

УДК [633.41:664.292]:519.86

ББК 42.15

X – 25

Хатко З.Н., МГТУ, г. Майкоп

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ОЧИСТКИ СВЕКЛОВИЧНОГО ПЕКТИНА

В статье представлены результаты математического моделирования процессов очистки свекловичного пектина на стадиях обработки пектинового экстракта и сухого пектина. Установлено, что на чистоту пектина сильное влияние оказывает рН пектинового экстракта при осаждении (31 %). Кроме того, удельное соотношение расхода ионитов на очистку значительно влияет на доброкачественность пектинового экстракта и чистоту получаемого из него пектина (25 %). Оптимальными параметрами получения высокоочищенного пектина являются следующие: осаждение пектина при рН пектинового экстракта 3,3...3,5, удельное соотношение ионитов на очистку от балластных веществ 1,38, скорость пропускания пектинового экстракта через ионообменные смолы 0,36...0,48 л/ч.

Математическое моделирование как метод научного исследования позволяет определить влияние различных факторов на эффективность процессов получения пектина из свекловичного жома и очистки его от сопутствующих при осаждении пектина балластных веществ.

Поскольку чистота пектина зависит от условий осаждения (рН пектинового экстракта), от степени очистки пектинового экстракта и сухого пектина, нами получены математические модели каждой из перечисленных стадий.

Для получения достоверных результатов, выявления связей между исследуемыми факторами, а также сокращения количества опытов в экспериментах, применяли математические методы [1, 2].

Планирование и обработку многофакторных экспериментов осуществляли с помощью множественного регрессионного анализа с оценкой взаимодействия факторов и эффектов второго порядка.

По результатам лабораторных опытов получали уравнение регрессии с квадратичными эффектами:

$$Y = B_0 + \sum_{j=1}^K B_j X_j + \sum_{u=1}^K \sum_{j=u+1}^K B_{ju} X_j X_u + \sum_{j=1}^K B_{jj} X_j^2, \quad (1)$$

Коэффициент уравнения регрессии определяли с помощью уравнений:

$$B_0 = a_1 \sum_{i=1}^N Y_i - a_2 \sum_{j=1}^K \sum_{i=1}^N X_{ji}^2 Y_0, \quad (2)$$

B_j

B_{uj}

B_{jj}

Их дисперсии определяли так:

$$S_{B_j}^2 = a_1 S_{\text{воспр}}^2, \quad (3)$$

где: $a_1, a_2, a_3, \dots, a_n$ - коэффициенты, определяемые с помощью таблиц.

Значимость коэффициентов регрессии определяли с помощью критерия Стьюдента.

Дисперсию воспроизводимости определяли по нулевым опытам:

$$S_{\text{воспр}}^2 = \frac{\sum_{u=1}^n (Y_u^0 - Y_0)^2}{n_0 - 1}, \quad (4)$$

$$Y = \frac{\sum_{u=1}^n Y_u^0}{n_0}, \quad (5)$$

Число степеней свободы дисперсии воспроизводимости:

$$f_{\text{воспр}} = n_0 - 1, \quad (6)$$

Остаточную дисперсию определяли по формуле:

$$S^2_{\text{ост}} = \frac{\sum_{i=1}^N (Y_i - \bar{Y})^2}{N - 1}, \quad (7)$$

Число степеней свободы остаточной дисперсии:

$$f_{\text{ост}} = N - 1, \quad (8)$$

Адекватность уравнения регрессии проверяли по критерию Фишера

$$F_{\text{расч}} = \frac{S_a^2}{S^2_{\text{воспр}}}, \quad (9)$$

где S_a^2 - дисперсия адекватности, которую определяли из соотношения:

$$S_a^2 f_a = S^2_{\text{ост}} f_{\text{ост}} - S^2_{\text{воспр}} f_{\text{воспр}}, \quad (10)$$

$$S_a^2 = \frac{S^2_{\text{ост}} f_{\text{ост}} - S^2_{\text{воспр}} f_{\text{воспр}}}{f_a}, \quad (11)$$

где f_a - число степеней свободы дисперсии адекватности:

$$f_a = f_{\text{ост}} - f_{\text{воспр}}, \quad (12)$$

Уравнение считали адекватным эксперименту, если $F_{\text{расч}} < F_{\text{табл}}$.

Табличный критерий Фишера находили по числу степеней свободы дисперсии адекватности $f_1 = f_a$ и числу степеней свободы дисперсии воспроизводимости $f_2 = f_{\text{воспр}}$

1. Математическое моделирование процесса осаждения пектина

В качестве факторов выбрали x_1 - чистота пектина, x_2 - рН экстракта при осаждении пектина, x_3 - удельное содержание карбониллов карбоксильных групп. Параметр отклика – Y_1 - комплексообразующая способность пектина. Влияние факторов x_1, x_2, x_3 на Y_1 показано на рисунке 1.

