

مدل سازی نقطه ذوب لغزشی چربی های اینتراستریفیه شده به روش شیمیایی به صورت تابعی از ترکیب اسیدهای چرب

محمدحسین ناالی¹، جمشید فرمانی²، عزیزالله زرگران³

- 1- کارشناسی ارشد مهندسی علوم و صنایع غذایی، دانشکده مهندسی زراعی، دانشگاه علوم کشاورزی و منابع طبیعی ساری، ساری، ایران
- 2- نویسنده مسئول: استادیار گروه علوم و صنایع غذایی، دانشکده مهندسی زراعی، دانشگاه علوم کشاورزی و منابع طبیعی ساری، ساری، ایران
پست الکترونیکی: jamshid_farmani@yahoo.com
- 3- استادیار انستیتو تحقیقات تغذیه ای و صنایع غذایی کشور، دانشکده تغذیه و صنایع غذایی، دانشگاه علوم پزشکی شهید بهشتی، تهران، ایران

تاریخ دریافت: 94/5/24

تاریخ پذیرش: 94/8/11

چکیده

سابقه و هدف: نقطه ذوب لغزشی SMP (Slip Melting Point) یکی از ویژگی کیفی و عملکردی مهم چربی هاست. با این حال، روش های رایج اندازه گیری نقطه ذوب معمولاً زمان بر هستند. لذا در این پژوهش مدل های رگرسیونی جهت توصیف SMP چربی های اینتراستریفیه شده به صورت تابعی از ترکیب اسیدهای چرب شان ساخته شدند.

مواد و روش ها: مخلوط های روغن سویا و پالم استتارین با نسبت های مختلف تحت اینتراستریفیکاسیون شیمیایی قرار گرفتند و ترکیب اسیدهای چرب و نقطه ذوب آن ها مشخص شد. SMP مخلوط های اینتراستریفیه شده به صورت تابعی از ترکیب اسیدهای چرب با کمک آنالیزهای رگرسیونی مدل سازی شد. شاخص های نیکوئی برازش مدل های مختلف ارزیابی شد و در انتها بهترین مدل برای پیش بینی SMP چربی های اینتراستریفیه شده معرفی گردید.

یافته ها: SMP مخلوط ها بعد از اینتراستریفیکاسیون شیمیایی به شکل معنی داری کاهش یافت ($p < 0/05$). همبستگی پیرسون معنی دار بسیار خوب ($r > 0/99$) بین تمامی اسیدهای چرب و SMP مخلوط های اینتراستریفیه شده روغن سویا: پالم استتارین مشاهده شد ($p < 0/01$). بنابراین از استراتژی های زیر برای مدل سازی SMP استفاده شد: مدل سازی SMP به عنوان تابعی از اسیدهای چرب پالمیتیک، استتاریک، اولئیک، لینولئیک و لینولنیک؛ مدل سازی SMP به عنوان تابعی از اسیدهای چرب اشباع کل و اسیدهای چرب غیراشباع کل؛ مدل سازی SMP به عنوان تابعی از اسیدهای چرب اشباع کل. مدل های پیشنهادی جهت پیش بینی SMP مخلوط های اینتراستریفیه شده روغن سویا: پالم استتارین دارای ضریب همبستگی (بین داده های تجربی و پیش بینی شده) بزرگ تر از 0/99 و میانگین خطای مطلق به ترتیب کم تر از 0/52°C بود، که نشان دهنده قدرت پیش بینی بالای مدل ها می باشد.

نتیجه گیری: نتایج اعتبارسنجی نشان داد، مدل خطی چندگانه به صورت تابعی از اسیدهای چرب اشباع کل و غیراشباع کل و مدل گمپرتز به عنوان تابعی از اسیدهای چرب اشباع کل می توانند SMP چربی های مختلف اینتراستریفیه شده را به خوبی پیش بینی کنند. این مدل ها می توانند در طراحی فرمولاسیون های چربی های اینتراستریفیه مفید باشند.

واژگان کلیدی: اینتراستریفیکاسیون شیمیایی، مدل سازی، نقطه ذوب لغزشی، ترکیب اسیدهای چرب

• مقدمه

است، فرآیند اینتراستریفیکاسیون منجر به تولید اسیدهای چرب ترانس نمی گردد. این فرآیند بهترین روش جهت تولید چربی های شکل پذیر بدون ترانس، به حساب می آید (1-5). اینتراستریفیکاسیون با بازآرایی مجدد اسیدهای چرب در ستون اصلی گلیسرول بدون تغییر ترکیب شیمیایی اسیدهای

با افزایش شواهد مربوط به اثرات سوء اسیدهای چرب ترانس بر سلامت انسان مانند افزایش خطر ابتلا به بیماری های قلبی، مطالعات و قوانین نظارتی بر کاهش دریافت این ترکیبات از رژیم های غذایی تاکید دارند. برخلاف هیدروژناسیون که عامل اصلی تولید اسیدهای چرب ترانس

چرب، باعث اصلاح خواص فیزیکی و عملکردی آن ها می شود (5، 6). در طول این فرآیند خصوصیات فیزیکوشیمیایی محصولات، نظیر ترکیب تری آسیل گلیسرول، نقطه ذوب، محتوای چربی جامد (Solid fat content) SFC و رفتار بلورینه شدن دچار تغییر می گردد. بر این اساس، اینتراستریفیکاسیون معمولاً با آنالیز تری آسیل گلیسرول و تعیین نقطه ذوب و SFC کنترل می شود (7).

طبق تعریف، نقطه ذوب دمایی است که در آن تغییر حالت ماده از جامد به مایع اتفاق می افتد. با توجه به اینکه چربی های طبیعی مخلوط پیچیده ای از ترکیبات مختلف هستند، تبدیل آن ها به شکل مایع کامل از طریق نرم شدن تدریجی انجام می شود. در نتیجه، این ترکیبات بر خلاف مواد خالص دارای نقطه ذوب دقیقی نمی باشند. نقطه ذوب از مهم ترین ویژگی های فیزیکی چربی ها جهت کنترل کیفی و ساخت محصولات چرب است. عواملی نظیر درجه غیراشباعیت، طول زنجیره کربنی، اشکال ایزومریک (سیس و ترانس) اسیدهای چرب و موقعیت آن ها در ستون اصلی گلیسرول و همچنین زمان و شرایط تمپرینگ بر نقطه ذوب چربی ها اثرگذار است (8، 9). روش های مختلفی نظیر نقطه ذوب وایلی (Wiley)، نقطه ذوب لغزشی SMP (Slip melting point)، نقطه نرم شدن (Softening point) و تکنیک های دستگاهی شامل نقطه ذوب متلر (Mettler melting point) و گرماسنجی پویشی افتراقی (Differential scanning calorimetry) جهت بررسی نقطه ذوب چربی ها موجود است (10). SMP به عنوان دمایی تعریف می شود که در آن چربی در یک لوله موئین باز شروع به حرکت می کند. در دمای SMP، چربی ها تقریباً حاوی 4% چربی جامد هستند. در واقع، در این روش ابتدای محدوده ذوبی اندازه گیری می شود. این روش اگرچه روش ساده ای است، اما نمونه ها حتماً به یک مرحله تمپرینگ طولانی مدت (16 ساعت) نیاز دارند (9، 11). در صنعت عملاً از مدت زمان کوتاه تری (1 ساعت) بدین منظور استفاده می شود، که نتایج در این شرایط دارای نوسان و همراه با خطای انسانی و عدم دقت لازم می باشد. در این زمینه، پیش بینی SMP بر طبق ترکیب اسیدهای چرب (که تحت تأثیر اینتراستریفیکاسیون قرار نمی گیرد و ابزار آنالیز آن (کروماتوگرافی گازی) بسیار معمول است) می تواند به صرفه جویی در زمان، کاهش خطای انسانی و به تولید فرمولاسیون چربی های بازساخته کمک فراوانی کند.

