

Математичне моделювання процесу водопоглинання в проростаючому зерні з використанням активованих водних розчинів

О.А. Півоваров, доктор технічних наук

О.С. Ковальова, асистент

Г.П. Тищенко, кандидат технічних наук

Встановлено, що використання водних розчинів, активованих нерівноважною плазмою, прискорює водопоглинення на початкових етапах ведення процесу пророщування зерна. Математичне моделювання адсорбційних процесів у зерновому матеріалі під дією активованих розчинів дозволяє продемонструвати закономірність та сталість процесів у проростаючому зерні.

Математичне моделювання біологічних процесів у зерновому матеріалі дозволяє скоротити кількість дослідів та удосконалити прогнозування технологічного результату. Поглинання води зерном є важливим етапом процесу солодощення. Чим швидше відбудеться поглинання колоїдами зерна вегетаційної вологи, тим швидше та інтенсивніше буде протікати процес пророщування. Для того, щоб у відведений термін у зерновому матеріалі був досягнутий бажаний обмін речовин, потрібен рівень його вологості 44–48 і навіть 50 %. Підтримка такого рівня протягом усього часу пророщування має суттєве значення для розвитку процесів життєдіяльності зерна [1, 2]. Оскільки процес насичення вологою зерна є основним у солодоростильній галузі, то його моделюванням можна якісно покращити та вдосконалити технологічний процес.

Створення математичної моделі адсорбційних процесів є необхідною складовою солодового виробництва, це дозволяє прогнозувати перебіг технологічних операцій та регламентувати технологічний процес.

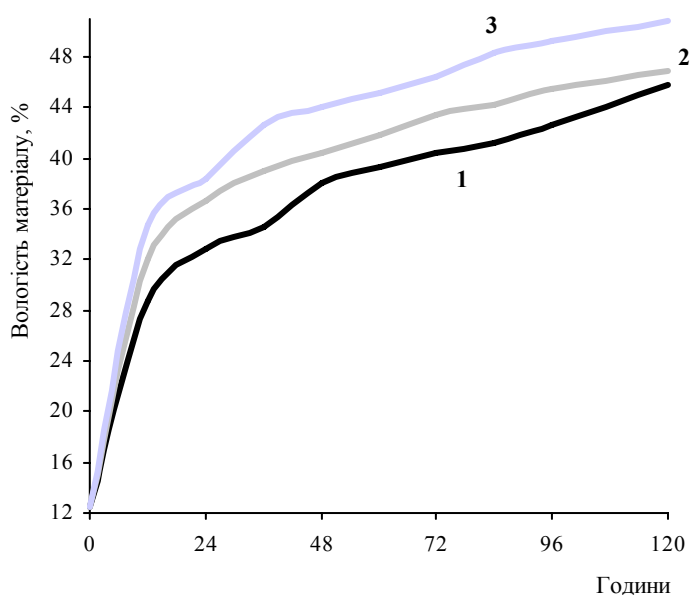
Метою досліджень було вивчення процесу поглинання зерном вологи з використанням плазмохімічно активованих водних розчинів, а також математичне моделювання адсорбційних процесів у зерновому матеріалі.

Зернову масу замочували в активованих водних розчинах, отриманих шляхом обробки водопровідної води в плазмохімічному реакторі [3, 4]. Обробку води проводили на експериментальній плазмохімічній установці. Основною характеристикою отриманих розчинів був час активації, який варіював у межах 5–90 хв, а також вміст пероксидів в активованих розчинах. Температура води в усіх дослідах не перевищувала 17–18 °С. Як основний об'єкт досліджень був використаний пивоварний ячмінь сорту Скарлетт.

Вологість на перших стадіях пророщування визначали кожні 12 год для зернової маси та кожні 10 год для зерна різних фракцій (табл. 1, рисунок).

