บทคัดย่อ

T 162069

แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ถูกสร้างขึ้นเพื่อใช้อธิบายจลนพลศาสตร์ของการหมักเอทานอลจากกากน้ำตาล (Molasses) โดยใช้ยีสต์ *Saccharomyces cerevisiae* สายพันธุ์ M30 ซึ่งมีความสามารถในการตกตะกอนเร็ว กากน้ำตาลซึ่งเป็นวัตถุดิบตั้งต้นหลักในการหมักเอทานอลของประเทศไทย ถูกใช้เป็นสารตั้งต้นในการทดลอง การทดลองที่ทำเป็นชนิดครั้งคราว ในขวดเขย่า ในขั้นแรกการหมักถูกทำขึ้นในขวดเขย่าที่ควบคุมอุณหภูมิไว้ 33 องศาเซลติเกรดโดยปรับเปลี่ยนค่าน้ำตาลเริ่มต้นระหว่าง 3 ถึง 25 เปอร์เซ็นต์มวลต่อปริมาตร จากการทดลองพบว่าความเข้มข้นเริ่มต้นของน้ำตาลที่เหมาะสมคือ 22 เปอร์เซ็นต์มวลต่อปริมาตร จากนั้นจึงทำการหมักโดยใช้ความเข้มข้นน้ำตาลเริ่มต้นที่ 22 เปอร์เซ็นต์มวลต่อปริมาตรที่อุณหภูมิต่างๆ ในช่วง 30 ถึง 42 องศาเซลติเกรด แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ที่สร้างขึ้นนี้พัฒนาจากแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของโมนอด โดยมีปัจจัยหลักสามส่วนคือ ปัจจัยของความเข้มข้นน้ำตาลเริ่มต้น ปัจจัยของความเข้มข้นของน้ำตาลและเอทานอล และปัจจัยของอุณหภูมิในการหมัก และนอกจากนั้นยังเพิ่มพจน์ของอัตราการตายและการบำรุงรักษาเซลล์ในสมการสมดุลมวลของเซลล์ โดยสมการชนิดโพลิโนเมียลถูกใช้ในการสร้างความสัมพันธ์ระหว่างค่าน้ำตาลเริ่มต้นกับค่าพารามิเตอร์ทางจลนพลศาสตร์ จากนั้นสมการเอกซ์โปเนนเชียลถูกใช้เพื่ออธิบายความสัมพันธ์ระหว่างอุณหภูมิกับค่าพารามิเตอร์ทางจลนพลศาสตร์ต่างๆ อาทิเช่น การเจริญเติบโตจำเพาะและการผลิตเอทานอลจำเพาะสูงสุด และความเข้มข้นสูงสุดของเซลล์ ค่าพารามิเตอร์ที่เหมาะสมถูกคำนวณจากการวนรอบของชุดโปรแกรมคำนวณทางคณิตศาสตร์ที่เขียนขึ้นโดยใช้ระเบียบวิธีกำลังสองน้อยที่สุด การจำลองการหมักด้วยแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ที่สร้างขึ้นให้ผลในทางเดียวกันกับการทดลองของการหมักเอทานอล ค่าความเข้มข้นน้ำตาลที่เหมาะสมทั้งในด้านการเจริญเติบโตของยีสต์และความเข้มข้นของเอทานอลมีค่าเป็น 22%มวลต่อปริมาตร ที่อุณหภูมิการหมัก 33 องศาเซลติเกรด จากงานวิจัยแสดงให้เห็นผลกระทบเชิงปริมาณของความเข้มข้นน้ำตาลเริ่มต้นต่อค่าจลนพลศาสตร์พารามิเตอร์ของกระบวนการหมัก โดยพบว่าค่าจลนพลศาสตร์ไม่เปลี่ยนแปลงอย่างมีนัยสำคัญเมื่อขยายขนาดจาก 0.5 ลิตรเป็น 10 ลิตร แต่พบการเบี่ยงเบนอย่างมีนัยสำคัญของค่าจลนพลศาสตร์เมื่อระบบเปลี่ยนจากแบบครั้งคราวเป็นแบบต่อเนื่อง

