

Д. А. С о л о н и н о в, О. С. М е з е н ц е в а (Ставрополь, СевКавГТУ).
Моделирование процесса осахаривания крахмалсодержащего сырья с учетом белкового компонента.

В основу предлагаемой математической модели положены современные представления о процессе осахаривания крахмалсодержащего сырья [1], [2].

Выделим фрагмент объема сула. Молекулы крахмала находятся в виде молекул в растворе воды и с помощью ферментов деструктурируются на декстрины, мальтозу и глюкозу. Молекулы белка под действием протеолитических ферментов деструктурируются на простые белки, пептиды и аминокислоты, причем: α -фермент обеспечивает деструкцию крахмала до глюкозы; β -фермент — деструкцию крахмала до мальтозы; γ -фермент — деструкцию крахмала до декстринов.

Пусть m_x — масса продуктов, полученных в процессе деструкции; m_y — масса активного фермента (активность ферментов); m_v — количество компонентов среды, подлежащих гидролизу; m_z — масса «фермент-субстратный комплекс». Для моментов времени τ и $\tau + d\tau$ материальный баланс веществ может быть записан в виде:

$$m_x(\tau + d\tau) = m_x(\tau) + k_1 m_z(\tau) d\tau, \quad (1)$$

$$m_z(\tau + d\tau) = m_z(\tau) - k_1 m_z(\tau) d\tau, \quad (2)$$

$$m_v(\tau + d\tau) = m_v(\tau) + k_2 m_y(\tau) d\tau, \quad (3)$$

$$m_y(\tau + d\tau) = m_y(\tau) - k_2 m_y(\tau) d\tau, \quad (4)$$

где k_1 и k_2 — кинетические коэффициенты.

Согласно закону сохранения масс, уравнение связи таково:

$$m_x(\tau) + m_z(\tau) + m_y(\tau) + m_v(\tau) = \text{const.} \quad (5)$$

Из (1) следует

$$dm_x(\tau)/d\tau = k_1^* m_z(\tau). \quad (6)$$

Величина материального потока из субстанции «z» в субстанцию «x» пропорциональна массе активного фермента, т. е. $k_1 \sim m_y(\tau)$ или $k_1 = k_1^* m_y(\tau)$. Тогда из (6) следует, что $dm_x(\tau)/d\tau = k_1^* m_y(\tau) m_z(\tau)$.

Так как $m_v(\tau) \gg m_x(\tau), m_y(\tau), m_z(\tau)$, то из (5) следует, что с уменьшением $m_y(\tau) + m_z(\tau)$ величина $m_x(\tau)$ должна возрастать, т. е. предполагая, что $k_1^* \sim 1/[m_y(\tau) + m_z(\tau)]$, получим общий вид кинетического уравнения деструктуризации:

$$dm_x(\tau)/d\tau = k_1^* m_y(\tau) m_z(\tau)/[m_y(\tau) + m_z(\tau)]. \quad (7)$$

Данное уравнение является общим для всех ферментативных реакций, происходящих во время осахаривания, крахмалсодержащего сырья. Основываясь на этом уравнении и применив его к каждому ферментативному процессу на разных стадиях осахаривания, можно получить систему уравнений (8)–(11):

$$dG(\tau) = \{\eta_G \Phi_\alpha(\tau) K(\tau)/[\Phi_\alpha(\tau) + K(\tau)]\} d\tau, \quad (8)$$

$$dM(\tau) = \{\eta_M \Phi_\beta(\tau) K(\tau)/[\Phi_\beta(\tau) + K(\tau)]\} d\tau, \quad (9)$$

$$dD(\tau) = \{\eta_D \Phi_\gamma(\tau) K(\tau)/[\Phi_\gamma(\tau) + K(\tau)]\} d\tau, \quad (10)$$

$$dA(\tau) = \{\eta_A \Phi_\pi(\tau) P(\tau)/[\Phi_\pi(\tau) + P(\tau)]\} d\tau, \quad (11)$$

