

УДК 615.322

РЕГРЕССИОННЫЙ АНАЛИЗ В РАЗРАБОТКЕ МЕТОДИКИ ВЫДЕЛЕНИЯ И КОЛИЧЕСТВЕННОГО ОПРЕДЕЛЕНИЯ ВОДОРАСТВОРИМЫХ ПОЛИСАХАРИДОВ ИЗ КОРНЕЙ ОДУВАНЧИКА ЛЕКАРСТВЕННОГО

© *Н.А. Дьякова*

*Воронежский государственный университет, Университетская пл., 1,
Воронеж, 394006 (Россия), e-mail: Ninochka_V89@mail.ru*

Корни одуванчика лекарственного (*Taraxacum officinale* F.H.Wigg) отличаются богатым химическим составом и содержат водорастворимые полисахариды, основу которых составляет инулин. Цель исследования – подбор оптимальных параметров ультразвуковой экстракции водорастворимых полисахаридов из корней одуванчика лекарственного на основе регрессионного анализа. Для проведения эксперимента использовали сырье, приобретенное в одной из аптек города Воронежа. Образец сырья (1.0 г) 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 мин с кратностью от 1 до 3, при этом после каждого одного из кратных исследований производили фильтрацию, далее заливали то же сырье новым растворителем. 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 неярко выражен, путем обработки при фиксации их значений. Наиболее важными условиями экстракции корней одуванчика лекарственного для получения наиболее стабильной результативности следует считать: температура экстракции – 80 °С; кратность экстракции – 3, частота ультразвука – 35 кГц, время экстрагирования – 40 мин, соотношение сырья и экстрагента – 1 г на 10 мл, при этом измельченность сырья может варьировать от 0.2 мм до 0.5 мм.

Ключевые слова: водорастворимые полисахариды, инулин, ультразвуковая ванна, корни одуванчика лекарственного.

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

Введение

Одуванчик лекарственный (*Taraxacum officinale* F.H.Wigg (syn. *Taraxacum vulgare* Schrank, *Taraxacum dens-leonis* Desf., *Leontodon taraxacum* L.)) – многолетнее травянистое высотой до от 5 см до 35–50 см, с толстым маловетвистым стержневым корнем (до 2.5 см в диаметре, длиной до 60 см), которое сверху переходит в многоглавое короткое корневище. Синантропный вид, широко распространенный по всей территории России и стран СНГ. Встречается на лугах, полянах, лесных опушках, вырубках, по обочинам дорог, вдоль придорожных канав, на эродированных склонах, на вырубках и просеках, в садах и огородах, посевах, часто образует обширные заросли [1–3].

Корни одуванчика лекарственного содержат водорастворимые полисахариды (ВРПС) (до 40–45% инулина), моносахариды (от 0.7 до 18%), стерины, протеин (до 5%), свободные аминокислоты, каучук (до 3%), тритерпеновые сапонины (до 1.5%), дубильные вещества, слизи, смолы, воск, эфирные масла, жирное масло, органические кислоты, витамины, макро- (калий, кальций) и микроэлементы (железо, селен, цинк, марганец, медь) [4–10].

Корни одуванчика лекарственного возбуждают аппетит, усиливают секрецию желудочного сока, об-

Дьякова Нина Алексеевна – ассистент кафедры фармацевтической химии и фармацевтической технологии, e-mail: Ninochka_V89@mail.ru

ладают желчегонным, гепатопротекторным, спазмолитическим, противовоспалительным, антихолестеринемическим, антигипергликемическим

действиями [11, 12]. Благодаря широкому спектру фармакологической активности корни одуванчика лекарственного широко используются как лекарственное растительное сырье, преимущественно в виде отвара [13, 14]. Таким образом, в медицинской и фармацевтической практике используются водные извлечения из лекарственного растительного сырья одуванчика лекарственного, а фармакологический эффект обусловлен водорастворимыми соединениями, основу которых составляют ВРПС [15, 16].

Перспективным методом воздействия на лекарственное растительное сырье с целью интенсификации выделения разных биологически активных веществ, в том числе ВРПС, 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].

