

<https://doi.org/10.33380/2305-2066-2022-11-1-113-121>
УДК 615.322



Оригинальная статья / Research article

Регрессионный анализ в разработке методики выделения и количественного определения водорастворимых полисахаридов из корней подсолнечника однолетнего

Н. А. Дьякова*

ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет» (ВГУ), 394006, Россия, г. Воронеж, Университетская площадь, д. 1

*Контактное лицо: Дьякова Нина Алексеевна. E-mail: Ninochka_V89@mail.ru

ORCID: Н. А. Дьякова – <https://orcid.org/0000-0002-0766-3881>.

Статья поступила: 10.01.2022

Статья принята в печать: 14.02.2022

Статья опубликована: 25.02.2022

Резюме

Введение. Корни подсолнечника однолетнего (*Helianthus annuus* L.) преимущественно являются отходами сельскохозяйственных предприятий при возделывании данной культуры. При этом они отличаются богатым химическим составом и содержат водорастворимые полисахариды, основу которых составляет инулин.

Цель. Цель исследования – подбор оптимальных параметров ультразвуковой экстракции водорастворимых полисахаридов из корней подсолнечника однолетнего на основе регрессионного анализа.

Материалы и методы. Для проведения эксперимента использовали сырье, приобретенное в одной из аптек города Воронежа. Образец сырья (1,0 грамм) помещался в ультразвуковую ванну Град 40-35, позволяющую поддерживать необходимую температуру и частоту ультразвука с заданной продолжительностью времени. Затем мерной колбой отмеряли 10 (15 или 20) мл очищенной от примесей воды очищенной с температурой от 60 °С до 80 °С и производили экстрагирование от 10 до 20 минут с кратностью от 1 до 3, при этом после каждого одного из кратных исследований производили фильтрацию далее заливали то же сырье новым растворителем.

Результаты и обсуждение. Исходные условия и полученные при проведении опытов данные позволили представить регрессионную модель в виде уравнения линейной множественной регрессии, которую с достаточной точностью можно использовать при прогнозировании и анализе. Адекватность модели подтверждена проверкой гипотез по χ^2 -критерию Пирсона. При определении тесноты общей взаимосвязи исходных и полученных данных использовался коэффициент корреляции, полученный на основе значений коэффициента регрессии и среднеквадратичного отклонения. Кроме того, проведено подробное изучение выборки тех переменных, приоритет которых был не ярко выражен, путем обработки при фиксации их значений.

Заключение. Наиболее важными условиями экстракции корней подсолнечника однолетнего для получения наиболее стабильной результативности следует считать: температуру экстракции, равной 80 °С; кратность экстракции, равную 3; частоту ультразвука, равную 35 кГц; при этом измельченность сырья может варьировать от 0,5 мм до 2 мм, времени экстрагирования может быть в пределах от 15 мин до 20 мин, соотношение сырья и экстрагента может варьировать от 1 г на 10 мл до 1 г на 15 мл.

Ключевые слова: водорастворимые полисахариды, инулин, ультразвуковая ванна, корни подсолнечника однолетнего, *Helianthus annuus* L.

Конфликт интересов. Авторы декларируют отсутствие явных и потенциальных конфликтов интересов, связанных с публикацией настоящей статьи.

Вклад авторов. Н. А. Дьякова придумала и разработала эксперимент, провела исследование и расчеты, написала статью.

Для цитирования: Дьякова Н. А. Регрессионный анализ в разработке методики выделения и количественного определения водорастворимых полисахаридов из корней подсолнечника однолетнего. *Разработка и регистрация лекарственных средств.* 2022;11(1):113–121. <https://doi.org/10.33380/2305-2066-2022-11-1-113-121>

Regression Analysis in Development of Method for Isolation and Quantitative Determination of Water-soluble Polysaccharides from Sunflower Roots of One-year-old

Nina A. Dyakova*

Voronezh State University, 1, Universitetskaya sq., Voronezh, 394006, Russia

*Corresponding author: Nina A. Dyakova. E-mail: Ninochka_V89@mail.ru

ORCID: Nina A. Dyakova – <https://orcid.org/0000-0002-0766-3881>.

Received: 10.01.2022

Revised: 14.02.2022

Published: 25.02.2022

Abstract

Introduction. The roots of one-year-old sunflower (*Helianthus annuus* L.) are mainly wastes of agricultural enterprises when cultivating this crop. At the same time, they differ in a rich chemical composition and contain water-soluble polysaccharides, the base of which is inulin.

Aim. The aim of this study is to select optimal parameters of ultrasonic extraction of water-soluble polysaccharides from sunflower roots of one-year old based on regression analysis.

Materials and methods. For the experiment, raw materials purchased from one of the pharmacies in the city of Voronezh were used. A sample of raw materials (1.0 grams) was placed in an ultrasonic bath Grad 40-35, which allows maintaining the necessary temperature and frequency of ultrasound with a given duration of time. Then, 10 (15 or 20) ml of purified water purified from impurities at a temperature of 60 °C to 80 °C was measured with a measuring flask and extracted from 10 to 20 minutes with a multiplicity of 1 to 3, and after each of the multiple studies, the same raw material was further filtered with a new solvent.

© Дьякова Н. А., 2022

© Dyakova N. A., 2022

Results and discussion. The initial conditions and the data obtained during the experiments made it possible to present the regression model in the form of a linear multiple regression equation, which can be used with sufficient accuracy in prediction and analysis. The adequacy of the model was confirmed by testing hypotheses against Pearson's χ^2 criterion. The correlation coefficient derived from the values of the regression coefficient and the mean square deviation was used in determining the tightness of the overall relationship between the source and the obtained data. In addition, a detailed study of a sample of those variables whose priority was not clearly expressed was carried out by processing when fixing their values.

Conclusion. The most important conditions for extraction of the roots of sunflower of a one-year old should be considered: extraction temperature equal to 80 °C; extraction multiplicity equal to 3; an ultrasound frequency of 35 kHz; Note here that raw material grinding can vary from 0.5 mm to 2 mm, extraction time can range from 15 min to 20 min, ratio of raw material and extractant can vary from 1 g per 10 ml to 1 g per 15 ml.

Keywords: water-soluble polysaccharides, inulin, ultrasonic bath, roots of one-year-old sunflower, *Helianthus annuus* L.

