

О.І. Торяник, д-р хім. наук
О.Г. Дьяков, канд. техн. наук
О.С. Луньова, асист.

ДОСЛІДЖЕННЯ СПІН-СПІНОВОЇ РЕЛАКСАЦІЇ У БЕЗБІЛКОВОМУ ТІСТІ ДЛЯ ВИГОТОВЛЕННЯ ДІЄТИЧНОГО ХЛІБА З ДОБАВКАМИ КСАНТАНУ

Проведено дослідження спін-спінової релаксації з використанням імпульсного спектрометра ЯМР у безбілковому тісті з малими добавками ксантану, які впливають на споживчі характеристики дієтичного хліба.

Проведено исследование спин-спиновой релаксации с использованием импульсного спектрометра ЯМР в безбелковом тесте с малыми добавками ксантана, которые влияют на потребительские характеристики диетического хлеба.

Research of spin-spin relaxation in conducted with the use of impulsive spectrometer NMR in the non-protein dough with small additions of xanthan gum, which influence on consumer descriptions of dietary bread.

Постановка проблеми у загальному вигляді. При проведенні досліджень харчових продуктів сучасними методами широко застосування знаходять спектрометричні методи. Одним з них є імпульсний метод ядерного магнітного резонансу (ЯМР), який дає можливість визначити стан води у харчових продуктах шляхом дослідження рухомості молекул води, застосовуючи резонанс протонів водню [1; 2].

Особливістю проведення цих досліджень є те, що вони потребують використання вимірювальної апаратури високої чутливості для визначення корисного сигналу на фоні впливу перешкод. При проведенні деяких експериментів необхідно дослідити вплив окремих добавок, що суттєво змінюють споживчі характеристики готового продукту, причому відсоток цих добавок значно менший основних компонентів. При таких малих концентраціях добавок зміна сигналу ЯМР відносно основних компонентів дуже мала і тому визначення їх впливу викликає великі труднощі. Одним із шляхів подолання цих труднощів є збільшення кількості проведення експериментів у кожній точці плану експерименту. Цей традиційний підхід суттєво збільшує час проведення досліджень. Інший підхід полягає у тому, щоб розробити спеціальні плани які можуть забезпечити необхідну точність у тій точці, яка викликає найбільший інтерес дослідника [3; 4].

Як приклад розглянемо вплив малих добавок ксантану на результати дослідження спін-спінової релаксації у безбілковому тісті. За технологічними вимогами до споживчих характеристик безбілкового дієтичного хліба раціональна кількість ксантану, що додається до рецептури, становить 0,2...0,5 %.

Тому питання підвищення якості вимірювань при проведенні експериментів з малими концентраціями добавок на основі використання спеціальних планів є актуальним завданням.

Аналіз останніх досліджень і публікацій. Питання побудови подібних планів експерименту ґрунтується на базі загальної теорії експериментальних досліджень. Відомо, що дисперсія $d(x_0, \varepsilon)$ у будь-якій точці проведення дослідження x_0 за наявності плану експерименту ε визначається за формулою [3; 4]:

$$d(x_0, \varepsilon) = f^T(x_0) \cdot D(\varepsilon) \cdot f(x_0), \quad (1)$$

де $f(x)$ – базова система функцій за якою будується необхідна залежність; $D(\varepsilon)$ – дисперсійна матриця плану експерименту; ε – точки, в яких проводиться експеримент.

План експерименту X може бути представлений наступним чином

$$\begin{bmatrix} x_1 & x_2 & \dots & x_r \\ h_1 & h_2 & \dots & h_r \end{bmatrix}, \quad (2)$$

де x_i – точки плану, причому кожна може зустрітись у плані h_i разів.

Крім того повинна виконуватись умова

$$\sum_{i=1}^r h_i = N, \quad (3)$$

де N – загальна кількість експериментів.

План експерименту можна також задати у вигляді

$$\begin{bmatrix} x_1 & x_2 & \dots & x_r \\ l_1 & l_2 & \dots & l_r \end{bmatrix}, \quad (4)$$

де $l_i = h_i/N$ – частка спостережень, що припадає на i -ту точку плану.

