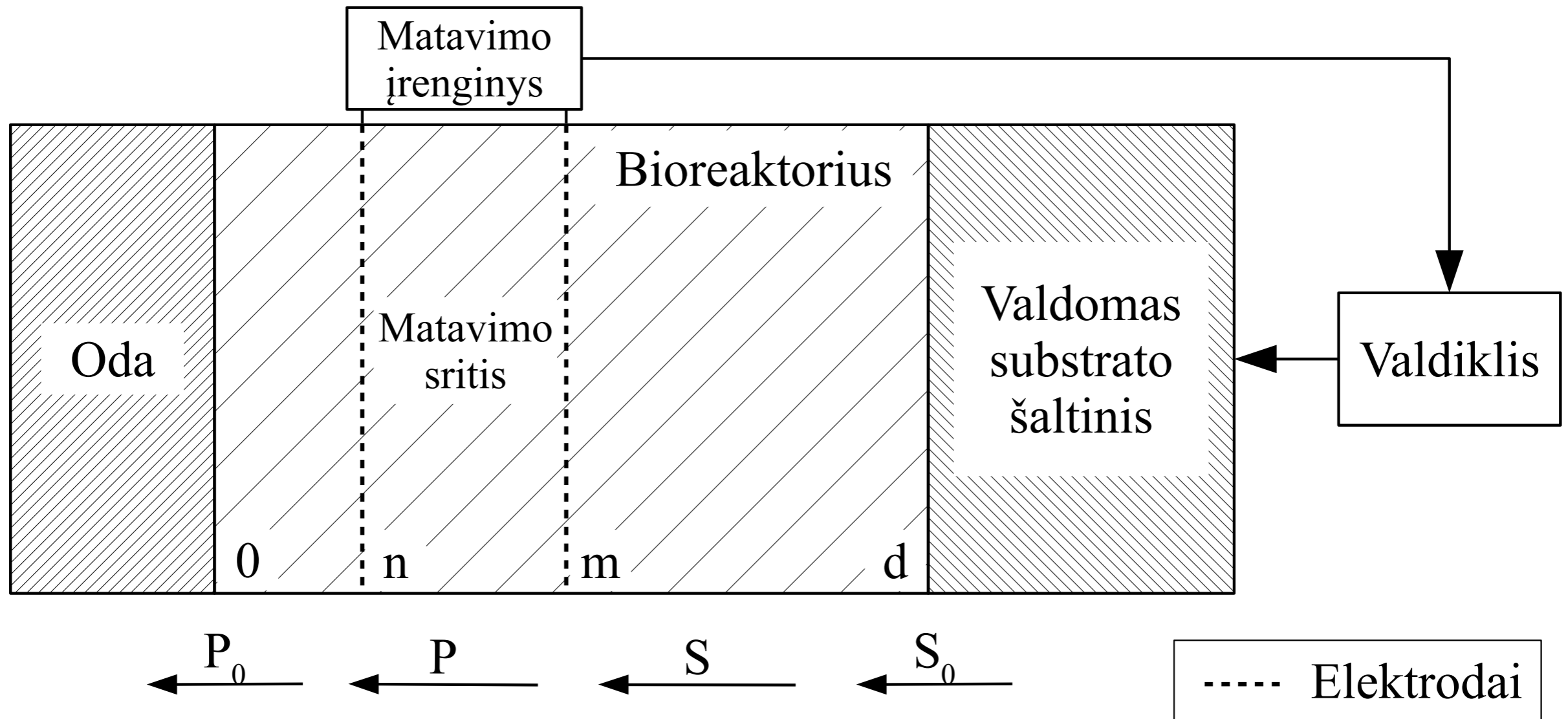
# Planas

- Skaitytas pranešimas 7-oje jaunųjų mokslininkų konferencijoje *Fizinių ir technologijos mokslų tarpdalykiniai tyrimai*.
- Pranešimas tarptautinėje konferencijoje *30th Nordic Seminar on Computational Mechanics (NSCM30)*, 2017, Technical University of Denmark, Copenhagen. Pranešimo pavadinimas *PID-controlled flow-through bioreactor*.
- Skaitytas pranešimas *3rd NESUS Winter School and PhD Symposium on Data Science and Heterogeneous Computing 2018*, Ruđer Bošković Institute, Centre for informatics and computing, Zagreb, Croatia.

# 2017–2018 m. m. mokslinių tyrimų planas

- Tyrimo metodikos sudarymas.
- Teorinis tyrimas: išanalizuoti skaitinio algoritmo stabilumą. Optimizuoti skaitinį algoritmą.
- Empirinis tyrimas: bioreaktoriaus skaitinė analizė naudojant superkompiuterį. Gautų rezultatų palyginimas su eksperimentų duomenimis.