Conflict of interest. The authors declare that they have no obvious and potential conflicts of interest related to the publication of this article.

Contribution of the authors. Nina A. Dyakova invented and developed the experiment, conducted research and calculations, writing of the article.

For citation: Dyakova N. A. Regression analysis in development of method for isolation and quantitative determination of water-soluble polysaccharides from sunflower roots of one-year-old. *Razrabotka i registratsiya lekarstvennykh sredstv = Drug development & registration*. 2022;11(1):113–121. (In Russ.) <https://doi.org/10.33380/2305-2066-2022-11-1-113-121>

ВВЕДЕНИЕ

Подсолнечник однолетний (*Helianthus annuus* L. (syn. *Helianthus aridus* Rydb., *Helianthus pumilus* Pers., *Helianthus macrocarpus* DC., *Helianthus erythrocarpus* Bartl., *Helianthus jaegeri* Heiser, *Helianthus multiflorus* Hook., *Helianthus ovatus* Lehm., *Helianthus petiolaris* hort. ex DC., *Helianthus lenticularis* Dougl., *Helianthus indicus* L., *Helianthus platycephalus* Cass., *Helianthus grandiflorus* Wender. ex Steud., *Helianthus tubaeformis* Nutt.) – однолетнее травянистое растение рода Подсолнечник (*Helianthus*) семейства Астровые (*Asteraceae*), высотой до 2,5–5 м. Широко культивируется в средней полосе России, в частности, Центрально-Черноземном регионе, преимущественно, с последующим получением из его семян масла. Плоды – продолговатой яйцевидные семечки с кожистым околоплодником – имеют длину 9–16 мм и содержат жирное масло (до 52 %), белки (до 22 %), углеводы (до 27 %), фосфолипиды, полиненасыщенные жирные кислоты, стерины, витамины (E, PP). Получаемое из семян подсолнечника однолетнего масло используется для пищевых, а также технических (производство саломаса, маргарина, мыла, лако-красочной продукции) нужд. Также семена применяются самостоятельно в пищу и в кондитерском деле (для получения халвы) [1–6].

Подсолнечник однолетний имеет стержневую корневую систему, достигающую в длину 2–3 м и составляющую до 25–30 % биомассы растения. Преимущественно корни подсолнечника однолетнего уходят в отходы сельскохозяйственных предприятий при возделывании данной культуры. При этом они

отличаются богатым химическим составом и содержат водорастворимые полисахариды, основу которых составляет инулин, а также алкалоиды, органические кислоты, витамины группы E, D, K, A, B, большое количество эссенциальных макро- и микроэлементов (кальций, магний, фосфор, калий, железо, цинк, селен и др.) [7–11]. Корни подсолнечника однолетнего обладают противовоспалительным, желчегонным, мочегонным действиями, применяются при сахарном диабете, артрите, артрозе, желчекаменной и мочекаменной болезнях. Благодаря широкому спектру фармакологической активности корни подсолнечника однолетнего широко используются как лекарственное растительное сырье в виде отвара [12–14]. Таким образом, в медицинской и фармацевтической практике используются водные извлечения из лекарственного растительного сырья подсолнечника однолетнего, а фармакологический эффект обусловлен водорастворимыми соединениями, основу которых составляют водорастворимые полисахариды [15, 16].

Перспективным методом воздействия на лекарственное растительное сырье с целью интенсификации выделения разных биологически активных веществ, в том числе, водорастворимых полисахаридов, является ультразвук частотой 15–35 кГц, что позволяет не только сократить процесс экстракции на 1–2 порядка, но и значительно увеличить выход основного продукта. Использование ультразвука с частотой более 35 кГц приводит к гидролизу биологически активных веществ и в технологии фитопрепаратов не применяется [17–19].

Целью настоящего исследования являлся подбор оптимальных параметров ультразвуковой экстракции водорастворимых полисахаридов из корней подсолнечника однолетнего на основе регрессионного анализа.

МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

Проведение эксперимента по получению инулина из корней подсолнечника однолетнего методом ультразвуковой экстракции детерминируется несколькими одновременно и совокупно действующими заданными параметрами. Поэтому задача исследования стоит в определении зависимости одной зависимой переменной от нескольких объясняющих значений в различных условиях варьирования параметров. Решение данной задачи можно найти, проведя множественный, или многофакторный регрессионный анализ [20, 21].

Различают уровни фактора проведения эксперимента, к которым следует отнести количественные и качественные. Качественные факторы следует учитывать на начальном этапе это качество и состояние сырья, оборудование. Для проведения эксперимента использовали сырье, приобретенное в одной из аптек города Воронежа («Корень подсолнечника», 6 упаковок, производитель ООО «Хорст», серия 161020, свидетельство о государственной регистрации RU.77.99.88.003.E.004300.10.17 от 03.10.2017, ТУ 10.89.19-175-14721358-2017). Отбор проб проводили в соответствии с ОФС.1.1.0004.15. Сырье измельчалось до однородной массы, отсеивалось через комплект сит с размерностями 0,2, 0,5, 1,0, 2,0, 3,0 мм. Образец сырья (1,0 грамм), взвешенный на весах A&D GH-202 (A&D, Япония), помещался в ультразвуковую ванну Град 40-35, позволяющую поддерживать необходимую температуру и частоту ультразвука с заданной продолжительностью времени. Затем мерной колбой отмеряли 10 (15 или 20) мл очищенной от примесей воды очищенной с температурой от 60 °С до 80 °С и производили экстрагирование от 10 до 20 минут с кратностью от 1 до 3, при этом после каждого одного из кратных исследований производили фильтрацию далее заливали то же сырье новым растворителем. Осаждение водорастворимых полисахаридов проводили 95%-ым спиртом этиловым, который брали в трехкратном объеме по отношению к получаемому водному извлечению. Осадок отфильтровывали под вакуумом при остаточном давлении 0,03–0,07 МПа, высушивали до постоянной массы в воздушном стерилизаторе Витязь ГП-40 (ОАО «Витязь», Республика Беларусь). Количественными факторами экстракции являются: измельченность сырья (x_1 , мм), температура (x_2 , °С), кратность экстракции (x_3), длительность экстракции (x_4 , мин), частота ультразвука (x_5 , кГц) и соотношение сырья и экстрагента (x_6 , г:мл). Определяли содержание гравиметрически осаждаемых водорастворимых полисахаридов (y , %).

