## ИЗВЕСТИЯ ВУЗОВ. ПРИКЛАДНАЯ ХИМИЯ И БИОТЕХНОЛОГИЯ Том 7 N 4 2017

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ / BRIEF COMMUNICATIONS Оригинальная статья / Original article УДК 66.061; 661.728

DOI: 10.21285/2227-2925-2017-7-4-122-125

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА СУБКРИТИЧЕСКОГО АВТОГИДРОЛИЗА СОЛОМЫ ПШЕНИЦЫ

## © Е.В. Верхотурова, В.К. Гайда

Иркутский национальный исследовательский технический университет, Российская Федерация, 664074, г. Иркутск, ул. Лермонтова, 83.

Проведено моделирование процесса субкритическго автогидролиза соломы пшеницы для определения оптимальных условий максимального выхода сахаров. В результате корреляционного анализа установлено, что наиболее выраженное влияние на выход сахаров оказывает продолжительность обработки. Найдена математическая модель процесса и установлены оптимальные условия: температура 200 °C, давление 30 МПа и продолжительность 60 мин.

Ключевые слова: субкритический автогидролиз, солома пшеницы, моделирование, воздействующий фактор, математическая модель.

Формат цитирования: Верхотурова Е.В., Гайда В.К. Моделирование процесса субкритического автогидролиза соломы пшеницы // Известия вузов. Прикладная химия и биотехнология. 2017. Т. 7, N 4. C. 122–125. DOI: 10.21285/2227-2925-2017-7-4-122-125

## MODELLING OF SUBCRITICAL AUTOHYDROLYSIS PROCESS OF WHEAT STRAW

## © E.V. Verkhoturova, V.K. Gaida

Irkutsk National Research Technical University, 83, Lermontov St., Irkutsk, 664074, Russian Federation

Modelling of the process of subcritical autohydrolysis of wheat straw for optimising the conditions for the maximum yield of sugars was carried out. As a result of the correlation analysis, it is established that the processing time has the most pronounced effect on the yield of sugars. A mathematical model of the process is found and optimal conditions are established: temperature - 200 ° C, pressure - 30 MPa and duration - 60 minutes.

Keyword: subcritical autohydrolysis, wheat straw, modeling, severity factor, mathematical model

**For citation:** Verkhoturova E.V., Gaida V.K. Modeling of the subcretical autohydrolysis of wheat straw. *Izvestia Vuzov. Pricladnaya Chimia I Biotechnologia*. Proceedings of Universitets. Applied chemistry and biotechnology. 2017, vol. 7, no. 4, pp. 122–125 (in Russian). DOI: 10.21285/2227-2925-2017-7-4-122-125

## ВВЕДЕНИЕ

На сегодняшний день трудно представить научно-исследовательскую деятельность без применения методологии и современных средств построения и использования математических моделей. Уровень и темпы развития современных компьютерных информационных технологий способствуют расширению и совершенствованию возможности моделирования. Сегодня с помощью моделирования технологического процесса можно определить оптимальные условия, не прибегая к многочисленным экспериментам, которые требуют времени и материальных затрат. Моделирование позволяет учитывать множество различ-

ных факторов, влияющих на ход технологического процесса [1].

Обработку соломы пшеницы водой в субкритическом состоянии можно отнести к технологическим процессам, в условиях которого происходит гидролиз основных компонентов соломы с получением ряда продуктов, в частности низкомолекулярных сахаров. Их выход зависит от условий обработки. Поэтому было проведено моделирование процесса субкритическго автогидролиза соломы пшеницы для определения оптимальных условий максимального выхода сахаров.

Цель работы – установить зависимость параметров обработки соломы пшеницы в субкритических условиях на выход сахаров с помощью математического моделирования.

## ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Подробное описание эксперимента по обработке соломы пшеницы водой в субкритических условиях, выделению и анализу полученных продуктов приведено в работе [2]. Полученные экспериментальные данные подвергали статистическому анализу с применением электронных таблиц *Microsoft Excel 2010*. Для математического моделирования использовали встроенный в *Microsoft Excel 2010* пакет анализа данных. Для оптимизации условий и нахождения вида математической модели процесса применяли методы корреляционного и регрессионного анализа.

## ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

На первом этапе было изучено влияние температурных условий на выход сахаров в составе жидких продуктов субкритического автогидролиза. Экспериментально установлено, что в интервале температур 150-200 °C формирование жидких продуктов осуществляется в основном за счет гидролиза пентозанов и частично целлюлозы. Основными компонентами жидких продуктов являются моно- и олигосахариды. При увеличении температуры выше 200 °C повышение выхода жидких продуктов связано с гидролизом целлюлозы соломы [2]. Побуждающим фактором на ряду с повышенной температурой, является субкритическая вода, проявляющая при температурах выше 200 °C свойства кислотного катализатора [3]. Согласно полученным данным в этих условиях также протекают процессы деструкции моносахаридов. Это объясняет полученные результаты, согласно которым в температурном интервале 200–270 °C происходит резкое снижение содержания сахаров в составе жидких продуктов субкритического автогидролиза (рисунок). Так при 270 °C их содержание в сравнение с содержанием в жидких продуктах полученных при температуре 200 °C сократилось более чем в 5,5 раз.

Таким образом, экспериментально установлено, что максимальный выход сахаров в составе жидких продуктов автогидролиза получен при температуре обработки 200 °C, давлении 30 МПа и продолжительности 60 мин и составил 29,7% на абсолютно сухую массу соломы (% на а.с.м.) Поэтому для дальнейшей оптимизации и нахождения вида математической модели процесса была выбрана температура 200 °C.

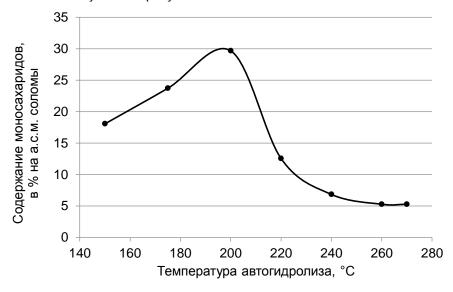
Методом планирования эксперимента были подобраны различные сочетания воздействующих факторов при оптимальной температуре: давления, МПа ( $\mathbf{x}_1$ ) и продолжительности, мин ( $\mathbf{x}_2$ ) (таблица).

Из полученных данных видно, что давление  $(x_1)$  и продолжительность  $(x_2)$ , ассоциативно оказывают влияние на выход сахаров (y) в составе жидких продуктов субкритического автогидролиза.

Для установления величины воздействия факторов был проведен корреляционный анализ и получены коэффициенты корреляции:

$$r_{x_1}$$
= 0,323 и  $r_{x_2}$ = 0,922.

На основании полученных значений корреляции можно заключить, что продолжитель-



Зависимость выхода сахаров от температуры субкритического автогидролиза

Relationship between sugar yield and subcrtitical hydrolysis temperature

# Выход моносахаридов в составе жидких продуктов в зависимости от воздействующих факторов

Yields of monosaccharides in liquid products at different actuating factors

Давление, МПа	Продолжительность, мин	Выход сахаров, в % на а.с.м. соломы
$x_1$	$x_2$	У
30	60	29,66
30	30	23,82
30	10	17,19
20	60	27,22
20	30	22,70
20	10	16,34
10	60	24,38
10	30	20,49
10	10	14,25

ность оказывает непосредственное (наиболее выраженное) влияние на выход сахаров в составе жидких продуктов автогидролиза. С увеличением продолжительности их выход значительно увеличивается. Корреляционный анализ показал, что давление оказывает незначительное влияние на выход сахаров.

Далее был найден вид математической модели процесса в зависимости от воздействующих факторов. Методом регрессионнофакторного анализа, были получены коэффициенты линейного уравнения. Таким образом, математическая модель эксперимента, связывающая два влияющих фактора, имеет следующий вид:

$$y = 10,66 + 0,19x_1 + 0,22x_2$$
, (1)

где y – максимальный выход моносахаридов в составе жидких продуктов, в % на а.с.м.;  $x_1$  – давление МПа;  $x_2$  – продолжительность обработки, мин. При этом коэффициент множественной регрессии равен 0,98, а коэффициент детерминации  $R^2$  = 0,96.

