



UDC 665:664.3

USE OF ARTIFICIAL INTELLIGENCE IN FOOD TECHNOLOGIES ON THE EXAMPLE OF OPTIMIZING PARAMETERS OF THE ENZYMATIC PROCESS FOR COCOA BUTTER EQUIVALENT PRODUCTION

Pavlo O. Nekrasov

National Technical University «Kharkiv Polytechnic Institute», 2 Kyrpychova Str., Kharkiv, 61002, Ukraine

Received 2 December 2025; accepted 5 February 2026; available online 23 March 2026

Abstract

In this study, an approach to intelligent control of biocatalytic processes in food technologies was substantiated and validated using the optimization of enzymatic interesterification for the production of a cocoa butter equivalent in a continuous packed-bed reactor with immobilized lipase. High-oleic sunflower oil and a mixture of ethyl esters of palmitic and stearic acids were used as substrates. The controlled factors were the molar ratio of ethyl esters to oil (4–9 mol/mol), temperature (50–75 °C), and hydrodynamic residence time (15–60 min). The methodological framework was based on integrating artificial intelligence models with an evolutionary optimization method, namely particle swarm optimization. Experimental data were obtained using an orthogonal maximin Latin hypercube design and used to compare nine regression models via nested cross-validation. Support vector regression with a radial basis function kernel provided the highest accuracy and the lowest inter-fold variability. The selected model was used as the fitness function in particle swarm optimization, enabling determination of the optimal enzymatic interesterification conditions: substrate molar ratio of 6 mol/mol, temperature of 65 °C, and residence time of 38 min. A confirmatory experiment verified the adequacy of the model in the vicinity of the optimum: the cocoa butter equivalent yield was $77.0 \pm 1.1\%$, with a relative deviation of $\delta = 0.52\%$. The results demonstrate the effectiveness of using artificial intelligence to identify optimal parameters of biocatalytic processes in food industry technologies.

Keywords: artificial intelligence; interesterification; lipase; cocoa butter equivalent; particle swarm optimization.

ВИКОРИСТАННЯ ШТУЧНОГО ІНТЕЛЕКТУ У ХАРЧОВИХ ТЕХНОЛОГІЯХ НА ПРИКЛАДІ ОПТИМІЗАЦІЇ ПАРАМЕТРІВ ФЕРМЕНТАТИВНОГО ПРОЦЕСУ ВИРОБНИЦТВА ЕКВІВАЛЕНТА КАКАО-МАСЛА

Павло О. Некрасов

Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут», вул. Кирпичова, 2, Харків, 61002, Україна

Анотація

У статті обґрунтований та апробований підхід до інтелектуального керування біокаталітичними процесами в харчових технологіях на прикладі оптимізації ферментативного переестерифікування для одержання еквівалента какао-масла в безперервному реакторі з нерухомим шаром іммобілізованої ліпази. Як субстрати використовували високоолеїнову соняшникову олію та суміш етилових естерів пальмітинової і стеаринової кислот. Керуваними факторами були: мольне співвідношення естерів до олії (4–9 моль/моль), температура (50–75 °C) і час перебування суміші субстратів в реакторі (15–60 хв). Методологічну основу дослідження становило поєднання моделей штучного інтелекту та еволюційного методу оптимізації, а саме алгоритму рою частинок. Експериментальні дані отримано за ортогонально-максимінним планом латинського гіперкуба та використано для порівняння дев'яти регресійних моделей із застосуванням вкладеної крос-валідації. Показано, що найкращу точність і найменшу міжфолдову варіабельність забезпечує регресія на основі опорних векторів з радіально-базисним ядром. Обрану модель використано як функцію пристосованості в алгоритмі рою частинок, що дозволило визначити оптимальні умови процесу ферментативного переестерифікування: мольне співвідношення субстратів 6 моль/моль, температура 65 °C і час перебування суміші субстратів в реакторі 38 хв. Перевірочний експеримент підтвердив адекватність моделі в зоні оптимуму: вихід еквівалента какао-масла становив $77.0 \pm 1.1\%$ за відносного відхилення $\delta = 0.52\%$. Результати проведеної роботи показали ефективність використання штучного інтелекту для встановлення оптимальних параметрів біокаталітичних процесів у технологіях харчової промисловості.

Ключові слова: штучний інтелект; переестерифікування; ліпаза; еквівалент какао-масла; алгоритм рою частинок.