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

В нашем случае система имеет два состояния уровней факторов (исходное состояние смеси и готовый экстракт), при меняющихся 6 факторах минимально необходимое число опытов составит 64. В случае фиксации одного или нескольких факторов число опытов может значительно уменьшиться. Но для качественного анализа адекватности выбранного способа следует провести такое количество опытов, которое позволит экспериментально определить значения выбранных параметров, при которых условия получения инулина протекают с лучшей результативностью, и выполнить статистическую оценку полученных данных по выбранной методике (таблица 1).

Проверка гипотезы о согласованности условий эксперимента и отсутствия в них случайных событий проверялась путем анализа дисперсий их распределения. Для данного рода исследований, связанных с проверкой однородности дисперсий применяют G-критерий Кохрена [20].

Для получения значений указанного критерия произведем расчет арифметического среднего – $X_{\text{ср}}$; стандартной ошибки – S_x ; дисперсии – S_2 ; стандартного отклонения (оно же среднеквадратическое отклонение, коэффициент вариации) – S (таблица 2).

Данные таблица 2 при уровне значимости $\alpha = 0,05$, числе степеней свободы 5 и количестве дисперсий 68, позволили получить значения $G = 0,017$ и $G_{\text{крит.}} = 0,08$, что обуславливает гипотезу об однородности данных ($G < G_{\text{крит.}}$), и подтверждает, статистическую надежность условий проведения эксперимента, а также отсутствие случайных событий.

Анализ полученных результатов позволяет судить об их линейной зависимости, в связи с чем, следует рассматривать линейную функцию множественной регрессии [20]. Для проведения оценки регрессии введем ограничения рассмотрения линейного соотношения между зависимой переменной y и объясняющими переменными $x_1 - x_6$.

Общее уравнение для шести переменных будет иметь вид:

$$y_{\text{расчетн.}} = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_4x_4 + b_5x_5 + b_6x_6, \quad (1)$$

где не учитываем аддитивную составляющую – переменную u , дающую суммарный эффект от воздействия всех неучтенных факторов и случайностей

$$y_{\text{эксперим.}} = y_{\text{расчетн.}} - u. \quad (2)$$

Регрессия линейного вида для исследуемых данных будет представлена формулой:

$$y_{\text{расчетн.}} = b_0 + b_1d_1 + b_2T_2 + b_3n_3 + b_4t_4 + b_5f_5 + b_6p_6, \quad (3)$$

где $d_1, T_2, n_3, t_4, f_5, p_6$ нам известны, а $b_1, b_2, b_3, b_4, b_5, b_6$ определим:

Таблица 1. Результаты количественного определения водорастворимых полисахаридов

Table 1. Results of quantitative determination of water-soluble polysaccharides

N	x ₁	x ₂	x ₃	x ₄	x ₅	x ₆	y	N	x ₁	x ₂	x ₃	x ₄	x ₅	x ₆	y
1	1,0	80	1	30	30	10	9,06	33	2,0	60	2	30	35	10	7,25
2	1,0	80	2	30	30	10	14,43	34	2,0	60	3	30	35	10	8,18
3	1,0	80	3	30	30	10	16,25	35	2,0	70	1	30	35	10	7,62
4	1,0	80	1	30	30	15	12,08	36	2,0	70	2	30	35	10	9,81
5	1,0	80	2	30	30	15	16,21	37	2,0	70	3	30	35	10	11,36
6	1,0	80	3	30	30	15	17,29	38	2,0	80	1	30	35	10	12,71
7	1,0	80	1	30	30	20	10,12	39	2,0	80	2	30	35	10	14,12
8	1,0	80	2	30	30	20	11,85	40	2,0	80	3	30	35	10	15,58
9	1,0	80	3	30	30	20	13,69	41	1,0	80	1	20	25	10	8,10
10	1,0	80	1	30	25	10	9,75	42	1,0	80	2	20	25	10	11,83
11	1,0	80	2	30	25	10	13,24	43	1,0	80	3	20	25	10	15,51
12	1,0	80	3	30	25	10	15,32	44	1,0	80	1	40	30	10	12,47
13	1,0	80	1	40	35	10	12,48	45	1,0	80	2	40	30	10	15,13
14	1,0	80	2	40	35	10	14,91	46	1,0	80	3	40	30	10	17,81
15	1,0	80	3	40	35	10	15,60	47	1,0	80	1	40	35	10	13,26
16	1,0	80	1	30	35	10	11,95	48	1,0	80	2	40	35	10	15,75
17	1,0	80	2	30	35	10	13,84	49	0,5	80	3	40	35	10	17,02
18	1,0	80	3	30	35	10	17,76	50	1,0	70	3	40	30	15	13,25
19	0,5	60	1	30	35	10	6,12	51	1,0	70	3	40	30	20	14,52
20	0,5	60	2	30	35	10	7,58	52	1,0	70	3	40	35	15	15,74
21	0,5	60	3	30	35	10	9,75	53	1,0	70	3	40	35	20	14,18
22	0,5	70	1	30	35	10	10,15	54	0,5	80	3	40	25	10	16,67
23	0,5	70	2	30	35	10	12,44	55	1,0	80	3	40	25	10	17,53
24	0,5	70	3	30	35	10	14,07	56	1,0	80	3	40	35	10	16,76
25	0,5	80	1	30	35	10	10,74	57	1,0	80	3	40	30	10	17,11
26	0,5	80	2	30	35	10	14,26	58	1,0	80	3	40	25	15	13,75
27	0,5	80	3	30	35	10	17,32	59	1,0	80	3	40	25	20	14,53
28	1,0	60	1	30	35	10	7,04	60	0,5	80	3	30	35	10	15,76
29	1,0	60	2	30	35	10	8,85	61	1,0	80	3	40	35	20	12,35
30	1,0	60	3	30	35	10	11,22	62	1,0	80	3	40	30	15	15,87
31	1,0	70	1	30	35	10	12,10	63	1,0	80	3	40	30	20	13,06
32	1,0	70	2	30	35	10	14,37	64	1,0	80	3	30	35	20	14,74

Для решения общий вид уравнения регрессии будет иметь вид:

$$y_{\text{расчетн.}} = b_0x_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_4x_4 + b_5x_5 + b_6x_6, \quad (4)$$

где x_0 неэффективный фактор равный 1.

