Matrix reloaded: od řasových biotechnologií k maticím

Štěpán Papáček, Ctirad Matonoha

Škola komplexních systémů (SXS) - FROV, Jihočeská univerzita, Nové Hrady
ÚI AV ČR, v.v.i., Praha

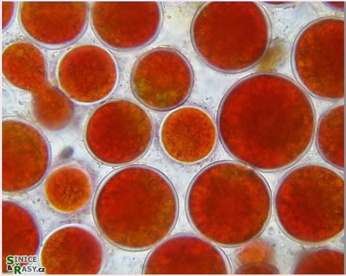
Den otevřených dveří ÚI AV ČR, v.v.i.

8.-9. listopadu 2012

SXS, FROV, JčU - součást AUC Nové Hrady

Mikroorganismy & (mikro)biotechnologie: Na co to je?

- Biomasa pro krmiva hospodářských zvířat & potravinové doplňky
- Biopaliva 3. generace (H_2, etanol)
- Cenné látky - HVC (high value compounds, např. karotenoidy, bioaktivní molekuly)
- Bioremediace, atd.



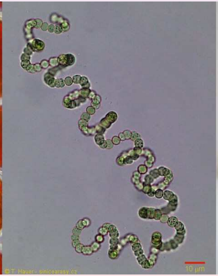


Foto-Bioreaktory (PBR): kultivační zařízení

- Open vs. Closed
- Outdoor vs. Indoor
- Tubulární vs. Panelové vs. ostatní

Vlevo: *Thin layer* technology = patentovaná technologie kultivace řasy *Chlorella* na tenké vrstvě.

Vpravo: Panelový PBR pro přípravu "násady", obě zařízení provozuje Mikrobiologický ústav AV ČR v Třeboni.

PBR vyvinuté v AUC Nové Hrady (www.auc.cz)

Tubulární PBR s lineárními Fresnelovými čočkami (LFL)

- osvětlená část PBR je tvořena smyčkou (24 m) ze skleněných trubek
- přímé sluneční záření je koncentrováno LFL

PBR Couette-Taylorova typu (C-TBR)

- Laminární Taylorovo vířivé proudění indukuje tzv. *light/dark cycles*
- zatímco tzv. shear stress je přijatelné úrovně, hydrodynamické míchání je perfektní

PSF model - úvod

PSF model (model tzv. fotosyntetické továrny) je model se soustředěnými parametry (LPM):

- Stavový vektor modelu má 3 složky: $y = (y_A, y_B, y_R)^T$ – "fotosyntetická továrna" může být právě v jednom ze tří stavů:
  - odpočívající y_R
  - aktivní y_A
  - inhibovaný y_B
- PSF model je velmi zjednodušený, ale přijatelně simuluje růst mikrořas v PBR (jako integrál $\bar{y}_A = \int_0^1 y_A(x)$).
- Tvar modelu: $\dot{y} = \left[A + u(t)B\right]y$, kde
  - A, B jsou čtvercové matice dimenze 3 (mají 3x3 prvků)
  - $u(t)$ je řídící signál, v našem případě je to intenzita osvětlení

PSF model - pokračování

PSF model lze dále zjednodušit, např.

- zanedbáním dynamiky pomalých či velmi rychlých jevů (redukce dimenze)

Pro popis růstu řas v PBR je ale třeba uvažovat

- s nehomogenním rozložením světla
- s prostorově závislou koncentrací buněk v příslušném stavu

$\Rightarrow$ potřebujeme model s rozloženými parametry (DPM).

PSF model - pokračování

Následně po

- redukci dimenzionality reakčních jevů na popis koncentrace řas v aktivovaném stavu y_A,
- využití vztahů pro popis transportních a reakčních jevů v PBR coby DPM,
- doplnění počátečních a okrajových podmínek,

dostaneme model popisující růst mikrořas v obecném PBR (viz následující slide).

PSF model - dokončení

PSF model jako model s rozloženými parametry (DPM)

$$-\left[p(x)y'\right]' + q(x)\ y = q(x)\ y_\infty, \quad y'(0) = 0,\ y'(1) = 0,$$

kde $q(x) = (u(x) + q_2)Da_{II}$ (x je prostorová souřadnice).