*Corresponding author: e-mail: nekrasov2007@gmail.com

© 2025 Oles Honchar Dnipro National University;

doi: 10.15421/jchemtech.v34i1.351426

Вступ

Сучасна промисловість дедалі більше орієнтується на принципи «розумного» виробництва, де ключову роль відіграють дані, прогнозні моделі та алгоритмічна оптимізація режимів [1–5]. Для багатьох процесів харчової технології характерні нелінійність, взаємодія факторів і висока варіабельність сировини, що ускладнює застосування суто емпіричних підходів і стимулює впровадження інтелектуальних методів пошуку оптимуму [6–11].

Окреме місце серед таких процесів у олійно-жировій промисловості посідає виробництво структурованих ліпідів із заданими функціонально-технологічними властивостями, зокрема альтернатив какао-масла.

Какао-масло – найдорожчий у світі природний жир, що видобувається із какао-бобів (*Theobroma cacao*), – є основним ліпідним компонентом шоколаду та преміальних кондитерських виробів. Його унікальний профіль плавлення, поліморфна поведінка та сенсорні характеристики зумовлені високоспецифічним складом триацилгліцеринів (ТАГ), у якому домінують три симетричні мононенасичені ТАГ: 1,3-дипальмітоїл-2-олеоїл-гліцерин (POP), 1-пальмітоїл-3-стеароїл-2-олеоїл-гліцерин (POS) і 1,3-дистеароїл-2-олеоїл-гліцерин (SOS), що сумарно становлять 75–85 % загальної кількості ТАГ [12]. Водночас постачання какао-масла стикається зі сталими викликами, зокрема волатильністю цін, географічною концентрацією виробництва, впливом зміни клімату та зростанням глобального попиту на шоколад [13]. Сукупність цих чинників зумовлює стійкий науковий інтерес до альтернатив какао-масла, передусім еквівалентів какао-масла (cocoa butter equivalents, CBE) [14]. На відміну від замінників і сурогатів какао-масла, які мають суттєво інший молекулярний склад триацилгліцеринів і зазвичай містять відповідно частково гідровані жири (з високим вмістом транс-ізомерів жирних кислот) та лауринові жири, CBE мають склад ТАГ і фізичні властивості, близькі до натурального какао-масла, і тому з ним повністю сумісні та можуть змішуватися в будь-яких співвідношеннях без істотної зміни властивостей какао-масла та продуктів на його основі [15].

Перспективним шляхом одержання CBE є ферментативне переетерифікування, яке

завдяки 1,3-специфічності ліпаз дає змогу керовано модифікувати структуру триацилгліцеринів і формувати ТАГ-профіль, наближений до какао-масла, з меншим утворенням побічних продуктів порівняно з хімічними підходами [16; 17]. Економічній ефективності вказаного процесу сприяють сучасні технології іммобілізації та повторного використання ліпаз, що розширює можливості промислового впровадження біокаталітичної модифікації жирів і олій [18].

Важливою умовою промислової реалізації ферментативного переетерифікування є вибір реакторного оформлення та забезпечення стабільної роботи іммобілізованого біокаталізатора. Як доцільне рішення для безперервних біокаталітичних перетворень у [19] пропонуються реактори із нерухомим шаром каталізатора (packed-bed reactors) завдяки можливості багаторазового використання ферменту, відносно простому керуванню процесом і придатності до масштабування, а також забезпеченню високої об'ємної частки іммобілізованого біокаталізатора в реакційній системі, що підвищує питому продуктивність і сприяє інтенсифікації перетворення субстратів. Крім того, іммобілізовані ліпази в таких реакторах характеризуються істотно підвищеною стабільністю, що подовжує їхній експлуатаційний ресурс. Фіксоване просторове положення ферменту мінімізує його втрати та спрощує вилучення продукту, усуваючи потребу в додаткових стадіях обробки й тим самим оптимізуючи загальний технологічний ланцюг [20; 21].

Разом із тим біокаталітичний синтез CBE є процесом, оптимізація якого залишається нетривіальним завданням через багатопараметричність і можливу наявність локальних екстремумів [22]. В таких умовах доцільним є поєднання експериментального планування з прогнозним моделюванням і глобальною оптимізацією, що узгоджується із сучасним трендом застосування штучного інтелекту в задачах харчової технології [7; 10; 11].

Методологічні передумови такого підходу сформовано також у наших попередніх роботах, присвячених біокаталітичній обробці олійної сировини та оптимізації параметрів процесів, кінетичному аналізу ферментативних перетворень, використанню нейромережевого моделювання й еволюційних алгоритмів для пошуку

раціональних режимів, а також розробленню жирових систем зі спрямованою модифікацією властивостей (зокрема систем зі зниженим вмістом транс-ізомерів) [23–28].