Математическая модель множественной регрессии метода наименьших квадратов (формула 5) требует использования матричных обозначений и владения техникой матричной алгебры:

$$b = [[x^T][x]^{-1}][x^T] y_{\text{расчетн.}} \quad (5)$$

Для компактности изложения примененных некоторых стандартных вычислительных процедур, представлены их результаты и описание. Введем вектор $y_{\text{расчетн.}}$ и значения наблюдений объясняющих значений функции таблицы 2 транспонируем в матрицу $[x]$ размерности количества строк по количеству переменных и количеству столбцов равному числу опытов (64). Затем вычислим матричное произведение

двух массивов транспонированной матрицы и исходной, $[x^T][x]$ затем найдем обратную матрицу $[[x^T][x]]^{-1}$ и вектор $[x^T] y_{\text{расчетн.}}$ с размерностями 7×7 . Из выражения 5 произведение обратной матрицы и вектора позволит получить результирующую матрицу в виде вектор столбца значений b (таблица 3).

Таким образом, уравнение регрессии для проведенного экспериментального исследования выделения водорастворимых полисахаридов способом ультразвукового экстрагирования будет иметь вид:

$$y_{\text{расчетн.}} = 32,069x_0 + (-0,564x_1) + 0,365x_2 + 32,93x_3 + 011x_4 + (60,213x_5 + 0,254x_6).$$

В соответствии с формулой 6 получим расчетные значения y (таблица 4).

По полученным данным результирующих зависимостей различными способами построим зависимости экспериментальных и расчетных значений y путем градации экспериментально полученных результатов при взаимосвязи с расчетными от меньшего к большему (рисунок 1).

Таблица 2. Межгрупповая обработка условий проведения эксперимента

Table 2. Inter-group treatment of experimental conditions

№ п/п	X_{cp}	S	S^2	S_x	№ п/п	X_{cp}	S	S^2	S_x
1	25,50	12,12	880,70	29,68	33	23,33	9,26	514,27	22,68
2	25,67	12,05	871,07	29,51	34	23,50	9,18	505,90	22,49
3	25,83	11,98	861,77	29,36	35	24,83	10,70	686,97	26,21
4	26,33	11,93	853,87	29,22	36	25,00	10,63	677,60	26,03
5	26,50	11,86	843,90	29,05	37	25,17	10,56	668,57	25,86
6	26,67	11,79	834,27	28,88	38	26,50	12,14	884,30	29,74
7	27,17	11,80	835,37	28,90	39	26,67	12,07	874,27	29,57
8	27,33	11,73	825,07	28,72	40	26,83	12,00	864,57	29,40
9	27,50	11,66	815,10	28,55	41	23,00	12,05	871,20	29,52
10	24,67	12,08	875,87	29,60	42	23,17	11,99	862,57	29,37
11	24,83	12,02	866,57	29,44	43	23,33	11,93	854,27	29,23
12	25,00	11,96	857,60	29,28	44	27,17	12,35	915,37	30,26
13	28,00	12,42	925,20	30,42	45	27,33	12,28	905,07	30,08
14	28,17	12,35	914,57	30,24	46	27,50	12,21	895,10	29,92
15	28,33	12,28	904,27	30,07	47	28,00	12,42	925,20	30,42
16	26,33	12,21	893,87	29,90	48	28,17	12,35	914,57	30,24
17	26,50	12,14	883,90	29,73	49	28,33	12,28	904,27	30,07
18	26,67	12,07	874,27	29,57	50	26,67	10,60	674,27	25,97
19	22,83	9,48	539,77	23,23	51	27,50	10,45	655,10	25,59
20	23,00	9,41	531,20	23,05	52	27,50	10,69	685,10	26,17
21	23,17	9,34	522,97	22,87	53	28,33	10,52	664,27	25,77
22	24,50	10,84	705,10	26,55	54	27,50	12,21	895,10	29,92
23	24,67	10,77	695,87	26,38	55	26,67	12,21	894,27	29,90
24	24,83	10,70	686,97	26,21	56	28,33	12,28	904,27	30,07
25	26,17	12,27	903,77	30,06	57	27,50	12,21	895,10	29,92
26	26,33	12,21	893,87	29,90	58	27,50	12,01	865,10	29,41
27	26,50	12,14	884,30	29,74	59	28,33	11,86	844,27	29,06
28	23,00	9,41	531,20	23,05	60	29,17	12,05	871,77	29,53
29	23,17	9,33	522,57	22,86	61	30,00	11,89	847,60	29,11
30	23,33	9,26	514,27	22,68	62	28,33	12,00	864,27	29,40
31	24,67	10,77	695,87	26,38	63	29,17	11,84	841,77	29,01
32	24,83	10,70	686,57	26,20	64	27,50	11,87	845,10	29,07

Таблица 3. Значения коэффициентов регрессии

Table 3. Values of regression coefficients

Параметр Parameter	B_0	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	B_6
Значения Values	-32,069	-0,564	0,365	2,930	0,110	0,213	0,254

Из графика, представленного на рисунке 1 следует, что визуально расчетная ломаная прямая описывает результаты значений, полученных экспериментально, из чего предварительно можно судить о положительном проведенном регрессионном анализе.

Гипотеза о согласованности значений эксперимента и полученных теоретически проверяется путем анализа распределения этой статистики. Для данного рода исследований наиболее часто используют: χ^2 -критерий Пирсона, F-критерий Фишера или t-критерий Стьюдента [21].

Для нахождения общей степени согласия расхождении при оценке экспериментальных и теоретических результатов целесообразно применять χ^2 -кри-

терий согласия Пирсона (хи-квадрат). Это наиболее часто применяемый статистический критерий при анализе данных. Критерий отвечает на вопрос, с одинаковой ли частотой встречаются разные значения признака в и распределениях, и определяется по формуле [20]:

$$y_{\text{эмпирич.}}^2 = \sum_{i=1}^n \frac{(y_{i \text{эксперем.}} - y_{i \text{расчетн.}})^2}{y_{i \text{расчетн.}}} \quad (7)$$

Откуда, из данных таблиц 1 и 4 вычислим $\chi_{\text{эмпирич.}}^2 = 26,59$. Критическое значение хи-квадрат является табличным значением и составит $\chi_{\text{таблич.}}^2 = 87,1$ при количестве степеней свободы $n - 1 = 67$ [21].