1. Зміна вологості зернового матеріалу залежно від товщини зерна ячменю, %

Дослід	Час, год									
	0	10	20	30	40	50	60	70	80	90
Товщина зерна – 2,0–2,5 мм										
Контроль	12	27	33	35	37	38	39	40	41	42
Актив. 30	12	29	34	36	38	39	42	43	44	45
Актив. 60	12	32	35	39	41	42	46	47	48	50
Товщина зерна – 2,5–2,8 мм										
Контроль	12	25	31	34	35	37	38	39	40	41
Актив. 30	12	28	33	35	37	38	41	40	43	44
Актив. 60	12	31	34	37	40	44	45	46	47	49
Товщина зерна – 2,8–3,0 мм										
Контроль	12	23	29	33	34	35	36	37	38	39
Актив. 30	12	24	30	34	35	37	38	40	42	43
Актив. 60	12	29	32	36	39	43	45	46	47	48
Товщина зерна – 3,0–4,0 мм										
Контроль	12	22	28	32	33	34	35	36	37	38
Актив. 30	12	24	29	34	35	36	38	40	41	42
Актив. 60	12	26	30	36	38	39	40	42	44	47



Зміна вологості зернового матеріалу: 1 – контроль; 2 – актив. 30 хв; 3 – актив. 60 хв

Виходячи з одержаних результатів, можна зробити висновок, що водопоглинення з використанням активованих водних розчинів відбувається значно швидше. Процес адсорбції до бажаного рівня (48 %) скорочується в 1,5 раза.

Певний вплив на швидкість поглинання води мають особливості зерна. Так, повні, крупні зерна потребують більше часу для досягнення заданої вологості, ніж слабкі. Тому водопоглинення досліджували в різних фракціях зерна. Позитивна динаміка водопоглинення зберігалася в усіх фракціях зерна, замоченого в активованих водних розчинах, що свідчить про явне підвищення адсорбційної здатності зернового матеріалу з різною товщиною зерна.

Припустимо, що використання розчинів, оброблених контактною нерівноважною плазмою, за рахунок подрібнення кластерних структур води на молекулярному рівні покращує транспорт вологи в середину зернини. Це може бути результатом активного притоку до зародка від'ємно заряджених часток та відтоку позитивно заряджених. Одночасно з можливим збільшенням проникненості структур зерна для води і поживних речовин наявність кластерних часток здатна підвищувати енергію проростання та прискорювати біохімічні процеси. У цьому випадку очікуваним є розпад асоціатив води на мономолекули, підвищення потенційної енергії валентних електронів за рахунок зміни радіуса електронних орбіталей, а також розпад на іони солей, які знаходяться у воді. Процеси перетворень у зерні, замоченого в активованих водних розчинах, наведено нижче, в розробленій моделі адсорбційних процесів.

2. Залежність вологості зернового матеріалу від часу контакту з активованими водними розчинами

Час обробки води, хв	Час, год									
	0	12	24	36	48	60	72	84	96	120
Контроль	12,4	28,7	32,9	34,6	38,1	39,3	40,4	41,2	42,7	45,8
Актив. 5	12,4	28,8	33,0	35,0	38,3	39,5	40,9	41,9	43,1	45,9
Актив. 10	12,4	29,5	34,0	35,5	38,9	39,9	41,8	42,6	43,9	46,1
Актив. 15	12,4	30,5	35,5	36,9	39,5	40,8	42,3	43,0	44,5	46,4
Актив. 20	12,4	31,0	36,0	37,8	40,0	41,5	42,9	43,9	44,9	46,6
Актив. 25	12,4	31,5	36,3	38,2	40,2	41,7	43,1	44,0	45,1	46,7
Актив. 30	12,4	32,1	36,7	39,0	40,4	41,9	43,4	44,2	45,5	46,9
Актив. 35	12,4	32,4	36,9	39,6	41,1	42,3	43,9	45,1	46,2	47,3
Актив. 40	12,4	32,7	37,1	40,5	41,8	42,7	44,2	45,9	46,9	47,8
Актив. 45	12,4	32,0	37,6	41,0	42,4	43,6	45,0	46,6	47,3	48,5
Актив. 50	12,4	33,4	37,8	41,3	43,1	44,5	45,6	47,0	48,0	49,1
Актив. 55	12,4	34,1	38,0	42,1	43,8	44,9	46,1	47,7	48,7	50,0
Актив. 60	12,4	34,8	38,3	42,7	44,1	45,2	46,4	48,3	49,2	50,8
Актив. 65	12,4	33,0	37,1	40,0	42,0	43,2	44,2	45,2	46,8	48,4
Актив. 70	12,4	31,5	35,7	39,0	39,4	42,0	42,5	43,1	44,5	46,0
Актив. 75	12,4	30,6	34,5	37,9	38,1	40,3	41,0	42,2	43,0	44,9
Актив. 80	12,4	30,0	34,0	35,0	36,2	39,1	40,5	41,0	42,5	43,5
Актив. 85	12,4	29,6	33,2	34,9	36,1	38,4	40,3	40,8	42,3	43,2
Актив. 90	12,4	29,0	33,0	34,2	36,0	38,0	40,0	40,5	42,0	43,0