ترکیب تری آسیل گلیسرول مهم ترین عامل تعیین کننده خواص فیزیکی چربی ها است. توزیع اسیدهای چرب در داخل تری آسیل گلیسرول روغن ها و چربی های طبیعی به صورت انتخابی می باشد. در حقیقت اسیدهای چرب غیراشباع غالباً موقعیت Sn-2 مولکول تری آسیل گلیسرول اکثر روغن ها و چربی ها را اشغال می کنند (تئوری توزیع 1 و 3 رندوم، 2 رندوم). بر این اساس، مخلوط های مختلف روغن ها/چربی های طبیعی، با وجود داشتن ترکیب اسید چرب یکسان، لزوماً ترکیب تری آسیل گلیسرول و به تبع آن خصوصیات فیزیکی مشابهی نخواهند داشت. به دنبال اینتراستریفیکاسیون شیمیایی، اسیدهای چرب به صورت تصادفی بین تری آسیل گلیسرول ها باز-توزیع می شوند (تئوری توزیع کاملاً تصادفی). واکنش در نهایت زمانی که همه تری آسیل گلیسرول های ممکن ساخته شد، به حالت تعادل می رسد (7، 8، 11). به دلیل توزیع کاملاً تصادفی اسیدهای چرب به دنبال اینتراستریفیکاسیون، می توان نتیجه گرفت که ساختار تری آسیل گلیسرول ها تنها تابعی از ترکیب اسیدهای چرب مخلوط های اینتراستریفیه شده است (12). از نظر تئوری، اینتراستریفیکاسیون شیمیایی مجزای دو چربی مختلف با ترکیب تری آسیل گلیسرول متفاوت اما ترکیب اسید چرب یکسان، به ترکیب تری آسیل گلیسرول مشابه و به تبع آن خصوصیات فیزیکی یکسان منتج خواهد شد (7). تغییرات ساختار تری آسیل گلیسرول ها بر اثر فرآیند اینتراستریفیکاسیون، تغییرات نقطه ذوب را موجب می شود (13). از این رو، یک مدل ریاضی که به توصیف رابطه بین SMP و ترکیب اسیدهای چرب بپردازد، می تواند در پیش بینی نتایج اینتراستریفیکاسیون مفید باشد.

تاکنون، مطالعات اندکی در زمینه مدل سازی نقطه ذوب چربی های اینتراستریفیه شده منتشر شده است. Boyaci و همکاران (12) استفاده از یک تابع خطی چندگانه در جهت ارتباط SMP با مقادیر پنج اسید چرب (پالمیتیک، استئاریک، اولئیک، لینولئیک و لینولنیک) را مورد ارزیابی قرار دادند. آن ها از روش حداقل مربعات برای محاسبه ضرایب ویژه هر یک از این اسیدهای چرب قبل و بعد از اینتراستریفیکاسیون استفاده و از این ضرایب و ترکیب اسید چرب روغن ها در جهت محاسبه SMP بهره گرفتند. مقایسه مقادیر محاسباتی و آزمایشگاهی SMP، رابطه خطی بین این مقادیر قبل از اینتراستریفیکاسیون را نشان نمی دهد (زیرا با توجه به توزیع انتخابی اسیدهای چرب در این مخلوط ها، ترکیب اسید چرب

مدل‌ها در تخمین SMP نمونه‌های اینتراستریفیه شده مربوط به سایر مطالعات نیز مورد ارزیابی قرار گرفت. در انتها بهترین مدل در جهت پیش‌بینی SMP چربی‌های اینتراستریفیه شده به‌عنوان تابعی از ترکیب اسیدهای چرب معرفی شد.

• مواد و روش‌ها

مواد: روغن سویا (خنثی، رنگبری و بی بو شده) و پالم استئارین اهدایی از شرکت روغن گیاهی نوش آذر (تهران، ایران) بود. روغن‌ها پس از تهیه، تا زمان استفاده در دمای یخچال نگهداری شدند. متوکسید سدیم از شرکت مرک (آلمان) خریداری گردید. خاک رنگبر و خاک کمک صافی از شرکت روغن گیاهی پرتو دانه خزر (بهشهر، ایران) تهیه شد. سایر مواد شیمیایی با درجه کروماتوگرافی یا تجزیه‌ای از شرکت مرک (آلمان) خریداری شدند.

تهیه مخلوط روغن‌ها: مخلوط‌های دوتایی روغن سویا: پالم استئارین با نسبت‌های 10:90، 20:80، 30:70، 40:60، 50:50، 60:40، 70:30، 80:20، 90:10 و 100:00 (وزنی/وزنی) تهیه و جهت حذف کامل رطوبت، به مدت 15 دقیقه، تحت فشار مطلق 0/8 بار و همزدن توسط همزن مغناطیسی با دور 300 rpm مخلوط گردید. از مخلوط‌های حاصل جهت آزمایش‌های مربوط به نمونه‌های اولیه نمونه-گیری شد.

اینتراستریفیکاسیون شیمیایی: ابتدا مخلوط‌های چربی در یک ارلن بوخنر در دمای 100 °C تحت خلا (0/2 بار مطلق) به مدت 20 دقیقه خشک شدند. اینتراستریفیکاسیون شیمیایی در یک ارلن بوخنر به وسیله 0/5 درصد (وزنی/وزنی) متوکسید سدیم پودری در دمای 90 °C، تحت خلا (0/2 بار مطلق)، همزنی 300 rpm و به مدت 1 ساعت صورت گرفت. واکنش با افزودن 2 درصد (وزنی/وزنی) محلول آبی 20 درصد اسید سیتریک، تحت همزنی 300 rpm و خلا 0/2 بار مطلق به مدت 15 دقیقه غیر فعال شد. در ادامه جهت جداسازی کاتالیست، عملیات رنگبری به مدت 15 دقیقه با افزودن 1/5 درصد (وزنی/وزنی) خاک رنگبر به مخلوط روغنی و حرارت دادن (در 110 °C) تحت خلا و دور 300 rpm انجام گرفت. کاتالیست و خاک رنگبر با استفاده از قیف بوخنر و کاغذ صافی آغشته شده به کمک خاک صافی از روغن جدا شد (جهت حذف کامل صابون، عملیات رنگبری دو بار انجام شد). از روغن صاف شده جهت انجام مراحل بعدی استفاده گردید (4).

اندازه‌گیری ترکیب اسیدهای چرب: آماده‌سازی متیل استر اسیدهای چرب مطابق روش AOCS Ce 2-66 و آنالیز آن‌ها با

تنها عامل مؤثر بر SMP این مخلوط‌ها نیست)، در حالی که SMP مخلوط‌های اینتراستریفیه شده به دلیل توزیع کاملاً تصادفی اسیدهای چرب با دقت خوبی ($r=0/956$) قابل تخمین بود. فرمانی و همکاران (2) همبستگی خطی خوبی ($R^2>0/99$) را بین میزان کل اسیدهای چرب اشباع و SMP مخلوط‌های سه‌تایی سویای کاملاً هیدروژنه، روغن کانولا و آفتابگردان که به طریقه آنزیمی اینتراستریفیه شده بودند، گزارش کردند. Fasina و همکاران (14) به یک رابطه خطی با همبستگی خوب ($R^2>0/95$) بین خصوصیات ذوبی (دمای شروع ذوب شدن، دمای پایان ذوب شدن، نقطه اوج دمای ذوب و آنتالپی ذوب) 12 گونه روغن گیاهی که توسط گرماسنجی پویا افتراقی مورد بررسی قرار گرفته بودند و مقدار اسیدهای چرب تک غیراشباع و چند غیراشباع دست یافتند. نتایج تحقیقات آن‌ها یک همبستگی ضعیف ($R^2=0/27$) بین خصوصیات ذوبی و اسیدهای چرب اشباع را نشان می‌دهد که از این مسئله از واقعیت دور به نظر می‌رسد. ابراهیمی (10) از مدل‌های رگرسیونی خطی چندگانه (به منظور بررسی تأثیر همزمان اسیدهای چرب بر روی متغیر پاسخ) و چندین نوع از توابع سیگموئیدی (به‌صورت تابعی از اسیدهای چرب اشباع) جهت پیش‌بینی مقادیر SMP مخلوط‌های دوتایی پالم اولئین کاملاً هیدروژنه شده و روغن سویا اینتراستریفیه شده آنزیمی، استفاده کرده است. بر اساس مطالعات وی، مدل سیگموئیدی Gompertz به دلیل دارا بودن بیشترین ضریب تعیین (0/99) و کم‌ترین میانگین خطای مطلق (0/30 درصد) نسبت به داده‌های آزمایشگاهی، مناسب‌ترین مدل پیشنهادی در راستای پیش‌بینی SMP چربی‌های اینتراستریفیه به‌صورت تابعی از ترکیب اسیدهای چرب می‌باشد.

