

Z VÝZKUMU A PRAXE

Modelování kvašení piva v CKT 1. část

Ing. PETR VOLF, VÚPS Praha, Ing. JAROSLAV VOTRUBA, CSc., MBÚ ČSAV Praha,
Prof. Ing. GABRIELA BASAŘOVÁ, DrSc., VŠCHT Praha

Klíčová slova: fermentace, monitoring, CKT, modelování

663.45

ÚVOD

Problémem technologického vybavení cylindrokónických tanků (CKT) v Československu je absence automatického řízení a regulace procesu. Současný nedostatek či neúměrná cena čidel vedou k tomu, že veškerá kontrola procesu je omezena především na snímání hodnot teploty v jednom místě aparátu. Měření a regulace tlaku je zajištěna pouze hradicím aparátom.

Výběr stavových veličin charakteristických pro průběh fermentace dnes není limitován metodickou obtížností jejich měření. Praxe však ukazuje, že pro zdárné vedení fermentace postačí sledovat jen některé vybrané stavové veličiny jako teplotu, tlak, koncentraci kyslíku v mladině, pH, rH, extrakt, vodivost, popříp. složení mladiny co do obsahu cukrů, či obsah diacetylu atp.

Vlastní měření vybraných neelektrických veličin s následným převodem na normalizovanou úroveň elektrických signálů je nezbytným předpokladem pro nasazení složitějších regulačněměřících soustav, jak v závodě, tak i na úseku fermentace. Pro počítače používané dnes v provozech je charakteristické vedle vysoké operační rychlosti především vzájemné propojení a jejich využití ke sběru, třídění a uchovávání informací. Výpočetní technika slouží nejen ke zpracování podnikové agendy, ale i k archivování provozních a laboratorních dat pro případ sporu, aby i zpětně bylo možno prokazovat, že byly dodrženy předepsané technologické postupy a normy, zejména v průběhu kvašení.

Vedle možnosti přímého měření stavových veličin skýtá použití počítače také lákavou možnost aplikace tzv. "softwarových" senzorů, jejichž princip spočívá v tom, že na základě dat získaných v minulosti (navržený model) je možno formulovat příčinné vztahy mezi rychlosťí kvašení a veličinami, které je možno snadno změřit (jako je tlak, teplota či hodnota zdánlivého extraktu a pod.). Pokud zadáme tyto snadno měřitelné veličiny počítači jako vstupní data, pak dostaneme jako odpověď předpokládané průběhy veličin, které nemůžeme měřit, nebo jejich zjištění je zpožděno za skutečným průběhem, např. zdlovavým postupem při chemické analýze. Tento přístup je odbornou veřejností označován jako nepřímé monitorování procesu.

Matematický model fermentace mladiny by měl vycházet z kinetického popisu nejdůležitější části metabolismu cukrů - alkoholového kvašení. Směr, kterým je proces veden, je zabezpečen správným složením mladiny, teplotou, parciálním tlakem CO_2 v prostředí a použitým kvasničným kmenem.

Při formulaci modelu, který by umožnil popsat alkoholové kvašení v CKT, musíme, podobně jako v jiných případech, najít kompromis mezi exaktností (složitostí) modelu a jeho užitečnosti (schůdnost řešení na počítači). Při tom musíme brát v úvahu přístupnost příslušných stavových veličin k měření, byť i jen orientačně.

Jak již bylo zmíněno, redukuje se v současnosti problém řízení kvasného procesu na nastavení a regulaci dvou stavových veličin, jimiž jsou tlak a teplota.

K optimálnímu kompromisnímu technickému řešení spojenému s volbou vhodné řídící strategie je možno se dopracovat několika způsoby.

První, čistě empirický, využívá metody zkoušky a omyleu a hledá optimální režim heuristicky.

Druhý způsob vychází z kinetiky biotransformace a řeší tento problém cestou počítačové simulace a matematického modelování. Tento druhý způsob je odvozen od pragmatické zkušenosti chemického reaktorového inženýrství a je stále více užíván v oblasti moderních biotechnologií [1].