Для прискореної обробки експериментальних даних, можливості прогнозування значення вологості зерна в довільні моменти часу і за різноманітних значень активації водного розчину доцільним є побудова математичної моделі процесу. У нашому випадку математична модель буде являти собою функцію (значення вологості) двох змінних – терміну активації та часу проростання. Оскільки вид функції завчасно невідомий, побудуємо функцію у вигляді повного полінома другого степеня:

$$F(x, y) = A_0 + A_1x + A_2y + A_3x^2 + A_4xy + A_5y^2, \quad (1)$$

де A_i ($i = 0, 5$) – невідомі, а також ті коефіцієнти, які підлягають визначенню.

Для обчислення цих коефіцієнтів скористаємося методом найменших квадратів [5]. Вважаємо, що невідома функція $\Phi(x, y)$ точно описує результати експерименту, наведені в табл. 2.

Апроксимуюча функція $F(x, y)$ виду (1) повинна бути подібна до невідомої функції $\Phi(x, y)$. Як критерій подібності приймемо суму квадратів відхилень значень цих двох функцій у всіх точках

$$E = \sum_{i=1}^{10} \sum_{j=1}^{10} [F(x_i, y_j) - \Phi(x_i, y_j)]^2 \rightarrow \min. \quad (2)$$

Дані, розташовані в непарних рядках табл. 2, будуть використані для визначення коефіцієнтів апроксимуючої функції (1), а дані з парних рядків – для контролю точності цієї функції.

Задача знаходження коефіцієнтів функції (1) зводиться до розв'язання задачі мінімізації функції (2) по цих коефіцієнтах. Тому функцію (2) перепишемо в такому вигляді:

$$E(A_0, \dots, A_5) = \sum_{i=1}^{10} \sum_{j=1}^{10} [A_0 + A_1x_i + A_2y_j + A_3x_i^2 + A_4x_iy_j + A_5y_j^2 - \Phi(x_i, y_j)]^2 \rightarrow \min \quad (3)$$

За необхідних умов екстремуму функції декількох змінних виходить, що в точці екстремуму частинні похідні функції по варіюючих параметрах дорівнюють нулю [5].

$$\frac{\partial E}{\partial A_i} = 0, \quad (i = \overline{0,5}). \quad (4)$$

Диференціюючи вираз (3) по невідомим коефіцієнтах, отримуємо систему шести лінійних алгебраїчних рівнянь відносно A_i . У матричному вигляді цю систему запишемо так:

$$A\bar{x} = \bar{b}, \quad (5)$$

де A – матриця коефіцієнтів системи лінійних алгебраїчних рівнянь;

x – вектор невідомих коефіцієнтів полінома (1);

b – вектор вільних коефіцієнтів:

