

Рекомендована д.ф.н., професором В.І.Чушовим

УДК 615.014.2:66.061

## РОЗРОБКА МАТЕМАТИЧНОЇ МОДЕЛІ ЕКСТРАГУВАННЯ З ТВЕРДИХ РЕЧОВИН У ПЕРЕХРЕСНОМУ СТРУМІ

О.І.Зайцев, М.М.Бойко, Л.В.Антонова, Є.В.Гладух

Національний фармацевтичний університет

**Розроблена та перевірена математична модель розрахунку оптимальних умов екстрагування на прикладі промислового виробництва настойки з трави кропиви собачої. Запропоновані заходи для оптимізування технології вилучення екстрактивних речовин з рослинної сировини: розподілити екстрагент на рівні частини при дробній мацерації (з урахуванням коефіцієнта утримання екстрагенту у сировині на першому ступені), після кожного ступеня роботи віджим витяжки з рослинної сировини.**

Препарати природного походження (лікарська рослинна сировина), сумарні препарати (настойки, екстракти), очищені препарати (новогаленові та індивідуальні), а також біологічно активні добавки на основі біологічно активних речовин з рослинної сировини [7, 8, 9] в останній час все більше цікавлять людей та лікарів для лікування або профілактики різних хронічних захворювань [10, 12, 13, 14], що приводить до підвищення попиту на лікарські рослини та лікарські препарати на основі біологічно активних речовин, виділених із рослинної сировини. Тому разом з пошуком нових лікарських рослин повинні удосконалюватися технології отримання екстракційних препаратів та розвиватися ресурсозберігаючі технології комплексної переробки рослинної сировини [11].

Для удосконалення та розробки оптимальної технології отримання екстракційних препаратів потрібно розробити теоретичні засади описання процесу екстрагування біологічно активних речовин із рослинної сировини при мацерації у рівноважних умовах. Теоретичним засадам оптимізації процесу екстрагування присвячено небагато робіт [1, 3, 4, 6].

Якщо система описується великою кількістю факторів, які характеризують швидкість проведення процесу, то доцільно залучати методи математичного моделювання для прогнозування оптимальних умов проведення екстракції.

На теперішній час широко відомі графічні моделі розрахунку [5], але саме графічне представлення дає велику похибку у розрахунку, тому нами

розглядається питання аналітичного описання процесу екстракції. Процес розробки математичної моделі (ММ) повинен включати в себе сумісне рішення систем рівнянь, які описують закони збереження маси та тепла, закони рівноваги та кінетики проходження процесу. Разом з тим при розробці ММ роблять відповідні припущення:

- на кожному ступені досягається рівноважний розподіл речовини, що екстрагується між взаємодіючими фазами;
- коефіцієнт утримання ( $K_u$ ) твердою речовиною екстракту є постійною величиною на кожному ступені екстракції;
- тверда речовина не розчиняється в екстрагенті.

### Експериментальна частина

Для підтвердження адекватного висновку математичної моделі нами була обстежена триступенева ремацерація трави кропиви собачої 70% етиловим спиртом. Дані екстракції трави кропиви собачої наведені у табл. 1.

### Результати та їх обговорення

Для одержання ММ нами були використані матеріальні баланси змішування та розшарування (на шрот та екстракт) для кожного ступеня екстрагування (1-3):

- загальний баланс:

$$G_N + G_S = G_R + G_E; \quad (1)$$

- по екстрактивній речовині:

$$G_N \cdot X_N = G_E \cdot Y_E + G_R \cdot X_R; \quad (2)$$

- по екстрагенту:

$$G_N \cdot X_N^S + G_S = G_E \cdot (1 - Y_E) + G_R \cdot X_R^S, \quad (3)$$

де:  $G_N$  — маса вихідної сировини, кг;  $G_S$  — маса екстрагенту, кг;  $X_N$  — вміст екстрактивних речовин у вихідній сировині, мас. частка;  $Y_E$  — вміст екстрактивних речовин в екстракті, мас. частка;  $X_N^S$  — вміст екстрагенту у вихідній сировині, мас. частки. Інші позначення наведені нижче, починаючи з формули (11).