Метою дослідження було встановлення оптимальних параметрів біокаталітичної технології виробництва еквівалента какао-масла з використанням як критерію оптимізації максимального вмісту цільових триацилгліцеринів у вихідному продукті. Вказана технологія ґрунтується на ферментативному переетерифікуванні високоолеїнової соняшникової олії та суміші етилових естерів пальмітинової і стеаринової кислот у реакторі з нерухомим шаром біокаталізатора.

Для досягнення поставленої мети запропоновано спільне застосування моделей штучного інтелекту та еволюційного методу оптимізації, а саме алгоритму рою частинок (Particle Swarm Optimization, PSO), під час оброблення експериментальних даних.

Вказаний підхід є одним з найбільш ефективних математичних апаратів оптимізації складних багатопараметричних функціональних залежностей [29 – 31], до яких належить процес біокаталітичного переетерифікування.

В роботі порівнювали дев'ять моделей штучного інтелекту: багатofакторну лінійну регресію (Multiple Linear Regression, MLR), регресію часткових найменших квадратів (Partial Least Squares Regression, PLSR), лінійну регресію з L1-регуляризацією (Least Absolute Shrinkage and Selection Operator, LASSO), регресію на основі опорних векторів з радіально-базисним ядром (Support Vector Regression, SVR з RBF-ядром), ядерну гребеневу регресію (Kernel Ridge Regression, KRR), екстремальний градієнтний бустинг (Extreme Gradient Boosting, XGB), випадковий ліс (Random Forest Regression, RFR), надзвичайні дерева (Extra Trees Regression, ETR) та градієнтний бустинг (Gradient Boosting Regression, GBR).

MLR, LASSO та PLSR описують залежність відгуку від факторів через лінійну комбінацію предикторів, що забезпечує високу інтерпретованість параметрів та можливість статистичного аналізу внеску окремих змінних [32]. MLR – базовий підхід і є доцільною як еталонна модель для наближено лінійної структури даних, однак може втрачати стійкість за мультиколінеарності та великої кількості ознак. Для підвищення

стійкості застосовують LASSO, що завдяки L1-регуляризації одночасно зменшує варіативність оцінок коефіцієнтів і виконує відбір ознак, зануляючи частину з них. Альтернативний шлях подолання мультиколінеарності реалізує PLSR: вихідні предиктори проєктуються в простір небагатьох латентних компонент $T = XW$, сконструйованих так, щоб максимізувати зв'язок із відкликом, після чого регресія виконується в просторі T , що є особливо ефективним за сильно корельованих змінних і у випадках, коли кількість ознак є порівнянною або більшою за кількість спостережень.

Регресія на основі опорних векторів (SVR) є високоефективною ядерною моделлю. Вона особливо корисна для опрацювання складних наборів даних, оскільки дає змогу ефективно працювати з випадками з великою кількістю вхідних ознак [33; 34]. Основна мета SVR полягає в побудові оптимальної гіперплощини в ознаковому просторі. Для побудови регресійної моделі SVR використовує вектор значень цільової змінної $y \in \mathbb{R}^n$ та вектори вхідних ознак $x_i \in \mathbb{R}^p$ ($i = 1, \dots, n$), як це показано в рівнянні (1):

$$F(x) = w^T \varphi(x) + b, \quad (1)$$

де w – вектор ваг моделі, F – функція, задана регресійною моделлю, а b – стала.

Ядерна гребенева регресія (KRR) поєднує метод ядра та гребеневу регресію для моделювання нелінійних процесів [35]. KRR мінімізує суму квадратів відхилень (SSE) із урахуванням регуляризації, що дає змогу запобігати перенавчанню та забезпечувати виконання необхідних обмежень. Математичні засади KRR подано в рівнянні (2):

$$\arg \min f \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (f_i - y_i)^2 + \lambda \|f\|_H, \quad (2)$$

де m – розмірність ядерної матриці, λ – гіперпараметр; f_i та y_i відповідають спостереженим і прогнозованим значенням цільової змінної.