هدف مطالعه حاضر دستیابی به یک مدل ریاضی ساده جهت پیش‌بینی SMP مخلوط‌های روغنی اینتراستریفیه شده بر اساس ترکیب اسیدهای چرب آن‌ها می‌باشد. در اولین بخش تحقیق، مخلوط‌های روغن سویا و پالم استئارین با نسبت‌های مختلف تهیه و تحت اینتراستریفیکاسیون شیمیایی قرار گرفت و ترکیب اسید چرب و SMP مخلوط‌ها تعیین شد. در دومین قسمت، کفایت ترکیب اسیدهای چرب در پیش‌بینی SMP مخلوط‌های اینتراستریفیه شده در جهت انتخاب متغیر مستقل به کمک ضرایب همبستگی پیرسون (Pearson correlation coefficients) مورد ارزیابی قرار گرفت. همچنین توانایی چند نوع مختلف از مدل‌های رگرسیونی در پیش‌بینی SMP نسبت به مقادیر آزمایشگاهی بررسی شد. در آخرین مرحله اعتبار

(Mean Absolute Error) توسط نسخه 10 نرم افزار STATISTICA (تلسا، آمریکا) محاسبه و ارزیابی شدند. در انتها جهت اعتباربخشی به مدل های ساخته شده، مقادیر SMP مخلوط های اینتراستریفیه شده مختلف (از کارهای دیگران) به کمک مدل پیشنهادی پیش بینی و با مقادیر واقعی آزمایشگاهی شان مورد برازش قرار گرفت. آزمایش ها در قالب طرح کاملاً تصادفی با سه تکرار انجام شد. مقایسه میانگین ها از طریق آزمون آنالیز واریانس یک طرفه در سطح $p < 0/05$ و با استفاده از نرم افزار 21 نرم افزار SPSS انجام شد.

• یافته ها

ترکیب اسیدهای چرب و نقطه ذوب لغزشی: به طور کلی ترکیب اسیدهای چرب از اصلی ترین فاکتورهای مؤثر بر نقطه ذوب چربی ها می باشد. جدول 1 ترکیب اسیدهای چرب و SMP مخلوط ها قبل و بعد از اینتراستریفیکاسیون شیمیایی را نشان می دهد. پالمیتیک و اولئیک اسید به ترتیب با 52/9 و 30/1 درصد اسیدهای چرب غالب پالم استئارین و لینولئیک اسید (به عنوان یک اسید چرب ضروری) و اولئیک اسید به ترتیب با 53/3 و 22 درصد اسیدهای چرب غالب روغن سویا بودند (جدول 1). افزودن روغن سویا به پالم استئارین باعث افزایش محتوای اسیدهای چرب چند غیراشباع گردید که این مسئله در ساخت یک چربی سالم دارای جذابیت است (16). اسیدهای چرب پالمیتیک، استئاریک، اولئیک، لینولئیک و لینولنیک بیش از 97 درصد از کل اسیدهای چرب مخلوط ها را تشکیل می دادند (جدول 1). بر اساس نتایج جدول 1، بنابر انتظار با افزایش نسبت پالم استئارین در مخلوط ها، به دلیل افزایش تری آسیل گلیسرول های سه اشباعی (با نقطه ذوب بالا)، SMP نیز افزایش یافت ($p < 0/05$). اینتراستریفیکاسیون به شکل معنی داری باعث کاهش ($2-10^{\circ}\text{C}$) SMP مخلوط ها شد ($p < 0/05$). با افزایش سهم پالم استئارین در مخلوط های روغنی با یک روند کلی اختلاف SMP قبل و بعد از اینتراستریفیکاسیون کاهش می یابد. به گونه ای که مخلوط هایی که دارای درصد بالاتری از پالم استئارین هستند، اختلاف SMP قبل و بعد کمتری را نسبت به مخلوط های حاوی روغن سویای بیشتر، از خود نشان می دهند.

دستگاه کروماتوگرافی گاز-مایع ساخت شرکت Agilent (آمریکا) مدل 6100 و بر طبق روش 91-AOCS 1Ce انجام گردید (15). دستگاه مجهز به جایگاه تزریق دوپاره کننده (Splited) و آشکارساز یونیزاسیون شعله بود. نام ستون موئینه CP Sil 88، طول، قطر داخلی و ضخامت آن به ترتیب 100 متر، 0/25 میلی متر و 0/25 میکرومتر بود. نسبت دوپارگی (Split Ratio) 40، گاز حامل نیتروژن و دمای آشکارساز و جایگاه تزریق به ترتیب 280 و 240°C بود. دمای راه اندازی ستون 198°C و فشار سر ستون 29/5 PSI بود.

اندازه گیری نقطه ذوب لغزشی: اندازه گیری SMP بر اساس روش لوله موئین باز 25-3-AOCS Cc انجام گرفت (15). نمونه ها تا 10°C بالاتر از نقطه ذوب شان مایع و سپس لوله موئین در داخل ظرف نمونه فرو برده شد تا روغن حدود 1 سانتی متر از لوله موئین بالا برود. جداره بیرونی لوله موئین حاوی نمونه با پنبه پاک گردید و سریعاً در بن ماری آب یخ فرو برده شد تا روغن جامد شود. سپس نمونه ها به مدت 16 ساعت در دمای $1 \pm 6^{\circ}\text{C}$ قرار گرفت. پس از گذشتن این زمان لوله موئین ها به دماسنج متصل و در یک بشر 600 میلی لیتری که حاوی آب با دمای حداقل 10°C کمتر از نقطه ذوب احتمالی نمونه، قرار داده شد. زمانی که اولین لغزش چربی به سمت بالا در لوله موئین مشاهده گردید، به عنوان SMP نمونه در نظر گرفته شد.

مدل سازی و تجزیه تحلیل آماری: به منظور بررسی همبستگی بین SMP و ترکیب اسیدهای چرب، ضرایب همبستگی پیرسون با استفاده از نسخه 21 نرم افزار SPSS (نیویورک، آمریکا) محاسبه شد. مدل سازی SMP به صورت تابعی از اسیدهای چرب با کمک آنالیزهای رگرسیونی و در مورد توابع سیگموئیدی و درجه 2 توسط نسخه 12 نرم افزار Sigma Plot (سیستات، آمریکا) و در رابطه با توابع خطی چندگانه به وسیله نسخه 21 نرم افزار SPSS انجام گرفت. در راستای سنجش توانایی و دقت مدل های ساخته شده، برازش بین داده های تجربی و آزمایشگاهی با بهره گیری از معیارهای سنجش دقت از جمله ضریب همبستگی (r)، ضریب تعیین (R^2)، خطای استاندارد (Standard Error) SE با استفاده از نرم افزار SigmaPlot و همچنین میانگین خطای مطلق MAE

جدول 1. ترکیب اسیدهای چرب و نقطه ذوب لغزشی مخلوطهای اینتراستریفیه شده شیمیایی روغن سویا: پالم استئارین