จากนั้นแบบจำลองแบบข่ายงานนิวรัลได้ถูกนำเสนอเพื่อใช้ทำนายจลนพลศาสตร์ของการหมักเอทานอล โดยที่แบบจำลองข่ายงานมีการปรับค่าน้ำหนัก(weight) และ ตัวถ่วง (bias) เพื่อลดผลต่างระหว่างค่าทำนายกับค่าจริงตามกลไกแบบย้อนกลับ (backpropagation algorithm) ใช้ ฟังก์ชันกระตุ้น logarithmic-sigmoidal และ pure-linearในชั้น hiddenและ outputตามลำดับ แบบจำลองใช้ในการทำนายกับข้อมูลจากกระบวนการหมักแบบครั้งคราวและแบบ fed batch จากห้องปฏิบัติการและโรงงานผลิตเอทานอลขนาดเล็ก (ถังหมักขนาด 2500 ลิตร) ชุดของข้อมูลป้อนและจำนวน node ถูกทดสอบเพื่อให้ได้แบบจำลองที่มีสมรถภาพที่ดีสุด โดยแม้ว่าการทำนายความเข้มข้นเซลล์เมื่อเทียบกับข้อมูลปริมาณจำนวนนับของเซลล์จากโรงงานจะไม่สอดคล้องนัก แต่ผลที่สอดคล้องเป็นอย่างดียิ่งระหว่างค่าทำนายกับค่าความเข้มข้นเอทานอลและน้ำตาลรีดิวซ์ที่วัดได้แสดงให้เห็นถึงความเหมาะสมของการนำแบบจำลองข่ายงานไปประยุกต์ใช้ในการทำนายจลนพลศาสตร์ของระบบ

Abstract

TE 162069

A mathematical model is developed to explain the process dynamics of ethanol production by flocculating yeast, *Saccharomyces cerevisiae* M30. Molasses, the main feedstock for ethanol production in Thailand, is used as the substrate source for all experiments. Firstly, the experiments are carried out by the batch fermentation in shaking flasks with the initial sugar concentration ranging from 3 to 25%w/v and incubate at 33°C. Subsequently, the optimal initial sugar concentration growth and production is found to be 22%w/v. At the optimal initial sugar concentration (22%w/v), the fermentation are performed with operating temperature ranging from 30 to 42°C. The mathematical model is developed from Monod kinetic model. It consists of three main factors; initial substrate concentration, substrate and ethanol concentration, and operating temperature, and counts with death rate and cell maintenance for biomass equation. Polynomial equation is used to describe the relationship between initial substrate concentration and kinetic parameters. Then, exponential relationships between operating temperature and kinetic parameters such as both maximum specific growth rate and production rate and maximum production concentrations are determined. The parameters of model are converged by using least-square method. The results reveal a good agreement between the simulation and the experiment data. The optimum conditions of ethanol batch fermentation by using molasses as substrate are at 22%w/v initial reducing sugar and 33°C of operating temperature. The quantitative effects of initial sugar concentration on the kinetic parameters are evaluated. The kinetic parameters are not significantly affected by the scale-up from 0.5 to 10 L, however, there are significant deviations of the kinetic parameters when the operation changes from batch to continuous process.

Next, cross combination neural network model is proposed to obtain the process dynamics. The neural network is trained by selecting the weights and the biases to minimize the output errors by the back propagation algorithm. The logarithmic-sigmoidal and the pure-linear function are chosen as the hidden and out put activation function, respectively. Applications of the model are on batch and fed - batch data obtained from real experiments in a laboratory and a small ethanol plant (2500 L fermentors). The set of inputs and number of hidden nodes are tested to get the best performance of the model. Although, the results of the prediction of cell counts from the plant are inconsistent, a good agreement between model simulation and measurements of ethanol and reducing sugar concentration are observed in all studies. It is shown that the cross combination neural network can be successfully applied for the prediction of the system's dynamics.