

РЕЗАНОВА В.Г., ХИЛЬЧУК В.В.

ПРОГРАМНЕ ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ ДЛЯ МАТЕМАТИЧНОГО МОДЕЛЮВАННЯ ГІДРОЛІЗУ КОЛАГЕНМІСТКИХ РЕЧОВИН

REZANOVA V. G., HYLCHUK V.V.

SOFTWARE FOR MATHEMATICAL MODELING HYDROLYSIS OF COLLAGEN- CONTAINING SUBSTANCES

Currently, most technology waste leather industry is very labor-intensive and energy intensive. Protein hydrolysates - products of incomplete hydrolysis of proteins containing essential amino acids, minerals and more.

The study described phenomena is mainly empirically, theoretical methods used significantly less. But mathematical modeling of these processes is important for the possibility of obtaining theoretically grounded practical results. Therefore, the theme of work is important.

The experiment, which implemented all possible combinations of levels of independent variables (factors) - a full factorial experiment. If the number of levels is two, it is a full factorial experiment of type 2^k .

The unknown coefficients indicate the strength of the effect of individual factors on the result. Built model must be checked for adequacy, and you can use it for further research.

Keywords: hydrolysate, mathematical models, full factorial experiment.

Вступ

В наш час наукове дослідження значно відрізняється від того, яким воно було в минулому, набуває нових засобів реалізації та форм. Велике значення, у цьому контексті, мають сучасні інформаційні технології. Нові технології стали невід'ємним атрибутом наукового дослідження, для їх використання потрібно мати ґрунтовні науково-методичних знання та вміти їх використовувати.

В даний час десятки тисяч тон відходів шкіряного виробництва накопуються на звалищах, тому що майже всі процеси переробки відходів шкіряної промисловості надзвичайно трудомісткі та енергозатратні, інші – малопродуктивні, внаслідок чого, наноситься велика шкода довкіллю. Дані відходи можна використовувати для виробництва гідролізатів, малярного клею, білкового добрива, штучної шкіри. Продукти неповного гідролізу білків, які мають незамінні амінокислоти та мікроелементи – це білкові гідролізати. Існують два основні способи отримання білкових гідролізатів: хімічний – під дією кислот і лугів та біологічний – під дією ферментів. Ферментативний спосіб являється більш придатним завдяки проведенню в м'якших умовах і перешкоджанню руйнування амінокислот, вуглеводів та інших речовин, які містяться у відходах.

В основному дослідним шляхом здійснюється дослідження описаних вище явищ, теоретичні методи використовуються набагато менше. Але важливим, з точки зору можливості отримання теоретично обґрунтованих практичних результатів, являється математичне моделювання даних процесів.

Постановка завдання

За допомогою математичних методів планування експерименту побудувати залежності вихідних даних (ступінь гідролізу, вміст сухого

залишку в гідролізаті) від вхідних (концентрація ферменту, температура, тривалість процесу гідролізу).

Основна частина

Повний факторний експеримент - це експеримент, в якому реалізуються усі можливі поєднання рівнів всіх незалежних змінних (факторів). Коли число рівнів рівняється двом, то це повний факторний експеримент типу 2^k . Умови експерименту представляють у вигляді таблиці - матриці планування, де рядки відповідають певним дослідам, а стовпці - значенням чинників. Геометрична інтерпретація повних факторних планів (рис.1.): план 2^2 задається координатами вершин квадрата, план 2^3 - координатами вершин куба, при $k > 3$ - координатами вершин гіперкуба.

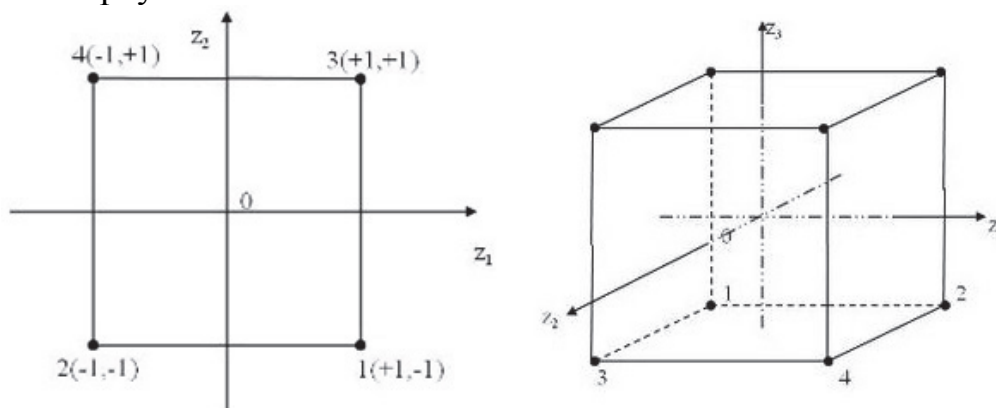


Рис. 1. Геометрична інтерпретація повних факторних планів

Знаходження моделі методом ПФЕ складається з:

- планування експерименту;
- власне експерименту;
- перевірки відтворюваності (однорідності вибірових дисперсій);
- утворення математичної моделі об'єкта з перевіркою статистичної значущості вибірових коефіцієнтів регресії;
- перевірки адекватності математичного опису.

