

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

Trečiųjų metų doktorantūros tyrimų ataskaita (2016-2020)

Anatolij Nečiporenko

anatolij.neciporenko@mif.vu.lt

Darbo vadovas

prof. habil. dr. Feliksas Ivanauskas

Konsultantas

prof. dr. Tadas Meškauskas

2019 m. rugsėjis

Planas

- Visi egzaminai išlaikyti. Rinktiniai matematinės fizikos lygčių skyriai, skaitiniai metodai, optimizavimo metodai ir jų taikymas, dirbtiniai neuroniniai tinklai.
- Paskelbti du moksliniai straipsniai.
- Šiuo metu ruošiami du straipsniai disertacijos tema. Vieno iš jų visi skaitiniai tyrimai jau atlikti, tekstas paruoštas, ruošiamas išsiųsti redakcijai. Antrojo straipsnio skaitiniai tyrimai, susiję su skaitinio algoritmo stabilumu, atlikti, ruošiamas tekstas.

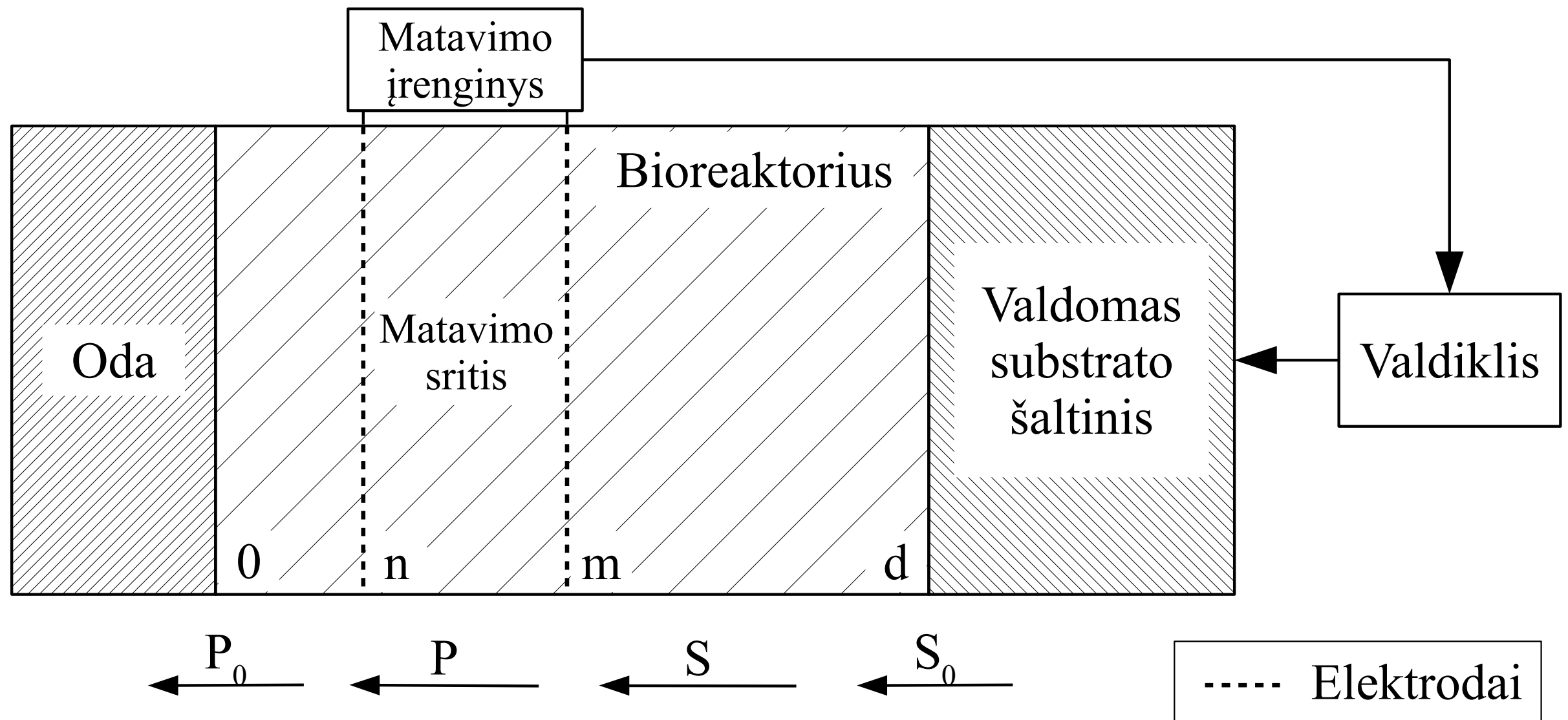
Planas

- 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.

