

treatment with sulfuric acid. Eastern-European Journal of Enterprise Technologies. – 2021. – 4 (6 (112)), 6–13.

3. Sytnik, N., Kunitsia, E., Kalyna, V., Petukhova, O., Ostapov, K., Ishchuk, V. et. al. Technology development of fatty acids obtaining from soapstock using saponification. Eastern-European Journal of Enterprise Technologies. – 2021. – 5 (6 (113)), 16–23.

4. Вычисление энергии на испарение связанной влаги из джекфрута / Т. С. Нгуен, А. Х. Х. Нугманов, З. М. Арабова, А. А. Нугманова // Известия КГТУ. – 2019. – № 55. – С. 214-225.

5. Нугманов, А. Х. Х. Теория и практика проектирования пищевых систем на основе феноменологического подхода : специальность 05.18.12 "Процессы и аппараты пищевых производств" : диссертация на соискание ученой степени доктора технических наук / Нугманов Альберт Хамед-Харисович, 2017. – 523 с.

DEVELOPMENT OF A COMBINED THREE-STAGE TECHNOLOGY FOR PRODUCING FATTY ACIDS

Ostrikov Alexander Nikolaevich, Doctor of Engineering. Sciences, Professor, Head of the Department of Technology of Fats, Processes and Apparatuses for Chemical and Food Production, Voronezh State University of Engineering Technologies, e-mail: ostrikov27@yandex.ru

Kopylov Maxim Vasilievich, Ph.D. tech. Sciences, Associate Professor, Associate Professor of the Department of Technology of Fats, Processes and Apparatuses of Chemical and Food Production, Voronezh State University of Engineering Technologies, e-mail: kopylov-maks@yandex.ru

Tsapkina Natalia Ivanovna, external student of the department of technology of fats, processes and apparatus of chemical and food production, Voronezh State University of Engineering Technologies, e-mail: eco-agro12@mail.ru

Voronezh State University of Engineering Technologies,
Russia, Voronezh, e-mail: rector@vsuet.ru

Abstract: *the article contains a description of a combined three-stage technology for the production of fatty acids (FA) from soap stocks, including three successive stages: the first is saponification of the feedstock with a NaOH solution, the second is salting out NaCl; the third is separation with a H₂SO₄ solution. This technological process for processing soap stock makes it possible to increase the degree of neutralization and the yield of FA.*

Key words: *waste, soap stock, oilseeds, separation, fatty acids, saponification, salting out, degree of neutralization.*

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДОВ *IN SILICO* ДЛЯ ОПТИМИЗАЦИИ ПОЛУЧЕНИЯ ЦЕЛЕВОГО ПРОДУКТА ПРИ КУЛЬТИВИРОВАНИИ

Осьмак Ольга Олеговна, инженер Университета ИТМО НОЦ ИнфоХимии,
e-mail: Osmak21@yandex.ru

Володарский Михаил Олегович, студент Университета ИТМО факультета биотехнологий, e-mail: michael.volodarsky@yandex.ru

Филозон Владислав Сергеевич, студент Университета ИТМО факультета биотехнологий, e-mail: flozop@yandex.com

Смирнов Игорь Сергеевич, студент Университета ИТМО факультета биотехнологий, e-mail: is_smirnov@itmo.ru

Ашихмина Мария Сергеевна, инженер Университета ИТМО НОЦ ИнфоХимии, e-mail: msashikhmina@itmo.ru

Национальный исследовательский университет ИТМО,
Россия, Санкт-Петербург, e-mail: so@itmo.ru

Аннотация: в работе представлен новый подход для математического моделирования кинетики накопления биомассы с использованием метода Gradient Boosting. Использование инструментов *in silico* позволяет анализировать и оптимизировать процессы культивирования микроорганизмов с минимальными затратами времени и средств.

Ключевые слова: *in silico*, питательная среда, целевой продукт, биомасса, биотехнология, машинное обучение.

