

даної полімерної композиції не будуть погіршені декоративні якості тканини.

Висновок

Використання полімерної композиції на основі олігоєфіракрилата дозволяє значно покращити декоративні показники якості тканини з полімерним покриттям, тканина набуває високих показників водостійкості, гриф тканини залишається м'яким, еластичним, не відшаровується від поверхні тканини. При необхідності створення багат шарових матеріалів композиційний склад можна використовувати для нанесення в декілька шарів.

Література

1. Зубов П. И., Сухарева Л. А. Структура и свойства полимерных покрытий. М.: Химия, 1982. – 256 с.

2. Сухарева Л.А., Кипнис Ю.Б. Защитные полимерные покрытия в производстве искусственной кожи. М.: Химия, 1989. – 230 с.
3. Акриловые олигомеры и материалы на их основе / А.А. Берлин, Г.В. Королев, Т.Я. Кефели, Ю.М. Сивергин. – М.: Химия, 1983. – 232 с.
4. Пасечник М.В., Кулиш И.Н., Сарибеков Г.С. Оценка степени сшивания полимеров в композиционных составах для отделки материалов специального назначения // Проблемы легкой и текстильной промышленности Украины. – Херсон: ХНТУ, 2010. - № 1(16). – С 39 – 43.
5. Пасечник М.В., Кулиш И.Н., Сарибеков Г.С. Оценка образования поперечных связей в полимерах для выбора компонентов в композиционных составах // Материалы пятой международной научно-практической конференции «Научные исследования – теория и эксперимент 2009». – Том 8. – Полтава: «ИнтерГрафика». – 2009. – С. 78 – 80.

Використання методів генетичних алгоритмів і нейронних мереж дозволило встановити оптимальні режими ферментативної трансестерифікації жирів. Результати лабораторних і дослідно-промислових випробувань підтвердили адекватність моделювання оптимуму

Ключові слова: трансестерифікація, структуровані ліпіди, генетичні алгоритми, штучні нейронні мережі

Использование методов генетических алгоритмов и нейронных сетей позволило установить оптимальные режимы ферментативной трансэтерификации жиров. Результаты лабораторных и опытно-промышленных испытаний подтвердили адекватность моделирования оптимума

Ключевые слова: трансэтерификация, структурированные липиды, генетические алгоритмы, искусственные нейронные сети

Use of artificial neural network-genetic algorithm technique made it possible to determine optimal process parameters of enzymatic transesterification of fats. The results of laboratory and experimental-industrial tests corroborated optimum modelling adequacy

Key words: transesterification, structured lipids, genetic algorithms, artificial neural networks

УДК 665:664.3

ОПТИМІЗАЦІЯ ПАРАМЕТРІВ ПРОЦЕСУ ОТРИМАННЯ СТРУКТУРОВАНИХ ЛІПІДІВ

П. О. Некрасов

Кандидат технічних наук, доцент
Кафедра технології жирів та продуктів бродіння
Національний технічний університет «Харківський
політехнічний інститут»
вул. Фрунзе, 21, м. Харків, Україна, 61002
Контактний тел.: (0572) 66 04 80
E-mail: nekrasov2007@gmail.com

У сучасному світі організм людини зазнає впливу цілого комплексу негативних факторів, які погіршують нормальне функціонування основних систем жит-

тєдіяльності. З одного боку, екологічна ситуація та збільшення кількості стресів, а з іншого – незбалансоване харчування. У зв'язку з цим виникла необхідність підвищення біологічної та фізіологічної ефективності

їжі. Одним з підходів до вирішення цієї проблеми є створення продуктів функціонального харчування, які не відрізняються за смаком та зовнішнім виглядом від традиційних, поліпшують здоров'я, сприяють зниженню ризику розвитку хвороб та користується повсякденним попитом [1–3]. Перспективним напрямом у цій сфері є структуровані ліпіди (СТЛ), які мають у своєму складі середньоланцюгові ацили, омега-3 і омега-6 поліненасичені кислоти. СТЛ розглядаються як нове покоління жирів, що є нутріцевтіками, тобто компонентами харчових продуктів, які збільшують поживну цінність останніх або роблять їх корисними для здоров'я, включаючи можливість запобігання та лікування хвороб [4–6].

Технологію отримання структурованих ліпідів методом ферментативної трансестерифікації жирів та етилових ефірів розроблено та удосконалюється в Національному технічному університеті «ХПІ» [7].

