УДК 330.43:663.4

СЄДИХ О.Л., старший викладач, МАКОВЕЦЬКА С.В., асистент, ДЕРІЙ О.І., аспірант
Національний університет харчових технологій, м. Київ

ПРО МЕТОДИ НАБЛИЖЕННЯ ДОСЛІДНИХ ДАНИХ ЗАСОБАМИ ПАКЕТУ MATHCAD НА ПРИКЛАДІ ДИНАМІКИ ВМІСТУ ДІАЦЕТИЛУ ПРИ ЗБРОДЖУВАННІ СУСЛА

Стаття присвячена методиці розв'язання задач обробки експериментальних даних методом найменших квадратів з використанням математичного пакету MathCAD на основі даних динаміки вмісту діацетилу при зброджуванні сусла.

Ключеві слова: експериментальні дані, математичний пакет MathCAD, методи математичного моделювання, метод найменших квадратів.

This article is devoted the method of decision of tasks of processing of experimental data a least-squares method with the use of mathematical package of MATHCAD on the basis of information of dynamics of content of diacetilu at zbrodzhuvanni of susla.

Keywords: experimental data, mathematical package of MathCAD, methods of mathematical design, least-squares method.

У процесі вивчення різних питань природознавства, економіки, техніки, соціології, педагогіки доводиться на основі великої кількості дослідних даних відокремити суттєві фактори, які впливають на досліджуваний об'єкт, а також встановлювати форму зв'язку між різними величинами (ознаками).

Методи математичного моделювання дозволяють проводити прогнозування властивостей і оптимізацію показників технічних об'єктів з меншими витратами, ніж при повторному проведенні експерименту. На жаль, в хімічній і харчовій промисловості кількість математичних моделей дуже мала. В результаті при обробці експериментальних даних виникає необхідність побудови математичних моделей різними доступними способами. Одним з них є метод найменших квадратів. При використанні цього методу завданням дослідника є побудова і аналіз математичної моделі. В результаті розроблена емпірична математична модель може бути використана для оцінки механізмів процесів, що протікають усередині об'єкта.

Мета цієї статті полягає у пропонуванні методики розв'язання задач обробки експериментальних даних методом найменших квадратів з використанням пакету Mathcad для автоматизації інженерних, технологічних та економічних розрахунків.

В ході наукових досліджень поряд з фізичними моделями все більшого поширення набувають математичні моделі, в якості яких часто використовуються розраховані за результатами експерименту рівняння регресії. Статистичні математичні моделі отримують, описуючи залежності вихідних параметрів Y (властивостей, відгуків) об'єкта від зміни вхідних параметрів X (факторів) за допомогою різних функцій:

$$y = f(x_1, x_2, ..., x_n) \quad (1)$$

Однією із основних вимог до математичної моделі об'єкта є точність опису (передбачення) поведінки реального об'єкта при зміні факторів.

Об'єкт досліджень розглядається в якості системи «чорний ящик» (рис. 1).

Суть даного принципу полягає у вивченні залежності відгуку системи Y ($y_1, y_2, \ldots, y_m$) на зміну вхідних вимірюваних і регульованих параметрів X ($x_1, x_2, \ldots, x_n$) при дії випадкових чинників W ($w_1, w_2, \ldots, w_k$) («шум» об'єкта). Комплекс параметрів X називають основним, він визначає умови експерименту. Вихідними параметрами Y можуть бути будь-які технологічні або технічні показники досліджуваного процесу. В якості випадкових параметрів W розглядаються параметри, які з різних причин важко або немає необхідності враховувати. Випадковим вважатиметься будь-який чинник, що не увійшов до основного комплексу вхідних параметрів.