Важной задачей любого биотехнологического процесса является получение целевого продукта и поддержание благоприятных условий для роста культуры, где в качестве целевого продукта может выступать биомасса и различные метаболиты. В изучении роста микроорганизмов и исследовании питательной среды традиционно используется S-образная кривая. Ранее для проведения подобных исследований требовалось значительное количество ресурсов. В настоящее время этот процесс можно упростить, применяя методы *in silico*, которые часто используются для моделирования и симуляции биологических систем.

Методы *in silico* произвели революцию в области биотехнологии, позволив исследователям предсказывать и анализировать сложные биологические процессы с минимальными затратами времени и средств. Использование инструментов *in silico* позволяет анализировать различные факторы: накопление биомассы в процессе культивирования, состав питательных сред, ответ микроорганизмов на внешние факторы и биологические реакции без необходимости постановки эксперимента, занимающего большой промежуток времени. Для оптимизации процесса культивирования применение математического моделирования является актуальной темой, поскольку позволяет уменьшить продолжительность экспериментальных работ в

лаборатории и помогает сузить диапазон искомых масс. Одним из ключевых преимуществ методов *in silico* является их способность обрабатывать большие объемы данных и проводить сложные анализы, которые было бы сложно осуществить с помощью традиционных экспериментальных методов.

Таблица 1

Результаты экспериментальных исследований (выборка)

$m_{Г}, Г$	$m_{М}, Г$	$d_0, Г$	$d_1, Г$	$d_2, Г$	$d_3, Г$	$d_4, Г$	$d_5, Г$	$d_6, Г$	$d_7, Г$
20	5	0,1	0,28	0,64	1	1,06	1,2	1,25	1,34
20	10	0,1	0,5	1,34	1,72	2,44	2,64	2,63	2,5
20	15	0,1	0,2	0,77	1,62	2,16	2,31	2,43	2,38
20	20	0,1	0,24	0,55	0,94	1,24	1,84	2,1	2,16
15	5	0,1	0,3	0,42	0,64	0,94	1,06	1,19	1,21
15	10	0,1	0,3	0,34	0,43	0,64	0,94	1,04	1,16
15	15	0,1	0,23	0,46	0,84	1,1	1,24	1,25	1,23
15	20	0,1	0,42	0,48	0,54	0,61	0,51	0,5	0,47
10	5	0,1	0,34	0,84	0,94	1,2	1,59	1,68	1,67
10	10	0,1	0,43	0,64	0,97	1,15	1,33	1,39	1,5
10	15	0,1	0,5	0,67	1,32	1,64	1,79	1,91	2,1
10	20	0,1	0,32	0,4	0,56	0,74	0,97	1,26	1,22
5	5	0,1	0,45	0,72	1,16	1,67	1,74	1,86	1,94
5	10	0,1	0,44	0,52	0,67	0,73	0,84	0,97	0,98
5	15	0,1	0,3	0,44	0,67	0,73	0,91	0,86	0,72
5	20	0,1	0,26	0,38	0,64	0,79	0,76	0,64	0,52

где d_0, d_1, \dots, d_7 значения биомассы от посева до седьмого дня культивирования соответственно.

В данной работе предложен подход для математического моделирования кинетики накопления биомассы в процессе культивирования с использованием модели Gradient Boosting.

Разработка питательной среды для накопления биомассы при культивировании базидиомицетов требует ежедневного контроля прироста биомассы. Известно, что в стационарной фазе происходит синтез различных веществ, которые могут вызвать лизис клеток, то есть их саморазрушение, что делает процесс отделения биомассы от культуральной среды более сложным.

На основании проведенных ранее исследований по изучению накопления биомассы в зависимости от состава питательной среды были получены данные, представленные в таблице 1.

Поскольку у нас имеется достаточно малый набор данных, то тяжело выявить корреляцию между ними. Поэтому для увеличения выборки данных была использована кубическая интерполяция, построенная на основе данных из таблицы 1. Для этого была введена функция двух переменных биомассы $f(m, g)$

(1), где $m > 0$ – масса соевой муки в граммах, $g > 0$ – масса глюкозы в граммах.

$$f(m, g) = \sum_{i=0}^3 \sum_j^3 a_{ij} m^i g^j \quad (1)$$

где a_{ij} — это коэффициенты, которые находятся из имеющихся значений $f(m, g)$, их производных $\frac{\partial f}{\partial m}, \frac{\partial f}{\partial g}$ и смешанных производных $\frac{\partial^2 f}{\partial m \partial g}$ в узловых точках. Под узловыми точками понимаются значения, полученные в ходе эксперимента (таблица 1).

