

JACEK WOŁKOWIAK
LIDIA ZANDER
FABIAN DAJNOWIEC

Wydział Nauki o Żywności, Uniwersytet Warmińsko-Mazurski w Olsztynie, Olsztyn

Zastosowanie różniczkowania numerycznego z jednoczesnym wygładzaniem w obliczeniach strumienia permeatu podczas mikrofiltracji

Wprowadzenie

Coraz szersze zastosowanie procesów separacji membranowej w różnych gałęziach przemysłu, również w przemyśle spożywczym, pociąga za sobą wzrost aktywności badawczo – naukowej na tym polu. Badanie wpływu różnych czynników na proces pociąga za sobą konieczność analizy zmian wielkości strumienia permeatu w czasie. Dane takie najczęściej uzyskuje się przez ważenie permeatu na wadze podłączonej do komputera, a następnie różniczkowanie numeryczne otrzymywanych wartości chwilowych, które często charakteryzują się stosunkowo wysokim poziomem szumów [1]. Niezbędne jest więc wygładzanie danych eksperymentalnych.

Stosuje się następujące sposoby różniczkowania funkcji, których wartości w punktach są wyznaczone empirycznie i obarczone błędami doświadczalnymi:

1. aproksymacja funkcją empiryczną, poddawaną następnie różniczkowaniu;
2. zastosowanie znanych wzorów interpolacyjnych
3. zastosowanie specjalnych metod różniczkowania z jednoczesnym wygładzaniem.

Metoda *Więckowskiego* [2], opracowana na potrzeby opracowywania wyników analiz spektralnych, oparta jest o wzór interpolacyjny *Lagrange'a* liczenia pochodnej centralnej z trzech punktów krzywej empirycznej:

$$y'_1 = \frac{-y_0 + y_1}{2h} \quad (1)$$

oraz operację wygładzania polegającą na uśrednieniu wartości (średnia arytmetyczna) pewnej liczby punktów leżących za i przed punktem, dla którego obliczamy pochodną. Wartość współczynnika wygładzającego (w) określa liczbę punktów branych do średniej po każdej stronie analizowanego punktu. Postępowanie według prezentowanej metody można przedstawić w postaci prostego wzoru rekurencyjnego:

$$y'_i = y'_{i-1} + \frac{y_{i-w-1} - y_{i-1} - y_i + y_{i+w}}{w(w+1)h} \quad (2)$$

gdzie wartość y'_w , stanowiąca punkt wyjścia do dalszych obliczeń dana jest wzorem:

$$y'_w = \frac{\sum_{k=0}^{2w} y_k \text{sign}(k-w)}{w(w+1)h} \quad (3)$$

Celem pracy było wykazanie przydatności metody *Więckowskiego* do opracowania wyników pomiarów zmian szybkości permeacji w czasie procesu mikrofiltracji i porównanie uzyskanych efektów z przebiegiem tej samej funkcji wyznaczonej z zastosowaniem wzorów interpolacyjnych *Lagrange'a* oraz metody *Savitzky'ego-Golaya*.

Metodyka postępowania

Przedmiotem analiz były przykładowe dane empiryczne otrzymane podczas badań przebiegu procesu mikrofiltracji wodnych zawiesin talku i drożdży. Do ilustracji uzyskiwanych efektów przyjęto dwa przebiegi eksperymentalne: jeden, w którym występowały niewielkie, przypadkowe błędy pomiarowe (A) i drugi (B), w którym poziom szumów był większy. Proces (A) polegał na mikrofiltracji wodnej zawiesiny 0,6% mas. talku prowadzonej przy ciśnieniu 75 kPa. W procesie (B) 1% zawiesinę drożdży piekarskich poddawano mikrofiltracji przy ciśnieniu 150 kPa. W obu przypadkach stosowano membranę o nominalnej wielkości porów 1,4 μm . Szybkość permeacji określano na podstawie masy permeatu zbieranego w naczyniu umieszczonym na szalce wagi elektronicznej, przy czym masę cieczy (G) otrzymywaną w czasie (t) rejestrowano w odstępach jednosekundowych.