Цель исследования – подбор оптимальных параметров ультразвуковой ВРПС из корней одуванчика лекарственного на основе регрессионного анализа.

Экспериментальная часть

Проведение эксперимента по получению инулина из корней одуванчика лекарственного 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 (производитель ООО «Фитофарм», серия 010514). 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 г), взвешенный на весах «A&D GH-202», 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 мин с кратностью от 1 до 3, при этом после каждого одного из кратных исследований производили фильтрацию, далее заливали то же сырье новым растворителем. Осаждение ВРПС проводили 95% 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». 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 ВРПС (y , %).

Обсуждение результатов

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 (табл. 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].

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 .

Таблица 1. Результаты количественного определения ВРПС

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	40	25	10	5.25	33	0.5	80	3	40	35	5	16.74
2	1.0	80	2	40	25	10	12.91	34	2.0	60	3	40	35	10	12.03
3	1.0	80	3	40	25	10	17.63	35	2.0	70	1	40	35	10	6.57
4	1.0	80	1	40	25	15	4.84	36	2.0	70	2	40	35	10	12.65
5	1.0	80	2	40	25	15	11.52	37	2.0	70	3	40	35	10	17.19
6	1.0	80	3	40	25	15	16.1	38	2.0	80	1	40	35	10	5.45
7	1.0	80	1	40	25	20	6.77	39	2.0	80	2	40	35	10	14.28
8	1.0	80	2	40	25	20	10.65	40	2.0	80	3	40	35	10	21.37
9	1.0	80	3	40	25	20	14.91	41	0.5	80	1	30	35	10	12.34
10	1.0	80	1	40	15	10	6.08	42	0.5	80	2	30	35	10	19.39
11	1.0	80	2	40	15	10	12.44	43	0.5	80	3	30	35	10	25.45
12	1.0	80	3	40	15	10	17.36	44	0.5	80	3	40	15	10	23.14
13	1.0	80	1	50	35	10	14.25	45	0.5	80	3	40	25	10	29.52
14	1.0	80	2	50	35	10	23.72	46	0.5	80	3	50	25	10	24.63
15	1.0	80	3	50	35	10	28.56	47	1.0	70	3	40	35	10	20.81
16	1.0	80	1	40	35	10	15.35	48	1.0	80	2	50	35	10	21.36
17	1.0	80	2	40	35	10	22.18	49	0.5	80	1	50	35	10	17.17
18	1.0	80	3	40	35	10	27.74	50	1.0	70	3	50	35	15	22.25
19	0.5	60	1	40	35	10	5.7	51	0.5	80	3	40	15	20	19.08
20	0.5	60	2	40	35	10	13.15	52	0.5	80	3	40	35	15	27.09
21	0.5	60	3	40	35	10	18.39	53	1.0	70	3	50	35	20	26.72
22	0.5	70	1	40	35	10	11.64	54	0.5	80	2	50	35	10	24.51
23	0.5	70	2	40	35	10	18.37	55	1.0	80	3	50	25	10	22.19
24	0.5	70	3	40	35	10	23.29	56	1.0	80	3	50	35	10	29.48
25	0.5	80	1	40	35	10	16.95	57	1.0	80	3	50	35	15	23.84
26	0.5	80	2	40	35	10	23.63	58	0.5	80	3	40	15	15	25.6
27	0.5	80	3	40	35	10	32.89	59	0.5	80	3	40	25	20	21.75
28	1.0	60	1	40	35	10	5.04	60	0.5	80	3	50	35	10	29.42
29	1.0	60	2	40	35	10	9.25	61	1.0	80	3	50	35	20	25.56
30	1.0	60	3	40	35	10	14.37	62	0.5	80	3	40	25	15	24.38
31	0.5	80	3	40	15	5	10.65	63	0.5	80	3	40	35	20	23.52
32	0.5	80	3	40	25	5	14.63	64	1.0	80	3	40	35	20	22.91

Общее уравнение для шести переменных будет иметь вид:

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

где не учитываем аддитивную составляющую – переменную u , дающую суммарный эффект от воздействия всех неучтенных факторов и случайностей (2)

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

Регрессия линейного вида для исследуемых данных будет представлена формулой:

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

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.