$$A = \begin{bmatrix} 100 & 10 \sum_{i=1}^{10} x_i & 10 \sum_{j=1}^{10} y_j & 10 \sum_{i=1}^{10} x_i^2 & \sum_{i=1}^{10} \sum_{j=1}^{10} x_i y_j & 10 \sum_{j=1}^{10} y_j^2 \\ 10 \sum_{i=1}^{10} x_i & 10 \sum_{i=1}^{10} x_i^2 & \sum_{i=1}^{10} \sum_{j=1}^{10} x_i y_j & 10 \sum_{i=1}^{10} x_i^3 & \sum_{i=1}^{10} \sum_{j=1}^{10} x_i^2 y_j & \sum_{i=1}^{10} \sum_{j=1}^{10} x_i y_j^2 \\ 10 \sum_{j=1}^{10} y_j & \sum_{i=1}^{10} \sum_{j=1}^{10} x_i y_j & 10 \sum_{j=1}^{10} y_j^2 & \sum_{i=1}^{10} \sum_{j=1}^{10} x_i^2 y_j & \sum_{i=1}^{10} \sum_{j=1}^{10} x_i y_j^2 & 10 \sum_{j=1}^{10} y_j^3 \\ 10 \sum_{i=1}^{10} x_i^2 & 10 \sum_{i=1}^{10} x_i^3 & \sum_{i=1}^{10} \sum_{j=1}^{10} x_i^2 y_j & 10 \sum_{i=1}^{10} x_i^4 & \sum_{i=1}^{10} \sum_{j=1}^{10} x_i^3 y_j & \sum_{i=1}^{10} \sum_{j=1}^{10} x_i^2 y_j^2 \\ \sum_{i=1}^{10} \sum_{j=1}^{10} x_i y_j & \sum_{i=1}^{10} \sum_{j=1}^{10} x_i^2 y_j & \sum_{i=1}^{10} \sum_{j=1}^{10} x_i y_j^2 & \sum_{i=1}^{10} \sum_{j=1}^{10} x_i^3 y_j & \sum_{i=1}^{10} \sum_{j=1}^{10} x_i^2 y_j^2 & \sum_{i=1}^{10} \sum_{j=1}^{10} x_i y_j^3 \\ 10 \sum_{j=1}^{10} y_j^2 & \sum_{i=1}^{10} \sum_{j=1}^{10} x_i y_j^2 & 10 \sum_{j=1}^{10} y_j^3 & \sum_{i=1}^{10} \sum_{j=1}^{10} x_i^2 y_j^2 & \sum_{i=1}^{10} \sum_{j=1}^{10} x_i y_j^3 & 10 \sum_{j=1}^{10} y_j^4 \end{bmatrix}; \quad (6)$$

$$\bar{b} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{10} \sum_{j=1}^{10} \Phi(x_i, y_j); \\ \sum_{i=1}^{10} \sum_{j=1}^{10} x_i \Phi(x_i, y_j); \\ \sum_{i=1}^{10} \sum_{j=1}^{10} y_j \Phi(x_i, y_j); \\ \sum_{i=1}^{10} \sum_{j=1}^{10} x_i^2 \Phi(x_i, y_j); \\ \sum_{i=1}^{10} \sum_{j=1}^{10} x_i y_j \Phi(x_i, y_j); \\ \sum_{i=1}^{10} \sum_{j=1}^{10} y_j^2 \Phi(x_i, y_j); \end{bmatrix}. \quad (7)$$

Підставляючи в матриці (6) та (7) дані з табл. 2, отримаємо числові дані для матриці коефіцієнтів при невідомих і вектора вільних коефіцієнтів. Через громіздкість процедури сумування рядків і стовпчиків тут не наводиться.

Розв'язуючи отриману систему лінійних алгебраїчних рівнянь методом Гауса, отримуємо значення коефіцієнтів полінома (1) – табл. 3. У результаті рішення задачі отримані такі значення коефіцієнтів, мінімізуючих функцію (2), з точністю до 4-х знаків після коми: $A_0 = 17,3431$; $A_1 = 0,7994$; $A_2 = 0,0073$; $A_3 = -0,0624$; $A_4 = -0,4416$; $A_5 = -0,1455$.

3. Значення коефіцієнта полінома в залежності від умов проведення експерименту

Час обробки води, хв	Час, год									
	0	12	24	36	48	60	72	84	96	120
Контроль	12,4	28,7	32,9	34,6	38,1	39,3	40,4	41,2	42,7	45,8
Актив. 10	12,4	29,5	34,0	35,5	38,9	39,9	41,8	42,6	43,9	46,1
Актив. 20	12,4	31,0	36,0	37,8	40,0	41,5	42,9	43,9	44,9	46,6
Актив. 30	12,4	32,1	36,7	39,0	40,4	41,9	43,4	44,2	45,5	46,9
Актив. 40	12,4	32,7	37,1	40,5	41,8	42,7	44,2	45,9	46,9	47,8
Актив. 50	12,4	33,4	37,8	41,3	43,1	44,5	45,6	47,0	48,0	49,1