Постановка задачі. Нехай в результаті досліджень була отримана таблиця деякої функціональної залежності:

Таблиця 1

Таблиця деякої функціональної залежності

x	x_1	x_2	…	…	x_n
y	y_1	y_2	…	…	y_n

Потрібно знайти аналітичний вигляд функції, яка б найкраще відображала таблицю дослідних даних. Тому шукають таку функцію $y = F(x)$, значення якої при $x = x_i$ досить близькі до табличних значень y_i $(i = 1,2,...,n)$. Функцію $y = F(x)$ називають емпіричною або рівнянням регресії y на x. Емпіричні функції мають велике практичне значення, вдало підібрана емпірична функція дає змогу не тільки апроксимувати сукупність експериментальних даних, «згладжуючи» значення величин y, а й екстраполювати знайдену залежність на інші проміжки значень x. Під апроксимацією розуміють заміну деякої вихідної функції f(x) наближеною функцією $F(x)$, при чому в заданій області існування функцій відхилення між цими функціями повинні бути найменшими. Функцію $F(x)$ називають апроксимуючою функцією.

Емпірична функція будується в два етапи:

1. Зображуємо графічно значення вихідної функції f(x). Проводимо криву якомога ближче до сукупності точок функції f(x) та візуально визначаємо графіком, якою із відомих нам функцій є ця крива.

2. Визначаємо найкращі параметри вибраної нами емпіричної функції $y = F(x, a_1, a_2, ..., a_m)$ методом найменших квадратів.

Суть методу найменших квадратів полягає у визначенні значень параметрів $a_1, a_2, ..., a_m$ таким чином, щоб сума квадратів відхилень табличної та емпіричної функцій була мінімальною.

$$S = \sum_{i=1}^{n} (y_i - F(x_i, a_1, a_2, ..., a_m))^2 \to \min \quad (2)$$

Відповідно з теорією необхідною умовою мінімуму функції є рівність нулю частинних похідних функції.

$$\begin{cases} \frac{\partial S}{\partial a_1} = 0 \\ \frac{\partial S}{\partial a_2} = 0 \\ .... \\ \frac{\partial S}{\partial a_n} = 0 \end{cases} \quad (3)$$

Розв'язавши систему рівнянь (3), отримаємо значення параметрів $a_1, a_2, ..., a_m$, які задовольняють умові мінімуму.

Визначення параметрів лінійної емпіричної залежності.

Нехай між вихідними експериментальними даними (x_i, y_i), $i = \overline{1, n}$ існує лінійна залежність $y = ax + b$. Функція суми квадратів відхилень має вигляд:

$$S = \sum_{i=1}^{n}(y_i - ax_i - b)^2 \quad (4)$$

Система рівнянь для визначення параметрів a, b буде мати вигляд:

$$\begin{cases} \frac{\partial S}{\partial a} = \sum_{i=1}^{n} 2(y_i - ax_i - b)(-x_i) = 0 \\ \frac{\partial S}{\partial b} = \sum_{i=1}^{n} 2(y_i - ax_i - b)(-1) = 0 \end{cases} \rightarrow$$

$$\begin{cases} -\sum_{i=1}^{n} x_i y_i + \sum_{i=1}^{n} a x_i^2 + \sum_{i=1}^{n} b x_i = 0 \\ -\sum_{i=1}^{n} y_i + \sum_{i=1}^{n} a x_i + \sum_{i=1}^{n} b = 0 \end{cases} \rightarrow$$

$$\begin{cases} a\sum_{i=1}^{n} x_i^2 + \sum_{i=1}^{n} b x_i = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i \\ a\sum_{i=1}^{n} x_i + nb = \sum_{i=1}^{n} y_i \end{cases} \quad (5)$$

Звідси можна вивести, що:

$$a = \frac{n\sum_{i=1}^{n} x_i y_i - \sum_{i=1}^{n} x_i \sum_{i=1}^{n} y_i}{n\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - (\sum_{i=1}^{n} x_i)^2} \qquad b = \frac{\sum_{i=1}^{n} y_i - a\sum_{i=1}^{n} x_i}{n} \quad (6)$$

Оцінка похибки апроксимуючої функції здійснюється за допомогою середньоквадратичного відхилення:

$$\delta = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n}(Y_i - y_i)^2}{n-1}} \quad (7)$$

де Y_i – розрахункові значення за емпіричною формулою;

y_i – таблично задані значення функції;

n – кількість точок.