Для решения общий вид уравнения регрессии будет иметь вид:

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

где x_0 неэффективный фактор, равный 1.

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

$$b = \left[\begin{matrix} x^T \\ x \end{matrix} \right]^{-1} \left[x^T \right] y_{расчетн.} \quad (5)$$

Для компактности изложения примененных некоторых стандартных вычислительных процедур представлены их результаты и описание. Введем вектор и значения наблюдений объясняющих значений функции таблицы 2, транспонируем в матрицу $[x]$ размерности количества строк по количеству переменных и количеству столбцов равному числу опытов. Затем вычислим матричное произведение двух массивов транспонированной матрицы и исходной $[x^T][x]$, затем найдем обратную матрицу $[[x^T][x]]^{-1}$ и вектор с размерностями 7×7 .

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

$$U_{\text{расчетн.}} = -46.019x_0 - 4.508x_1 + 0.387x_2 + 5.9x_3 + 0.279x_4 + 0.44x_5 - 0.072x_6. \quad (6)$$

В соответствии с формулой 6 получим расчетные значения y (табл. 2).

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 (рис.).

Из графика, представленного на рисунке, следует, что визуально расчетная ломаная прямая описывает результаты значений, полученных экспериментально, из чего предварительно можно судить о положительно 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].

Таблица 2. Расчетные значения y по уравнению регрессии для корней одуванчика лекарственного

№ опыта	Урасчетн	№ опыта	Урасчетн	№ опыта	Урасчетн	№ опыта	Урасчетн
1	8.32	18	24.52	35	4.34	52	26.69
2	14.22	19	7.23	36	10.24	53	23.27
3	20.12	20	13.13	37	16.14	54	23.66
4	8.23	21	19.03	38	8.21	55	22.90
5	14.13	22	11.10	39	14.11	56	27.30
6	20.03	23	17.00	40	20.01	57	27.22
7	8.15	24	22.90	41	12.18	58	17.89
8	14.05	25	14.97	42	18.08	59	22.21
9	19.95	26	20.87	43	23.98	60	29.56
10	3.92	27	26.77	44	17.97	61	27.14
11	9.82	28	4.98	45	22.37	62	22.29
12	15.72	29	10.88	46	25.16	63	26.61
13	15.50	30	16.78	47	20.65	64	24.35
14	21.40	31	18.05	48	21.40		
15	27.30	32	22.45	49	17.76		
16	12.72	33	26.85	50	21.15		
17	18.62	34	12.27	51	17.81		

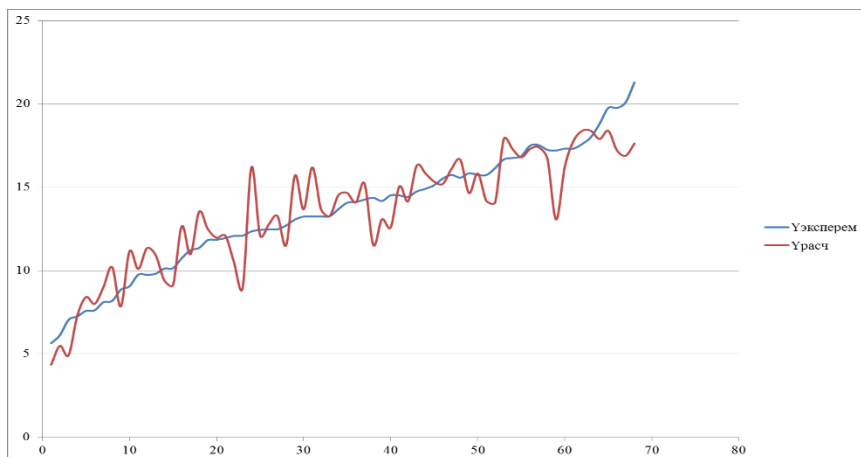


Диаграмма зависимости
Уэксперим И Урасчетн

Для нахождения общей степени согласия расхождении при оценке экспериментальных и теоретических результатов целесообразно применять χ^2 -критерий 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 $U_{\text{эмпирич}}$ и $U_{\text{расчетн}}$ распределениях, и определяется по формуле [20]:

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

Откуда, из данных таблиц 1 и 2 вычислим $\chi^2_{\text{эмпирич}}=71.05$. Критическое значение хи-квадрат является табличным значением и составит $\chi^2_{\text{таблич}}=82.5$ при количестве степеней свободы $n-1=63$ [21].