Раніше проведені нами дослідження з вивчення кінетики і механізму ферментативного трансестерифікації жирів показали, що протікання цього процесу визначається чотирма основними факторами: співвідношенням субстратів – етилових ефірів і триацилгліцеринів (ТАГ), кількістю ферменту, температурою та часом [8]. Встановлено, що надлишок у реакційній суміші етилових ефірів веде до підвищення виходу структурованих ліпідів за рахунок збільшення ступеня перетворення вихідних триацилгліцеринів. В той же час надмірне введення етилових ефірів вище раціонального рівня економічно недоцільно, що обумовлено додатковими витратами на очищення цільового продукту. Крім того, враховуючи відносно високу вартість ферментного препарату, бажано мінімізувати його кількість у реакційній суміші, забезпечуючи при цьому протікання ферментативних процесів з максимальним виходом продуктів реакції. Процес трансестерифікації жирів є ендотермічним, тобто вимагає підведення тепла. Але за межею температури стабільності позитивний ефект підвищення температури внаслідок білкової природи ферменту тією чи іншою мірою компенсується негативним ефектом теплової денатурації. Точка повної компенсації є оптимальною температурою для дії ферменту. Слід зазначити, що оптимум часу протікання процесу обумовлюється, з одного боку, забезпеченням максимально можливого в заданих умовах виходу структурованих ліпідів, з іншого – економічною доцільністю.

Тому метою представленої роботи є встановлення оптимальних параметрів ферментативного трансестерифікації жирів з використанням як критерія оптимізації ступеня перетворення вихідних триацилгліцеринів в двозаміщені структуровані ліпіди (СТЛ²), тобто максимального виходу останніх.

Моделними ефіром середньоланцюгової кислоти та триацилгліцерином, що містить ацили поліненасиченої кислоти, було обрано відповідно етиловий ефір каприлової кислоти та трилінолеїн. Мольне співвідношення першого та другого субстратів (Еф:ТАГ) варіювалось від 2:1 до 10:1. Реакцію каталізували за допомогою ферментного препарату 1,3-специфічної ліпази *Lipozyme RM IM* виробництва фірми «Novozymes» (Данія). Кількість біокаталізатора – від 2% до 20% мас. по відношенню до маси реакційної суміші. Процес проводили при температурах від 30°C до 90°C при по-

стійному перемішуванню під шаром азоту. Час реакцій варіювали від 60 до 360 хвилин. У визначені проміжки часу відбирались проби, ліпідний склад яких аналізувався методом високотемпературної газорідинної хроматографії у відповідності із AOCS Official Method Cd 11b-91 [9]. Використовувався хроматограф Clarus 500 Gas Chromatography (Perkin-Elmer), оснащений полум'яно-іонізаційним детектором (ПІД). Колонка Restek Rtx-65TG, капілярна; її геометричні параметри: довжина 30 м, 0,25 мм внутрішній діаметр, 0,2 мкм товщина нерухомої фази. Стаціонарна фаза Crossbond 35% диметил – 65% дифенілполісилоксан. Температурна програма 80°C (0 хв.), 10 °C/хв. до 320°C (0 хв.), 5°C/хв. до 360°C (15 хв.) Температура інжектора – 320°C, температура детектора – 370°C. Газ-носієй – гелій. Швидкість газу-носія 3 см³/хв. Спліт 1 : 50. Витрата повітря для ПІД – 450 см³/хв., витрата водню для ПІД – 45 см³/хв. Обсяг проби, що вводився, – 0,5 мкл.

Отримані експериментальні дані (середнє значення двох паралельних досліджень) використовувались в якості вихідних для моделювання та оптимізації параметрів процесу ферментативної трансестерифікації жирів методом комбінування апаратів нейронних мереж і генетичних алгоритмів (рис. 1).



Рис. 1. Схема сумісного використання апаратів штучних нейронних мереж і генетичних алгоритмів

Вказаний метод є одним з найбільш сучасних і найкращих математичних апаратів оптимізації складних багатопараметричних функціональних залежностей, до яких належить модель процесу ферментативної трансестерифікації жирів.

У наведеній схемі (рис. 1) штучну нейронну мережу нами використано для побудови цільової функції оптимізації шляхом апроксимації нею наявних числових даних про досліджуваний процес.

Штучні нейронні мережі (ШНМ) являють собою систему з'єднаних і взаємодіючих простих процесорів (штучних нейронів). Значені мережі не програмуються у звичному змісті цього слова, вони навчаються (тренуються). Технічно навчання полягає в знаход-

Таблиця 1

женні коефіцієнтів зв'язків між нейронами. У процесі навчання нейронна мережа здатна виявляти складні залежності між вхідними даними й вихідними, а також виконувати узагальнення. Це означає, що у випадку успішного навчання мережа зможе повернути правильний результат на підставі даних, які були відсутні в навчальній вибірці [10].