На жаль, лінійна модель не завжди щонайкраще підходить до даного розподілу. Найчастіше на практиці зустрічаються такі емпіричні залежності: степенева, показникові, експоненціальна тощо.

Ці види нелінійних емпіричних залежностей зводяться до лінійних. При цьому використовують так званий метод "вирівнювання". Наприклад, нехай за емпіричну функцію була вибрана функція $y = bx^a$. Ця функція нелінійна. Приведення до лінійної здійснюється у два етапи. На першому етапі проводиться логарифмування лівої та правої частин функції. В результаті отримуємо $\ln y = \ln(bx^a) \rightarrow \ln y = \ln(b) + a\ln(x)$. При заміні $Y = \ln y$; $B = \ln b$; $X = \ln x$ отримуємо лінійну функцію $Y = B + aX$.

Дуже зручними при виборі емпіричних залежностей можуть бути наведені в табл. 2 функції та їх лінійні аналоги.

В тому випадку, коли емпірична функція має вигляд параболи $y = ax^2 + bx + c$, функція суми квадратів відхилень має вигляд:

$$S = \sum_{i=1}^{n}(y_i - ax_i^2 - bx_i - c)^2 \quad (8)$$

Умови мінімуму квадратичного критерію мають вигляд:

Таблиця 2

Функції та їх лінійні аналоги

Вигляд емпіричної функції	Лінійний аналог	Значення параметрів
$y = b \cdot x^a$	$Y = B + aX$	$Y = \ln y$; $B = \ln b$; $X = \ln x$
$y = b \cdot a^x$	$Y = B + Ax$	$Y = \ln y$; $A = \ln a$; $B = \ln b$
$y = b \cdot e^{ax}$	$Y = B + ax$	$Y = \ln y$; $B = \ln b$
$y = a\ln x + b$	$y = aX + b$	$X = \ln x$

$$\begin{cases} \frac{\partial S}{\partial a} = 2\sum_{i=1}^{n}(y_i - ax_i^2 - bx_i - c)x_i^2 = 0 \\ \frac{\partial S}{\partial b} = 2\sum_{i=1}^{n}(y_i - ax_i^2 - bx_i - c)x_i = 0 \\ \frac{\partial S}{\partial c} = 2\sum_{i=1}^{n}(y_i - ax_i^2 - bx_i - c) = 0 \end{cases}$$

Після перетворень система рівнянь набуде вигляд:

$$\begin{cases} a\sum_{i=1}^{n} x_i^4 + b\sum_{i=1}^{n} x_i^3 + c\sum_{i=1}^{n} x_i^2 = \sum_{i=1}^{n} x_i^2 y_i \\ a\sum_{i=1}^{n} x_i^3 + b\sum_{i=1}^{n} x_i^2 + c\sum_{i=1}^{n} x_i = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i \\ a\sum_{i=1}^{n} x_i^2 + b\sum_{i=1}^{n} x_i + cn = \sum_{i=1}^{n} y_i \end{cases} \quad (9)$$

Отримати розв'язок системи рівнянь з трьома невідомими a, b, c можна, використавши функцію lsolve в MathCAD.

Розглянемо конкретну задачу. Потрібно побудувати математичну модель динаміки вмісту діацетилу при зброджуванні сусла із заміною солоду патокою мальтозною (ПМ) та глюкозно-фруктозними сиропами (ГФС).

Таблиця 3

Динаміка вмісту діацетилу при зброджуванні сусла із заміною солоду патокою мальтозною (ПМ) та глюкозно-фруктозними сиропами (ГФС)