W obu przypadkach eksperymentalne dane $G(t)$ różniczkowano numerycznie ze współczynnikiem wygładzającym $w = 2$. Otrzymane wyniki porównano z wynikami uzyskanymi z zastosowaniem metody wzorów interpolacyjnych *Lagrange'a* (dla pięciu punktów) [3] oraz metody *Savitzky'ego-Golay'a* (drugiego rzędu dla pięciu punktów) [4]. Jako kryterium oceny przyjęto wartość współczynnika korelacji dla dopasowania do przebiegów empirycznych następującej funkcji aproksymującej:

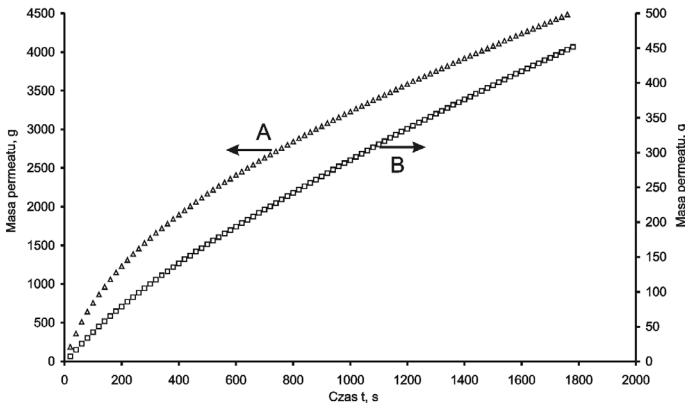
$$J = J_{ss} + kt^b \quad (4)$$

Wartości współczynników funkcji (4) wyznaczono metodą aproksymacji średniokwadratowej z wykorzystaniem narzędzia *Solver* aplikacji *Microsoft Excel*.

Wyniki

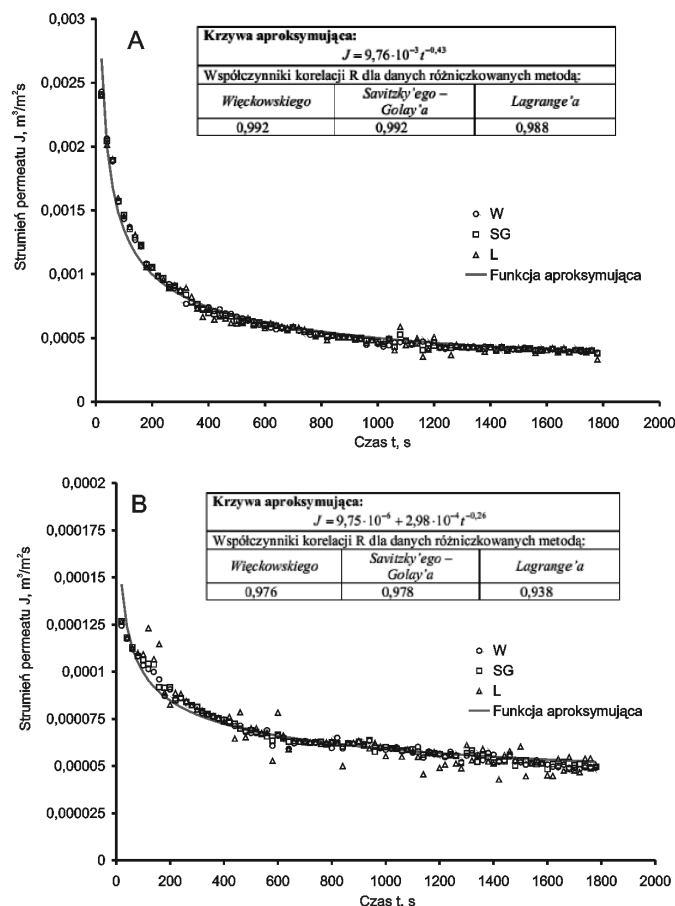
Na rys. 1 przedstawiono bezpośrednie wyniki pomiarów masy permeatu uzyskiwane w warunkach laboratoryjnych podczas mikrofiltracji zawiesin talku (A) i drożdży (B) w wodzie.