В результате обработки полученных данных на ЭВМ для Y_1 получено следующее уравнение регрессии:

$$Y_1 = 511,2 + \frac{1\%}{17,3x_1} - \frac{31\%}{95,3x_2} + \frac{4\%}{4,1x_3} + \frac{3\%}{25,7x_1^2} + \frac{8\%}{2,5x_2^2} - \frac{7\%}{0,1x_3^2} + \frac{20\%}{1,1x_2x_3} - \frac{3\%}{1,1x_1x_3} - \frac{0\%}{1,0x_1x_2},$$

где над чертой - доля влияния (%), под чертой - коэффициент регрессии.

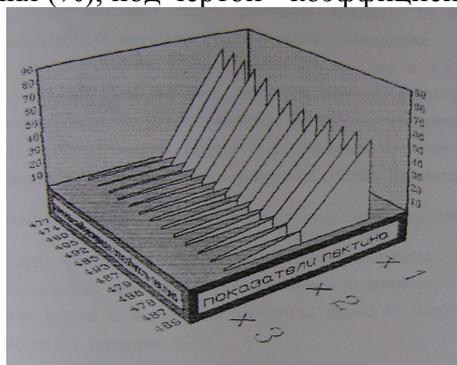


Рис. 1. Влияние факторов x_1, x_2, x_3 на комплексообразующую способность пектина

Анализ уравнения регрессии позволил выявить наличие тесной связи (коэффициент детерминации $R=0,67$) между факторами. Положительное влияние на комплексообразующую способность оказывают увеличение чистоты пектина (x_1) и удельного содержания карбониллов карбоксильных групп в молекуле пектина (x_3), однако доля влияния этих факторов на Y_1 не велика - 1 и 4 %. А вот увеличение рН экстракта при осаждении пектина (x_2)

уменьшает комплексообразующую способность. Доля влияния этого фактора высока - 31 %. Однако темп снижения комплексообразующей способности не высокий.

Анализ межфакторного взаимодействия x_1 , x_2 и x_3 полученного уравнения регрессии показывает, что увеличение факторов x_1x_2 и x_1x_3 - уменьшает комплексообразующую способность пектина, но не намного, т.к. доля влияния составляет всего 3 %. Увеличение x_1x_3 увеличивает комплексообразующую способность пектина. Доля влияния составляет 20 %.

Y_2 - комплексообразующая способность чистого пектина.

В качестве факторов выбрали x_1 - выход пектина, x_2 - рН экстракта при осаждении пектина, x_3 удельное содержание карбонил карбоксильных групп в молекуле пектина. Влияние факторов x_1 , x_2 , x_3 на Y_2 показано на рисунке 2.

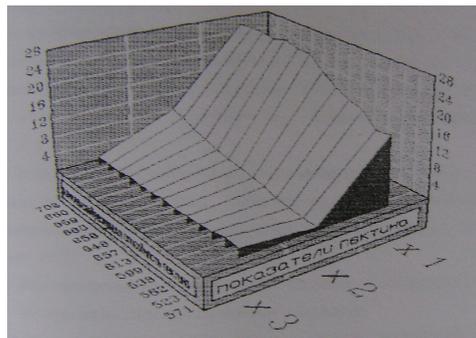


Рис. 2. Влияние факторов x_1 , x_2 , x_3 на комплексообразующую способность чистого пектина

Получено следующее уравнение регрессии:

$$Y_2 = -810,2 + \frac{16\%}{1706x_1} + \frac{19\%}{210,6x_2} - \frac{6\%}{40,1x_3} - \frac{12\%}{332,9x_1^2} + \frac{2\%}{2,3x_2^2} + \frac{15\%}{2,4x_3^2} + \frac{1\%}{5,7x_1x_2} - \frac{5\%}{23,2x_1x_3} - \frac{23\%}{9,2x_2x_3}$$

В результате анализа уравнения регрессии выявлена тесная связь между факторами ($R=0,88$). Регрессионный анализ данных позволил установить, что наибольшее положительное влияние на комплексообразующую способность чистого пектина оказывают в линейной части выход пектина (x_1) и рН экстракта при осаждении пектина (x_2), т.е. при увеличении рН экстракта - увеличивается выход пектина и растет комплексообразующая способность пектина. Доля влияния факторов x_1 и x_2 - высока 16 и 19 %. Темп прироста показывает, что увеличение x_1 ведет сначала к росту Y_2 , затем к снижению, а увеличение x_2 ведет к незначительному приросту Y_2 .

Анализ межфакторного взаимодействия x_1 , x_2 и x_3 показывает, что существенное влияние на комплексообразующую способность чистого пектина оказывают межфакторные взаимодействия x_1x_3 и x_2x_3 - Увеличение этих факторов снижают Y_2 , причем доля влияния их значительна и равна соответственно 5 и 23 %.

Таким образом, оптимальным параметром осаждения пектина является значение рН пектинового экстракта 3,3...3,5, при котором выход пектина составляет 23,7...6,5 %, а комплексообразующая способность очищенного пектина - 613...650 мг РБ²⁺/г.