На следующем этапе эксперимента с помощью методов оптимизации, необходимо определить ограничивающие параметры. Так как эксперимент проводился под давлением от 10 до 30 МПа и продолжительности обработки от 10 до 60 мин, то ограничения будут соответствовать данному диапазону величин. Функцию оптимальности и ограничения можно записать следующей системой уравнений:

$$\begin{cases} y = 10,66 + 0,19x_1 + 0,22x_2 \to max \\ 10 \le x_1 \le 30 \\ 10 \le x_2 \le 60 \end{cases}$$
 (2)

Из системы выражений находим, что максимальному выходу моносахаридов  $(y_{max})$  соответствуют значения воздействующих факторов  $x_1$  = 30 МПа;  $x_2$  = 60 мин, при этом максимальный выход сахаров составил 29,52 % на а.с.м.

## **ЗАКЛЮЧЕНИЕ**

Таким образом, с помощью моделирования было найдено математическое описание процесса при температуре 200 °С и установлены оптимальные условия обработки соломы пшеницы водой в субкритических условиях для максимального выхода сахаров: давление 30 МПа и продолжительность 60 мин.

## БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

- **1.** Дворецкий С.И., Муромцев Ю.Л., Погонин В.А., Схиртладзе А.Г. Моделирование систем. М.: Академия, 2009. 317 с.
- **2.** Евстафьев С.Н., Чечикова Е.В. Превращения полисахаридов соломы пшеницы в динамических условиях процесса субкритического автогидролиза // Химия растительного
- сырья. 2015. N 1. C. 41-49.
- **3.** Ingram T., Rogalinski T., Antranikian G., Bockemühl V., Brunner G. Semi-continuous liquid hot water pretreatment of rye straw // The Journal of Supercritical Fluids. 2009. V. 48 (3). P. 238–246.

## **REFERENCES**

- **1.** Dvoretskii S.I., Muromtsev Yu.L., Pogonin V.A., Skhirtladze A.G. *Modelirovanie sistem* [Simulation of systems]. Moscow: Akademiya Publ.,
- 2009, 317 p.
- 2. Evstaf'ev S.N., Chechikova E.V. Transformations of wheat straw polysaccharides in dy-

## Е.В. Верхотурова, В.К. Гайда

namic conditions of subcritical autohydrolysis. *Khimiya rastitel'nogo syr'ya* [Chemistry of plant raw material]. 2015, no. 1, pp. 41–49. (in Russian)

3. Ingram T., Rogalinski T., Antranikian G.,

## Критерии авторства

Верхотурова Е.В., Гайда В.К. выполнили экспериментальную работу, на основании полученных результатов провели обобщение и написали рукопись. Верхотурова Е.В., Гайда В.К. имеют на статью равные авторские права и несут равную ответственность за плагиат.

## Конфликт интересов

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

# СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ Принадлежность к организации

## Елена В. Верхотурова

Иркутский национальный исследовательский технический университет Hayчный сотрудник vev.irkutsk@gmail.com

## Виктория К. Гайда

Иркутский национальный исследовательский технический университет К.б.н., доцент gd-vk@mail.ru

Поступила 29.06.2017

Bockemühl V., Brunner G. Semi-continuous liquid hot water pretreatment of rye straw. *The Journal of Supercritical Fluids*. 2009, no. 48 (3), pp. 238–246.

#### Contribution

Verkhoturova E.V., Gaida V.K. carried out the experimental work, on the basis of the results summarized the material and wrote the manuscript. Verkhoturova E.V., Gaida V.K. have equal author's rights and bear equal responsibility for plagiarism

## Conflict of interests

The authors declare no conflict of interests regarding the publication of this article.

## AUTHORS' INDEX Affiliations

#### Elena V. Verkhoturova

Irkutsk National Research Technical University Research Assistant vev.irkutsk@gmail.com

## Viktoria K. Gaida

Irkutsk National Research Technical University Ph.D. (Biology), Assosiate Professor gd-vk@mail.ru

Received 29.06.2017