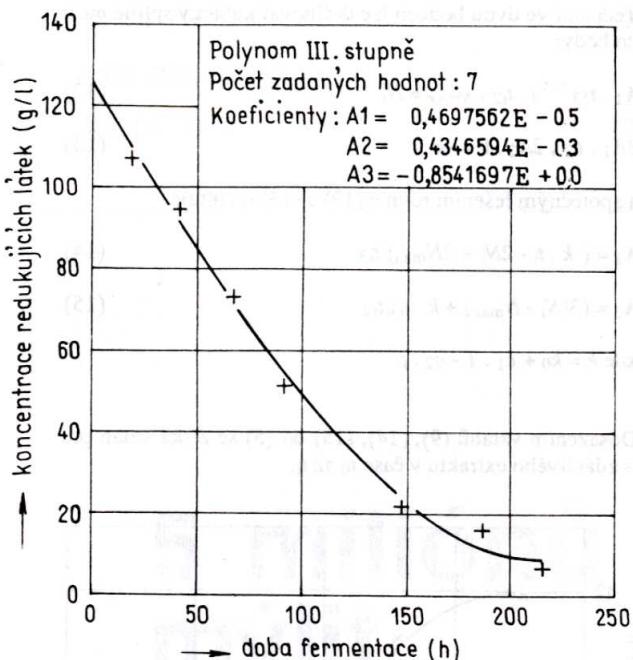
Z pohledu druhé strany, technologů, jeví se použití klasických matematických modelů pro vytvoření počítačového prostředí pro "inteligentní měření" a kontrolu problematické, protože inherentní neurčitost v chování biologických systémů výrazně omezuje možnosti konstrukce matematického modelu procesu běžnými statistickými metodami. Protože jsou tyto procesy silně nelineární, selhává v řadě případů i běžně zavedená teorie řízení, která byla původně odvozena pouze pro lineární systémy. Použijeme-li jednoduché kinetické modely, může se stát, že hodnoty parametrů modelu, o nichž jsme apriorně předpokládali, že jsou konstantní, se mění s časem. Schůdnou cestou, jak se s tímto problémem vyrovnat, je užití technik a adaptivních algoritmů pro aktualizace dynamických a prediktivních vlastností modelu podle procesních údajů [2].

1. MODEL "ČERNÉ SKŘÍŇKY"

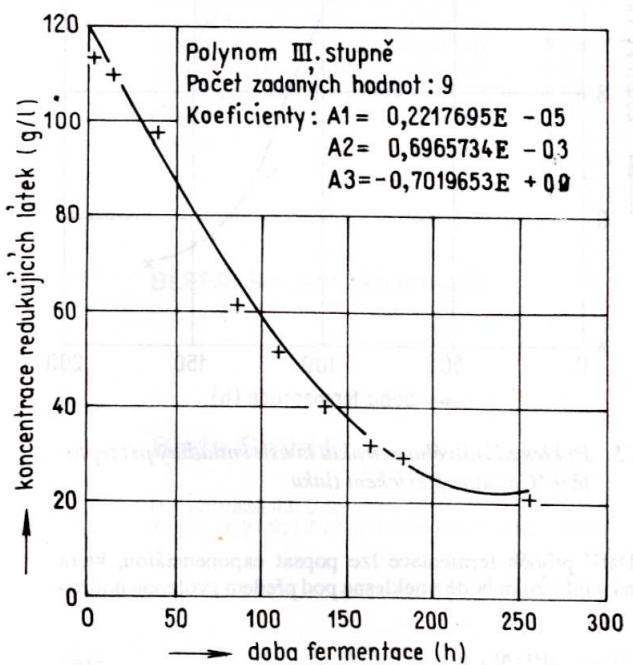
Ke sledování kvasného procesu můžeme přistupovat bez předběžného rozboru našich znalostí. Předpokládáme, že vybrané stavové veličiny se mění v čase pro nás neznámým způsobem. Metody prognózování takových změn, které nezahrnují dřívější zkušenosť, vycházejí z toho, že neznámou funkci můžeme approximovat algebraickou funkcí. Nejběžnějším způsobem approximace je polynom, který je možno odvodit od Taylorova rozvoje pro libovolný funkcionál. Racionální lomené funkce naproti tomu dobrě popisují procesy množení, které mají zpravidla exponeční charakter. Je-li proces silně nelineární, je možno jej approximovat složenými funkcemi, po částech hladkými, které mají ve styčných bodech spojité derivace; v odborné literatuře je tento druh approximace označován jako approximace pomocí splíne funkci.