2. Математическое описание процесса очистки пектинового экстракта ионообменными смолами КУ-2-8чС и ЭДЭ-10П.

В качестве факторов выбрали x_1 - сухие вещества экстракта, x_3 -соотношение расхода ионитов, x_3 - содержание спиртоосаждаемого пектина, x_4 выход пектина. Параметр отклика Y_3 доброкачественность экстракта. Влияние факторов x_1 , x_2 , x_3 на Y_3 показано на рисунке 3.

В результате обработки полученных данных и отсева значимых коэффициентов регрессии для Y_3 получено следующее уравнение регрессии:

$$Y_3 = -0,9 - \frac{15\%}{7,7x_1} + \frac{19\%}{4,7x_4} + \frac{30\%}{2,2x_1^2} + \frac{2\%}{0,2x_2^2} - \frac{0\%}{0,1x_1x_2} - \frac{34\%}{0,8x_1x_4}$$

Регрессионный анализ выявил тесную связь между факторами ($R=1,0$). В линейной части уравнения существенное влияние на доброкачественность оказывают содержание сухих веществ в экстракте и выход пектина, причем увеличение сухих веществ (x_1) снижает u_3 , а увеличение выхода пектина (x_4) увеличивает u_3 , что вполне логично.

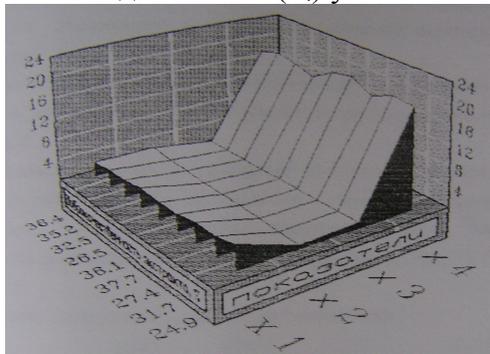


Рис. 3. Влияние факторов x_1, x_2, x_4 на доброкачественность пектинового экстракта

Увеличение x_1 способствует значительному снижению Y_3 . Доля влияния составляет 30%. Увеличение соотношения ионитов способствует некоторому приросту Y_3 (до 10 пунктов).

Анализ межфакторного взаимодействия показывает, что наибольшее влияние на Y_3 оказывает межфакторное взаимодействие x_1x_4 . Доля влияния составляет 34 %.

3. Математическое описание процесса очистки пектина

В качестве факторов выбрали x_1 - комплексообразующая способность пектина, x_2 - соотношение расхода ионитов. Параметр отклика Y_4 - чистота пектина. Влияние факторов x_1, x_2 на Y_4 показано на рисунке 4.

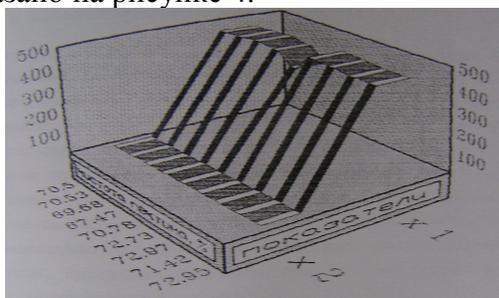


Рис. 4. Влияние факторов x_1 и x_2 на чистоту пектина

Получено следующее уравнение регрессии:

$$Y_4 = 846,1 - \frac{19\%}{3,1x_1} - \frac{25\%}{132,4x_2} + \frac{17\%}{0,003x_1^2} + \frac{1,0\%}{0,9x_2^2} + \frac{25\%}{0,3x_1x_2}$$

В результате регрессионного анализа выявлена тесная связь ($R=0,87$) между факторами. Доля влияния x_1 и x_2 в линейной части велика - 19 и 25 %. Увеличение этих факторов ведет к снижению Y_4 , хотя темпы очень маленькие. При межфакторном взаимодействии они оказывают положительное влияние на Y_4 . Доля влияния равна 25 %.

Таким образом, в результате математического планирования эксперимента и обработки полученных данных установлено, что на чистоту пектина сильно влияет рН экстракта при осаждении (31 %). Кроме того, удельное соотношение расхода ионитов оказывает большое влияние на доброкачественность пектинового экстракта и чистоту получаемого из него пектина (25 %). Оптимальными параметрами получения высокоочищенного пектина являются следующие: осаждение пектина при рН пектинового экстракта 3,3...3,5, удель-

ное соотношение ионитов на очистку от балластных веществ 1,38, скорость пропускания пектинового экстракта через ионообменные смолы 0,36...0,48 л/ч.

Литература

1. Доспехов Б.А. Методика полевого опыта. - М.: Колос. -1979. - 416с.
2. Кафаров В.В., Перов В.Л., Мешалкин В.П. Принципы математического моделирования химико-технологических процессов. - М.: Химия. - 1974. - 344с.