SMP (°C)		ترکیب اسید چرب (%)								مخلوطها
بعد	قبل	PUFA	UFA	SFA	18:3	18:2	18:1	18:0	16:0	
-	-	60/6	83/6	16/2	7/3±0/03	53/3±0/07	22/0±0/05	4/5±0/01	11/6±0/03	PS:SBO 0:100
24/6 ^b	33/7 ^a	55/3	79/1	20/7	6/6±0/02	48/7±0/05	22/8±0/04	4/6±0/02	15/2±0/02	10:90
27/4 ^b	37/1 ^a	50/1	74/8	25/2	5/8±0/02	44/2±0/03	23/8±0/02	4/8±0/02	19/4±0/04	20:80
30/6 ^b	39/1 ^a	44/8	70/1	29/6	5/1±0/02	39/6±0/03	24/4±0/03	4/9±0/03	24/0±0/02	30:70
33/3 ^b	42/5 ^a	39/5	65/6	34/1	4/4±0/01	35/1±0/02	25/2±0/04	5/1±0/02	28/0±0/02	40:60
36/3 ^b	44/6 ^a	34/2	61/1	38/5	3/7±0/02	30/5±0/05	26/0±0/02	5/3±0/04	32/4±0/04	50:50
38/8 ^b	47 ^a	29/0	56/6	43/0	3/0±0/03	26/0±0/02	26/90±0/05	5/4±0/03	38/4±0/03	60:40
41/6 ^b	47/8 ^a	23/7	52/1	47/4	2/2±0/06	21/4±0/02	27/7±0/06	5/6±0/02	40/5±0/02	70:30
44/4 ^b	48/9 ^a	18/4	47/6	51/9	1/5±0/03	16/9±0/03	28/5±0/02	5/8±0/03	44/6±0/07	80:20
47/9 ^b	50/0 ^a	13/2	43/1	56/3	0/8±0/02	12/3±0/06	29/3±0/03	5/9±0/05	48/7±0/04	90:10
49/8 ^b	52/8 ^a	38/6	7/9	60/8	0/1±0	7/8±0/02	30/1±0/05	6/1±0/03	52/9±0/06	100:0

نتایج به صورت میانگین سه تکرار $\pm$ انحراف معیار بیان شده است. در هر ردیف، داده‌های نشان داده شده با بالانویس‌های متفاوت دارای اختلاف معنی‌دار در $p < 0/05$ می‌باشند؛ PS، پالم استئارین؛ SBO، روغن سویا؛ SFA، اسیدهای چرب اشباع (مجموع 14:0، 16:0 و 18:0)؛ UFA، اسیدهای چرب غیراشباع (مجموع 18:1، 18:2 و 18:3)؛ PUFA، اسیدهای چرب چند غیراشباع (مجموع 18:2 و 18:3)؛ SMP، نقطه ذوب لغزشی.

است (7). بر اساس نتایج جدول 2، تمامی متغیرهای مستقل مورد ارزیابی همبستگی معنی‌دار بسیار خوبی ($r > 0/99$) را با متغیر پاسخ (SMP) نشان می‌دهند ($p < 0/01$) و همه آن‌ها قابلیت بالایی در انتخاب به عنوان متغیر مستقل دارند. متغیرهای پالمیتیک، استئاریک و اسیدهای چرب اشباع کل دارای نقطه ذوب بالایی هستند و بنابر انتظار یک همبستگی مثبت معنی‌دار بین این اسیدهای چرب با SMP مشاهده شد (جدول 2). بر خلاف اسیدهای چرب اشباع، متغیرهای اولئیک، لینولئیک، لینولنیک و اسیدهای چرب غیراشباع کل با توجه به اینکه دارای نقطه ذوبی کمتر از 5°C هستند، اثری منفی بر SMP داشتند (جدول 2).

همبستگی نقطه ذوب لغزشی و ترکیب اسیدهای چرب:

به منظور تشخیص متغیرهایی که دارای همبستگی بیشتر با SMP هستند، ضرایب همبستگی پیرسون بین SMP و اسیدهای چرب پالمیتیک، استئاریک، اولئیک، لینولئیک، لینولنیک، اسیدهای چرب غیراشباع کل و اسیدهای چرب اشباع کل محاسبه شد (جدول 2). ضریب همبستگی پیرسون ارتباط اساسی میان متغیرها را به تصویر می‌کشد. این پارامتر بین 1- و 1 است. اگر دو متغیر تمایل به افزایش با هم را داشته باشند، ضریب همبستگی آن‌ها مثبت خواهد بود. در مقابل، اگر یکی از متغیرها تمایل به افزایش به دنبال کاهش دیگری را داشته باشد، در این شرایط ضریب همبستگی منفی

جدول 2. ضرایب همبستگی پیرسون بین نقطه ذوب لغزشی و ساختار اسیدهای چرب مخلوطهای اینتراستریفیه شده روغن سویا: پالم استئارین

PUFA	UFA	SFA	18:3	18:2	18:1	18:0	16:0	SMP	
-0/998 ^a	-0/997 ^a	0/998 ^a	-0/998 ^a	-0/998 ^a	0/998 ^a	0/998 ^a	0/998 ^a	1	SMP
-1/000 ^a	-1/000 ^a	1/000 ^a	-1/000 ^a	-1/000 ^a	0/999 ^a	1/000 ^a	1	0/998 ^a	16:0
-1/000 ^a	-1/000 ^a	1/000 ^a	-1/000 ^a	-1/000 ^a	1/000 ^a	1	1/000 ^a	0/998 ^a	18:0
-1/000 ^a	-1/000 ^a	1/000 ^a	-1/000 ^a	-1/000 ^a	1	1/000 ^a	0/999 ^a	0/998 ^a	18:1
1/000 ^a	1/000 ^a	-1/000 ^a	1/000 ^a	1	-1/000 ^a	-1/000 ^a	-1/000 ^a	-0/998 ^a	18:2
1/000 ^a	1/000 ^a	-1/000 ^a	1	1/000 ^a	-1/000 ^a	-1/000 ^a	-1/000 ^a	-0/998 ^a	18:3
-1/000 ^a	-1/000 ^a	1	-1/000 ^a	-1/000 ^a	1/000 ^a	1/000 ^a	1/000 ^a	0/998 ^a	SFA
1/000 ^a	1	-1/000 ^a	1/000 ^a	1/000 ^a	-1/000 ^a	-1/000 ^a	-1/000 ^a	-0/997 ^a	USFA
1	1/000 ^a	-1/000 ^a	1/000 ^a	1/000 ^a	-1/000 ^a	-1/000 ^a	-1/000 ^a	-0/998 ^a	PUFA

بالانویس a نشان دهنده معنی‌داری همبستگی در سطح 0/01 می‌باشد؛ SFA، اسیدهای چرب اشباع (مجموع 14:0، 16:0 و 18:0)؛ UFA، اسیدهای چرب غیراشباع (مجموع 18:1، 18:2 و 18:3)؛ PUFA، اسیدهای چرب چند غیراشباع (مجموع 18:2 و 18:3)؛ SMP، نقطه ذوب لغزشی.