Východiskem pro takto pojaté formální modelování kvasného procesu byl soubor dat, který byl získán z fermentací prováděných v laboratorním modelu CKT o objemu 10 l a doplněn o provozní data z CKT o užitném objemu 200 až 230 m^3 . Koncentrace O_2 před zakvašením byla v rozsahu 6 až 8 mg.l^{-1} a přetlak se pohyboval v rozsahu 0,0 až 0,1 MPa.

Spektrum sacharidických látok bylo určeno pomocí HPLC [3] a redukující látky byly stanoveny klasickou metodou [4].



Obr. 1. Fermentace bez přetlaku oxidu uhličitého



Obr. 2. Fermentace za přetlaku oxidu uhličitého 0,1 MPa

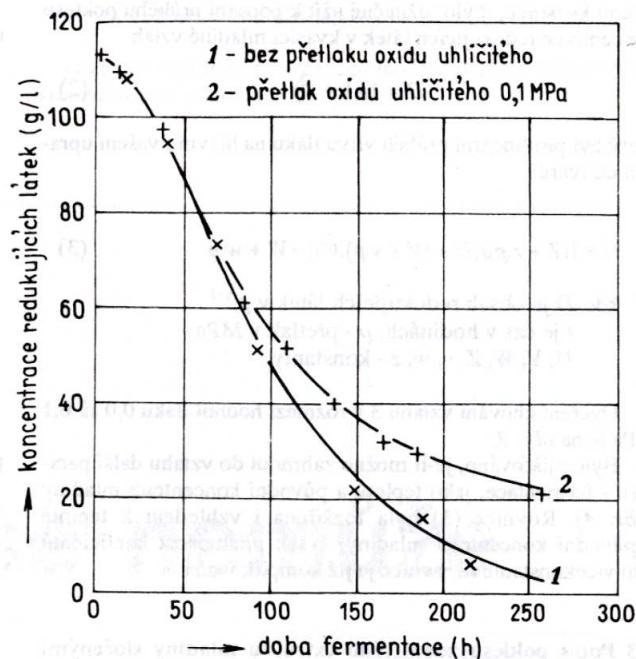
1.1 Popis získaných závislostí polynomem n-tého řádu

Ke sledování vlivu tlaku na průběh hlavního kvašení byl nejprve vybrán pokles obsahu redukujících láték v kvasicí mladini (současně s poklesem hodnot zdánlivého extraktu).

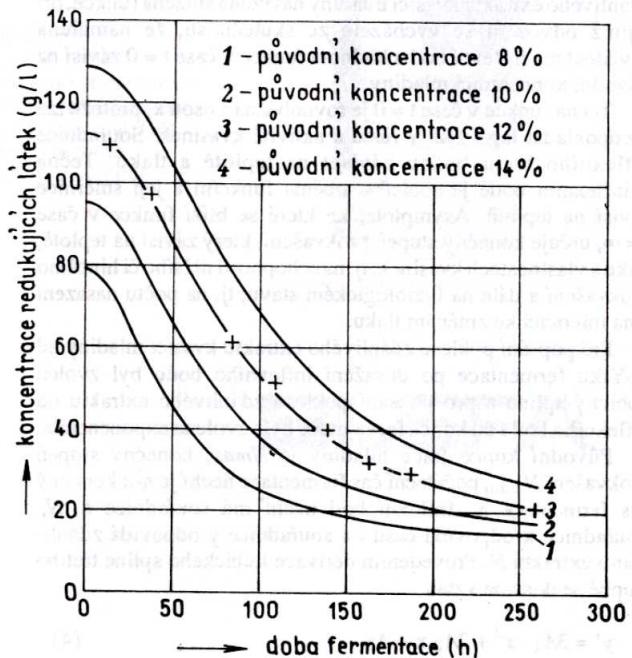
Pro svoji univerzálnost byl zvolen polynom n-tého stupně ve tvaru:

$$A_1 x^n + A_2 x^{n-1} + \dots + A_{n+1} = 0 \quad (1)$$

Pro zjištění stupně polynomu a nalezení hodnot dílčích koeficientů byl použit program POLRG firmy IBM [5]. Program metodou nejmenších čtverců prokládá zadanými hodnotami polynom co nejnižšího stupně.