2018–2019 m. m. mokslinių tyrimų planas

- Gautų duomenų analizė, apibendrinimas, išvadų parengimas. Modeliavimo rezultatų analizė ir optimalių parametrų parinkimas.
- Pasiūlyti matematinius ir kompiuterinius modelius valdomiems bioreaktoriams.
- Išanalizuoti diferencialinės sistemos skaitinio algoritmo stabilumą.
- Atlikti valdymo mechanizmo tyrimą.

Bioreaktorius



Matematinis modelis

Difuzijos–reakcijos 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

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

Konvekcijos–difuzijos–reakcijos netiesinių
diferencialinių lygčių sistema

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

Matematinis modelis

Nelokali kraštinė sąlyga, PID valdymo algoritmas

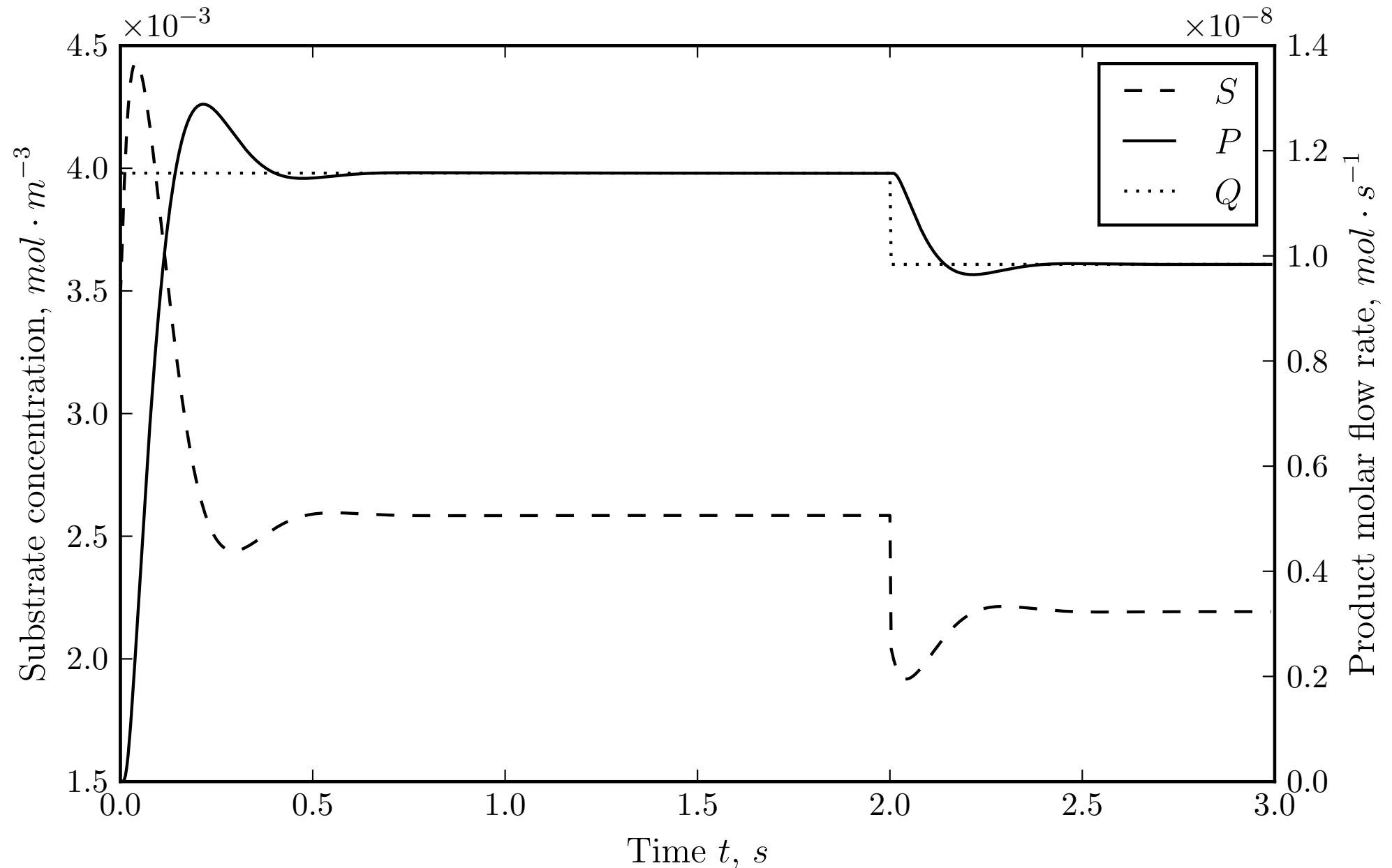
$$\left\{ \begin{array}{l} e(t) = Q(t) - \frac{2\mathcal{D}_p}{m^2 - n^2} \int_n^m P(x, t) dx, \\ S(d, t) = \mathcal{K}_p e(t) + \mathcal{K}_i \int_0^T e(\tau) d\tau + \mathcal{K}_d \frac{de(t)}{dt}, \\ 0 < m, n < d, \quad 0 < t \leq T. \end{array} \right.$$