где $G(\tau)$, $M(\tau)$, $D(\tau)$, $A(\tau)$ — текущие массовые концентрации, соответственно, глюкозы, мальтозы, декстринов и аминокислот с пептидами г/см³; $\Phi_\alpha(\tau)$, $\Phi_\beta(\tau)$, $\Phi_\gamma(\tau)$, $\Phi_\pi(\tau)$ — текущие массовые концентрации «активных» α -, β -, γ - и π -ферментов,

г/см^3 ; $K(\tau)$, $P(\tau)$ — массовые концентрации, соответственно, «крахмала» и белка, г/см^3 .

Рассмотрим уравнение (11). В работах, посвященных моделированию процессов биосинтеза этанола [1], [2], белковый компонент обычно не учитывается, т. к. белки в производстве являются балластом, который, однако, также подвергается разжижению. Предположим, что приращение белков с течением времени происходит за счет деструкции крахмалсодержащего сырья. Тогда сырьем z является белок $mP(\tau)$. Действующим ферментом y является фермент γ -глюкоамилаза $m\Phi_\pi(\tau)$. Предметом реакции является белок.

В силу сохранения массы

$$K(\tau) - K(\tau + d\tau) = d[G(\tau) + M(\tau) + D(\tau)], \quad P(\tau) - P(\tau + d\tau) = d[A(\tau)].$$

Откуда следует

$$dK(\tau)/d\tau = - \left\{ \frac{\eta_G \Phi_\alpha(\tau)}{\Phi_\alpha(\tau) + K(\tau)} + \frac{\eta_M \Phi_\beta(\tau)}{\Phi_\beta(\tau) + K(\tau)} + \frac{\eta_D \Phi_\gamma(\tau)}{\Phi_\gamma(\tau) + K(\tau)} \right\} K(\tau). \quad (12)$$

Аналогичным образом можно получить уравнения для декстринов и белкового комплекса:

$$dD(\tau)/d\tau = - \left\{ \frac{\xi_G \Phi_\alpha(\tau)}{\Phi_\alpha(\tau) + D(\tau)} + \frac{\xi_M \Phi_\beta(\tau)}{\Phi_\beta(\tau) + D(\tau)} + \frac{\xi_D \Phi_\gamma(\tau)}{\Phi_\gamma(\tau) + D(\tau)} \right\} D(\tau), \quad (13)$$

$$dP(\tau)/d\tau = - \eta_A \Phi_\pi(\tau) P(\tau) / [\Phi_\pi(\tau) + P(\tau)]. \quad (14)$$

С учетом изменения масс (активности) ферментов α , β , γ математическая модель представлена в виде системы дифференциальных уравнений:

$$dK(\tau)/d\tau = - \frac{\eta_G \Phi_\alpha(\tau)}{\Phi_\alpha(\tau) + K(\tau)} K(\tau) - \frac{\eta_M \Phi_\beta(\tau)}{\Phi_\beta(\tau) + K(\tau)} K(\tau) - \frac{\eta_D \Phi_\gamma(\tau)}{\Phi_\gamma(\tau) + K(\tau)} K(\tau),$$

$$dP(\tau)/d\tau = - \eta_\pi [\Phi_\pi(\tau) / (\Phi_\pi(\tau) + P(\tau))] P(\tau),$$

$$dD(\tau)/d\tau = - \frac{\xi_G \Phi_\alpha(\tau)}{\Phi_\alpha(\tau) + D(\tau)} D(\tau) - \frac{\xi_M \Phi_\beta(\tau)}{\Phi_\beta(\tau) + D(\tau)} D(\tau) + \frac{\eta_D \Phi_\gamma(\tau)}{\Phi_\gamma(\tau) + K(\tau)} K(\tau),$$

$$dG(\tau)/d\tau = \frac{\eta_G \Phi_\alpha(\tau)}{\Phi_\alpha(\tau) + K(\tau)} K(\tau) - \frac{\xi_G \Phi_\beta(\tau)}{\Phi_\beta(\tau) + D(\tau)} D(\tau) + \frac{\xi_{MG} \Phi_\gamma(\tau)}{\Phi_\gamma(\tau) + M(\tau)} M(\tau),$$