Obr. 3. Pokles koncentrace redukujících láték za různých tlakových podmínek podle vztahu (3)



Obr. 4. Předpokládaný pokles redukujících láték v závislosti na původní koncentraci mladiny za přetlaku oxidu uhličitého 0,1 MPa a teploty 9 °C

Program určí stupeň polynomu a jednotlivé koeficienty a uvede rozbor výpočtu (hodnoty předpokládané, hodnoty vypočítané, počet stupňů volnosti, součet čtverců odchylek, střední kvadratická odchylka a zlepšení poměru součtu čtverců odchylek).

Grafické interpretace výsledků jsou na obr. 1, 2

1.2 Popis poklesu redukujících látek racionální lomenou funkcí

Protože spotřeba redukujících látek souvisí s populační dynamikou kvasinek, bylo užitečné užít k popsání průběhu poklesu koncentrace redukujících látek v kvasici mladině vztah

$$D = 1/(1 + t^2) \quad (2)$$

který byl pro lineární průběh vlivu tlaku na hlavní kvašení upraven do tvaru:

$$D = [(Z + z_p)/(U + (V + v_p)t^2)] + W + w.p \quad (3)$$

kde D je obsah redukujících látek v g.l⁻¹
 t je čas v hodinách, p - přetlak v MPa
 U, V, W, Z, v, w, z - konstanty

Ověření chování vztahu 3 v rozmezí hodnot tlaku 0,0 až 0,1 MPa je na obr. 3.

Bыло zjišťováno, že-li možno zahrnout do vztahu další parametry fermentace, jako teplotu a původní koncentraci mladiny (obr. 4). Rovnice (3) byla rozšířena i vzhledem k teplotě a původní koncentraci mladiny, avšak přístupnost koeficientů této vícekonstantové rovnice je již komplikovaná.

1.3 Popis poklesu zdánlivého extraktu mladiny složenými funkcemi

V další části aplikace approximačních metod byla k poklesu zdánlivého extraktu kvasicí mladiny navržena složená funkce, při jejímž odvození se vycházel ze skutečnosti, že naměřená závislost má inflexní bod a hodnota funkce v čase $t = 0$ závisí na původní koncentraci mladiny.

Tečna funkce v čase $t = 0$ je rovnoběžná s osou x, protože lze předpokládat lag - fázi v růstu a aktivitě kvasinek. Souřadnice inflexního bodu budou záviset na teplotě a tlaku. Tečna v inflexním bodě je společná oběma funkčním a její směrnice závisí na teplotě. Asymptota, ke které se blíží funkce v čase $t = \infty$, určuje konečný stupeň prokvašení, který závisí na teplotě, tlaku a vlastnostech kvasinek, tj. na schopnosti nižšího či hlubšího prokvašení a dále na fyziologickém stavu, tj. na počtu nasazení a na toleranci ke změnám tlaku.

Pro popsání poklesu zdánlivého extraktu kvasicí mladiny od začátku fermentace po dosažení inflexního bodu byl zvolen kubický spline a pro popsání poklesu zdánlivého extraktu od inflexního bodu do konce fermentace byla zvolena exponenciální.