Matematinis modelis

Nelokali kraštinė sąlyga, PID valdymo algoritmas

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

Rezultatai



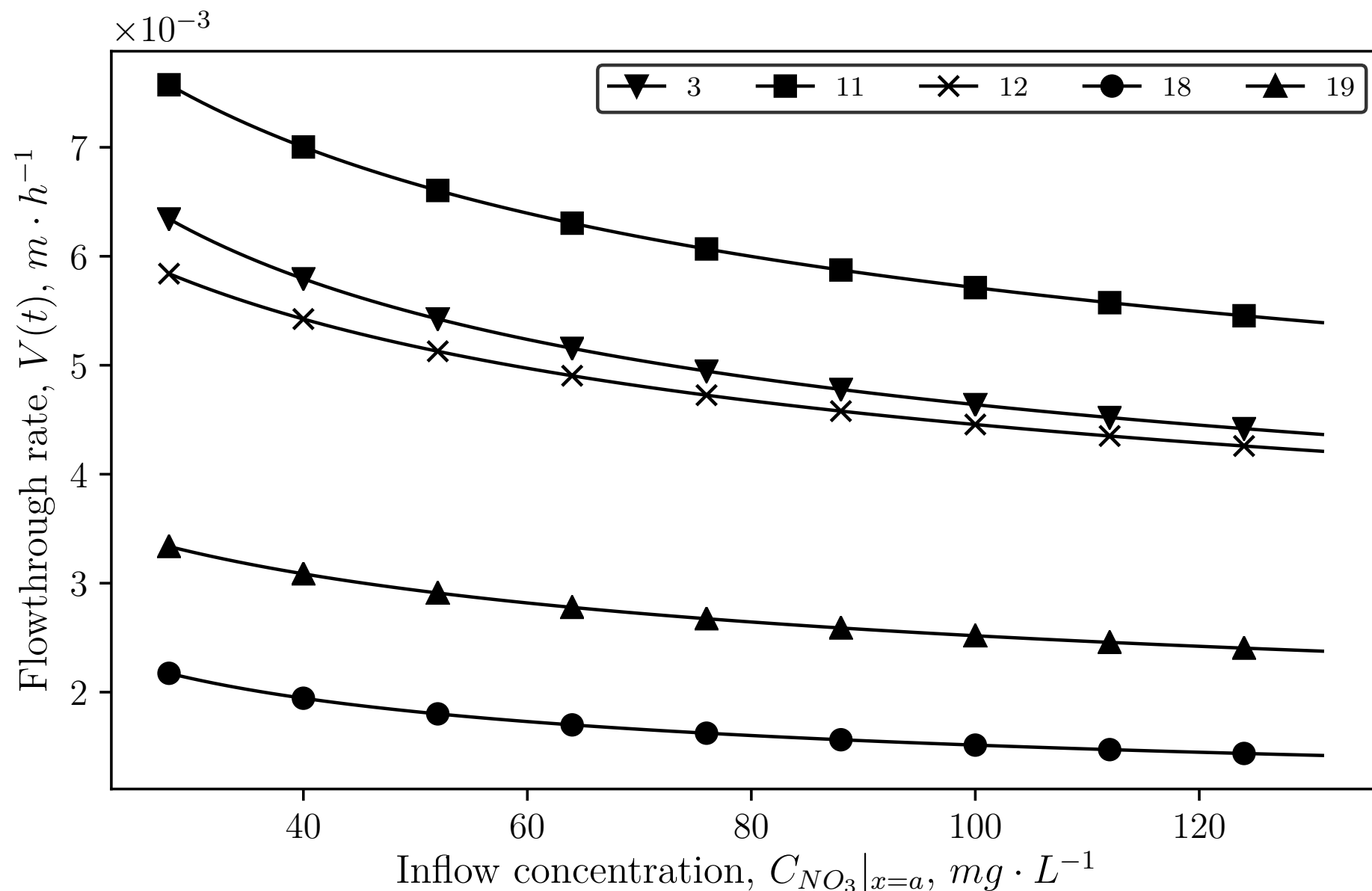
Stepwise treatment protocol. Substrate (S) concentration $S(d, t)$, product (P) molar flow rate and set-point (Q) function $Q(t)$.
 Parameters $\mathcal{K}_p = 3 \times 10^5$, $\mathcal{K}_i = 4 \times 10^6$, $\mathcal{K}_d = 1.2 \times 10^7$.