Таблица 4. Расчетные значения у

Table 4. Calculated values of y

№ опыта experience	у _{расчетн.} y _{rated}						
1	9,06	18	17,76	35	7,62	52	15,74
2	14,43	19	6,12	36	9,81	53	14,18
3	16,25	20	7,58	37	11,36	54	16,67
4	12,08	21	9,75	38	12,71	55	17,53
5	16,21	22	10,15	39	14,12	56	16,76
6	17,29	23	12,44	40	15,58	57	17,11
7	10,12	24	14,07	41	8,10	58	13,75
8	11,85	25	10,74	42	11,83	59	14,53
9	13,69	26	14,26	43	15,51	60	15,76
10	9,75	27	17,32	44	12,47	61	12,35
11	13,24	28	7,04	45	15,13	62	15,87
12	15,32	29	8,85	46	17,81	63	13,06
13	12,48	30	11,22	47	13,26	64	14,74
14	14,91	31	12,10	48	15,75		
15	15,60	32	14,37	49	17,02		
16	11,95	33	7,25	50	13,25		
17	13,84	34	8,18	51	14,52		

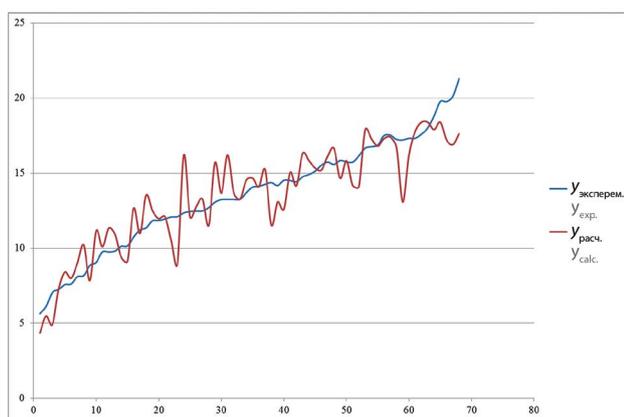


Рисунок 1. Диаграмма зависимости уэксперим и урасчетн

Figure 1. Dependency Diagram уэксперим и урасчетн

Поскольку $\chi^2_{\text{эмпирич.}} < \chi^2_{\text{таблич.}}$ то выдвинутая гипотеза (уравнение регрессии) подтверждается, следовательно, степень расхождения между эмпирическими и теоретическими частотами минимальная.

Кроме того, оценку значимости уравнения регрессии возможно осуществить при помощи параметрического F-критерия Фишера (F-распределения), который служит для определения достоверности различий между дисперсиями полученных результатов и показывает уровень однородности данных в выборках [20]. Составим матрицу оценки качества модели F-распределения (таблица 5) на основе вычислений и данных из пакета анализа в программе MS Excel 2016.

Из данных таблицы 5 следует, что коэффициент детерминации и коэффициент множественной корреляции (индекс корреляции) являются показателями, отражающими тесноту связи и точность регрессии, чем ближе они к единице, тем лучше регрессия

аппроксимирует эмпирические данные, тем теснее наблюдения примыкают к линии регрессии и тем больше он отражает тесноту связи построенной модели под воздействием изучаемых объясняющих факторов. На основании того, что $(R)R^2 > 0,7$, то следует сделать вывод о том связь полученных результатов с выбранными параметрами вариации хорошая и функциональная форма выбрана верно.

Таблица 5. Матрица оценки качества регрессии F-распределения

Table 5. F-Distribution Regression Quality Estimation Matrix

Расшифровка расчетных показателей Decryption of calculated indicators	Формула Formula	Полученное значение Value Received
Среднее значение зависимой переменной Average value of dependent variable	$\bar{y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_{\text{эксп.}}$	13,53
Коэффициент детерминации Determination factor	$R^2 = \frac{\sum (y_{\text{расч.}} - \bar{y})^2}{\sum (y_{\text{эксп.}} - \bar{y})^2}$	0,8
Коэффициент множественной корреляции (индекс корреляции) Multiple correlation coefficient (correlation index)	$R = \sqrt{\frac{\sum (y_{\text{расч.}} - \bar{y})}{\sum (y_{\text{эксп.}} - \bar{y})}}$	0,89
F-критерий Фишера Fisher F-test	$F = \frac{R^2/k}{(1-R^2)/(n-m-1)}$	1,44
Критическое значение (F-критерия Фишера) Critical value (Fischer F-test)	Табличное значение Table value	1,99

Если фактическое значение $F < F_{\text{крит.}}$, то коэффициент детерминации статистически значим, следовательно, найденная оценка уравнения регрессии статистически надежна при заданном уровне $\alpha = 0,05$ [20].

Кроме того, сравнивались дисперсии распределения регрессии и эксперимента, в результате чего было установлено, что данные относятся к одной генеральной совокупности ($F = 1,44 < F_{\text{табл.}} = 1,99$, при $S_1 = 13,16$; $S_2 = 10,70$).

Что касается t-критерия Стьюдента, то он используется для установления сходства-различия средних арифметических значений в двух выборках или в более общем виде, для установления сходства-различия двух эмпирических распределений, когда дисперсии в двух выборках совпадают [для наших выборок $D_{\text{эксперим.}} (13,16) > D_{\text{расчетн.}} (10,70)$], в связи с чем его следует исключить [20].

С целью оценки качества регрессионной модели используют среднюю ошибку выполненной аппроксимации [20]:

$$e_{\text{отн.}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{|Y_{\text{расч.}} - Y_{\text{эксп.}}|}{Y_{\text{эксп.}}} \cdot 100 = 9,31 \%, \quad (8)$$

которая позволяет сделать вывод о рассеянии экспериментальных точек относительно линии регрессии в пределах 9,31 %, что характеризует адекватно построенное уравнение регрессии.

Для определения тесноты зависимости результатов эксперимента X_i от Y используют коэффициент корреляции. Изначально подходящим измерителем тесноты связи X от Y является коэффициенты регрессии b , но он показывает на сколько в среднем изменяется Y , когда X увеличивается на одну единицу, что в отдельных случаях может показывать очень абстрактное представление. Для сравнения данных по различным характеристикам между собой используется стандартная единица измерения переменной, называемая среднеквадратичным отклонением (СКО) s , которое определяется:

$$s_{x,y} = \sqrt{\sum_{i=1}^n x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n x_i \right)^2}. \quad (9)$$

Для того чтобы сравнить, на сколько величин s_y изменится в среднем Y , когда X увеличится на одно s_x применяется величина называемая коэффициентом корреляции, который определяется по формуле:

$$r = b_1 \frac{s_x}{s_y}. \quad (10)$$

В соответствии с полученными данными определим тесноту связи переменных x_{1-6} с соответствующими им значениями $y_{\text{эксперим.}}$ (таблица 6).