Генетичні алгоритми – це процедури пошуку, засновані на механізмах природного добору і спадкування. У них використовується еволюційний принцип виживання найбільш пристосованих особин. Вказані алгоритми відрізняються від традиційних методів оптимізації декількома базовими елементами. Зокрема: кодування параметрів, операції на популяціях, використання мінімуму інформації про задачу та рандомізація операцій. Усі перераховані властивості приводять у результаті до стійкості генетичних алгоритмів і до їхньої переваги над іншими широко застосовуваними технологіями оптимізації [11].

Програмну реалізацію методу комбінування апаратів нейронних мереж і генетичних алгоритмів була виконано у середовищі MATLAB 7 (The Mathworks, Inc.).

Попереднє моделювання процесу ферментативної трансетерифікації жирів полягало у визначенні структури мережі, яке виконувалося шляхом проведення ряду обчислювальних експериментів з різними параметрами топології – кількість шарів, кількість нейронів у шарі, активаційна функція та інші. У результаті для апроксимації експериментальних даних нами була побудована тришарова мережа прямої передачі сигналу з 5 і 9 нейронами в першому й другому (схованих) шарах відповідно, і 1 нейроном у третьому (вихідному) шарі. Структура розробленої мережі представлена на рис. 2.

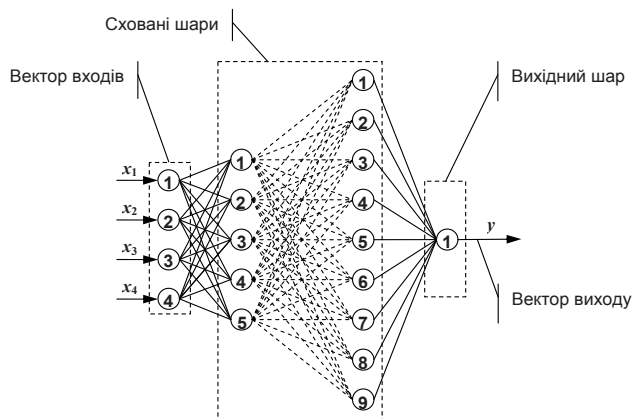


Рис. 2. Схема тришарової мережі прямої передачі сигналу

У якості функції активації схованих шарів і вихідного шару була обрана гіперболічна тангенціальна функція. Як функцію оцінки якості навчання був використаний комбінований критерій якості. У якості алгоритму адаптації та навчання – алгоритм Левенберга-Макрквадта. Кількість епох навчання – 100. Точність – 0,0001.

Дані раніше проведених експериментів по ферментативній трансетерифікації жирів використовувалися для тренування та верифікації штучної нейронної мережі (табл. 1 і 2).

Фрагмент навчальної вибірки

| Еф: ТАГ | Кількість ферменту, % мас. | Температура, °С | Час, хв. | Ступінь перетворення ТАГ в СТЛ, % | | Абсолютне відхилення, % |
|---------|----------------------------|-----------------|----------|-----------------------------------|--------|-------------------------|
| | | | | Експеримент | Модель | |
| x_1 | x_2 | x_3 | x_4 | y | | |
| 2 | 6 | 70 | 180 | 30,26 | 29,80 | 1,5 |
| 2 | 10 | 70 | 120 | 28,30 | 28,19 | 0,4 |
| 2 | 10 | 70 | 240 | 48,30 | 47,06 | 2,6 |
| 3 | 2 | 60 | 210 | 14,57 | 15,09 | 3,5 |
| 4 | 4 | 40 | 120 | 7,30 | 7,37 | 0,9 |
| 4 | 4 | 60 | 120 | 21,80 | 21,40 | 1,8 |
| 4 | 8 | 70 | 300 | 83,24 | 80,28 | 3,6 |
| 5 | 15 | 50 | 120 | 33,80 | 34,14 | 1,0 |
| 5 | 15 | 90 | 120 | 56,60 | 53,88 | 4,8 |
| 6 | 4 | 60 | 120 | 30,51 | 30,18 | 1,1 |
| 6 | 8 | 70 | 300 | 85,27 | 86,41 | 1,3 |
| 8 | 2 | 50 | 180 | 16,30 | 15,97 | 2,0 |
| 8 | 2 | 70 | 180 | 26,20 | 26,13 | 0,3 |
| 8 | 5 | 70 | 180 | 42,80 | 43,83 | 2,4 |
| 8 | 10 | 30 | 180 | 22,70 | 21,98 | 3,2 |
| 8 | 10 | 60 | 180 | 60,04 | 61,94 | 3,2 |
| 8 | 10 | 70 | 60 | 15,07 | 15,33 | 1,7 |
| 8 | 10 | 70 | 120 | 51,42 | 50,50 | 1,8 |
| 8 | 10 | 70 | 180 | 77,51 | 74,70 | 3,6 |
| 8 | 10 | 70 | 240 | 88,90 | 86,84 | 2,3 |
| 8 | 10 | 90 | 180 | 63,12 | 63,68 | 0,9 |
| 8 | 20 | 70 | 180 | 77,60 | 78,87 | 1,6 |
| 10 | 2 | 70 | 210 | 26,08 | 25,51 | 2,2 |
| 10 | 10 | 50 | 270 | 71,20 | 70,34 | 1,2 |
| 10 | 10 | 70 | 30 | 10,20 | 9,95 | 2,5 |
| 10 | 10 | 70 | 90 | 33,20 | 33,68 | 1,5 |
| 10 | 10 | 70 | 150 | 67,50 | 68,15 | 1,0 |
| 10 | 10 | 70 | 210 | 85,35 | 88,27 | 3,4 |
| 10 | 10 | 70 | 240 | 89,64 | 87,22 | 2,7 |

