

文章编号 :1009 - 038X(2000)05 - 0461 - 03

反应器生态系统的模型化

周少奇

(华南理工大学造纸与环境工程学院 , 广东广州 510640)

摘 要 :提出了反应器生态系统的建模除了考虑菌体生长动力学、基质消耗动力学、产物生成动力学外 , 还应考虑流变流体动力学、生化反应能与生化反应计量学 . 指出综合考虑能更有效地对反应器生态系统进行设计、控制与优化 .

关键词 :模型 ; 反应器生态系统 ; 动力学 ; 计量学 ; 流变流体动力学 ; 生物能学
中图分类号 : TP27(Q2) **文献标识码 :** A

The Abbreviation on Modeling of Reactor Ecosystem

ZHOU Shao-qi

(South China University of Technology , Guangzhou 510640)

Abstract : The rheofluid dynamics and biological stoichiometry as well as bioenergetics should be considered in the modeling of biochemical processes in reactor ecosystem besides the consideration of kinetics such as those for the growth of microorganisms(cell) , the consumption of substrates and the production of products . This will be more effective for the design , control and optimization of biochemical processes in reactor ecosystem .

Key words : modeling ; reactor ecosystem ; kinetics ; stoichiometry ; rheofluid dynamics ; bioenergetics

生化过程的建模与控制是近年国际控制学界最感兴趣的领域之一 . 实际的生化反应过程较为复杂 , 在检测、建模和控制诸方面都有不少困难 . 尽管如此 , 众多的研究者对自己领域内的具体生化过程进行了或正在进行不同层次的研究和探讨 , 给出了许多具体的模型 . 近年来 , 我国广大学者在该领域已取得了不小进展^[1~6] . 然而 , 绝大部分的模型化与过程控制研究主要限于生化过程的动力学(kinetics)方面 . 对于生化反应过程的计量学(stoichiometry)与能学(bioenergetics)及反应过程在系统中的宏观动力特性——流体动力学(Hydrodynamics)还很少涉及 , 而这些对于生化反应过程进行的方向、反应进行的程度及系统均匀性都是必须考虑的 , 最终影响到生化反应过程的快慢程度——生化

反应动力学 . 因此 , 它们是生化过程模型化时应该予以重视的 . 作者提出了进行“反应器生态系统”的模型化应对生化反应过程的动力学、计量学、热力学、流体动力学进行综合考虑 .

1 “反应器生态系统”及其动力学模型化

近年来 , 由于生物高新技术的迅猛发展及全球生态环境意识的深入人心 , 已有人提出了“生态生物过程”一词并在国外广泛传播^[7,8] , 有许多权威学者甚至认为它是 21 世纪的新的科学与技术范例 , 且不是一般的高技术(High - Tech) , 而是所谓的“超高技术(Hyper - Tech) . 在国内 , 赵学明教授已

收稿日期 2000 - 01 - 24 ; 修订日期 2000 - 05 - 27 .

作者简介 : 周少奇 (1965 -) , 男 , 湖南益阳人 , 工学博士 , 教授 .

万方数据

开展这方面的研究^[9]. 作者则基于生态学考虑, 并从系统论的思想出发, 于 1993 年独立地提出了“反应器生态系统”的概念, 并就“反应器生态系统”的动力学进行探讨^[11~13], 提出了两相非牛顿体系的二阶偏微分方程组.

初步的“反应器生态系统动力学理论”认为^[12]:

1) “生物反应器系统”由“反应器生态系统”、动力源系统、加卸料系统、控制系统及空气净化与鼓泡系统(主要是好氧过程) 5 个子系统组成, 其中“反应器生态系统”是核心的子系统.

2) “反应器生态系统”是指处于操作状态的生物反应器, 它是一个极其复杂的开放系统, 与环境之间有着物质、信息与能量的交换.

3) “反应器生态系统”中主要有 3 种动力学行为, 即流变流体动力学、生化反应动力学和细胞生长动力学. 这 3 种动力学行为分属不同的层次: 流变流体动力学反映宏观水平(工程水平)的动力特性, 生化反应动力学反映分子水平的反应特性与遗传特性, 细胞生长动力学反映细胞水平的代谢调节与生长特性.