# 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

Bioreaktoriaus valdymas kontroliuojant vaisto  
pirmtako slėgį

$$\begin{cases} \frac{\partial S}{\partial t} = D_S \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} + \alpha \frac{\partial S}{\partial x} - \frac{V_{max} S}{K_M + S}, \\ \frac{\partial P}{\partial t} = D_P \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \alpha \frac{\partial P}{\partial x} + \frac{V_{max} S}{K_M + S}, \end{cases}$$

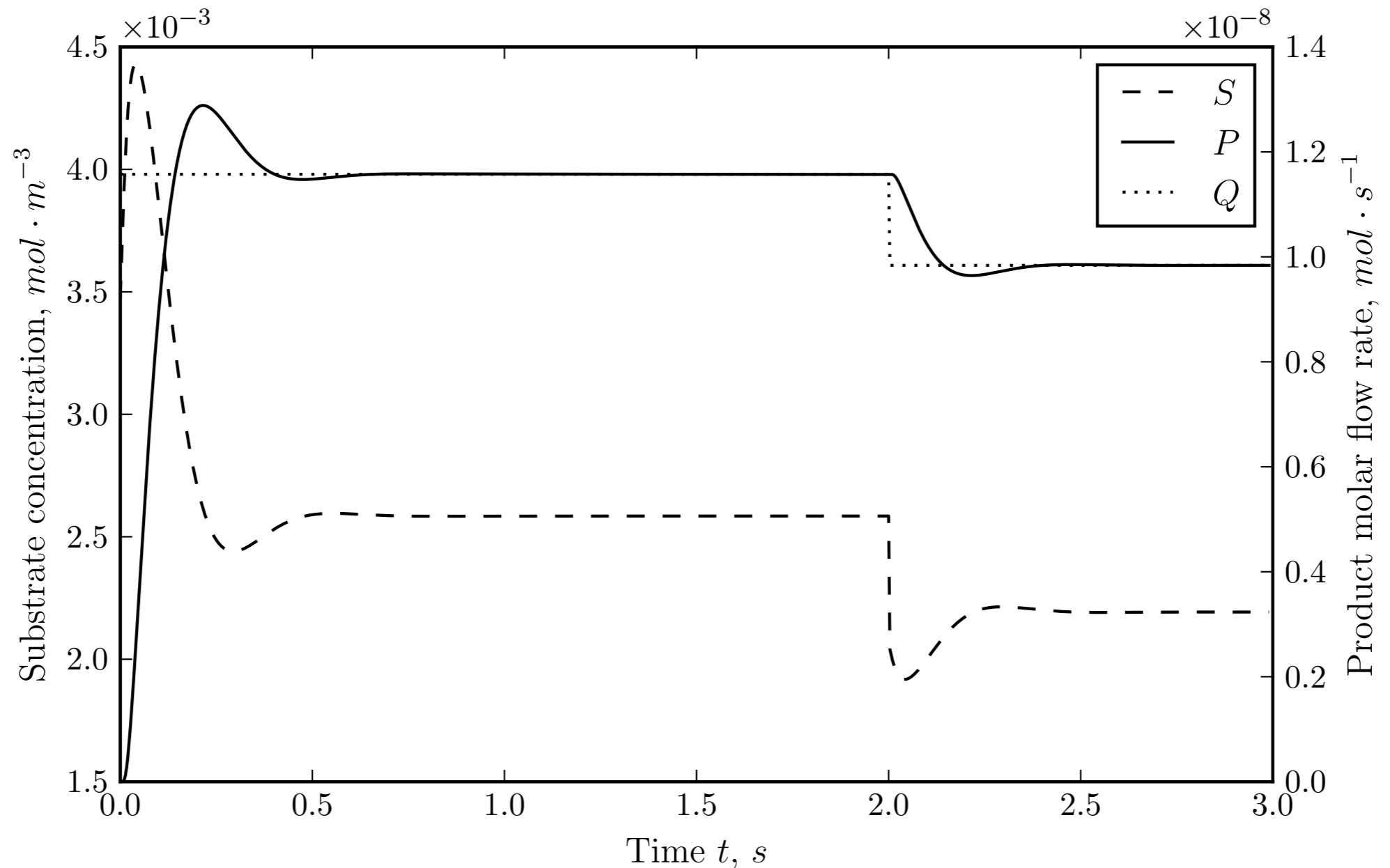
# Matematinis modelis

Nelokali kraštinė sąlyga (PID valdymo algoritmas)

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



# Rezultatai



Stepwise treatment protocol. Substrate ( $S$ ) concentration  $S(d, t)$ , product ( $P$ ) molar flow rate and set-point ( $Q$ ) function  $Q(t)$ .

Parameters  $\mathcal{K}_p = 3 \times 10^5$ ,  $\mathcal{K}_i = 4 \times 10^6$ ,  $\mathcal{K}_d = 1.2 \times 10^7$ .

# Nauji atlikti tyrimai

- ▶ Ištekančio mišinio sudėties valdymas.
- ▶ Bioreaktoriaus ilgio įtaka valdymui.
- ▶ Bioreaktoriaus valdymas kontroliuojant vaisto pirmtako slėgį.

# Ištekančio mišinio sudėties valdymas

- 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, kad valdymas efektyvus esant 1 cm ilgiui.

Děkoju už děmesj