Для більш якісної роботи алгоритмів тренування нейронної мережі вихідні дані масштабувалися в діапазон [-1;1].

Обсяг навчальної та верифікаційної вибірок дорівнював відповідно 90 та 20 вимірювань.

Дані, наведені в табл. 1 і 2, свідчать про адекватність нейронної мережі експериментальним даним. Середнє значення абсолютного відхилення модельних даних від експериментальних у навчальній вибірці склало 2,2%, а у верифікаційній – 2,8%.

Розроблена в результаті конструювання, навчання і верифікації багатшарова штучна нейронна мережа далі використовувалася для обчислення функції пристосованості при оптимізації ферментативної трансетерифікації методом генетичних алгоритмів. Для оптимізації процесу були задані наступні значення параметрів апарата генетичних алгоритмів: обсяг вибірки – 200, кількість елітних нащадків – 20, кількість поколінь – 50.

У якості функцій мутації та схрещування використовувалися відповідно адаптивна і евристична функції.

Таблиця 2

Верифікаційна вибірка

| Еф: ТАГ | Кіль- кість фер- менту, % мас. | Тем- пера- тура, °C | Час, хв. | Ступінь перетво- рення ТАГ в СТЛГ, % | | Абсо- лютне відхи- лення, % |
|----------------|--|------------------------------|----------------|--|--------|--------------------------------------|
| | | | | Експе- римент | Модель | |
| x ₁ | x ₂ | x ₃ | x ₄ | y | | |
| 2 | 10 | 70 | 60 | 8,20 | 7,70 | 6,1 |
| 2 | 10 | 70 | 180 | 37,40 | 37,31 | 0,2 |
| 2 | 10 | 70 | 360 | 50,00 | 49,58 | 0,8 |
| 3 | 10 | 60 | 120 | 15,39 | 15,15 | 1,6 |
| 4 | 10 | 50 | 240 | 57,90 | 57,84 | 0,1 |
| 5 | 15 | 70 | 120 | 61,00 | 59,84 | 1,9 |
| 6 | 4 | 40 | 120 | 7,17 | 6,81 | 5,0 |
| 6 | 10 | 50 | 240 | 63,15 | 64,30 | 1,8 |
| 8 | 4 | 50 | 180 | 18,45 | 18,18 | 1,4 |
| 8 | 6 | 50 | 180 | 20,92 | 21,49 | 2,7 |
| 8 | 10 | 70 | 30 | 9,11 | 8,74 | 4,0 |
| 8 | 10 | 70 | 90 | 32,97 | 32,23 | 2,2 |
| 8 | 10 | 70 | 150 | 66,65 | 62,92 | 5,6 |
| 8 | 10 | 70 | 210 | 84,57 | 89,49 | 5,8 |
| 8 | 15 | 70 | 180 | 77,40 | 73,97 | 4,4 |
| 10 | 8 | 70 | 210 | 82,44 | 86,92 | 5,4 |
| 10 | 10 | 60 | 270 | 80,27 | 82,42 | 2,7 |
| 10 | 10 | 70 | 60 | 15,26 | 15,34 | 0,6 |
| 10 | 10 | 70 | 120 | 52,00 | 53,30 | 2,5 |
| 10 | 10 | 70 | 180 | 78,20 | 78,42 | 0,3 |

На рис. 3 представлені найкращі (максимальні) значення функції пристосованості на відповідному поколінні функціонування генетичних алгоритмів.