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 (табл. 3) на основе вычислений и данных из пакета анализа в программе MS Excel 2016.

Из данных таблицы 3 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.

Если фактическое значение $F > F_{\text{крит}}$, то коэффициент детерминации статистически значим, следовательно, найденная оценка уравнения регрессии адекватна при заданном уровне $\alpha=0.05$ ($F=39.94 > F_{\text{табл}}=2.62$).

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

$$e_{\text{оши}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{|y_{\text{расч}} - y_{\text{эксн}}|}{y_{\text{эксн}}} 100 = 16.13\%, \quad (8)$$

которая позволяет сделать вывод о рассеянии экспериментальных точек относительно линии регрессии в пределах 16.13%, 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 $u_{\text{эксперим}}$ (табл. 4).

Таблица 3. Матрица оценки качества регрессии F-распределения

Расшифровка расчетных показателей	Формула	Полученное значение
Коэффициент детерминации	$R^2 = \frac{\sum (y_{расч} - \bar{y})^2}{\sum (y_{эсп} - \bar{y})^2}$	0.80
Коэффициент множественной корреляции (индекс корреляции)	$R = \sqrt{\frac{\sum (y_{расч} - \bar{y})}{\sum (y_{эсп} - \bar{y})}}$	0.89
F-критерий Фишера	$F = \frac{R^2/k}{(1-R^2)/(n-m-1)}$	39.94
Критическое значение (F-критерия Фишера)	табличное значение	2.62

Таблица 4. Определение коэффициента корреляции между переменными

Показатели СКО s_{xi}	s_{x1}	s_{x2}	s_{x3}	s_{x4}	s_{x5}	s_{x6}
Значения s_{xi}	0.46	7.26	0.82	4.9	6.86	3.92
Показатели СКО $S_{уэсперим}$	$S_{уэсперим}$					
Значение $S_{уэсперим}$	7.25					
Показатели коэффициента корреляции r_i	r_1	r_2	r_3	r_4	r_5	r_6
Значения r_i	0.33	0.35	0.69	0.35	0.17	0.12

На 5% уровне коэффициент корреляции статистически значим для x_5 , x_6 и показывает удовлетворительный уровень связи. Особо ярко выражен у переменных x_1 , x_2 , x_3 , x_4 (уровень значимости более 30%).

Из анализа полученных данных следует, что теснота взаимосвязи между выбранными показателями выражена достаточным уровнем значимости. Это позволяет судить о правильном выборе параметров их значений.

Выводы

В результате проведения статистической обработки выполненного полного факторного эксперимента следует отметить, что исходные условия и полученные при проведении опытов данные позволили представить регрессионную модель в виде уравнения линейной множественной регрессии, проведенный дисперсионный анализ установил ее адекватность, а корреляционный анализ подтвердил качественное влияние факторов на результативность эксперимента. При этом уровень согласованности исходных данных по критерию Кохрена составил для корней одуванчика лекарственного $G=0.0183$ при $G_{крит}=0.064$, что подтверждает однородность и статистическую надежность условий проведения серий лабораторных исследований. Для получения расчетных функциональных зависимостей результирующего признака от шести факторных признаков эксперимента выведено уравнение множественной линейной регрессии экстрагирования ВРПС из корней одуванчика лекарственного. Оценка качества модели регрессии подтверждена проверкой гипотез по F-критерию Фишера, которое составило 39.94, при критическом значении $F_{крит}=2.62$, и χ^2 -критерию Пирсона, который составил 71.05 при табличном значении $\chi^2_{таблич}=82.5$. При определении тесноты общей взаимосвязи исходных и полученных данных использовался коэффициент корреляции $r_{y,x}$, полученный на основе значений коэффициента регрессии и среднеквадратичного отклонения, который варьировал от 0.12 до 0.69, что позволяет судить о достаточном уровне значимости и правильном выборе параметров значений факторных признаков. На основании проведенных исследований при подробном изучении воздействия каждого значимого фактора, учитывая их влияние на стабильность результативности получения ВРПС при их экстрагировании из корней одуванчика лекарственного, выделим параметры, которые в последующих опытах можно считать как наиболее предпочтительные: температура экстракции – 80 °С; кратность экстракции – 3, частота ультразвука – 35 кГц, время экстрагирования – 40 мин, соотношение сырья и экстрагента – 1 г на 10 мл, при этом измельченность сырья может варьировать от 0.2 мм до 0.5 мм.