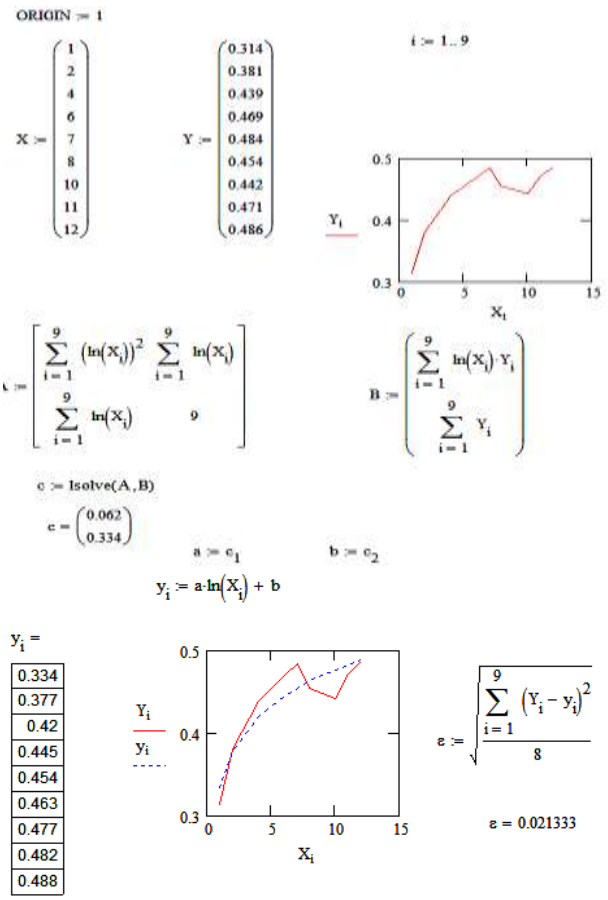
№ п/п	Зразок сусла	Частка заміни солоду, %	Вміст діацетилу, мг/дм^3, на добу зброджування									Середнє значення
			1	2	4	6	7	8	10	11	12	
1	Солодове	0	0,40	0,65	0,51	0,40	0,29	0,22	0,15	0,11	0,10	0,314
2	З ПМ: ИМ 55	20	0,39	0,63	0,59	0,49	0,44	0,26	0,24	0,21	0,18	0,381
3	ИМ 55	25	0,37	0,67	0,61	0,55	0,49	0,5	0,28	0,27	0,21	0,439
4	ИМ 70	20	0,36	0,61	0,69	0,65	0,59	0,52	0,3	0,27	0,23	0,469
5	ИМ 70	25	0,31	0,63	0,68	0,63	0,61	0,56	0,38	0,31	0,25	0,484
6	З ГФС: 10М	20	0,35	0,42	0,61	0,58	0,54	0,52	0,41	0,36	0,3	0,454
7	10М	25	0,29	0,31	0,65	0,61	0,52	0,49	0,42	0,38	0,31	0,442
8	42	20	0,29	0,37	0,64	0,6	0,58	0,53	0,45	0,41	0,37	0,471
9	42	25	0,27	0,29	0,71	0,66	0,61	0,6	0,48	0,38	0,37	0,486

Створюємо остаточну таблицю експериментальних даних:

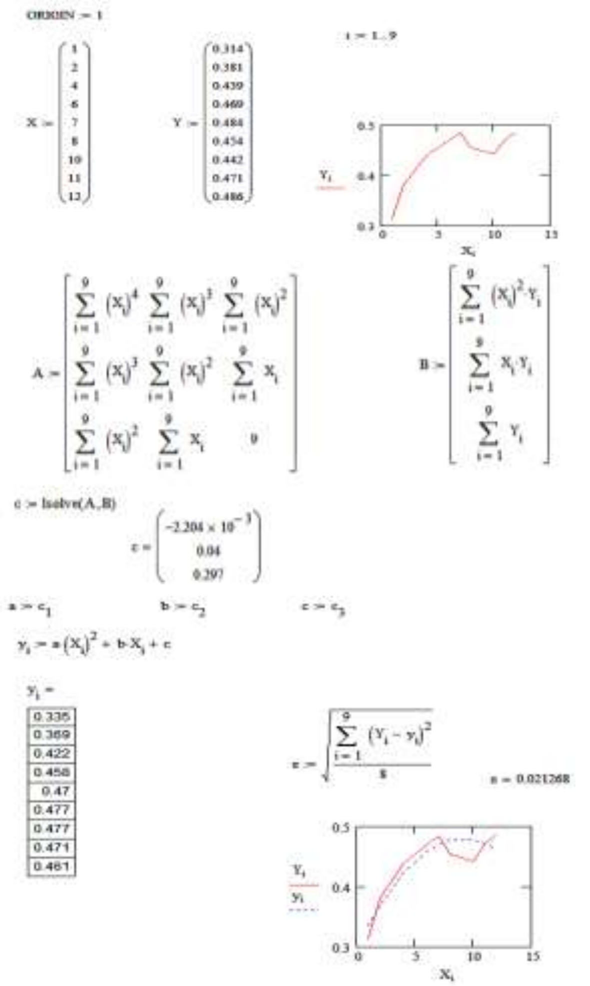
x	1	2	4	6	7	8	10	11	12
y	0,314	0,381	0,439	0,469	0,484	0,454	0,442	0,471	0,486