4) “反应器生态系统”中的 3 种动力学行为存在循环相互作用, 其中流变流体动力学对生化反应动力学与细胞生长动力学都有举足轻重的影响, 这一点是自 Monod 于 1949 年提出菌体生长速率模型后, 关于生化过程动力学模型研究中一直未予深究的. 为此, 作者在物理系统质量守恒(连续性)、动量守恒(牛顿第二定律)、能量守恒(热力学第一定律)的基础上, 建立了“反应器生态系统”的气液两相非牛顿体系的流变流体动力学数学模型, 并用时间裂有限元法进行了简化求解.

5) “反应器生态系统”的 3 种动力学行为决定了系统的演化. 它关系到“反应器生态系统”的结构设计与优化放大, 关系到整个反应器生态系统的动力学模型化与求解, 关系到系统的过程控制与优化.

2 “反应器生态系统”的生化过程行为

反应器生态系统中动力学及其模型化是很重要的, 因为生化反应的动力学反映了反应的快慢程度或细胞增长的快慢程度, 而流变流体动力学(rheofluid dynamics)反映了系统内气液固三相体系(包括非牛顿体系)的传递特性. 前者反映的是系统内的化学变化和生物化学变化, 后者反映的是系统内的物理运动和变化. 当然, 通过检测系统对物理参

数、化学参数和生物参数进行检测并通过模型对系统进行控制, 还反映了系统的信息变化情况, 然而, 这是建立在系统物理特性与化学、生物学特性基础之上的. 因此, 对“反应器生态系统”的模型化而言, 关键是要考虑系统内的物理变化、化学与生物化学反应的模型化.

对于系统内的物理变化, 三相体系的流动, 应该遵循物理系统的三大守恒定律, 即物质守恒、动量守恒、能量守恒, 这在前文^[11]中已进行了较深入的探讨.

对于系统内的化学与生物学变化, 作者认为最根本的是生物化学反应, 而生物化学反应是由微生物或细胞参与完成的, 其代谢途径和机理较为复杂, 受反应条件的影响和制约. 但总的来讲, 生物化学反应在本质上可看作是一种氧化还原反应, 也应该遵循物质守恒和能量守恒, 且主要涉及 3 个方面:

1) 反应的方向

在一定的条件下(pH 、温度、溶氧、流动状况等), 系统内存在的各种反应物(培养基)和微生物(细胞)将发生生物化学反应, 但具体的代谢途径(反应的方向)除决定于生物的遗传特性外, 系统内反应条件和反应物的情况也能影响到生化反应方向的取舍, 生化反应方向的判定可以用能学的方法, 通过反应的 Gibbs 自由能变化进行判断.

2) 反应的快慢程度

反应进行后, 一定时间内反应物消耗、产物生成、菌体生长的快慢程度, 可以由动力学来描述, 动力学模型主要有结构模型和非结构模型两大类.

3) 反应进行的程度

在微生物(细胞)的作用下经过一段时间, 能消耗掉多少碳源、氮源等营养物质, 能生成多少产物(包括菌体和细胞), 反应物消耗与产物生成之间的数量关系, 这些是描述反应进行的程度需要考虑的. 这方面的内容光靠动力学难以完成, 而必须依据计量学. 根据作者近年来的研究, 生化反应计量学可以建立在生化反应电子流平衡的基础上, 既可保证反应在物质上的平衡, 又可保证反应在能量上的平衡.

因此, 生化过程的模型化或者说反应器生态系统的模型化, 需要考虑 4 个方面的内容, 即: 流变流体动力学, 生物能学(bioenergetics), 生化反应动力学(包括基质消耗、菌体生长、产物生成 3 个方程), 生化反应计量学(biological stoichiometry). Monod 模型研究了半个世纪, 对生化过程进行建模与控

制 ,仅考虑动力学很难反映生化反应的复杂特性.

3 “反应器生态系统”的模型化方法与控制

对“反应器生态系统”进行建模 ,必须考虑生化过程行为的层次性 ,见表 1.