На 5 % уровне коэффициент корреляции статистически значим для x_1, x_2, x_3, x_4, x_5 . Особо ярко выражен у переменных (уровень значимости более 30 %), которые в последующих опытах можно зафиксировать на значениях $x_2 = 80, x_3 = 3, x_4 = 30-40$ как наиболее предпочтительные при получении наиболее ста-

бильной результативности. Связь между полученными данными и переменными тесная, за исключением переменной x_1 , которую следует исследовать наиболее тщательно. Для более подробного изучения стабильности получения данных исследования, также нельзя исключать влияние переменных x_5 и x_6 . Из анализа полученных данных следует, что теснота взаимосвязи между выбранными показателями выражена достаточным уровнем значимости. Это позволяет судить о правильном выборе параметров, их значений и адекватности проведенного эксперимента.

Таблица 6. Определение коэффициента корреляции между переменными

Table 6. Determination of correlation coefficient between variables

Показатели СКО MSE indicators	S_{x_1}	S_{x_2}	S_{x_3}	S_{x_4}	S_{x_5}	S_{x_6}
Значения S_{x_i} Values S_{x_i}	0,52	3,63	0,84	5,58	3,61	3,59
Показатели СКО $s_{y_{\text{эксперим.}}}$ MSE indicator $s_{y_{\text{эксп.}}}$	$s_{y_{\text{эксперим.}}}$ $s_{y_{\text{эксп.}}}$					
Значение $s_{y_{\text{эксперим.}}}$ Values $s_{y_{\text{эксп.}}}$	3,62					
Показатели коэффициента корреляции r_i Correlation coefficient indicators r_i	r_1	r_2	r_3	r_4	r_5	r_6
Значения Values	0,08	0,32	0,64	0,43	0,15	0,112

Когда определены значения параметров оказывающих наибольшую тесноту связи на полученные результаты, проведем оценку выборки с рекомендуемыми значениями исходных данных, рассмотренными ранее (таблица 7).

Таблица 7. Результаты эксперимента с рекомендовано-зафиксированными данными

Table 7. Results of the recommended-fixed data experiment

N	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	y
1	1,0	80	3	40	25	20	14,26
2	2,0	80	3	30	35	10	14,43
3	1,0	80	3	20	25	10	15,60
4	1,0	80	2	40	30	10	14,07
5	1,0	80	3	40	35	10	15,87
6	1,0	80	3	40	30	10	16,25
7	1,0	80	3	40	35	15	15,74
8	1,0	80	3	40	30	15	16,21
9	1,0	80	3	30	35	10	16,76
10	1,0	80	3	30	30	10	14,43
11	1,0	80	3	30	25	10	15,32
12	1,0	80	3	40	35	10	14,91
13	0,5	80	3	30	35	10	17,02
14	1,0	80	3	40	25	10	17,32
15	1,0	80	3	40	35	15	15,87
16	1,0	80	3	40	35	10	15,58
17	1,0	80	3	40	30	10	17,76
18	1,0	80	3	30	30	15	17,29

Из данных таблицы 7 следует, что в соответствии с формулой 1 количество проведенных опытов соответствует их минимальному количеству равному 8, и позволяет приступить к дальнейшей оценке. Так как произведена фиксация переменных x_2, x_3, x_4 , то примем их за постоянные условия эксперимента и в дальнейших расчетах учитывать не будем.

В соответствии с имеющимися данными таблицы 7 определим тесноту связи переменных x_4, x_5, x_6 при фиксации каждого параметра в отдельности с соответствующими результатами экспериментально определенного содержания гравиметрически осаждаемых водорастворимых полисахаридов ($y_{\text{эксперим.}}$) и выделим наиболее предпочтительные параметры этих переменных согласно их уровню статистической значимости (таблица 8).

Таблица 8. Определение коэффициента корреляции между переменными

Table 8. Determination of correlation coefficient between variables

	S_{x_i}	r_i	S_{x_i}	r_i	S_{x_i}	r_i	S_{x_i}	r_i
	Общий General		$x_1 = 2$		$x_5 = 25$		$x_5 = 30$	
S_{x_1}	0,34	0,18	-	-	-	-	-	-
S_{x_5}	4,04	0,29	4,16	0,51	-	-	-	-
S_{x_6}	2,97	0,17	3,25	0,44	5	0,51	2,58	0,57
$S_{y_{\text{эксперим.}}}$	1,63		1,33		1,16		2,12	
	S_{x_i}	r_i	S_{x_i}	r_i	S_{x_i}	r_i		
	$x_5 = 35$		$x_6 = 10$		$x_6 = 15$			
S_{x_1}	-	-	-	-	-	-		
S_{x_5}	4,08	0,59	-	-	-	-		
S_{x_6}	2,58	0,68	4,16	0,37	2,88	0,52		
$S_{y_{\text{эксперим.}}}$	1,25		1,47		2,14			

Анализ данных таблицы 8 свидетельствует о том, что в представленной выборке с точки зрения статистической значимости параметры переменной при $x_5 = 25$, не отражает достаточной тесноты связи. Кроме этого показателя $x_1 = 1$ и $x_1 = 3$ не является предпочтительными.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате проведения статистической обработки многофакторных экспериментальных исследований следует отметить, что исходные условия и полученные при проведении опытов данные позволили представить регрессионную модель в виде уравнения линейной множественной регрессии, которую с достаточной точностью можно использовать при прогнозировании и анализе. Уровень согласованности исходных данных по критерию Кохрена составил $G = 0,017 < G_{\text{крит.}} = 0,061$ (при $\Sigma D = 52975,17$; $D_{\text{max}} = 925,20$; $D_{\text{min}} = 505,90$; $\alpha = 0,05$; $df = 5,00$; $k = 68,00$),

что подтверждает однородность и статистическую надежность условий проведения эксперимента.