При п'яти невідомих параметрах ( $G_R$ ,  $G_E$ ,  $Y_E$ ,  $X_R$ ,  $X_R^S$ ) з трьох рівнянь неможливо провести розрахунок отриманих при екстракції кінцевих потоків, тому треба залучити ще два відомих пара-

Таблиця 1

Дані обслідування промислової триступеневої ремацерації  
трави кропиви собачої 70% етиловим спиртом

Найменування показника	Ступінь ремацерації		
	1	2	3
Кількість трави кропиви собачої для завантаження в екстрактор, кг	222,3	—	—
Вміст екстрактивних речовин у сировині, яка завантажується у перший екстрактор, мас. частка	0,15	—	—
Кількість екстрагенту, який подають на 1 ступінь для змочування сухої трави кропиви собачої, кг	235	—	—
Кількість екстрагенту, який подають на кожний ступінь екстракції, кг	245	370	361
Кількість витяжки, яка самоплинно вийшла з екстрактора, кг	250	375	366
Кількість витяжки, яка зійшла з екстрактора після віджиму, кг	—	—	84
Сумарна кількість витяжки, яку отримали при екстракції, кг	1075		
Вміст екстрактивних речовин у витяжці, мас. частка	0,0177		
Розрахунковий за експериментальними даними ступінь недовитягання, %	43,07		

метри, які характеризують утримання рідкої фази твердою речовиною ( $Ku$ ), та коефіцієнти розподілу екстрактивної речовини між фазами  $m$ :

$$Ku = \Delta GER / GRc, \quad (4)$$

$$m = Y_E / X_{Rc}, \quad (5)$$

які розглядаються зі складанням матеріального балансу вилучення зі шроту екстрагенту ( $\Delta GER$ ), який утримується твердою речовиною:

- загальний баланс:

$$G_R = GRc + \Delta GER, \quad (6)$$

- по екстрактивній речовині:

$$G_R \cdot X_R = GRc \cdot X_{Rc} + \Delta GER \cdot Y_E, \quad (7)$$

- по екстрагенту:

$$G_R \cdot X_R^S = \Delta GER \cdot (1 - Y_E), \quad (8)$$

де:  $X_{Rc}$  — вміст екстрактивних речовин у сухому шроті після екстракції, мас. частка.

Така кількість рівнянь дозволяє знайти вісім невідомих характеристик потоків цієї системи. Проводячи вираз одного через інший, у результаті можна отримати наступні рівняння для розрахунку концентрації екстрактивної речовини у екстракті ( $Y_E$ ):

$$Y_E = \frac{1}{2} \cdot \left( -A - \sqrt{A^2 - 4 \cdot m \cdot \frac{G_N \cdot X_N}{G_N + G_S}} \right), \quad (9)$$

$$\text{де: } A = -1 - m \cdot \frac{G_N \cdot X_N}{G_N + G_S} + (1 - m) \cdot \frac{G_S}{G_S + G_N}. \quad (10)$$

По знайденому значенню  $Y_E$  зворотним розрахунком знаходяться невідомі у рівняннях (1-8) потоки та концентрації:

- концентрація екстрактивних речовин у сухому шроті (у шроті, з якого весь екстрагент був видалений):

$$X_{Rc}^S = Y_E / m, \quad (11)$$

- кількість екстракту, яка утримується шротом:

$$\Delta GER = Ku \cdot \frac{m}{(1 - Y_E)} \cdot \left( \frac{G_N \cdot X_N \cdot (1 - Y_E)}{Y_E} - G_S \right), \quad (12)$$

- кількість шроту у розрахунку на суху речовину:

$$G_{Rc} = \frac{m}{(1 - Y_E)} \cdot \left( \frac{G_N \cdot X_N \cdot (1 - Y_E)}{Y_E} - G_S \right), \quad (13)$$

- кількість шроту:

$$G_R = G_{Rc} + \Delta GER, \quad (14)$$

- кількість екстракту:

$$G_E = G_N + G_S - G_R, \quad (15)$$

- концентрація екстрактивних речовин у шроті:

$$X_R = \frac{G_{Rc} \cdot Y_E / m + \Delta GER \cdot Y_E}{G_{Rc} + \Delta GER}, \quad (16)$$