Список литературы

1. Ботанико-фармакогносический словарь: справ. пособие / под ред. К.Ф. Блиновой, Г.П. Яковлева. М., 1990. 206 с.
2. Путьрский И.Н., Прохоров В.Н. Универсальная энциклопедия лекарственных растений. М., 2000. 656 с.
3. Куркин В.А. Фармакогнозия. Самара, 2004. 1180 с.

4. Танхаева Л.М., Олейников Д.Н. Методика количественного определения суммарного содержания полифруктанов в корнях одуванчика лекарственного (*Taraxacum officinale* Wigg.) // Химия растительного сырья. 2010. №2. С. 85–89.
5. Никитина В.С., Гайнанова Л.Т., Абдуллин М.И., Беспалова А.А. Пектиновые вещества корней лопуха обыкновенного *Arctium lappa* L. и корней одуванчика лекарственного *Taraxacum officinale* Wigg. // Химия растительного сырья. 2012. №2. С. 21–26.
6. Сущенко А.О., Компанцева Е.В. Изучение аминокислотного состава корней одуванчика лекарственного (*Taraxacum officinale* F.H.Wigg.), произрастающего на Северном Кавказе // Аспирантский вестник Поволжья. 2020. №5-6. С. 184–190.
7. Сущенко А.О., Компанцева Е.В., Благоразумная Н.В. Изучение микроэлементного состава и некоторых числовых показателей корней одуванчика лекарственного (*Taraxacum officinale* F.H.Wigg.), произрастающего на Северном Кавказе // Во имя жизни и здоровья: материалы 72-й Международной научно-практической конференции. 2019. С. 217–225.
8. Исаева Е.А. Исследование химического состава одуванчика лекарственного // Человек и медицина XXI века: традиции, инновации и приоритеты российской науки. Сборник тезисов докладов 74-й итоговой конференции СНО. 2006. С. 133–135.
9. Караева И.Т., Хмелевская А.В., Черчесова С.К. Результаты определения минерального состава инулинсодержащих растений, произрастающих в РСО-Алания // Известия Горского государственного аграрного университета. 2016. Т. 53. №3. С. 133–136.
10. Захаров В.Л., Кудашкина Т.А., Жихорева В.И. Содержание биологически активных веществ в корнях лекарственных травянистых растений // Агропромышленные технологии Центральной России. 2018. №3 (9). С. 8–15.
11. Кароматов И.Д., Давлатова М.С. Лечебные свойства лекарственного растения одуванчик // Биология и интегративная медицина. 2018. №9 (26). С. 145–164.
12. Лукашов Р.И., Гурина Н.С. Одуванчик лекарственный. Часть 2. Фармакологические свойства // Рецепт. 2019. Т. 22. №2. С. 259–265.
13. Тигунцева Н.П., Естафьев С.Н. Состав низкомолекулярных водорастворимых соединений одуванчика лекарственного *Taraxacum officinale* Wigg. // Известия вузов. Прикладная химия и биотехнология. 2012. №2 (3). С. 27–29.
14. Дьякова Н.А., Мындра А.А., Сливкин А.И., Гапонов С.П. Особенности накопления водорастворимых полисахаридов корнями одуванчика лекарственного // Вестник Воронежского государственного университета. Серия: Химия. Биология. Фармация. 2018. №2. С. 292–297.
15. Дьякова Н.А., Мындра А.А., Сливкин А.И. Безопасность и эффективность лекарственного растительного сырья одуванчика лекарственного, собранного в районах, испытывающих антропогенную нагрузку // Разработка и регистрация лекарственных средств. 2018. №2 (23). С. 120–123.
16. Дьякова Н.А., Сливкин А.И., Самылина И.А., Гапонов С.П., Мындра А.А., Шушунова Т.Г. Разработка и валидация экспресс-методики выделения и количественного определения водорастворимых полисахаридов корней одуванчика лекарственного (*Taraxacum officinale* Wigg.) // Химико-фармацевтический журнал. 2018. №4. С. 40–43. DOI: 10.30906/0023-1134-2018-52-4-40-43.
17. Молчанов Г.И., Молчанов А.А., Кубалов Л.М. Фармацевтические технологии: современные электрофизические биотехнологии в фармации. М.: Альфа-М, 2011. 336 с.
18. 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. С. 81–87. DOI: 10.14258/jcprgm.2018042195.
19. 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. С. 133–136.
20. Бондарчук С.С., Бондарчук И.С. Статобработка экспериментальных данных в MS Excel. Томск, 2018. 433 с.
21. Реброва О.Ю. Статистический анализ медицинских данных. Применение пакета прикладных программ STATISTICA. М., 2000. 312 с.