Nauji atlikti tyrimai

- ▶ Bendradarbiaujant su Vytauto Didžiojo universiteto mokslininku prof. dr. Arvydu Povilaičiu gauti laboratoriniai eksperimentai naujam konvekcijos--reakcijos modeliui, atlikta duomenų analizė.
- ▶ Valdymo mechanizmas pritaikytas modeliuoti nitratais užteršto vandens valymą, kai koncentracija kinta laike.
- ▶ Skaitinio algoritmo stabilumo tyrimas.

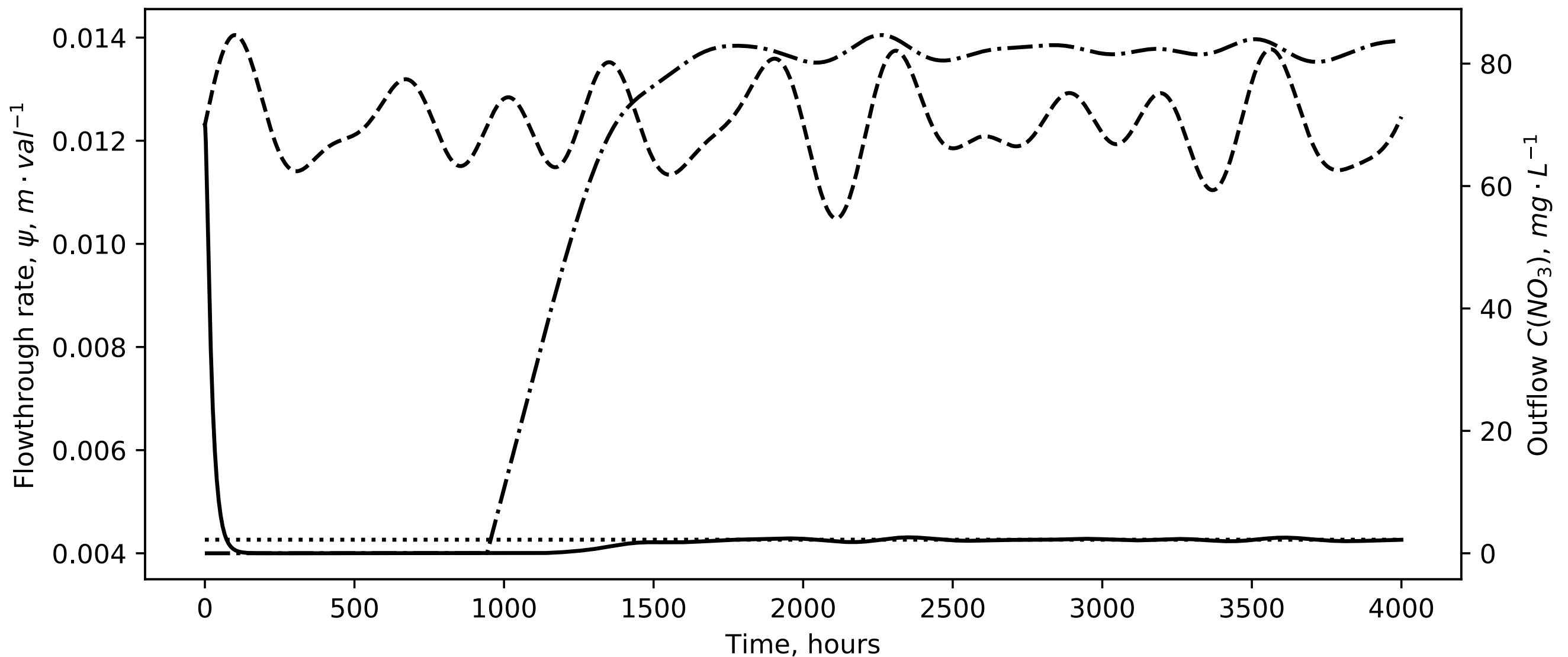
Denitrifikacijos bioreaktoriaus valdymas