Da_{II} je tzv. *Damköhlerovo číslo* definované jako poměr

$$\frac{\text{charakteristického času transportu (disperzí)}}{\text{charakteristického času reakce}}$$

Pro

- $Da_{II} \gg 1$ je proces limitován transportem (špatné míchání)
- $Da_{II} \ll 1$ je proces limitován reakcí (dobré míchání)

Viz numerické výsledky mého kolegy.

ÚI AV ČR Praha

Oddělení výpočetních metod

Zabývá se otázkami:

- vývoj algoritmů pro řešení úloh vyskytujících se v praxi
- software obsahuje různé metody na řešení problémů
- metody: navrhujeme, testujeme, srovnáváme, vylepšujeme
- algoritmy jsou podloženy matematickou teorií
- teorie je nedílnou součástí výzkumu

Matematika a počítače

Počítače – užitečný nástroj k počítání, přináší komplikace:

- hledání přibližného řešení (přesné lze málokdy nalézt)
- pracují s konečnou dimenzí
- problém zaokrouhlovacích chyb (konečná aritmetika)
- pracujeme s nepřesnými daty (chyba měření nebo důsledek předchozích nepřesných výpočtů)
- chyby se mohou hromadit (může dojít k destrukci výsledků)
- je třeba znát odhad chyby výpočtu
- problém efektivity algoritmů (paměťové nároky, rychlost výpočtu, numerické chování, stabilita)

Od reálného problému k matematice

1. Formulace modelu, systému proměnných, určení objektivní funkce a omezení
2. Shromáždění dat, která definují konkrétní problém
3. Řešení problému a nalezení optimálního řešení
4. Analýza výsledků zda je to to co chceme
5. Zlepšení modelu a dat a opětovné hledání optimálního řešení

Model růstu mikrořas

Zpět k našemu modelu:

$$-\left[p(x)y'\right]' + q(x)\ y = q(x)\ y_\infty, \tag{1}$$

$$y'(0) = 0, \quad y'(1) = 0, \tag{2}$$

- $p(x)$ modeluje prostorově závislý koeficient hydrodynamické disperze
- $q(x) = (u(x) + q_2)Da_{II}$ je tzv. reaction rate (závislý na intenzitě osvětlení $u(x)$ ve kterém jsme definovali Da_{II})
- okrajové podmínky (2) modelují neprostupnost stěny PBR.

Zajímá nás růst mikrořas v závislosti na Da_{II}:

$$y_{av} = \int_0^1 y(x)\mathrm{d}x \quad \rightarrow \quad \max_{Da_{II}} \tag{3}$$

Přibližné řešení

Na základě znalostí jednotlivých funkcí:

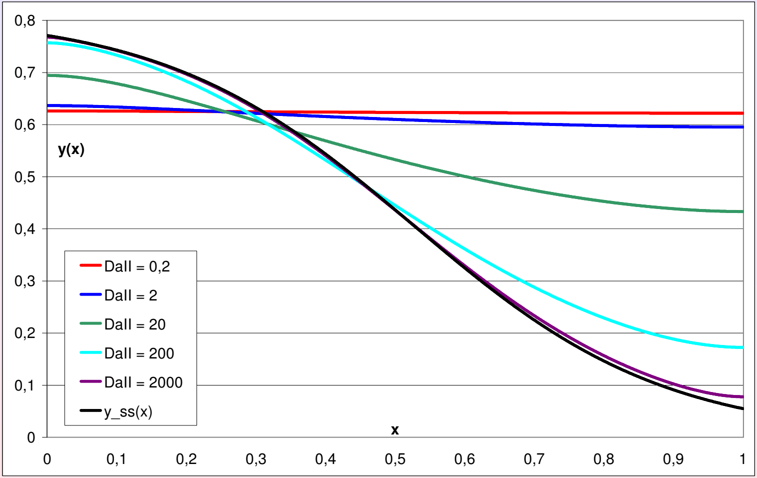
- úloha má jednoznačné řešení
- přesné řešení nelze najít jednoduchými prostředky
- použijeme numeriku a najdeme přibližné řešení v uzlech