- концентрація екстрагенту у шроті:

$$X_R^S = \frac{\Delta GER \cdot (1 - Y_E)}{G_{Rc} + \Delta GER}. \quad (17)$$

Разом з цим нами отримана залежність, за якою можна розрахунково прогнозувати мінімальну кількість екстрагенту, яку потрібно взяти для змочування вихідної твердої сировини:

$$G_{S \min} = Ku \cdot G_F \cdot (1 - m \cdot X_F \cdot \frac{Ku + 1}{m \cdot Ku + 1}). \quad (18)$$

Таким чином, послідовно розрахувавши за рівняннями (9-17), можна отримати кінцеві потоки після проведення процесу екстракції. Це дає змогу передбачити умови проведення процесу при досягненні якоїсь функції цілі (наприклад, найменшого ступеня недовитягання):

$$\Phi = \frac{G_{Rk} \cdot X_{Rk}}{G_F \cdot X_F}. \quad (19)$$

Таблиця 2

Результати розрахунку триступеневої екстракції трави кропиви собачої 70% етиловим спиртом

Найменування показника	Ступінь ремацерації		
	1	2	3
Кількість трави кропиви собачої, яка завантажується, кг	222,3*	—	—
Вміст екстрактивних речовин у сировині, яка завантажується у перший екстрактор, мас. частка	0,15*	—	—
Кількість екстрагенту, який подають на кожен ступінь екстракції, кг	480*	370*	361*
Кількість екстрагенту, який на 1 ступені з 480 кг йде на змочування сухої трави кропиви собачої, кг	246,6*	—	—
Кількість витяжки, яка самоплинно вийшла з екстрактора, кг	243 (2,8)**	382 (3,2)**	370 (2,5)**
Вміст екстрактивних речовин в отриманих витяжках, мас. частка	0,0226	0,0178	0,0139
Кількість витяжки, яка вийшла з екстрактора після віджиму, кг	—	—	84
Кількість шроту, який залишився в екстракторі, кг	459	447	438
Вміст у шроті: екстрактивних речовин, % мас.; екстрагенту, % мас.	0,05995 (0,5283)**	0,04588 (0,5313)**	0,03501 (0,5337)**
Сумарна кількість витяжки, отриманої при екстракції, кг	1079 (0,4)**		
Вміст екстрактивних речовин у витяжці, мас. частка	0,01778 (0,7)**		
Розрахунковий ступінь недовитягання, ф%	42,48 (1,4)**		

\* — дані, які були задані; \*\* — похибка розрахованих результатів у відсотках до дослідних.

Попередніми дослідженнями, як показано у [2], встановлено, що для цієї системи коефіцієнт розподілу дорівнює  $m = 0,234$ , а коефіцієнт утримання екстрагенту твердою речовиною  $Ku = 1,18$ . Завдяки цьому нами була розрахована триступенева екстракція за математичною моделлю (рівняння 1-19) з метою підтвердження адекватності отриманої методики. Результати розрахунку представлені у табл. 2.

За результатами розрахунку видно, що розроблена математична модель достатньо адекватно описує процес екстракції. Це дає змогу проводити розрахунки при інших умовах проведення процесу екстракції з подальшим аналізом отриманих результатів. Так, нами була поставлена задача знайти розподіл екстрагенту (або коефіцієнти надлишку поглинача  $\beta_i$ ) на кожний ступінь, при якому буде найменший ступінь недовитягання, при збереженні його загальної кількості.

Результати розрахунку показали, що для одержання мінімального ступеня недовитягання треба так розподіляти екстрагент, щоб коефіцієнт над-

лишку поглинача на кожному ступені був постійною величиною.

З метою зменшення мінімального ступеня недовитягання нами було запропоновано після кожного ступеня екстрагування проводити віджим шроту (як роблять у промислових умовах на останньому ступені біля 20% від кількості шроту). Таким технологічним засобом ступінь недовитягання зменшується на 7,8%.

Таким чином, розроблена математична модель (методологія) може бути інструментом знаходження технологічних умов у фітохімічному виробництві.

#### ВИСНОВКИ

1. Розроблена математична модель адекватно описує процес екстракції у системі “тверде тіло — рідина”.