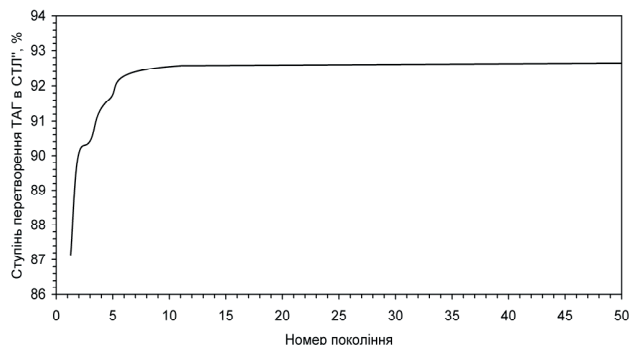


Рис. 3. Процес оптимізації ферментативної трансестерифікації жирів комбінуванням методів генетичних алгоритмів і нейронних мереж

Починаючи з 11 покоління (рис. 3) спостерігається наявність сталою значення функції відклику, що відповідає встановленню її оптимуму – 92,7% ступеня перетворення триацилгліцеринів в двозаміщені структуровані ліпіди. Цей результат досягається при наступних розрахункових значеннях вихідних параметрів: співвідношенням триацилгліцеринів і етилових ефірів – 1:8, кількість ферменту – 10% мас. по відношенню до маси реакційної суміші, температура – 70°C, час реакції – 300 хвилин.

Встановлені оптимальні параметри ферментативної трансестерифікації жирів були апробовані в умовах дослідно-промислового виробництва структурованих ліпідів на ВАТ «Іллічівський олійножировий комбінат». Згідно результатів випробовувань ступінь перетворення вихідних триацилгліцеринів в двозаміщені структуровані ліпіди складав $92 \pm 0,8\%$ мас., що добре корелюється із даними моделювання.

Література

- Gibson G.R. Functional foods: concept to product / G. R. Gibson, C.M. Williams. – CRC Press, Woodhead Publishing Limited, Cambridge, England, 2000. – 356 p.
- Shetty K. Functional food and biotechnology / K. Shetty, G. Paliyath, A.L. Pometto, R.E. Levin. – CRC Press, Taylor & Francis Group, New York, 2007. – 650 p.
- Bagchi D. Biotechnology in functional foods and nutraceuticals / D. Bagchi, F.C. Lau, D.K. Ghosh. – CRC Press, Taylor & Francis Group, New York, 2010. – 591 p.
- Akoh C.C. Food lipids: chemistry, nutrition, and biotechnology, 3rd ed. / Casimir C. Akoh and David B. Min. – CRC Press, Taylor & Francis Group, New York, 2008. – 914 p.
- Mu H. The metabolism of structured triacylglycerols / H. Mu, T. Porsgaard // Progress in Lipid Research. – 2005. – Vol. 44, №6. – P. 430–448.
- Gunstone F.D. The lipid handbook, 3rd ed. / F. D. Gunstone, J. L. Harwood, A. J. Dijkstra, – CRC Press, Taylor & Francis Group, New York, 2007. – 719 p.
- Некрасов П.О. Ферментативний метод отримання дієтичних структурованих ліпідів / П.О. Некрасов, О.В. Подлісна, Ю.М. Плахотна, Г.Є. Поліщук // Наукові праці НУХТ. – Київ: НУХТ, 2009. – №29. – С. 26–29.
- Некрасов П.О. Дослідження кінетики процесу отримання структурованих ліпідів методом ферментативної трансестерифікації жирів / П.О. Некрасов // Інтегровані технології та енергозбереження. – Харків: НТУ «ХПІ», 2010. – №2. – С. 37–43.
- AOCS. In: Firestone D, editor. Official methods and recommended practices of the American Oil Chemist's Society. 5th ed. Champaign, IL: American Oil Chemists' Society (AOCS), 2003.
- Хайкин С. Нейронные сети: полный курс, 2-е издание / С. Хайкин. – М.: Издательский дом «Вильямс», 2006. – 1104 с.
- Рутковская Д. Нейронные сети, генетические алгоритмы и нечеткие системы / Д. Рутковская, М. Пилинский, Л. Рутковский; пер. с польск. И.Д. Рудинского. – М.: Горячая линия-Телеком, 2006. – 452 с.