$$dM(\tau)/d\tau = \frac{\eta_M \Phi_\alpha(\tau)}{\Phi_\alpha(\tau) + K(\tau)} K(\tau) - \frac{\xi_M \Phi_\beta(\tau)}{\Phi_\beta(\tau) + D(\tau)} D(\tau) - \frac{\xi_{MG} \Phi_\gamma(\tau)}{\Phi_\gamma(\tau) + M(\tau)} M(\tau),$$

$$dA(\tau)/d\tau = \eta_A [\Phi_\pi(\tau) / (\Phi_\pi(\tau) + P(\tau))] P(\tau),$$

$$d\Phi_\alpha(\tau)/d\tau = - \varphi_{\alpha G} G \Phi_\alpha - \varphi_{\alpha M} M \Phi_\alpha, \quad d\Phi_\beta(\tau)/d\tau = - \varphi_{\beta G} G \Phi_\beta - \varphi_{\alpha M} M \Phi_\beta,$$

$$d\Phi_\gamma(\tau)/d\tau = - \varphi_{\gamma D} D \Phi_\gamma, \quad d\Phi_\pi(\tau)/d\tau = - \varphi_{\pi D} D \Phi_\pi.$$

Начальные условия: $K(0) = K_0$, $M(0) = M_0$, $G(0) = G_0$, $P(0) = P_0$, $A(0) = A_0$, $D(0) = D_0$, $\Phi_\alpha(0) = \Phi_{\alpha 0}$, $\Phi_\beta(0) = \Phi_{\beta 0}$, $\Phi_\gamma(0) = \Phi_{\gamma 0}$, $\Phi_\pi(0) = \Phi_{\pi 0}$. Балансовые соотношения: $K(\tau) + D(\tau) + \Phi_\alpha(\tau) + \Phi_\beta(\tau) + \Phi_\gamma(\tau) + G(\tau) + M(\tau) = \text{const}$, $P(\tau) + \Phi_\pi(\tau) + A(\tau) = \text{const}$.

Введенные в модель коэффициенты характеризуют: η_G — скорость образования глюкозы в процессе ферментативного гидролиза; η_M — скорость образования мальтозы из крахмала; η_D — скорость образования декстринов из крахмала; η_A — скорость образования аминокислот и пептидов из белка; ξ_G — скорость образования глюкозы из декстринов; ξ_M — скорость образования мальтозы из декстринов; $\varphi_{\alpha G}$ — скорость расходования α -фермента при расщеплении декстринов до глюкозы; $\varphi_{\alpha M}$ — скорость расходования α -фермента при расщеплении крахмала до мальтозы; $\varphi_{\beta G}$ —

скорость расходования β -фермента при расщеплении крахмала до глюкозы; $\varphi_{\beta M}$ — скорость расходования β -фермента при расщеплении мальтозы; $\varphi_{\gamma D}$ — скорость расходования γ -фермента при расщеплении декстринов; $\varphi_{\pi A}$ — скорость расходования π -фермента при расщеплении белкового комплекса, ξ_{MG} — коэффициент конверсии мальтозы в глюкозу.

Полученные соотношения позволяют прогнозировать и контролировать динамику процесса осахаривания крахмалсодержащего сырья, обеспечить оптимизацию условий его проведения, оценить эффективность утилизации сложных углеводных субстратов и получения целевого продукта.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Востриков С. В., Ряжских В. И.* Математическая модель процесса биосинтеза этанола в условиях периодического брожения. — В сб.: Тезисы докладов III Всероссийской конференции «Информационные технологии и системы». Воронеж: 1999, с. 171–172.
2. *Востриков С. В.* Теоретические основы и разработка прикладных задач безотходной технологии спиртового производства. Диссертация доктора наук (рукопись). Воронеж: 2000.