Původní koncentrace mladiny je N_{max} , konečný stupeň prokvašení N_{min} , počáteční čas fermentace nechť je t_0 a konečný čas fermentace t_k . Inflexní bod nechť má souřadnice t_i , N_i . Souřadnice x odpovídá času t a souřadnice y odpovídá zdánlivému extraktu N . Provedením derivace kubického spline třetího stupně se dostane vztah

$$y' = 3A_1 \cdot x^2 + 2A_2 \cdot x + A_3 \quad (4)$$

resp.

$$N' = 3A_1 \cdot t^2 + 2A_2 \cdot t + A_3 \quad (5)$$

z čehož plyne

$$y(0) = N_{max} \quad (6)$$

$$y'(0) = 0 \quad (7)$$

$$y(t_i) = N_i \quad (8)$$

$$A_3 = 0 \quad (9)$$

$$A_4 = N_{max} \quad (10)$$

$$y'(t_i) = -k \quad (11)$$

Tečnami ve dvou bodech lze definovat kubický spline mezi těmito body:

$$A_1 \cdot t_{13} + A_2 \cdot t_{12} + N_{max} = N_i \quad (12)$$

$$3A_1 \cdot t_{12} + 2A_2 \cdot t_i = -k \quad (13)$$

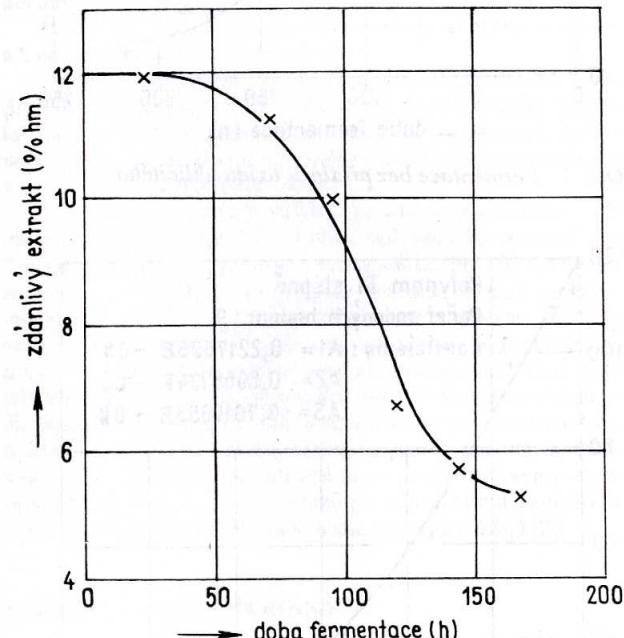
a společným řešením rovnic (12) a (13) rezultuje

$$A_1 = (-k \cdot t_i - 2N_i + 2N_{max})/t_{13} \quad (14)$$

$$A_2 = (3(N_i - N_{max}) + k \cdot t_i)/t_{12} \quad (15)$$

kde $k = k_0 + c_1 \cdot T - c_2 \cdot p$

Dosazením vztahů (9), (14), (15) do (5) se získá vztah pro popis zdánlivého extraktu v čase t_0 až t_i .



Obr. 5. Pokles zdánlivého extraktu kvasicí mladiny při teplotě 9 °C a atmosférickém tlaku

Další průběh fermentace lze popsát exponenciálou, která začíná v inflexním bodě a neklesne pod předem zvolenou hodnotu.

$$N = j \cdot e^{-h(t - t_i)} + L \quad (16)$$

kde L je konečný stupeň prokvašení
 j, h - konstanty
platí

$$N(t_i) = N_i \quad (17)$$

$$N'(t_i) = -k \quad (18)$$

$$N(t_k) = L \quad (19)$$

$$N_i = j + L \quad (20)$$

Tečna exponenciály v inflexním bodě má směrnici $-k$. Derivace spojených vztahů (16) a (17)

$$N' = -h \cdot j \cdot e^{-n(t-i)} \quad (21)$$

a dále z (21) a (18) plyne

$$-k = -(N_i - L) \cdot h \quad (22)$$

a spojením vztahů (22) a (20) do (16) plyne rovnice pro průběh poklesu zdánlivého extraktu kvasící mladiny v čase t_i až t_k ,

$$\text{kde } L = L_0 + c_3 \cdot T + c_4 \cdot p \quad (23)$$

A_{1-n} je koeficient polynomu,
 c_1-c_4 konstanty a T je teplota ve °C

Grafické vyjádření odvozeného modelu poklesu zdánlivého extraktu kvasící mladiny je na obr. 5.