Поступила в редакцию 12 декабря 2021 г.

После переработки 9 февраля 2022 г.

Принята к публикации 21 февраля 2022 г.

Для цитирования: Дьякова Н.А. Регрессионный анализ в разработке методики выделения и количественного определения водорастворимых полисахаридов из корней одуванчика лекарственного // Химия растительного сырья. 2022. №3. С. 249–256. DOI: 10.14258/jcprgm.20220310724.

Dyakova N.A. REGRESSION ANALYSIS IN DEVELOPMENT OF PROCEDURE FOR ISOLATION AND QUANTITATIVE DETERMINATION OF WATER-SOLUBLE POLYSACCHARIDES FROM DANDELION ROOTS OF MEDICINAL

Voronezh State University, Universitetskaya pl., 1, Voronezh, 394006 (Russia), e-mail: Ninochka_V89@mail.ru

The roots of the dandelion drug (*Taraxacum officinale* F.H. Wigg) are rich in chemical composition and contain water-soluble polysaccharides based on inulin. The aim of the study is to select optimal parameters of ultrasonic extraction of water-soluble polysaccharides from dandelion roots based on regression analysis. 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 g) 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. one-year old, as well as in industrial production of water-soluble polysaccharides from this kind of raw material. 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 min 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. 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. The most important conditions for extraction of dandelion roots for obtaining the most stable performance should be considered: extraction temperature – 80 °C; extraction multiplicity – 3, ultrasound frequency – 35 kHz, extraction time – 40 min, ratio of raw material and extractant – 1 g per 10 ml, at the same time, grinding of raw material can vary from 0.2 mm to 0.5 mm.

Keywords: water-soluble polysaccharides, inulin, ultrasonic bath, roots of dandelion medicine.