- Eksperimentinių duomenų ekstrapoliavimas

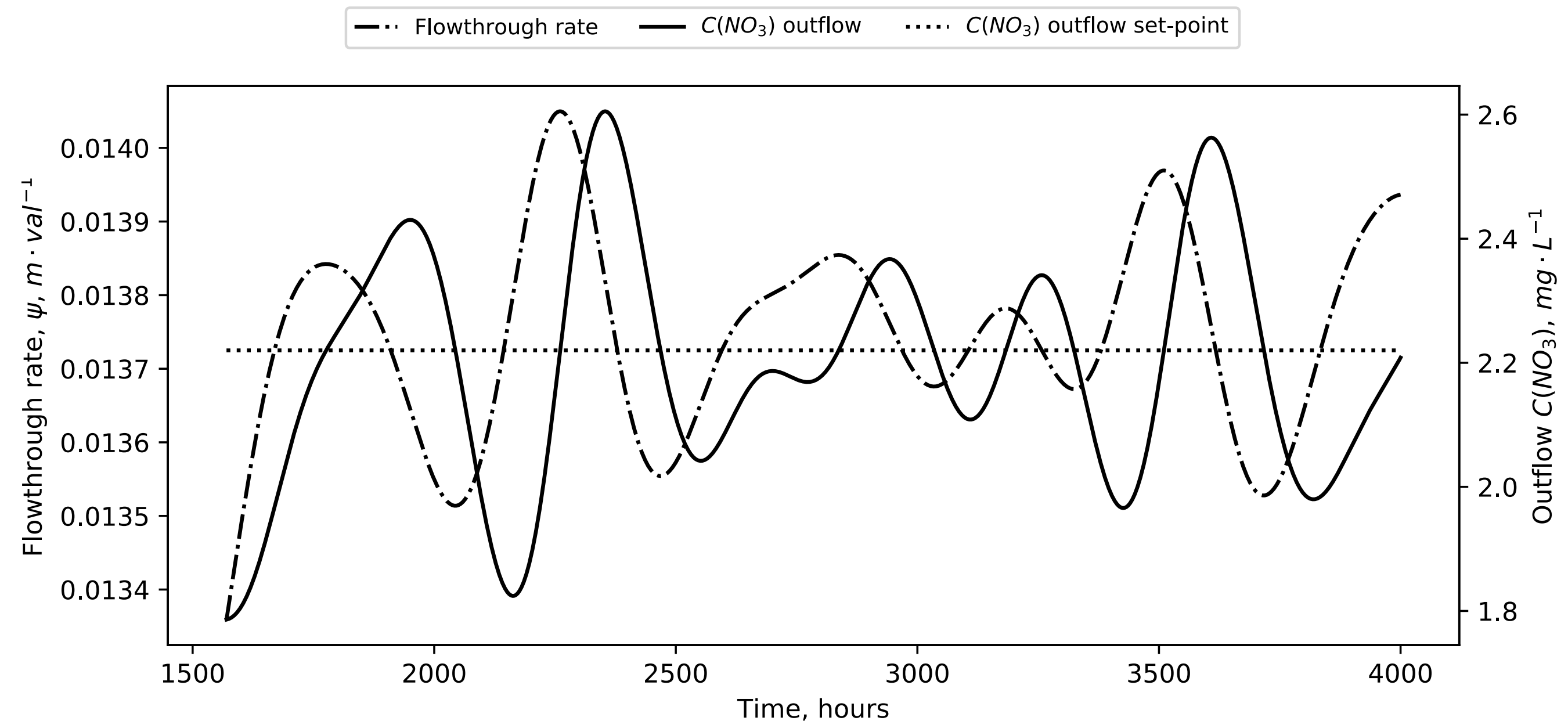


Denitrifikacijos bioreaktoriaus valdymas

—·— Flowthrough rate — $C(\text{NO}_3)$ outflow $C(\text{NO}_3)$ outflow set-point - - - $C(\text{NO}_3)$ inflow