На основе интерполированных данных была разработана прогностическая модель машинного обучения, которая анализировала изменения биомассы в течение определенного периода времени. Для обучения была выбрана модель Gradient Boosting, которая представляет собой ансамбль моделей. Основная идея заключается в последовательном добавлении новых моделей к ансамблю для корректировки ошибок предыдущих моделей [1-4]. В отличие от других методов машинного обучения, Gradient Boosting использует градиент функции потерь для уменьшения ошибок. Преимуществами данной модели являются высокая точность прогнозирования, гибкость и возможность оптимизации различных функций потерь.

Используя интерполированные данные, была обучена модель. Для визуализации данных были построены тепловые карты (рисунок 1). На изображениях визуализируются трёхмерные данных в двумерном пространстве. Шкала в правой части изображения представляет из себя легенду и соотносит цвета с конкретными значениями биомассы. Минимальное значение на шкале равняется 0 г, максимальное – 2,8 г.

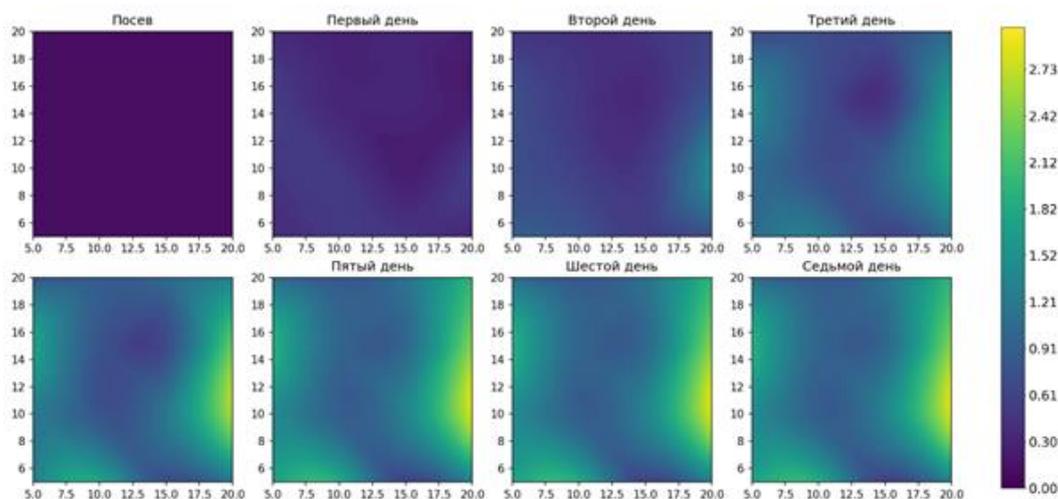


Рисунок 1 – Тепловая карта данных, полученных с помощью модели машинного обучение, обученной на интерполированных данных по таблице 1

Анализируя тепловые карты на рисунке 1, можно заметить, что на протяжении первых трех дней изменения в росте биомассы минимальны вне зависимости от количества глюкозы и соевой муки в среде. Однако на четвертый день начинается заметный рост биомассы. Кроме того, можно заметить, что биомасса растет по мере увеличения количества глюкозы, в то время как количество соевой муки не оказывает большого влияния на рост. На пятый и шестой день рост биомассы становится еще выраженнее при увеличении количества глюкозы, подтверждая гипотезу о том, что глюкоза оказывает большее влияние на рост биомассы, чем соевая мука. На седьмой день наблюдаются максимальные значения биомассы, особенно в верхней правой части тепловой карты, что указывает на сильную зависимость роста биомассы от количества добавленной глюкозы в питательную среду.