Актив. 60	12,4	34,8	38,3	42,7	44,1	45,2	46,4	48,3	49,2	50,8
Актив. 70	12,4	31,5	35,7	39,0	39,4	42,0	42,5	43,1	44,5	46,0
Актив. 80	12,4	30,0	34,0	35,0	36,2	39,1	40,5	41,0	42,5	43,5
Актив. 90	12,4	29,0	33,0	34,2	36,0	38,0	40,0	40,5	42,0	43,0

Остаточню апроксимуючу функцію можна представити у вигляді

$$F(x, y) = 17,3431 + 0,7994x + 0,0073y - 0,0624x^2 - 0,4416xy - 0,1455y^2. \quad (8)$$

Для оцінки адекватності отриманої моделі обчислимо значення функції вологості та порівняємо їх з деякими даними, наведеними в парних рядках табл. 2. Експериментальні значення для часу активації 35 і 65 хв, а також наближені до них значення, отримані за формулою (8), наведено в табл. 4. Верхній рядок – експериментальні дані, нижній – наближені значення.

4. Порівняльна оцінка розрахункових та експериментальних даних вологості зернового матеріалу за різних умов експерименту

Час обробки води, хв	Час, год									
	0	12	24	36	48	60	72	84	96	120
Актив. 35	12,4	32,4	36,9	39,6	41,1	42,3	43,9	45,1	46,2	47,3
	12,3	30,9	35,8	38,6	40,8	42,5	44,1	45,7	46,1	47,1
Актив. 65	12,4	33,0	37,1	40,0	42,0	43,2	44,2	45,2	46,8	48,4
	12,3	31,2	36,6	39,5	41,8	43,4	45,1	46,0	46,4	47,9

Для даних табл. 4 середньоквадратичне відхилення E , розраховане за формулою

$$E = \frac{1}{10} \sum_{i=1}^{10} [F(x_i, y_{35(65)}) - \Phi(x_i, y_{35(65)})]^2, \quad (9)$$

становило 0,2314 для часу активації 35 хв та 0,2766 для 65 хв. Для всіх даних, наведених у табл. 2, середньоквадратичне відхилення склало 0,2411. Для його оцінки використовували формулу більш загального виду

$$E = \frac{1}{90} \sum_{i=1}^{10} \sum_{j=1}^9 [F(x_i, y_j) - \Phi(x_i, y_j)]^2. \quad (10)$$

Таким чином, отримані результати підтверджують адекватність і точність моделі (1) та дають підставу рекомендувати її для прогнозування вологості зерна залежно від часу та тривалості активації.

Висновки

1. Експериментально доведена доцільність застосування активованих водних розчинів для замочування зернової сировини, оскільки відомо, що чим зерно більше поглинає вологу, тим інтенсивніше перебігають процеси обміну речовин, які насамперед важливі для солодощення.

2. Встановлено, що вода, оброблена контактною нерівноважною плазмою, має властивості, які дозволяють прискорити адсорбцію вологи зерном і, як наслідок, весь процес пророщування зерна. Позитивна динаміка водопоглинення

зберігається в усіх фракціях зерна, замоченого в активованих водних розчинах, що свідчить про явне підвищення адсорбційної здатності зернового матеріалу з різною товщиною зерна.

3. Для прискореної обробки експериментальних даних, можливості прогнозування значення вологості зерна в довільні моменти часу і за різноманітних значень активації водного розчину побудована математична модель процесу водопоглинання.

Бібліографія

1. Біологічне рослинництво: навч. посібник / [Зінченко О.І., Алексєєва О.С., Приходько П.М. та ін.]; за ред. О.І. Зінченка. – К. : Вища школа, 1996. – 375 с.

2. Злобін О.І. Курс фізіології і біохімії рослин / О.І. Злобін. – Суми : Університетська книга, 2004. – 464 с.

3. Пивоваров А.А. Неравновесная плазма: процессы активации воды и водных растворов / Пивоваров А.А., Тищенко А.П. – Днепропетровск : Изд-во DS-Print, 2006. – 225 с.

4. Пивоваров О.А. Розщеплення білків в солодовому зерні при використанні водних розчинів, оброблених контактною плазмою / Пивоваров О.А., Ковальова О.С. // Вопросы химии и химической технологии. – 2010. – № 6. – С. 110–114.

5. Турчак Л.И. Основы численных методов: учебное пособие / Турчак Л.И., Плотников П.В. – М. : Физматлит, 2002. – 304 с.