Ця величина носить назву частоти i -ї точки плану і задовольняє наступній умові [4].

З урахуванням (4) дисперсійна матриця плану експерименту має наступний вигляд

$$D = \left(\sum_{i=1}^r l_i f(x_i) f^T(x_i) \right)^{-1}. \quad (5)$$

Тому необхідно побудувати такий план проведення досліджень, щоб з урахуванням (5) величина $d(x_0, \varepsilon)$ мала мінімальне значення.

Мета та завдання статті. Метою дослідження є розробка плану експерименту для знаходження відгуку моделі у заданій точці з найвищою точністю. План експерименту, що задовольняє поставленій меті, базується на використанні наступної теореми [3].

Коли система функцій $f(x)$, на основі якої будується модель, належить до системи функцій Чебишева на відрізку $[a, b]$, то оптимальний план ε^* , що задовольняє умові мінімального значення дисперсії відгуку математичної моделі у заданій точці x_0 зосереджується у точках $x_1^*, x_2^*, \dots, x_r^*$, з наступним розподіленням частот точок плану

$$l_i^* = \frac{|L_i(x_0)|}{\sum_{i=1}^N |L_i(x_0)|} \quad (i=1, 2, \dots, N), \quad (6)$$

де

$$L_i(x) = \frac{|F(x_1, x_2, \dots, x_{i-1}, x, x_{i+1}, \dots, x_N)|}{|F(x_1, x_2, \dots, x_N)|}, \quad (7)$$

де $F(x_1, x_2, \dots, x_N)$ – матриця функцій незалежних змінних, що визначається видом моделі та рівнянням регресії і яка має вигляд

$$F(x_1, x_2, \dots, x_N) = \|f(x_1), f(x_2), \dots, f(x_N)\|. \quad (8)$$

Виклад основного матеріалу дослідження. Розглянемо практичне застосування даного підходу для визначення часу спін-спінової

релаксації T_2 для безбілкового тіста з концентрацією ксантану у кількості 0,5% до основного компоненту тіста кукурудзяного крохмалю. Безпосереднє визначення величини T_2 для значень добавок ксантану 0,3%, 0,5% не вдалось тому, що різниця між сигналами, що спостерігались, була незначною. Для вирішення поставленої задачі було прийняте рішення визначити значення T_2 з концентраціями ксантану у кількості 0%, 1% та 2%. Далі за знайденими даними побудувати рівняння регресії другого порядку і аналітичним шляхом знайти величини T_2 для концентрацій 0,3 та 0,5% ксантану відповідно.

Система незалежних функцій f , на базі якої будується модель має вигляд

$$f^T(x) = |Ixx^2|, \quad (9)$$

що дозволяє побудувати модель виду

$$T_2(C) = |a| \cdot |f(C)|, \quad (10)$$

де $|a|$ – вектор невідомих коефіцієнтів моделі, який необхідно визначити за результатами експерименту.

За формулою (6) були знайдені частоти проведення експерименту у кожній точці плану таким чином, щоб значення дисперсії у тій точці ($C = 0,5\%$ ксантану), в якій потрібно визначити значення T_2 , було мінімальним. У першій точці плану (концентрація ксантану дорівнює нулю) необхідно провести три досліди, у другій точці плану (концентрація ксантану дорівнює 1%) необхідно провести шість дослідів, в останній точці (концентрація ксантану дорівнює 2%) необхідно провести одне вимірювання.

Матриця незалежних функцій F , у кодованих значеннях буде мати наступний вигляд:

$$F^T = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & -1 & 1 & -1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{vmatrix}. \quad (11)$$

У матриці (11) були використані кодовані значення які пов'язані з природними значеннями наступним співвідношенням

$$X_i = \frac{C_i - \frac{C_{i\max} + C_{i\min}}{2}}{\frac{C_{i\max} - C_{i\min}}{2}}, i=1...3. \quad (12)$$

За даними експерименту було одержано наступні значення часу спін-спінової релаксації T_2 при різних концентраціях ксантану. Результати наведено у таблиці.