همبستگی بسیار قوی ($r=1/0$) بین اسیدهای چرب غیراشباع و اشباع بر قرار است (جدول 2). از سوی دیگر، به دلیل اینکه مجموع اسیدهای چرب موجود در چربی 100 درصد است، افزایش و یا کاهش هر یک بر مقادیر سایر آن ها تأثیرگذار خواهد بود. در واقع، توزیع آماری اولئیک، لینولئیک، لینولنیک و اسیدهای چرب غیراشباع کل کاملاً تحت تأثیر مقادیر اسیدهای چرب اشباع کل، پالمیتیک و استئاریک می باشد. در نتیجه می توان با بهره گیری از متغیرهای مستقل ترکیبی اسیدهای چرب اشباع کل و اسیدهای چرب غیراشباع کل که به ترتیب مجموعی از تمامی اسیدهای چرب غیراشباع و اشباع می باشند، مدلی ساده تر ارائه داد. اثر متغیرهای مستقل اسیدهای چرب اشباع کل و اسیدهای غیراشباع کل بر SMP را می توان به شکل زیر نشان داد:

$$\text{معادله 2} \quad \text{SMP} = a(\text{SFA}) + b(\text{UFA}) + f$$

که در این رابطه a و b ضرایب رگرسیون و f مقدار ثابت رگرسیون می باشند، SFA و UFA به ترتیب درصد اسیدهای چرب اشباع کل و اسیدهای چرب غیراشباع کل می باشد. ضرایب و شاخص های نیکویی برازش مدل در جدول 3 ارائه شده است. بر اساس جدول 3، مدل قدرت بالایی در پیش بینی SMP مخلوط های اینتراستریفیه شده روغن سویا: پالم استئارین دارد (به ترتیب با ضریب تعیین و میانگین خطای مطلق 0/998 و 0/21 °C).

مدل سازی نقطه ذوب لغزشی به عنوان تابعی از اسیدهای چرب اشباع کل: مطالعات گذشته نشان می دهد، SFC و به تبع آن SMP چربی ها می تواند به شکل بهتری توسط اسیدهای چرب اشباع توصیف شود (19، 18، 2). پالمیتیک و استئاریک اسید اسیدهای چرب اصلی مخلوط ها بودند و مقدار آن ها به ترتیب در محدوده 15/2-52/9 و 4/6-6/1 درصد قرار داشت (جدول 1). به منظور ساده سازی مدل و همچنین اعمال تأثیر همزمان هر دو اسید چرب پالمیتیک و استئاریک، اسیدهای چرب اشباع کل (که در عمل مجموعی از این دو اسید چرب است) به عنوان متغیر مستقل ترکیبی یگانه انتخاب گردید. از این رو SMP به عنوان تابعی از اسیدهای چرب اشباع کل ($\text{SMP}_{(SFA)}$) به کمک توابع خطی ساده (معادله 3)، درجه 2 (معادله 4) و دو تابع سیگموئیدی سیگموئید (معادله 5) و گمپترز (معادله 6) مدل سازی شد. ضرایب همبستگی و شاخص های نیکویی برازش این مدل ها در جدول 3 ارائه شده است. بر اساس نتایج جدول 3، تمامی این مدل های یگانه (تک متغیره) توانایی خوبی در پیش بینی SMP

مدل سازی نقطه ذوب لغزشی به صورت ترکیب اسیدهای

چرب: با توجه به این که SMP با یکایک اسیدهای چرب همبستگی بسیار بالایی نشان داد (جدول 2) از استراتژی های زیر برای مدل سازی استفاده شد: 1- مدل سازی SMP به عنوان تابعی از اسیدهای چرب پالمیتیک، استئاریک، اولئیک، لینولئیک و لینولنیک 2- مدل سازی SMP به عنوان تابعی از اسیدهای چرب اشباع کل و اسیدهای چرب غیراشباع کل 3- مدل سازی SMP به عنوان تابعی از اسیدهای چرب اشباع کل.

مدل سازی نقطه ذوب لغزشی به عنوان تابعی از اسیدهای

چرب پالمیتیک، استئاریک، اولئیک، لینولئیک و لینولنیک: از آن جا که اسیدهای چرب پالمیتیک، استئاریک، اولئیک، لینولئیک و لینولنیک تقریباً تمام ترکیب اسیدهای چرب مخلوط های اینتراستریفیه شده روغن سویا: پالم استئارین را به خود اختصاص داده اند (جدول 1)، پس می توان انتظار داشت که ویژگی های فیزیکوشیمیایی این مخلوط ها تا اندازه زیادی متأثر از نسبت این اسیدهای چرب است. در نتیجه می توان از رگرسیون های خطی چندگانه (چند متغیره) جهت بررسی تأثیر همزمان همه این اسیدهای چرب بر SMP بهره گرفت. به کمک رگرسیون های چندگانه می توان همزمان به تحلیل و بررسی چندین متغیر مختلف پرداخت. رگرسیون چندگانه در حقیقت، ارتباط بین یک سری از متغیرهای پیشگو را با متغیر پاسخ مورد نظر بیان می کند (17). رابطه بین متغیرهای مستقل اسیدهای چرب پالمیتیک، استئاریک، اولئیک، لینولئیک و لینولنیک و متغیر وابسته SMP به کمک توابع خطی چندگانه به شکل زیر می باشد:

معادله 1

$$\text{SMP} = a(P) + b(S) + c(O) + d(L) + e(Ln) + f$$

در رابطه بالا a, b, c, d و e ضرایب رگرسیون و f مقدار ثابت رگرسیون می باشند که مسئول برآورد متغیر پاسخ هستند. P, S, O, L و Ln به ترتیب درصد اسیدهای چرب پالمیتیک، استئاریک، اولئیک، لینولئیک و لینولنیک است. ضرایب و شاخص های نیکویی برازش مدل در جدول 3 ارائه شده است. این مدل با توجه به ضریب تعیین بالا (0/999) و میانگین خطای مطلق کم (0/13 °C) بالاترین توانایی در پیش بینی SMP مخلوط های اینتراستریفیه شده روغن سویا: پالم استئارین را بین تمام مدل های پیشنهادی از خود نشان می دهد (جدول 3).

مدل سازی نقطه ذوب لغزشی به عنوان تابعی از اسیدهای

چرب اشباع کل و اسیدهای چرب غیراشباع کل: یک

SMP مخلوط‌های اینتراستریفیه شده به صورت تابعی از اسیدهای چرب اشباع کل به کمک دو تابع سیگموئیدی سیگموئید (معادله 5) و گمپرتز (معادله 6) به صورت زیر قابل برازش است:

معادله 5

$$SMP = \frac{a}{1 + e^{-\left(\frac{SFA-c}{b}\right)}}$$

معادله 6

$$SMP = ae^{-e^{-\left(\frac{SFA-c}{b}\right)}}$$

a؛ مجانب بالا، b؛ عرض از مبدأ، c؛ نرخ برش، e؛ عدد اویلر (e=2.71828) و SFA؛ درصد اسیدهای چرب اشباع کل می‌باشد.

(SFA) از خود نشان دادند. در بین مدل‌های یگانه، مدل سیگموئیدی گمپرتز دارای بهترین شاخص‌های نیکویی برازش (به ترتیب با ضریب همبستگی و میانگین خطای مطلق 0/999 و 0/21°C) بود (جدول 3). تأثیر اسیدهای چرب اشباع کل به عنوان متغیر مستقل یگانه بر SMP را به کمک تابع خطی ساده می‌توان به شکل مدل زیر ارائه داد:

$$SMP = a(SFA) + c$$

معادله 3

در این معادله a، c و SFA به ترتیب ضریب رگرسیون (شیب خط رگرسیون)، ثابت رگرسیون (عرض از مبدأ) و درصد اسیدهای چرب اشباع کل می‌باشد.

ارتباط بین SMP و اسیدهای چرب اشباع کل را به کمک تابع درجه 2 به شکل زیر می‌باشد:

$$SMP = a(SFA)^2 + b(SFA) + c$$

معادله 4

در معادله بالا a و b ضرایب رگرسیون و c و SFA به ترتیب ثابت رگرسیون و درصد اسیدهای چرب اشباع کل می‌باشد.