由于生化过程的行为分属不同的层次 ,所以反应器生态系统的模型化只能通过“分解—耦合”的方法进行.所谓“分解”是对上述 4 个方面的内容分别进行建模 ,所谓“耦合”是将上述各种层次的模型联立起来 ,进行整体考虑 ,这样 ,有望实现“反应器生态系统”的整体的系统控制与优化 ,为生化过程结构模型的研究提供新的思路.

实际上 ,在电子流平衡基础上通过能学和计量学确定生化反应计量方程式(细胞以 $C_\alpha H_\beta O_\epsilon N_\delta P_\theta S_\gamma$ 表示)后 ,可以将流变流体动力学数学模型与反应动力学数学模型联立求解 ,采用“有限—整体”法先求出反应器生态系统中各区域反应物、产物及菌体的浓度分布与温度分布 ,再求出各区域的反应动力学特性及各区域的细胞合成分量 ,然后在整个反应器生态系统中求和得到系统中总的情况.

反应器生态系统模型求解的难点在于 :流变流体动力学方程组是一个二阶的偏微分方程组 ,特别是在考虑体系的非牛顿特性和气相的影响时 ,即使是求数值解 ,其难度也非常大.这有赖于数值计算理论与技术的进一步发展.

表 1 “反应器生态系统”生化过程行为的层次性与建模
Tab.1 Gradation and the modeling of biochemical processes in reactor ecosystem

编号	名称	层次	反映特性		模型特点
(1)	流变流体动力学	宏观水平 工程水平	动力特性		二阶偏微分方程组
(2)	生化反应动力学： 菌体生长动力学 基质消耗动力学 产物生成动力学	细胞水平 分子水平	增长特性	与遗传和反 应条件有关	一阶微分方程
			反应特性		
(3)	生化反应能学		反应特性		
(4)	生化反应计量学	电子水平 分子水平	反应特性		电子流平衡基础上的反应等式

4 结 语

对于反应器生态系统中生化过程的模型化 ,可以得到这样的认识 :1)光考虑动力学是不够的 ,还

应该考虑生化反应的计量学与能学 ;2)考虑动力学 ,光考虑反应动力学是不全面的 ,还应该考虑流变流体动力学.

参考文献

[1] 蒋慰孙主编.全国生化过程模型化与控制学术讨论会论文集[C].上海 :华东化工学院出版社 ,1989.
[2] 王树青主编.生化过程模型化与控制[M].杭州 :浙江大学出版社 ,1990.
[3] 欧阳藩 ,王树青 ,曹竹安等.生化过程模型化与控制[J].无锡轻工大学学报 ,1996 ,15(2/A):1~5.
[4] 王树青.生化过程新型检测技术[J].无锡轻工大学学报 ,1996 ,15(2/A):13~17.
[5] 张嗣良.青霉素发酵过程计算机控制与优化技术研究[J].无锡轻工大学学报 ,1996 ,15(2/A):6~12.
[6] 徐新民.补料分批发酵过程的模拟与优化[J].无锡轻工大学学报 ,1996 ,15(2/A):87~95.
[7] MORSER A. Ecological Biotechnolog[J]. Acta Biotechnologica. 1992 ,12(2):69~78
[8] NIKOLAEV N. Ecologically clean technologies for the industrial productions of substances by microbial synthesis[J]. Biotechnologiya ,1993(3):23.
[9] 赵学明 ,班睿 ,湛竞清.生态生物过程工程——新科学与技术范例研究[A].见 :李宝璋 ,李稳宏 ,范代娣编.第六届全国生物化学学术会论文论文集[C].北京 :化学工业出版社 ,1995.603~607.
[10] 周少奇 ,唐立民 ,冯朴荪.反应器生态系统的流变行为[J].大自然探索 ,1993 ,12(2):33~37.
[11] 周少奇 ,姚汝华 ,唐立民等.反应器生态系统的两相流变流体动力学数学模型[J].华南理工大学学报 ,1998 ,26(1):60~64.
[12] 周少奇 ,姚汝华 ,冯朴荪.工程技术研究开发与展望[M].北京 :中国科学技术出版社.1995.124~128.
[13] ZHOU S ,TANG L ,YAO R et al. Numetical ananlysis of hydrodynamics in IALR ecosystem[J]. J South China Univ of Technol ,1998 ,22(2):77~82.

(责任编辑 :秦和平)