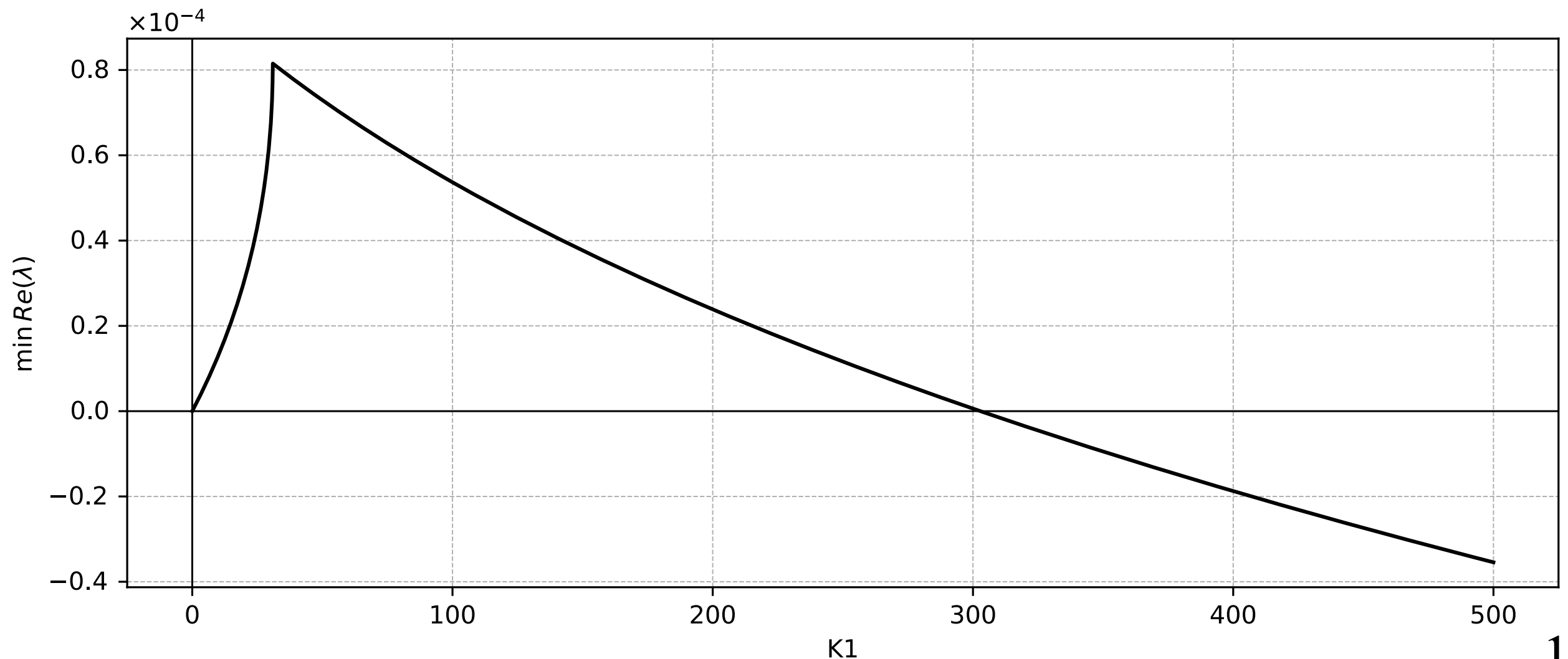


Denitrifikacijos bioreaktoriaus valdymas



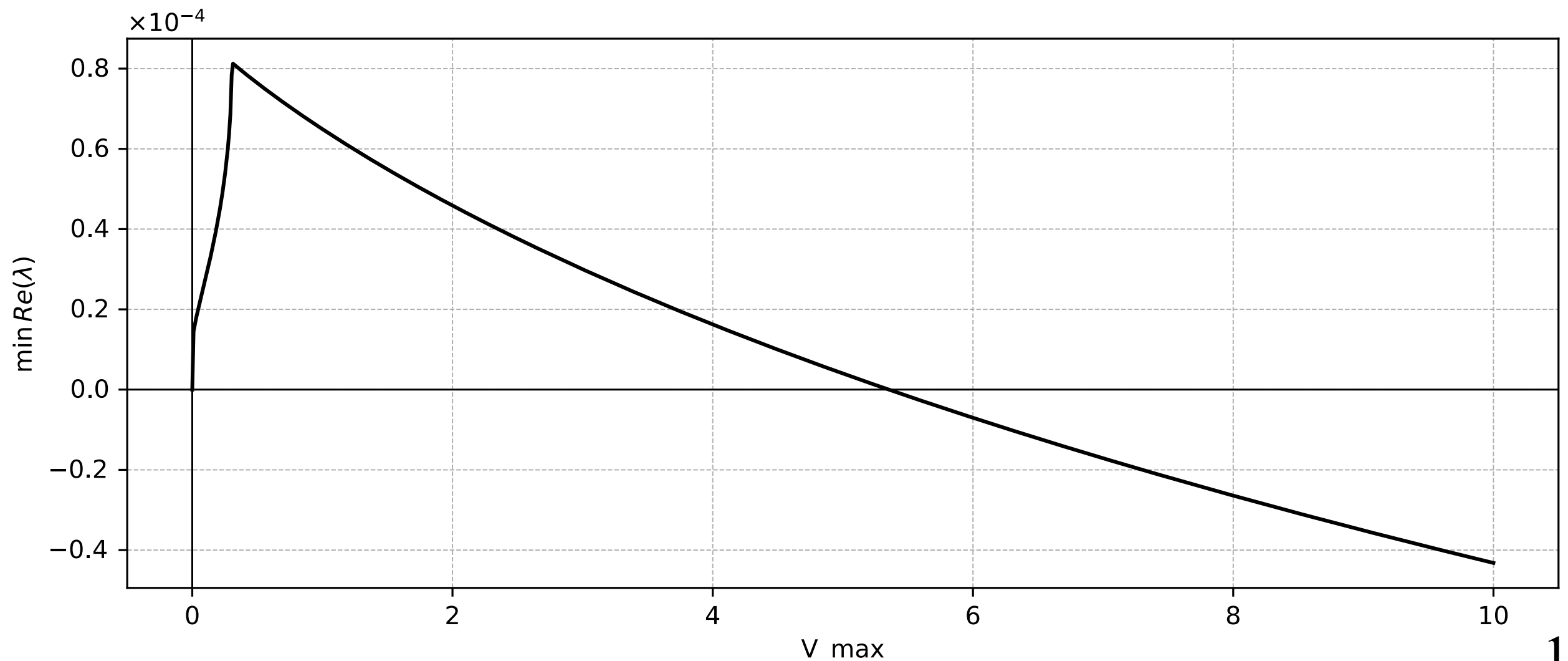
Skaitinio algoritmo stabilumo tyrimas

- Skaitinio algoritmo matricos tikrinių reikšmių tyrimas pagal valdymo parametą K_1 .



Skaitinio algoritmo stabilumo tyrimas

- Skaitinio algoritmo matricos tikrinių reikšmių tyrimas pagal reakcijos greičio parametą $V_{\max}$.



Děkoju už děmesj