References

1. *Botaniko-farmakognosticheskiy slovar': sprav. posobiye* [Botanical-pharmacognostic dictionary: Ref. allowance], ed. K.F. Blinova, G.P. Yakovlev. Moscow, 1990, 206 p. (in Russ.).
2. Putyrskiy I.N., Prokhorov V.N. *Universal'naya entsiklopediya lekarstvennykh rasteniy*. Moscow, 2000, 656 p. (in Russ.).
3. Kurkin V.A. *Farmakognosiya*. [Pharmacognosy]. Samara, 2004, 1180 p. (in Russ.).
4. Tankhayeva L.M., Oleynikov D.N. *Khimiya rastitel'nogo syr'ya*, 2010, no. 2, pp. 85–89. (in Russ.).
5. Nikitina V.S., Gaynanova L.T., Abdullin M.I., Bespalova A.A. *Khimiya rastitel'nogo syr'ya*, 2012, no. 2, pp. 21–26. (in Russ.).
6. Sushchenko A.O., Kompantseva Ye.V. *Aspirantskiy vestnik Povolzh'ya*, 2020, no. 5-6, pp. 184–190. (in Russ.).
7. Sushchenko A.O., Kompantseva Ye.V., Blagorazumnaya N.V. *Vo imya zhizni i zdorov'ya: materialy 72-y Mezhdunarodnoy nauchno-prakticheskoy konferentsii*. [For the sake of life and health: materials of the 72nd International scientific and practical conference]. 2019, pp. 217–225. (in Russ.).
8. Isayeva Ye.A. *Chelovek i meditsina XXI veka: traditsii, innovatsii i prioritety rossiyskoy nauki. Sbornik tezisov dokladov 74-y itogovoy konferentsii SNO*. [Man and medicine of the XXI century: traditions, innovations and priorities of Russian science. Collection of abstracts of the 74th final conference of the SSS]. 2006, pp. 133–135. (in Russ.).
9. Karayeva I.T., Khmelevskaya A.V., Cherchesova S.K. *Izvestiya Gorskogo gosudarstvennogo agrarnogo universiteta*, 2016, vol. 53, no. 3, pp. 133–136. (in Russ.).
10. Zakharov V.L., Kudashkina T.A., Zhikhoreva V.I. *Agropromyshlennyye tekhnologii Tsentral'noy Rossii*, 2018, no. 3 (9), pp. 8–15. (in Russ.).
11. Karomatov I.D., Davlatova M.S. *Biologiya i integrativnaya meditsina*, 2018, no. 9 (26), pp. 145–164. (in Russ.).
12. Lukashov R.I., Gurina N.S. *Retsept*, 2019, vol. 22, no. 2, pp. 259–265. (in Russ.).
13. Tiguntseva N.P., Yestaf'yev S.N. *Izvestiya vuzov. Prikladnaya khimiya i biotekhnologiya*, 2012, no. 2 (3), pp. 27–29. (in Russ.).
14. D'yakova N.A., Myndra A.A., Slivkin A.I., Gaponov S.P. *Vestnik Voronezhskogo gosudarstvennogo universiteta. Seriya: Khimiya. Biologiya. Farmatsiya*, 2018, no. 2, pp. 292–297. (in Russ.).
15. D'yakova N.A., Myndra A.A., Slivkin A.I. *Razrabotka i registratsiya lekarstvennykh sredstv*, 2018, no. 2 (23), pp. 120–123. (in Russ.).
16. D'yakova N.A., Slivkin A.I., Samylina I.A., Gaponov S.P., Myndra A.A., Shushunova T.G. *Khimiko-farmatsevticheskiy zhurnal*, 2018, no. 4, pp. 40–43. DOI: 10.30906/0023-1134-2018-52-4-40-43. (in Russ.).
17. Molchanov G.I., Molchanov A.A., Kubalov L.M. *Farmatsevticheskiye tekhnologii: sovremennyye elektrofizicheskiye biotekhnologii v farmatsii*. [Pharmaceutical technologies: modern electrophysical biotechnologies in pharmacy]. Moscow, 2011, 336 p. (in Russ.).
18. D'yakova N.A. *Khimiya rastitel'nogo syr'ya*, 2018, no. 4, pp. 81–87. DOI: 10.14258/jcprm.2018042195. (in Russ.).
19. D'yakova N.A., Slivkin A.I., Gaponov S.P., Mikhaylovskaya I.Yu. *Vestnik Voronezhskogo gosudarstvennogo universiteta. Seriya: Khimiya, Biologiya, Farmatsiya*, 2016, no. 4, pp. 133–136. (in Russ.).
20. Bondarchuk S.S., Bondarchuk I.S. *Statobrabotka eksperimental'nykh dannykh v MS Excel*. [Statistical processing of experimental data in MS Excel]. Tomsk, 2018, 433 p. (in Russ.).
21. Rebrova O.Yu. *Statisticheskiy analiz meditsinskikh dannykh. Primeneniye paketa prikladnykh programm STATISTICA*. [Statistical analysis of medical data. Application of the application package STATISTICA]. Moscow, 2000, 312 p. (in Russ.).

Received December 12, 2021

Revised February 9, 2022

Accepted February 21, 2022

For citing: Dyakova N.A. *Khimiya Rastitel'nogo Syr'ya*, 2022, no. 3, pp. 249–256. (in Russ.). DOI: 10.14258/jcprm.20220310724.