Для оценки качества модели регрессии определялись коэффициент множественной корреляции $R = 0,89$ и коэффициент детерминации $R^2 = 0,8$ и среднюю ошибку выполненной аппроксимации $e_{\text{отн.}} = 6,2$, которые обусловили существенное влияние изучаемых факторов. Адекватность модели подтверждена проверкой гипотез по χ^2 -критерий Пирсона, где $\chi^2_{\text{эмпирич.}} = 26,59 < \chi^2_{\text{таблич.}} = 87,1$ и F-критерию Фишера, где $F = 1,44 < F_{\text{табл.}} = 1,99$.

При определении тесноты общей взаимосвязи исходных и полученных данных использовался коэффициент корреляции ($r_1 = 0,08$, $r_2 = 0,32$, $r_3 = 0,64$, $r_4 = 0,43$, $r_5 = 0,15$, $r_6 = 0,112$), полученный на основе значений коэффициента регрессии и среднеквадратичного отклонения. Кроме того, проведено подробное изучение выборки тех переменных, приоритет которых был не ярко выражен, путем обработки при фиксации их значений.

Таким образом, с точки зрения результатов, полученных при статистической обработке экспериментальных данных количественного определения водорастворимых полисахаридов в корнях подсолнечника однолетнего, наиболее важными условиями экстракции для получения наиболее стабильной результативности следует считать: температуру экстракции, равной 80 °С; кратность экстракции, равную 3, при этом измельченность сырья может варьировать от 0,5 мм до 1 мм, частота ультразвука от 30 до 35 кГц, соотношение сырья и экстрагента от 1 г на 10 мл до 1 г на 15 мл, а время экстрагирования может быть в пределах от 30 мин до 40 мин.

Исследования выполнены при поддержке гранта Президента РФ для государственной поддержки молодых российских ученых – кандидатов наук (проект МК-1177.2021.3).

ЛИТЕРАТУРА

- Dwivedi A., Sharma G. A review on Heliotropism plant: *Helianthus annuus* L. *Journal of Phytopharmacology*. 2014;3(2):149–155. DOI: 10.38001/ijlsb.535889.
- Fowler M. W. Plants, medicines and man. *Journal of the Science of Food and Agriculture*. 2006;86(12):1797–1804. DOI: 10.1002/jsfa.2598.
- Owens G. L., Rieseberg L. H. Hybrid incompatibility is acquired faster in annual than in perennial species of sunflower and tarweed. *Journal of Evolution*. 2014;68(3):893–900. DOI: 10.1111/evo.12297.
- Путырский И. Н., Прохоров В. Н. Универсальная энциклопедия лекарственных растений. М.: Махаон; 2000. 656 с.
- Куркин В. А. Фармакогнозия. Самара: Офорт; 2004. 1180 с.
- Терентьева Е. Подсолнечники. *В мире растений*. 2002;10:28–35.
- Таова М. Р. Исследование противовоспалительной активности извлечений листьев и корней подсолнечника масличного. *Научное обозрение*. 2010;1:24–26.
- Таова М. Р., Коновалов Д. А. Изучение фенольных соединений листьев подсолнечника однолетнего методом высокоэффективной жидкостной хроматографии. *Научные ведомости Белгородского государственного университета. Серия: Медицина. Фармация*. 2011;16(11):245–246.