Zapis zmian masy permeatu w czasie nie ujawnia występowania różnic w precyzji wyników ważenia, jednak rozkład



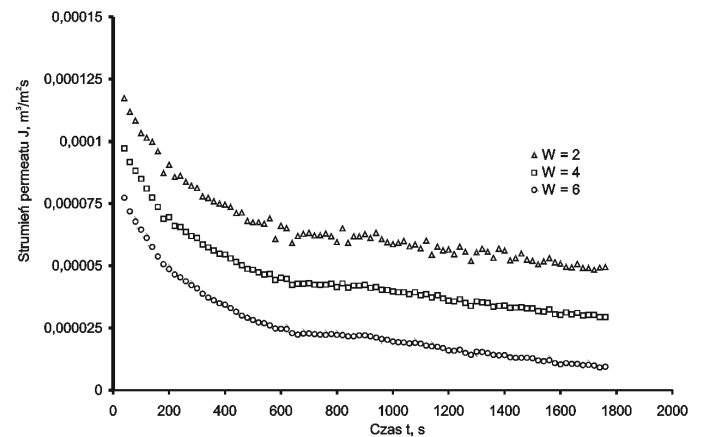
Rys. 1. Zmiany masy permeatu w czasie mikrofiltracji zawiesin talku (A) i drożdży (B)

punktów na rys. 2 wykazuje zróżnicowanie dokładności obu serii pomiarów i uzależnienie efektu wygładzenia danych od metody obliczeń. Wynika stąd, że w przypadku danych empirycznych obciążonych stosunkowo niewielkimi błędami doświadczalnymi popularna metoda wzorów interpolacyjnych *Lagrange'a* [3] daje satysfakcjonujące rezultaty i może być z powodzeniem wykorzystywana do analizy wyników.



Rys. 2. Wyniki różniczkowania funkcji obciążonej niewielkimi błędami (A) i obciążonej dość dużymi błędami (B): W – metoda specjalna *Więckowskiego*, SG – metoda *Savitzky'ego - Golay'a*, L – metoda wzorów interpolacyjnych

Ze wzrostem poziomu szumów występujących w danych eksperymentalnych pojawia się konieczność ich redukcji przez zastosowanie metod specjalnych: *Savitzky'ego-Golay'a* [2] lub *Więckowskiego* [1]. Na rys. 3 pokazano, że przy odpowiednio wysokiej wartości współczynnika w specjalna metoda różniczkowania z jednoczesnym wygładzaniem pozwala na zredukowanie szumów, co w konsekwencji prowadzi do uzyskania wysokiego stopnia dopasowania modelu (4) zmian strumienia permeatu w czasie mikrofiltracji do danych doświadczalnych i poprawnego oszacowania liczbowych wartości jego parametrów.



Rys. 3. Redukcja szumów funkcji zróżniczkowanej specjalną metodą *Więckowskiego* – wpływ wartości współczynnika w na efekt wygładzenia danych (krzywe przesunięto w celu lepszego zilustrowania efektu)

Wnioski

1. Przytoczone rezultaty obliczeń wskazują na przydatność metody specjalnej do opracowywania wyników badań przebiegu procesów separacji membranowej.
2. Zapis metody wygładzania danych w postaci wzoru rekurencyjnego pozwala na łatwe zaimplementowanie jej w dowolnym języku programowania i wykorzystanie w obliczeniach komputerowych.

Oznaczenia

- b – parametr równania (4), [-]
- h – krok różniczkowania
- J – strumień permeatu, [m³/m²s]
- J_{ss} – równowagowy strumień permeatu, [m³/m²s]
- k – parametr równania (4), [m s^{b-1}]
- R – współczynnik korelacji
- t – czas, [s]
- y – zmienna zależna
- y'_w – pochodna w punkcie w
- w – współczynnik wygładzający, [-]

LITERATURA

1. D.M. Kanani, R. Ghosh: J. Membr. Sci., **290**, nr 1-2, 207 (2007).
2. A.B. Więckowski: Pro Dialog, **2**, 57 (1994).
3. A. Savitzky, M.J.E. Golay: Analytical Chem., **36**, nr 2, 1627 (1964).
4. D. Kincaid, W. Cheney: Analiza numeryczna. Warszawa, WNT, 2006.