Таким образом, можно сделать несколько выводов на основании проведенных экспериментов: во-первых, глюкоза является ключевым компонентом питательной среды для роста биомассы, в то время как эффект от соевой муки менее значителен и может быть второстепенным фактором. Из этого следует, что для оптимизации роста биомассы следует сосредоточиться на увеличении концентрации глюкозы в питательной среде. Во-вторых, для получения целевого продукта, используя данные тепловые карты, мы можем «подпитывать» среду, то есть можем в определенный период поддерживать определенную концентрацию вещества для достижения максимального количества биомассы.

Библиографический список

1. Natekin A., Knoll A. Gradient boosting machines, a tutorial // Front Neurorobot. 2013. Vol. 7.
2. Hastie T. et al. // The elements of statistical learning: data mining, inference, and prediction // New York: springer. 2009. V. 2. P. 1-758.
3. Huber F. et al. Extreme Gradient Boosting for yield estimation compared with Deep Learning approaches // Comput Electron Agric. 2022. Vol. 202. P. 107346.
4. Friedman J.H. Greedy function approximation: A gradient boosting machine. // The Annals of Statistics. 2001. Vol. 29, № 5.
5. Нугманов, А. Х. Х. Теория и практика проектирования пищевых систем на основе феноменологического подхода : специальность 05.18.12 "Процессы и аппараты пищевых производств" : диссертация на соискание ученой степени доктора технических наук / Нугманов Альберт Хамед-Харисович, 2017. – 523 с.

USE OF IN SILICO METHODS TO OPTIMIZE THE PRODUCTION OF THE TARGET PRODUCT DURING CULTIVATION

*Osmak Olga Olegovna, engineer at ITMO University REC Infochemistry,
e-mail: Osmak21@yandex.ru*

*Mikhail Olegovich Volodarsky, student at ITMO University, Faculty of
Biotechnology, e-mail: michael.volodarsky@yandex.ru*

Philozop Vladislav Sergeevich, student at ITMO University, Faculty of Biotechnology, e-mail: fllozop@yandex.com
Smirnov Igor Sergeevich, student at ITMO University, Faculty of Biotechnology, e-mail: is_smirnov@itmo.ru
Ashikhmina Maria Sergeevna, engineer of ITMO University REC Infochemistry, e-mail: msashikhmina@itmo.ru

ITMO University, Russia, St. Petersburg, e-mail: so@itmo.ru

Abstract: *The paper presents a new approach for mathematical modeling of the kinetics of biomass accumulation using the Gradient Boosting method. The use of in silico tools allows you to analyze and optimize the processes of cultivation of microorganisms with minimal time and money.*

Keywords: *in silico, nutrient medium, target product, biomass, biotechnology, machine learning.*

УДК 663.44, 663.45

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ СОСТАВА АРОМАТИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ МОЛОДОГО СВЕТЛОГО ПИВА ИЗ ЯЧМЕННОГО СОЛОДА, ПОЛУЧЕННОГО ПУТЕМ СБРАЖИВАНИЯ НИЗОВЫМИ И ВЕРХОВЫМИ ДРОЖЖАМИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ РАЗЛИЧНЫХ СПОСОБОВ ОТВАРОЧНОГО ЗАТИРАНИЯ

Палагин Константин Алексеевич, аспирант, ФГБОУ ВО «Кубанский государственный технологический университет», e-mail: delfin_09super@mail.ru

Осеledцева Инна Владимировна, д-р техн. наук, доцент, ФГБОУ ВО «Кубанский государственный технологический университет», e-mail: ivovino@mail.ru

Назаренко Мария Алексеевна, канд. техн. наук, доцент, ФГБОУ ВО «Кубанский государственный технологический университет», e-mail: mariyababenkova@mail.ru

Ханин Даниил Кириллович, магистрант, ФГБОУ ВО «Кубанский государственный технологический университет» e-mail: danihanin768@gmail.com

ФГБОУ ВО «Кубанский государственный технологический университет»,
Россия, Краснодар, e-mail: adm@kgtu.kuban.ru

Аннотация: произведен сравнительный анализ состава ароматических веществ молодого светлого пива из ячменного солода, полученного путем сбраживания низовыми и верховыми дрожжами с использованием различных способов