Розглянемо розв'язок поставленої задачі засобами MathCAD.

В якості математичної моделі виберемо логарифмічну функцію.



Тепер виконаємо розрахунки для квадратичної функції:



Порівнявши похибку логарифмічної та квадратичної функцій можна зробити висновок, що більш точно описує динаміку вмісту діацетилу при зброджуванні сусла із заміною солоду патокою мальтозною (ПМ) та глюкозно-фруктозними сиропами (ГФС) квадратична модель.

За допомогою метода найменших квадратів можна обробляти будь-які експериментальні дані. Цей метод дозволяє отримувати коефіцієнти наближеної регресії, працює з нелінійними моделями, мінімізує похибку. Але найкращі результати при використанні метода найменших квадратів досягаються тільки для нормального статистичного розподілу.

Поступила 08.2012

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Ахназарова, С.Л. Методы оптимизации эксперимента химической технологи [Текст] / С.Л. Ахназарова, В.В. Кафаров // Учеб. пособие для хим.-технол. спец. вузов. – 2- е изд., перераб. и доп. – М.: Высш. шк., 1985. – 327 с.
2. Львовский, Е.Н. Статистические методы построения эмпирических формул [Текст]: Учеб. пособие для втузов – 2-е изд., перераб. и доп. – М.: Высш. школа, 1988. – 239 с.
3. Гурский, Д.А. Вычисления в MathCAD 12 [Текст] / Д.А. Гурский, Е.С. Турбина – СПб.: Питер, 2006.
4. Литвин, О.М. Практикум з курсів «Математичні методи та моделі в розрахунках на ПЕОМ» і «Чисельні методи» (із застосуванням системи MATHCAD) [Текст] / О.М. Литвин, Л.С. Лобанова // Навчальний посібник. − Харків: УІПА, 2006. – 153 с.
5. Покращення якості пива з використанням замінників солоду [Текст] / А.Є. Мелетьєв, О.І. Дерій, С.І. Літвінчук, Л.В. Проценко, Є.С. Богданов // Наукові праці національного університету харчових технологій. – №37, 38. – К.: НУХТ, 2011. – С. 38-40.

УДК 664.664.4

ХЛЄБУТІНА М.С., магістр, ІВАНОВА В.Д., канд. біол. наук, доцент, ГОЙКО І.Ю., канд. техн. наук
Національний університет харчових технологій, м. Київ

РОЗРОБЛЕННЯ СКЛАДУ КЕКСУ ПІДВИЩЕНОЇ ХАРЧОВОЇ ЦІННОСТІ

Досліджено можливість використання порошу з насіння люцерни для розширення асортименту кексів та підвищення їх харчової цінності. Визначено амінокислотний склад насіння люцерни, оцінено органолептичні властивості порошку з насіння. Наведено результати досліджень властивостей тіста та готових кексів із додаванням різної кількості порошку з насіння люцерни. Визначено фізико-хімічні, структурно-механічні, органолептичні, мікробіологічні показники експериментальних зразків кексів, розраховано їх біологічну та харчову цінність. Визначено оптимальне дозування порошку з насіння люцерни. Встановлено вплив порошку з насіння люцерни на якість, терміни зберігання, харчову та біологічну цінність кексів. Показано, що готовий виріб має збільшену харчову цінність.