Модель за планом ПФЕ 2^2 описується многочленом (1):

$$y = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + a_{12}x_1x_2 \quad (1)$$

Модель за планом ПФЕ 2^3 описується многочленом (2):

$$y = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3 + a_{12}x_1x_2 + a_{13}x_1x_3 + a_{23}x_2x_3 + a_{123}x_1x_2x_3 \quad (2)$$

Етапи роботи при плануванні експерименту і побудові математичної моделі у разі повного факторного експерименту: вибір локальної області та меж визначення чинників; завдання нульового рівня в багатовимірному факторному просторі; вибір інтервалів варіювання чинників; проведення експерименту; побудова математичної моделі, що виражає залежність вихідного чинника від вхідних факторів.

Невідомі коефіцієнти, що потрібно обчислити за результатами експерименту, будуть обчислені за методом найменших квадратів, суть

якого полягає у наступному. Нехай виконується n експериментів, в кожному з яких незалежним змінним (факторам) x надаються певні значення, і при цьому одержуються деякі значення залежної змінної y . Нехай $x^i = (x_1^i, \dots, x_p^i)$ набір значень незалежних змінних, що було надано їм в i -му експерименті, y_i – відповідні значення залежної змінної. Згідно з МНК в якості оцінки вектора параметрів $\beta = (\beta_1, \dots, \beta_m)$ береться такий вектор $b = (b_1, \dots, b_m)$ при якому сума

$S(\beta) = \sum_{i=1}^n [y_i - f(x^i; \beta)]^2$ приймає мінімальне значення по β . Необхідною

умовою мінімуму $S(\beta)$ є виконання рівностей

$$\frac{\partial S(\beta)}{\partial \beta_j} = 0, j = 1, 2, \dots, m. \quad (3)$$

У нашому випадку для плану ПФЕ 2^2 система вигляду (3) буде мати вигляд:

$$\begin{aligned} a_0 \cdot n + a_1 \cdot \sum x_1^{(i)} + a_2 \cdot \sum x_2^{(i)} + a_{12} \cdot \sum x_1^{(i)} x_2^{(i)} &= \sum y_i \\ a_0 \cdot \sum x_1^{(i)} + a_1 \cdot \sum (x_1^{(i)})^2 + a_2 \cdot \sum x_1^{(i)} x_2^{(i)} + a_{12} \cdot \sum (x_1^{(i)})^2 x_2^{(i)} &= \sum y_i x_1^{(i)} \\ a_0 \cdot \sum x_2^{(i)} + a_1 \cdot \sum x_1^{(i)} x_2^{(i)} + a_2 \cdot \sum (x_2^{(i)})^2 + a_{12} \cdot \sum x_1^{(i)} (x_2^{(i)})^2 &= \sum y_i x_2^{(i)} \\ a_0 \cdot \sum x_1^{(i)} x_2^{(i)} + a_1 \cdot \sum (x_1^{(i)})^2 x_2^{(i)} + a_2 \cdot \sum x_1^{(i)} (x_2^{(i)})^2 + a_{12} \cdot \sum (x_1^{(i)} x_2^{(i)})^2 &= \sum y_i x_1^{(i)} x_2^{(i)} \end{aligned}$$

Невідомі коефіцієнти вказують на силу впливу окремих чинників на результат. Побудовану модель необхідно перевірити на адекватність, після чого можна використовувати її для подальших наукових досліджень.

Висновки

Таким чином, програмне забезпечення, що реалізує всі вищеописані кроки, дозволить раціоналізувати роботу дослідника, а саме - значною мірою зменшити затрати часу на виконання великого обсягу роботи по обробці результатів експерименту. Побудовані регресійні рівняння можна буде використовувати для подальших наукових досліджень, зокрема – для оптимізації параметрів процесу гідролізу з метою отримання практичних результатів – оптимальних умов переробки колагенмістких відходів з метою отримання з них корисних речовин.

Література

1. Барабашук В.І. Планування експерименту в техніці. - К .: Техніка. - 1984. - 200с.
2. Максимюк Н.Н., Марьяновская Ю.В. О преимуществах ферментативного способа получения белковых гидролизатов // Фундаментальные исследования. – 2009. – № 1 – С. 34-35.
3. Новик Ф.С., Арсов Я.Б. Оптимізація процесів методами планування експериментів. - 1980. - 304с.