Таблиця – Обчислене значення часу T_2

Концентрація ксампану С, %	0	1	2
Значення T_2 , с	0,028	0,0213	0,0178

Здобуті значення були використані для знаходження регресійного рівняння другого порядку, що описує залежність значення часу спін-спінової релаксації T_2 від концентрації ксантану.

Рівняння регресії має вигляд

$$T_2(C) = 0.028 - 8,3 \cdot 10^{-3} \cdot C + 1,6 \cdot C^2. \quad (13)$$

Використовуючи регресійне рівняння можна визначити час спін-спінової релаксації тіста для всіх значень концентрацій ксантану в інтервалі від нуля до двох відсотків. За технологічними умовами концентрації ксантану в безбілковому тісті становлять 0,3% та 0,5%, для значення T_2 становлять відповідно 0,026 та 0,024. Дисперсія обумовлена планом експерименту становить 1,563. Якщо використовувати рівномірний план то дисперсія буде становити 2,153. Таким чином точність підвищена у 1,4 рази у порівнянні зі звичайним планом.

Висновки. Розглянуто підхід щодо підвищення точності визначення значення T_2 у разі проведення експериментів для визначення ефектів від малих концентрацій добавок на властивості речовин, що досліджуються. Розглянуто числовий приклад практичного використання даного метода на прикладі визначення впливу малих концентрацій ксантану на властивості білкового тіста. Показано, що шляхом вибору оптимального плану можна підвищити точність визначення величини, що досліджується, в окремій точці, яка викликає найбільший інтерес.

Список літератури

1. Торяник, О. І. Використання комп'ютерних технологій при дослідженні харчових продуктів методом ЯМР [Текст] / О. І. Торяник, О. Г. Дьяков // Нові технології та технічні рішення в харчовій та переробній промисловості: сьогоднішня і перспективи : IX Міжнар. наук.-техн. конф., 17-19 жовтня 2005 р. – К. : НУХТ, 2005. – Ч 2. – С. 50.
2. Торяник, О. І. Підвищення якості оцінки результатів експерименту в ЯМР дослідженнях харчових продуктів [Текст] / О. І. Торяник, О. Г. Дьяков // Прогресивні техніка та технології харчових виробництв ресторанного господарства і торгівлі : зб. наук. праць. – Харків, 2005. – Вип.2. – С. 314–317.
3. Федоров, В. В. Теория оптимального эксперимента (планирование регрессионных экспериментов) [Текст] / В. В. Федоров. – М. : Наука, 1971. – 312 с.
4. Хартман, К. Планирование экспериментов в исследовании технологических процессов [Текст] / К. Хартман, Э. Лецкий, В. Шеффер. – М. : Мир, 1977. – 552 с.

Отримано 30.09.2009. ХДУХТ, Харків.

© О.І. Торяник, О.Г. Дьяков, О.С. Луньова, 2009.

УДК 621.9.:681.3

В.О. Потапов, д-р техн. наук

І.С. Маргинець, магістр

ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНЕ ВИЗНАЧЕННЯ МАСООБМІННИХ ХАРАКТЕРИСТИК ХАРЧОВОЇ СИРОВИНИ

Наведено результати досліджень масообмінних характеристик харчової сировини, отриманих у процесі її сушіння.

Приведены результаты исследований массообменных характеристик пищевого сырья, полученных в процессе его сушки.

The results of the investigations of the mass transfer of food raw materials which were obtained in the process of drying are given in this article.

Постановка проблеми у загальному вигляді. У таких технологічних процесах як сушіння і збереження, вологотермічна обробка, екстракція та низки інших важливу роль відіграють явища масообміну та масоперенесення. Інтенсивність і тривалість цих явищ визначається масообмінними характеристиками харчової сировини: коефіцієнтом молекулярної та конвекційної фільтраційної дифузії вологи. Знання цих характеристик дає можливість проводити науково обгрунтований