Ключові слова: функціональні продукти, кекс, насіння люцерни, біологічна цінність, харчова цінність

A possibility of the usage of the alfalfa seeds powder is for increase the assortment of the cupcakes and to improve their nutritional value were discussed. Amino acid composition of the raw was determined, organoleptic properties of the seeds powder were assessed. The results of the investigation of the properties of the dough and the cupcakes with the addition of different amounts of the alfalfa seeds powder were shown. Physico-chemical, structural, mechanical, organoleptic and microbiological parameters of the experimental samples of the cakes were determined. Nutritional and biological values of a new kind of cupcake were calculated. It was shown that the product has increased nutritional value. The optimum dosage of the alfalfa seeds powder was determined. The influence of the alfalfa seeds powder on the quality, shelf life, nutritional and biological value of cupcakes was discussed.

Keywords: functional foods, cupcake, alfalfa seed, biological value, nutritional value

Проблема забезпечення населення продовольством не втрачає актуальності у всьому світі. Для її вирішення у розвинених країнах використовують різні стратегії, спрямовані на створення ринку різноманітних і якісних продуктів та (або) на розроблення заходів для зміни структури харчування населення.

Хлібобулочні та кондитерські вироби традиційно користуються великим попитом у населення. Проте вони є висококалорійними продуктами з порівняно низьким вмістом харчових волокон, вітамінів, поліненасичених жирних кислот тощо, а їх надмірне споживання порушує збалансованість раціону харчування . Саме тому вироби цієї групи є перспективними базовими об’єктами для створення спеціальних продуктів оздоровчого призначення, збагачених необхідними для організму людини речовинами.

При розробленні рецептур борошняних кондитерських виробів функціонального призначення основну увагу слід приділяти зниженню їхньої енергетичної цінності та збільшенню вмісту в них таких біологічно активних речовин (БАР), як харчові волокна, білки, вітаміни, мінеральні речовини [1]. Проте, необхідність забезпечення продуктам цієї групи характерних органолептичних властивостей (зокрема, структури та форми) накладає обмеження на введення у їх рецептуру нових складових [2]. Отже, спектр функціональних добавок до борошняних кондитерських виробів звужується до кола інгредієнтів рослинного походження [3]. Останні можуть бути введені у вигляді порошків до складу тіста чи у вигляді наповнювачів в начинку.

Метою даної роботи було обґрунтування та розроблення композиції інгредієнтів для виготовлення кексу підвищеної харчової та біологічної цінності та дослідження якісних показників тіста та готових виробів.

Як функціональний інгредієнт в експериментах використовували насіння люцерни (зразки сировини збирали у Київській області, висушували, подрібнювали, одержували порошки). Тісто для кексів готували в лабораторних умовах. Порошок із насіння люцерни вносили замість борошна пшеничного (його кількість виражали як % від масової частки пшеничного борошна) і додавали безпосередньо під час замісу тіста. Як контроль було обрано кекс «Янтарний», приготовлений традиційним способом з використанням карбонату амонію [4-5]. Як сировину для виготовлення контрольних зразків кексів використовували борошно пшеничне вищого ґатунку, цукор-пісок, сухе знежирене молоко, олію рослинну, меланж.

Показники якості сировини, напівфабрикатів і готових виробів визначали за методиками, регламентованими стандартами. Амінокислотний склад порошку із насіння люцерни досліджували на автоматичному аналізаторі амінокислот Т339 виробництва Чехії за допомогою методу іонообмінної рідинно-колонкової хроматографії [6]. Ступінь свіжості готових виробів оцінювали за зміною деформаційних характеристик їх м'якушки, які визначали за допомогою пенетрометра АП 4/1. Визначення реологічних властивостей тіста проводили на віскозиметрі Реотест-2 згідно рекомендацій [7]. Кожну серію всіх дослідів виконували у трикратній повторності. Для оптимізації складу та комплексного поліпшення якості виробів використовували методи експериментально-статистичного моделювання. Статистичне оброблення результатів досліджень, побудову графіків і діаграм