9. Kamal J. Quantification of alkaloids, phenols and flavonoids in sunflower (*Helianthus annuus* L.). *African Journal of Biotechnology*. 2011;10:3149–3151. DOI: 10.5897/AJB09.1270.
10. Лукашов Р. И., Жак А. В., Жаврид А. В. Антирадикальный эффект извлечений из подсолнечника однолетнего. *Вестник Башкирского государственного медицинского университета*. 2019;4:223–228.
11. Соколова О. А., Котов А. Г., Гонтовая Т. Н., Котова Э. Э. Стандартизация сырья подсолнечника однолетнего по макро- и микроскопическим признакам для разработки проекта монографии Государственной фармакопеи Украины. *Вестник фармации*. 2018;1(79):6–11.
12. Соколова О. А., Котов А. Г., Гонтовая Т. Н., Котова Э. Э. Разработка методики идентификации фенольных соединений в цветках и листьях подсолнечника однолетнего. *Вестник фармации*. 2018;2(80):18–23.
13. Павлиди М. Р., Коновалов Д. А. Сравнительное ВЭЖХ исследование фенольных соединений листьев подсолнечника однолетнего. *Вестник Волгоградского государственного медицинского университета*. 2014;4(52):23–24.
14. Птушова И. В., Коновалов Д. А., Карпенко В. А., Лигай Л. В., Кулешова С. А. Фитохимическое и фармакогностическое изучение корней подсолнечника однолетнего. *Химия растительного сырья*. 2014;2:189–194.
15. Мелик-Гусейнов В. В., Герасименко С. В. Биологически активные вещества и элементный состав корней подсолнечника однолетнего. *Вопросы обеспечения качества лекарственных средств*. 2013;1:24–26.
16. Мелик-Гусейнов В. В., Герасименко С. В. Идентификация фенольных соединений в подземных органах подсолнечника однолетнего (*Asteraceae*). *Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Естественные науки*. 2013;3:34–36.
17. Дьякова Н. А. Разработка и валидация экспресс-методики выделения и количественного определения водорастворимых полисахаридов листьев лопуха большого (*Arctium lappa* L.). *Химия растительного сырья*. 2018;4:81–87. DOI: 10.14258/jcprm.2018042195.
18. Дьякова Н. А., Сливкин А. И., Гапонов С. П., Михайловская И. Ю. Изучение динамики изменения содержания инулина в корнях лопуха большого (*Arctium lappa* L.) и одуванчика лекарственного (*Taraxacum officinale* Webb.) в процессе вегетации. *Вестник Воронежского государственного университета. Серия: Химия, Биология, Фармация*. 2016;4:133–136.
19. Дьякова Н. А., Сливкин А. И., Самылина И. А., Гапонов С. П., Мындра А. А., Шушуннова Т. Г. Разработка и валидация экспресс-методики выделения и количественного определения водорастворимых полисахаридов корней одуванчика лекарственного (*Taraxacum officinale* Wigg.). *Химико-фармацевтический журнал*. 2018;52(4):40–43. DOI: 10.30906/0023-1134-2018-52-4-40-43.
20. Бондарчук С. С., Бондарчук И. С. Статобработка экспериментальных данных в MS Excel. Томск: Изд. ТГПУ; 2018. 433 с.
21. Реброва О. Ю. Статистический анализ медицинских данных. Применение пакета прикладных программ STATISTICA. М.: МедиаСфера; 2000. 312 с.
22. Kurkin V. A. *Farmakognoziya* [Pharmacognosy]. Samara: Ofort; 2004. 1179 p. (In Russ.)
23. Terent'eva E. *Podsolnechniki* [Sunflowers]. *V mire rastenij*. 2002; 10:28–35. (In Russ.)
24. Taova M. R. Study of anti-inflammation activity of sunflower leaves and roots extracts. *Nauchnoe obozrenie*. 2010;1:24–26. (In Russ.)
25. Taova M. R., Konovalov D. A. Studying of phenolic compounds of leaves of sunflower annual by the method of high-performance liquid chromatography. *Nauchnye vedomosti Belgorodskogo gosudarstvennogo universiteta. Seriya: Medicina. Farmaciya = Scientific bulletins of Belgorod State University. Series: Medicine. Pharmacia*. 2011;16(111):245–246. (In Russ.)
26. Kamal J. Quantification of alkaloids, phenols and flavonoids in sunflower (*Helianthus annuus* L.). *African Journal of Biotechnology*. 2011;10:3149–3151. DOI: 10.5897/AJB09.1270.
27. Lukashov R. I., Zhah A. V., Zhavrid A. V. Antiradical effect of *Helianthus annuus* extracts. *Vestnik Bashkirskogo gosudarstvennogo medicinskogo universiteta*. 2019;4:223–228. (In Russ.)
28. Sokolova O. A., Kotov A. G., Gontovaya T. N., Kotova E. E. Standardization of annual sunflower raw material by macroscopic and microscopic features for the project development of a monograph of State Pharmacopoeia of Ukraine. *Vestnik farmacii*. 2018;1(79):6–11. (In Russ.)
29. Sokolova O. A., Kotov A. G., Gontovaya T. N., Kotova E. E. Development of the identification method of phenolic compounds in flowers and leaves of sunflower. *Vestnik farmacii*. 2018;2(80):18–23. (In Russ.)
30. Pavlidi M. R., Konovalov D. A. Comparative HPLC Study Of Phenolic Compounds In The Leaves Of *Helianthus Annuus*. *Vestnik Volgogradskogo gosudarstvennogo medicinskogo universiteta = Journal of Volgograd State Medical University*. 2014;4(52):23–24. (In Russ.)
31. Ptushova I. V., Konovalov D. A., Karpenko V. A., Ligaj L. V., Kuleshova S. A. *Fitohimicheskoe i farmakognosticheskoe izuchenie kornej podsolnechnika odnoletnego* [Phytochemical and pharmacognostic study of annual sunflower roots]. *Himiya rastitel'nogo syr'ya = Chemistry of plant raw material*. 2014;2:189–194. (In Russ.)
32. Melik-Guseinov V. V., Gerasimenko S. V. Biologically active substances and elemental composition of common sunflower roots. *Voprosy obespecheniya kachestva lekarstvennyh sredstv = Journal of Pharmaceuticals Quality Assurance Issues*. 2013;1:24–26. (In Russ.)
33. Melik-Guseinov V. V., Gerasimenko S. V. *Identifikatsiya fenol'nyh soedinenij v podzemnyh organah podsolnechnika odnoletnego (Asteraceae)* [Identification of phenolic compounds in the underground organs of the annual sunflower (*Asteraceae*)]. *Vestnik Moskovskogo gosudarstvennogo oblastnogo universiteta. Seriya: Estestvennye nauki*. 2013;3:34–36. (In Russ.)
34. Dyakova N. A. Development and validation of an express technique of allocation and quantitative determination of water-soluble polysaccharides of leaves of *Arctium lappa* L. *Khimija Rastitel'nogo Syr'ya = Chemistry of plant raw material*. 2018;4:81–87. (In Russ.) DOI: 10.14258/jcprm.2018042195.
35. Dyakova N. A., Slivkin A. I., Gaponov S. P., Mihajlovskaya I. Yu. Studying of dynamics of change of content of inulin in roots of *Arctium lappa* L. and *Taraxacum officinale* Webb. in the course of vegetation. *Vestnik Voronezhskogo gosudarstvennogo universiteta. Seriya: Himiya, Biologiya, Farmaciya = Proceedings of Voronezh State University. Series: Chemistry. Biology. Pharmacy*. 2016;4:133–136. (In Russ.)
36. D'yakova N. A., Slivkin A. I., Samylyna I. A., Gaponov S. P., Myndra A. A., Shushunova T. G. Development and validation of an express technique for isolation and quantitative determination of water-soluble polysaccharides from roots of *Taraxacum officinale* Wigg. *Khimiko-Farmatsevticheskii Zhurnal = Pharmaceutical Chemistry Journal*. 2018;52(4):40–43. (In Russ.) DOI: 10.30906/0023-1134-2018-52-4-40-43.
37. Bondarchuk S. S., Bondarchuk I. S. *Statobrabotka eksperimental'nyh dannyh v MS Excel* [Statistical processing of experimental data at MS Excel]. Tomsk: Izd. TGPU; 2018. 433 p. (In Russ.)
38. Rebrova O. Yu. *Statisticheskij analiz medicinskih dannyh. Primenenie paketa prikladnyh program STATISTICA* [Statistical analysis of medical data. Application package STATISTICA]. Moscow: MediaSfera; 2000. 312 p. (In Russ.)

REFERENCES

1. Dwivedi A., Sharma G. A review on Heliotropism plant: *Helianthus annuus* L. *Journal of Phytopharmacology*. 2014;3(2):149–155. DOI: 10.38001/ijlsb.535889.
2. Fowler M. W. Plants, medicines and man. *Journal of the Science of Food and Agriculture*. 2006;86(12):1797–1804. DOI: 10.1002/jsfa.2598.
3. Owens G. L., Rieseberg L. H. Hybrid incompatibility is acquired faster in annual than in perennial species of sunflower and tarweed. *Journal of Evolution*. 2014;68(3):893–900. DOI: 10.1111/evo.12297.
4. Putyrskij I. N., Prohorov V. N. *Universal'naya enciklopediya lekarstvennyh rastenij* [Universal Encyclopedia of Medicinal Plants]. Moscow: Mahaon; 2000. 656 p. (In Russ.)