2. При організації фітохімічного виробництва треба розподіляти екстрагент на кожен ступінь таким чином, щоб коефіцієнт надлишку поглинача на кожному ступені був однаковим.

3. Для більш повного вилучення екстрактивних речовин можна запропонувати віджим шроту після кожного ступеня.

#### ЛІТЕРАТУРА

1. Азарян Р.А. // *Фармація*. — 1986. — №1. — С. 31-35.
2. Зайцев О.І., Бойко М.М., Антонова Л.В., Гладух Є.В. // *Вісник фармації*. — 2007. — №4 (52). — С. 37-41.
3. Мурав'їов І.О., Пшуков Ю.Г., Кобильченко Н.В. // *Фармац. журн.* — 1983. — №5. — С. 42-44.
4. Мурав'єв И.А., Пшуков Ю.Г. *Теоретические основы производства жидких экстрактов методом реперколяции с законченным циклом: Метод. рекоменд. для преподавателей фармац. институтов (факультетов), слушателей ФПК и ФУПС, производственного персонала фармац. фабрик.* — Пятигорск: Республиканский учебно-методический кабинет, 1985. — 48 с.

5. Павлов К.Ф., Романков П.Г., Носков А.А. *Примеры и задачи по курсу процессов и аппаратов химической технологии.* — Л.: Химия, 1987. — 576 с.
6. Пономарёв В.Д. *Экстрагирование лекарственного сырья.* — М.: Медицина, 1976. — 202 с.
7. Arora A., Nair M.G., Strasburg G.M. // *Free Radic. Biol. Ved.* — 1998. — Vol. 24, №9. — P.1355-1363.
8. Briskin D.P. // *Plant Physiol.* — 2000. — №124. — P. 507-514.
9. Carlo G., Mascolo N., Izzo A.A., Capasso F. // *Life Sci.* — 1999. — Vol. 65, №4. — P. 337-353.
10. Cragg G.M., Newman D.J., Snader K.M // *J. Nat. Prod.* — 1997. — №60 — P. 52-60.
11. Gaedcke F. *Herbal medicinal products scientific and regulatory basis for development, quality assurance and marketing authorization / F.Gaedcke, B.Steinhoff, H.Blasius.* — Stuttgart: Medpharm, Scientific publishers, 2003. — 177 p.
12. Newall C.A. *Herbal medicines. A guid for health-care professionals / C.A.Newall, L.A.Anderson, J.D.Phillipson.* — London: Parmaceutical, 1996. — 260 p.
13. Samuelsson G. *Drugs of natural origin / G.Samuelsson.* — Stockholm: Swedish Pharmaceutical, 1999. — 253 p.
14. Tyler V.E. // *J. Nat. Prod.* — 1999. — №62. — P. 1589-1592.

---

УДК 615.014.2:66.061

РАЗРАБОТКА МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ЭКСТРАГИРОВАНИЯ ИЗ ТВЕРДЫХ ТЕЛ В ПЕРЕКРЕСТНОМ ТОКЕ

А.И.Зайцев, Н.Н.Бойко, Л.В.Антонова, Е.В.Гладух

Разработана и проверена математическая модель расчета оптимальных условий экстрагирования на примере промышленного производства настойки из травы пустырника. Предложены способы для оптимизации технологии извлечения экстрактивных веществ из растительного сырья: распределить экстрагент на одинаковые части при дробной мацерации (с учетом коэффициента удерживания экстрагента в сырье на первой ступени), после каждой ступени делать отжим вытяжки из растительного сырья.

---

UDC 615.014.2:66.061

DEVELOPMENT OF THE MATHEMATICAL MODEL OF THE EXTRACTION PROCESS FROM SOLIDS IN THE CROSS CURRENT

A.I.Zaytsev, N.N.Boyko, L.V.Antonova, Ye.V.Gladukh

The mathematical model that calculates optimal conditions of the extraction process has been developed and checked in the example of industrial production of a tincture from Leonuri herb. Several methods for optimizing the extraction technology of extractive substances from the raw material have been offered. They are distribution of an extragent into equal portions in fractional maceration (taking into account the coefficient of extragent retention in the raw material at the first stage), then after every stage squeezing of the extract from the raw material should be done.