جدول 3. ضرایب و شاخص‌های نیکویی برازش مدل‌های پیشنهادی در جهت پیش‌بینی نقطه ذوب لغزشی مخلوط‌های اینتراستریفیه شده روغن سویا؛ پالم استتارین به صورت تابعی از ترکیب اسیدهای چرب

شاخص‌های نیکویی برازش مدل‌ها				ضرایب همبستگی مدل‌ها						مدل‌های پیشنهادی
MAE	SE	R ²	r	f	e	d	c	b	a	
0/13	0/25	0/999	0/999	0	62/17	-9/333	-0/327	14/213	0/706	مدل‌های خطی چندگانه
0/21	0/29	0/998	0/999	131/937	-	-	-	-1/201	-0/58	تابعی از Ln، O، S، P و L
										تابعی از SFA و UFA
										مدل‌های یگانه SMP _(SFA)
0/27	0/33	0/997	0/999	-	-	-	11/5698	-	0/6356	خطی ساده
0/52	0/68	0/995	0/997	-	-	-	10/6514	0/6855	-0/0006	درجه 2
0/24	0/32	0/998	0/999	-	-	-	38/3114	27/3726	71/9064	سیگموئیدی سیگموئید
0/21	0/30	0/999	0/999	-	-	-	34/8922	51/986	91/7998	سیگموئیدی گمپرتز

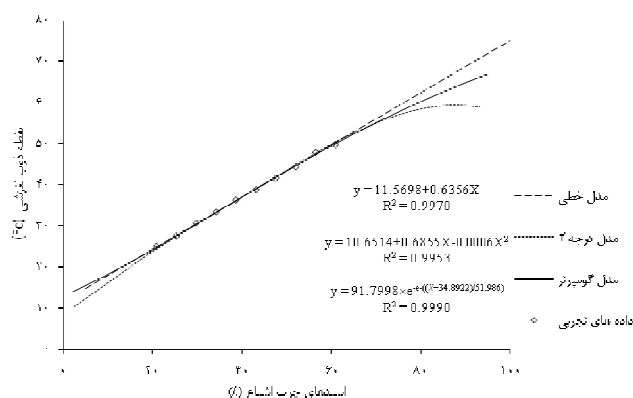
P، پالمیتیک اسید؛ S، استتاریک اسید؛ L، لینولنیک اسید؛ Ln، لینولنیک اسید؛ SFA، اسیدهای چرب اشباع (مجموع 14:0، 16:0 و 18:0)؛ UFA، اسیدهای چرب غیراشباع (مجموع 18:1، 18:2 و 18:3)؛ r، ضریب همبستگی بین داده‌های آزمایشگاهی و پیش‌بینی شده؛ R²، ضریب تعیین؛ SE، خطای استاندارد؛ MAE، میانگین خطای مطلق؛ SMP_(SFA)، نقطه ذوب لغزشی به صورت تابعی از اسیدهای چرب اشباع.

• بحث

اشباعی-دو غیراشباعی عنوان شده است (21). همان‌گونه که عنوان شد با افزایش سهم پالم استتارین در مخلوط‌های روغنی با یک روند کلی اختلاف SMP قبل و بعد از اینتراستریفیکاسیون کاهش می‌یابد. این موضوع به این دلیل است که با افزایش سهم پالم استتارین در فرمول و متعاقباً افزایش تری آسیل گلیسرول‌های سه‌اشباعی، درصد کاهش

همان‌گونه که در بخش یافته‌ها بیان شد، SMP مخلوط‌ها بعد از اینتراستریفیکاسیون کاهش یافت (جدول 1). این نتایج مطابق با یافته‌های قبلی است (21، 20، 4). دلیل کاهش SMP به دنبال اینتراستریفیکاسیون، کاهش تری آسیل گلیسرول‌های سه‌اشباعی با نقطه ذوب بالا و افزایش مقدار تری آسیل گلیسرول‌های دواشباعی-تک غیراشباعی و تک

سیگموئیدی، تابع گمپرتز پرکاربردترین آن ها در مدل سازی های ریاضی نظیر مدل سازی های سری های زمان می باشد و تاکنون کاربردهای متنوعی از آن در حوزه های مختلف عنوان شده است (24، 7).



شکل 1. برازش منحنی $f(SFA)$ SMP مخلوط های اینتراستریفیه شده روغن سویا. پالم استتارین با توابع خطی، درجه 2 و سیگموئیدی (گمپرتز)

اعتبارسنجی مدل های پیشنهادی: در راستای بررسی

کفایت یک مدل ریاضی باید قابلیت آن در پیش بینی سری دیگر از داده های آزمایشگاهی که در ساخت مدل از آن ها استفاده نشده نیز، مورد ارزیابی قرار گیرد. در این صورت می توان با قاطعیت بالاتری در مورد کارایی یک مدل ریاضی اطمینان حاصل کرد (25). به منظور اعتبارسنجی مدل های خطی چندگانه و مدل گمپرتز پیشنهادی، از معادلات 1، 2 و 6 و ضرایب ارائه شده مربوط به آن ها در جدول 3 جهت پیش بینی SMP مخلوط های اینتراستریفیه شده مخلوط های دوتایی روغن تخم پنبه: پالم استتارین (11)، روغن سویا: پالم اولئین کاملاً هیدروژنه (10)، روغن کانولا: سویای کاملاً هیدروژنه، روغن کانولا: پالم اولئین (4) و مخلوط سه تایی روغن آفتابگردان: روغن کانولا: سویای کاملاً هیدروژنه (2) به عنوان تابعی از ترکیب اسیدهای چرب شان استفاده و مقادیر پیش بینی شده با مقادیر آزمایشگاهی مقایسه و نیکوئی برازش بین آن ها ارزیابی شد (جدول 4). بر اساس جدول 4، مدل خطی چندگانه پیشنهادی به عنوان تابعی از اسیدهای چرب پالمیک، استتاریک، اولئیک، لینولئیک و لینولنیک توانایی بسیار ضعیفی در پیش بینی SMP مخلوط های اینتراستریفیه شده مورد ارزیابی دارد. به نظر می رسد که هر چند مدل خطی چندگانه به صورت تابعی از اسیدهای چرب پالمیک،

تری آسیل گلیسرول های سه اشباعی در اثر اینتراستریفیکاسیون کاهش می یابد. به عبارت دیگر میزان اختلافات SMP بین پروفیل تری آسیل گلیسرول قبل و بعد اینتراستریفیکاسیون در مخلوط هایی با پالم استتارین بالاتر، کمتر است، چون با افزایش سهم پالم استتارین در مخلوط ها محتوای تری آسیل گلیسرول های سه اشباعی زیاد شده و این باعث می شود بعد از واکنش هرچند تعداد این نوع از تری آسیل گلیسرول ها کاهش می یابد، اما به دلیل اینکه هنوز هم مقدار زیادی از آن ها در مخلوط اینتراستریفیه شده موجود است، بعد از فرآیند اختلاف نقطه ذوب کمتری مشاهده شود (22، 23).

به منظور مقایسه و ارزیابی توانایی مدل های یگانه در توصیف منحنی $f(SFA)$ SMP مخلوط های اینتراستریفیه شده روغن سویا: پالم استتارین، داده های تجربی با مدل های خطی، درجه 2 و سیگموئیدی گمپرتز مورد برازش قرار گرفت (شکل 1). همان گونه که در شکل 1 قابل مشاهده است، تغییرات $f(SFA)$ SMP ، رفتاری صعودی و S شکل (سیگموئیدی) دارد. هر سه این مدل ها برازش خوبی را با داده های تجربی در ناحیه خطی منحنی $f(SFA)$ SMP مخلوط های اینتراستریفیه شده روغن سویا: پالم استتارین از خود نشان دادند (شکل 1). با این وجود، به دلیل سیگموئیدی بودن منحنی $f(SFA)$ SMP ، در قسمت های ابتدا و انتهای منحنی، مدل های خطی و درجه 2 انحراف بیشتری از داده های تجربی پیدا کردند (شکل 1). در مقادیر اسیدهای چرب اشباع بالاتر از محدوده داده های تجربی، مدل خطی نقطه ذوبی حتی بیشتر از $72^\circ C$ (نقطه ذوب تری استتارین) را پیش بینی کرد و مدل درجه 2 با توجه به سهمی شکل بودن، پس از رسیدن به نقطه ماکزیمم، کاهش در نقطه ذوب را ارائه داد که در عمل چنین پدیده ای کاملاً از واقعیت دور است. اما در عوض تابع سیگموئیدی گمپرتز با توجه به این که S شکل است، توانست با قابلیت بالاتری SMP را پیش بینی کند (شکل 1). از سوی دیگر با توجه به شاخص های نیکوئی برازش بهتر مدل گمپرتز (ضریب تعیین 0/99 و میانگین خطای مطلق $0/21^\circ C$) نسبت به مدل سیگموئید و سایر مدل های یگانه (جدول 3)، می توان نتیجه گرفت، تابع گمپرتز بهترین گزینه در جهت ساخت مدل های یگانه $f(SFA)$ SMP است. توابع سیگموئیدی دارای کاربردهای گسترده در حوزه های مختلف می باشند. این توابع دارای دو مجانب افقی در مقادیر بالا و پایین منحنی خود و یک نقطه عطف در مقادیر میانی می باشند. در بین توابع مختلف