$$0 = y_0,\ y_1,\ y_2,\ \ldots, y_N = 1:$$

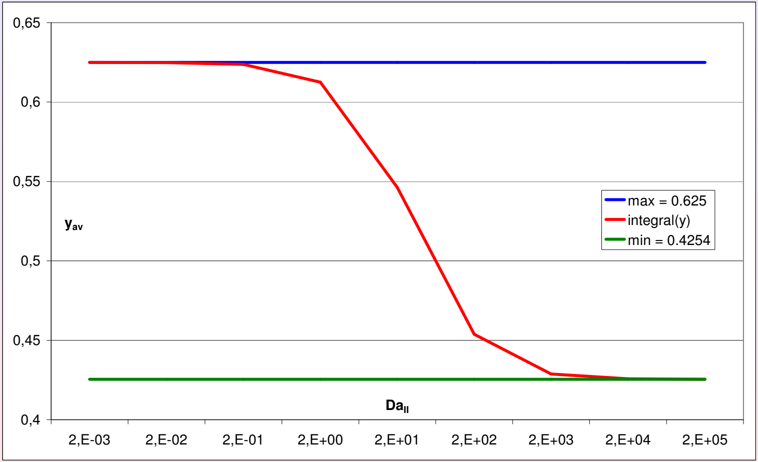
$$\begin{pmatrix} a_0 & b_0 & 0 & \ldots & 0 \\ b_0 & a_1 & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & b_{N-1} \\ 0 & \ldots & 0 & b_{N-1} & a_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_0 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ y_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g_0 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ g_N \end{pmatrix}$$

- integrál aproximujeme lineární kombinací hodnot y_i

Graf $y(x)$ vs. x pro různá Da_{II}



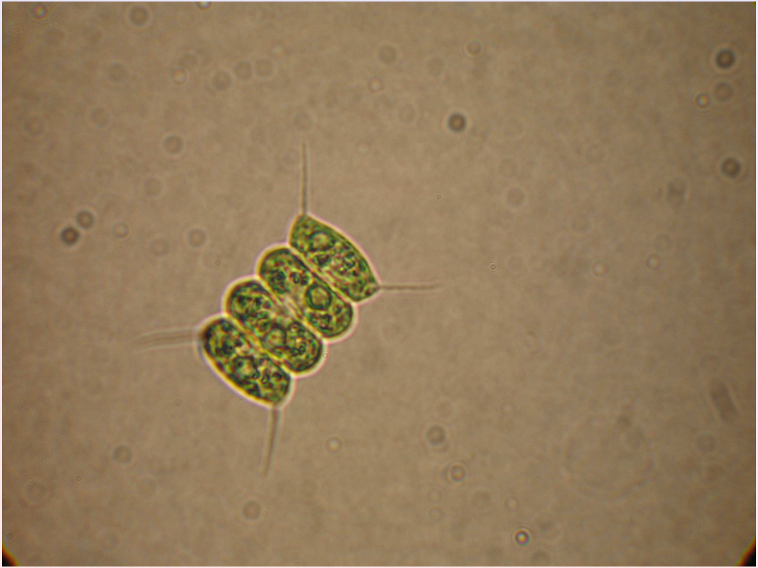
Graf y_{av} vs. Da_{II}



Závěr

- Ukázali jsme model fotosyntetického růstu mikroorganismů
- Je důležité pracovat s vhodným modelem, který musí vystihnout všechny podstatné vlastnosti procesu či systému
- Pro řešení se volí matematické prostředky (diskretizace ODE, řešení systému lineárních rovnic, aproximace integrálu)
- Skutečnosti, které nám pomáhají: jednoznačnost řešení, speciální struktura rovnice (matice je 3-diagonální)
- Dosáhli jsme hodnověrné výsledky, které dobře odrážejí závislost růstu mikrořas na Da_{II}
- Výsledky mohou dobře simulovat produktivitu vyvíjeného zařízení

Řasa scenedesmus



Růst mikroorganismů