استتاریک، اولئیک، لینولئیک و لینولنیک (معادله 1)، دارای بهترین شاخص‌های نیکویی برازش بین تمامی مدل‌های پیشنهادی در پیش‌بینی SMP مخلوط‌های روغن سویا: پالم استتارین است (جدول 3)، اما این مدل در پیش‌بینی SMP سایر مخلوط‌های اینتراستریفیه شده ضعیف می‌باشد. چرا که در مورد این تابع، اگر ترکیب اسیدهای چرب خارج از محدوده مورد استفاده در مدل‌سازی تحقیق حاضر (ترکیب اسیدهای چرب مخلوط‌های روغن سویا: پالم استتارین) باشد، SMP با مقادیری منفی و یا حتی فراتر از حداکثر مقدار نقطه ذوب موجود برای چربی‌ها (تری استتارین با 72°C) پیش‌بینی می‌کند که کاملاً دور از واقعیت است. از این رو می‌توان نتیجه گرفت که مدل خطی چندگانه به صورت تابعی از اسیدهای

مدل گمپتر: $(SMP)_{(SFA)}$ (معادله 6)			مدل خطی چند گانه تابعی از SFA و UFA (معادله 2)			مدل خطی چندگانه تابعی از L_n و L_n, O, S, P (معادله 1)			نوع چربی های اینتراستریفیه شده	
نیکوئی برازش		$SMP (^{\circ}C)$	نیکوئی برازش		$SMP (^{\circ}C)$	نیکوئی برازش		$SMP (^{\circ}C)$		
r	MAE	پیش بینی	r	MAE	پیش بینی	r	MAE	پیش بینی	تجربی	
0/95	2/46		0/94	1/78		0/95	244/80		PS:CSO	
		35			34/7			-309/1	29/9	30:70
		37/5			37/1			-260/5	36/8	40:60
		40/6			40/0			-203/8	37/1	50:50
		42/5			40/7			-161/3	41/5	60:40
		45			43/3			-100/8	43/2	70:30
0/97	2/87		0/97	2/73		0/97	203/90		FHPO:SBO	
		29/5			29/4			-16/9	24/6	15:85
		34/5			34/2			62/2	31/2	25:75
		39/6			39/1			182/6	38	35:65
		44/5			43/9			282/4	45/7	45:55
		49/2			48/7			382/2	47	55:45
		53/7			53/6			482/0	49/6	65:35
0/99	2/22		0/40	3/32		-0/3	480/0		FHSBO:CO	
		24/9			24/9			460/0	23	15:85
		27/7			27/7			591/5	25/6	20:80
		30			30/5			546/2	31	25:75
		33/4			26/7			500/8	35/5	30:70
		39/3			38/8			456/8	44	40:60
0/96	4/16		0/95	4/03		-0/95	109/0		PO:CO	
		27			27/0			182/0	24/1	42:58
		30/2			30/1			137/2	25/2	55:45
		34/1			33/8			89/3	29/7	70:30
0/99	3/41		0/99	3/54		0/99	154/8		FHSBO:CO:SFO	
		25/9			25/9			-55/2	25/3	15:25:50
		28/7			29/3			29/0	30/8	20:25:55
		31/4			31/2			123/4	34/1	25:25:50
		38/5			34/0			210/2	38/5	30:25:45
		43/1			36/8			291/8	43/1	35:25:40
		35/1			39/4			381/7	45/1	40:25:35

[Downloaded from nsft.sbm.ac.ir on 2026-08-09]

لغزشی؛ PS، پالم استئارین؛ CSO، روغن تخم پنبه؛ FHPO، پالم اولئین کاملاً هیدروژنه؛ SBO، روغن سویا؛ FHSBO، سویای کاملاً هیدروژنه؛ CO، روغن کانولا؛ PO، پالم اولئین؛ SFO، روغن آفتابگردان.

دارای بهترین شاخص های نیکویی برآزش بود، با توجه به سیگموییدی (S شکل) بودن به بهترین نحو با منحنی $SMP_{(SFA)}$ مخلوط های اینتراستریفیه شده روغن سویا: پالم استئارین قابل برآزش بود و بهترین گزینه جهت انتخاب به عنوان مدل یگانه است. نتایج اعتبارسنجی نشان داد، مدل خطی چندگانه به عنوان تابعی از اسیدهای چرب اشباع کل و غیراشباع کل و مدل یگانه گمپرتز $SMP_{(SFA)}$ قدرت بالایی در پیش بینی SMP مخلوط های اینتراستریفیه شده مختلف را دارند. در مجموع می توان گفت از بین مدل های مختلف مورد بررسی، مدل خطی چندگانه به عنوان تابعی از اسیدهای چرب اشباع کل و غیراشباع کل (معادله 2) و مدل گمپرتز پیشنهادی را می توان به عنوان یک مدل جامع مناسب جهت پیش بینی SMP چربی های گوناگون اینتراستریفیه شده به حساب آورد.

سپاسگزاری: از شرکت روغن نباتی پارس قو (تهران، ایران) جهت کمک های تکنیکی و شرکت روغن نباتی نوش آذر (تهران، ایران) به دلیل اهدای مواد خام کمال تشکر و قدردانی به عمل می آید.

References

1. Khatoun S, Reddy SRY. Plastic fats with zero trans fatty acids by interesterification of mango, mahua and palm oils. *Eur J Lipid Sci Tech* 2005; 107(11): 786-91.
2. Farmani J, Hamed M, Safari M, Madadlou A. Trans-free Iranian vanaspati through enzymatic and chemical transesterification of triple blends of fully hydrogenated soybean, rapeseed and sunflower oils. *Food Chem* 2007; 102(3): 827-33.
3. Farmani J, Hamed M, Safari M. Production of zero trans Iranian vanaspati using chemical transesterification and blending techniques from palm olein, rapeseed and sunflower oils. *Int J Food Sci Tech* 2008; 43(3): 393-9.
4. Farmani J, Safari M, Hamed M. Trans-free fats through interesterification of canola oil/palm olein or fully hydrogenated soybean oil blends. *Eur J Lipid Sci Tech* 2009; 111(12): 1212-20.
5. Fauzi SHM, Rashid NA, Omar Z. Effects of chemical interesterification on the physicochemical, microstructural and thermal properties of palm stearin, palm kernel oil and soybean oil blends. *Food Chem* 2013; 137: 8-17.
6. Ahmadi L, Marangoni AG. Functionality and physical properties of interesterified high oleic shortening structured with stearic acid. *Food Chem* 2009; 117(4): 668-73.
7. Farmani J. Modeling of solid fat content of chemically interesterified fully hydrogenated soybean oil and canola oil blends as a function of temperature and saturated fatty acids. *Food Measure* 2015; 9(3): 281-289.
8. Belitz HD, Grosch W, Schieberle P. *Food Chemistry*, 4th Ed. Berlin: Springer; 2009.
9. O'Brien RD. *Fats and Oils: Formulating and Processing for Applications*, 3th Ed. New York: CRC Press; 2004.
10. Ebrahimi I. Modeling of solid fat content and melting point of enzymatically interesterified fats. Sari: Sari Agricultural Sciences and Natural Resources University, Faculty of Agricultural Engineering; 2014 [in Persian].
11. Karabulut I, Turan S, Ergin G. Effects of chemical interesterification on solid fat content and slip melting point of fat/oil blends. *Eur Food Res Technol* 2004; 218(3): 224-9.
12. Boyaci IH, Karabulut I, Turan S. Slip melting point estimation of fat blends before and after interesterification based on their fatty acid compositions. *J Food Lipids* 2003; 10(3): 193-202.
13. Ribeiro APB, Grimaldi R, Gioielli LA, Gonçalves LAG. Zero trans fats from soybean oil and fully hydrogenated

توانایی هر دو این مدل های پیشنهادی در پیش بینی SMP مخلوط هایی که حاوی حداقل یک فاز سخت (مخلوط های حاوی پالم استئارین، پالم اولئین کاملاً هیدروژنه و سویای کاملاً هیدروژنه) بودند نسبت به مخلوطی که فاقد فاز سخت است (مخلوط حاوی پالم اولئین) کمی بالاتر است. این موضوع می تواند به دلیل اختلاف در ترکیب اسیدهای چرب به ویژه ترکیب اسیدهای چرب اشباع این مخلوط باشد. نتایج اعتبارسنجی این دو مدل با نتایج مربوط به مدل گمپرتز پیشنهادی ابراهیمی (10) نزدیک بود، با این تفاوت که مدل های جامع پیشنهادی حاضر SMP مخلوط های حاوی فاز سخت را با خطای کمتری نسبت به مدل پیشنهادی وی پیش بینی می کنند.

بررسی ضرایب همبستگی پیرسون، مؤید این مسئله است که SMP چربی های اینتراستریفیه شده کاملاً از ترکیب اسیدهای چرب شان تأثیر می پذیرد و توانایی استفاده به عنوان متغیر مستقل در جهت پیش بینی SMP را دارند. تمامی مدل های پیشنهادی، توانایی بسیار بالایی در پیش بینی SMP مخلوط های اینتراستریفیه شده روغن سویا: پالم استئارین داشتند. در بین مدل های یگانه، مدل گمپرتز علاوه بر این که

- soybean oil: Physico-chemical properties and food applications. *Food Res Int* 2009; 42(3): 401-10.
14. Fasina OO, Craig-Schmidt M, Colley Z, Hallman H. Predicting melting characteristics of vegetable oils from fatty acid composition. *Food Sci Technol-LWT* 2008; 41: 1501-1505.
 15. AOCS. Official Methods and Recommended Practices of the American Oil Chemists' Society. 4th ed ed: Champaign: AOCS Press.; 1996.
 16. Andreia Schäfer De Martini Soares F, Claro da Silva R, Caroline Guimarães da Silva K, Bertolessi Lourenço M, Ferreira Soares D, Antonio Gioielli L. Effects of chemical interesterification on physicochemical properties of blends of palm stearin and palm olein. *Food Res Int.* 2009; 42(9): 1287-94.
 17. Balan, B., S. Mohaghegh, and S. Ameri. State- of- Art- in permeability determination from well log data: Part 1- A comparative study, Model development. *Soc Petrol Eng J.* 1995; 30978: 17-25.
 18. Davenel A, Riaublanc A, Marchal P, Gandemer G. Quality of pig adipose tissue: relationship between solid fat content and lipid composition. *Meat Sci.* 1999; 51(1): 73-9.
 19. Ospina-E JC, Cruz-S A, Pérez-Álvarez JA, Fernández-López J. Development of combinations of chemically modified vegetable oils as pork backfat substitutes in sausages formulation. *Meat Sci.* 2010; 84(3): 491-7.
 20. Costales-Rodríguez R, Gibon V, Verhé R, De Greyt W. Chemical and Enzymatic Interesterification of a Blend of Palm Stearin: Soybean Oil for Low trans-Margarine Formulation. *J Am Oil Chem Soc.* 2009; 86(7): 681-97.
 21. Soares FASDM, da Silva RC, Hazzan M, Capacla IR, Viccola ER, Maruyama JM, et al. Chemical Interesterification of Blends of Palm Stearin, Coconut Oil, and Canola Oil: Physicochemical Properties. *J Agric Food Chem.* 2012; 60(6): 1461-9.
 22. Criado M, Hernández-Martín E, López-Hernández A, Otero C. Enzymatic Interesterification of Extra Virgin Olive Oil with a Fully Hydrogenated Fat: Characterization of the Reaction and Its Products. *J Am Oil Chem Soc.* 2007; 84: 717-726.
 23. Masuchi M, Gandra K, Maranconi A, DE Sá Perwrenha C, Chiu M, Grimaldi R, Goncalves L. Fats from Chemically Interesterified High-Oleic Sunflower Oil and Fully Hydrogenated Palm Oil. *J Am Oil Chem Soc.* 2014; 91: 859-866.
 24. Augusto PED, Soares BMC, Chiu MC, Gonçalves LAG. Modelling the effect of temperature on the lipid solid fat content (SFC). *Food Res Int.* 2012; 45(1): 132-5.
 25. Mortazavi A, Ziaalagh H. Modeling of food process. Mashhad: Ferdowsi University of mashhad. Press; 2007. P. 5-24. [in Persian].

Modeling the Slip Melting Point of Chemically Interesterified Fats as a Function of Fatty Acid Composition

Naeli MH¹, Farmani J^{1*}, Zargaraan A²

- 1- MSc Student of Food Science and Technology, Faculty of Agricultural Engineering, Sari Agricultural Sciences and Natural Resources University, Sari, Iran.
- 2- *Corresponding author: Assistant prof, Dept. of Food Science and Technology, Faculty of Agricultural Engineering, Sari Agricultural Sciences and Natural Resources University, Sari, Iran.
- 3- Assistant prof, National Nutrition and Food Technology Research Institute, Shahid Beheshti University of Medical Sciences, Tehran, Iran.

Received 15 Aug, 2015

Accepted 2 Nov, 2015

Background and Objectives: Slip melting point (SMP) is one of the most important qualitative and functional properties of fats. However, the common melting point determination methods are generally time-consuming. Therefore, in this research, regression models were developed for description of the SMP of interesterified fats as a function of fatty acid composition.

Materials and Methods: Blends of soybean oil and palm stearin were subjected to chemical interesterification, and the fatty acid composition and SMP of the products were determined. SMP of the interesterified fats was modeled as a function of fatty acid composition using regression analysis. Goodness of fit of different models was evaluated, and finally, the best model for SMP prediction was determined.

Results: The SMP of blends decreased after interesterification significantly ($p < 0.05$). A good Pearson's correlation coefficient ($r > 0.99$) was observed between SMP and all fatty acids ($p < 0.01$). Accordingly, the following strategies were used for SMP modeling: as a multiple function of palmitic, stearic, oleic, linoleic and linolenic acids; as a multiple function of total saturated and unsaturated fatty acids; as a function of saturated fatty acids. The proposed models for prediction of the SMP of interesterified soybean oil and palm stearin blends showed a correlation coefficient (between the experimental and predicted data) of greater than 0.99, and a mean absolute error lower than 0.52°C, indicating the high prediction power of the models.

Conclusions: The results of model validation showed that the model describes SMP as a multiple function of total saturated and unsaturated fatty acids and the Gompertz model describes SMP as a function of total saturated fatty acids could predict the SMP of different interesterified fats in the best way. The models may be useful in the design and development of new interesterified fat formulations.

Keywords: Chemical interesterification, Modeling, Slip melting point, Fatty acid composition