Екстремальний градієнтний бустинг (XGB) є сучасним методом, що ґрунтується на деревоподібних моделях та градієнтному бустингу [36]. Його ефективність зумовлена адитивним поєднанням декількох «слабких» учнів (weak learners) у «сильного» учня. XGB використовує автономні паралельні обчислення для підвищення точності процесу навчання та обчислювальної ефективності. Прогнозна функція XGB для певного кроку часу t подана в рівнянні (3):

$$f_i^t = \sum_{k=1}^t f_k(x_i) = f_i^{t-1} + f_t(x_i), \quad (3)$$

де $f_i^{(t)}$ позначає прогноз на кроці t ; $f_i^{(t-1)}$ – прогноз на попередньому кроці; $f_t(x_i)$ – новий учень, доданий на кроці t ; x_i – вхідний вектор ознак, а $f_k(x_i)$ належить до певного функціонального простору моделей.

Випадковий ліс (RFR) використовує підхід бутстреп-агрегування (bootstrap aggregating), або беггінг (bagging), який поєднує агрегування та бутстрепінг [37]. Кожне дерево рішень у процесі побудови моделі випадкового лісу отримує власну випадкову підвибірку вхідних даних (бутстреп-вибірку) та навчається незалежно від інших дерев. Сукупна сила прогнозів, отриманих від окремих дерев рішень, істотно впливає на точність моделі випадкового лісу. Прогноз моделі випадкового лісу визначається рівнянням (4):

$$f(x) = \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K DT_k(x), \quad (4)$$

де K – кількість дерев рішень (DT) у випадковому лісі, а $f(x)$ є функцією, заданою регресійною моделлю.

Модель надзвичайних дерев (ETR) аналогічна випадковому лісу, але додатково рандомізує положення порогів розбиття, що ще більше зменшує дисперсію ансамблю. Кожне дерево будується на всій навчальній вибірці, а розщеплення обираються з випадкового набору порогів [38]. Це обумовлює високу швидкість навчання та добру узагальнювальну здатність. Одночасно модель має меншу інтерпретованість та можливе недоузгодження на дуже гладких функціях.

Градієнтний бустинг (GBR) реалізує послідовну побудову адитивної моделі шляхом наближення антиградієнта функції втрат. Оновлення прогнозу на ітерації t має вигляд:

$$\hat{y}^{(t)}(x) = \hat{y}^{(t-1)}(x) + \eta f_t(x), \quad (5)$$

де $f_t(x)$ – базовий регресор (зазвичай дерево рішень), а η – коефіцієнт навчання. На кожному кроці базову модель навчають на псевдозалишках, тобто значеннях антиградієнта функції втрат, обчислених для поточного ансамблю, що забезпечує поступове зменшення помилки. GBR здатний відтворювати складні нелінійні залежності та взаємодії факторів і часто демонструє високу точність [39]. Обмеженнями є чутливість до вибору гіперпараметрів (кількість дерев, їхня глибина, η) та схильність до перенавчання за відсутності регуляризації.

PSO належить до обчислювальних методів на основі роєвого інтелекту й придатний для розв'язання задач оптимізації неперервних багатомодальних функцій з обмеженнями або без них. Його ключова перевага полягає в тому, що він працює безпосередньо в просторі неперервних дійсних змінних, не потребуючи інформації про градієнт цільової функції [40; 41]. Алгоритм дає змогу ефективно збалансувати глобальне дослідження простору пошуку та локальну розвідку. Імітуючи колективну поведінку зграї птахів або косяка риб, PSO використовує групу «частинок», які ітеративно здійснюють пошук у просторі рішень. Кожна частинка відповідає окремому кандидату на розв'язок і поступово наближається до глобального оптимуму шляхом динамічного коригування власної швидкості та положення. Ініціалізація PSO здійснюється шляхом задання початкової популяції частинок, випадковим чином розподілених у просторі пошуку. Частинки характеризуються вектором положення, що відповідає поточній точці дослідження в просторі гіперпараметрів, та вектором швидкості, який визначає напрям і інтенсивність її руху в процесі ітераційної оптимізації. На кожній ітерації (або поколінні) алгоритму кожна частинка коригує свою швидкість і положення на основі власного досвіду та досвіду своїх «сусідів». Це коригування зумовлене двома ключовими компонентами: найкращим відомим для частинки положенням (особистий оптимум, personal best) та найкращим відомим положенням, знайденим будь-якою частинкою рою (глобальний оптимум, global best).

$$v_i(t+1) = w \cdot v_i(t) + c_1 \cdot r_1 \cdot (p_{i,best} - x_i(t)) + c_2 \cdot r_2 \cdot (p_{g,best} - x_i(t)), \quad (6)$$

де $v_i(t)$ – швидкість частинки i на ітерації t ; w – інерційна вага, що визначає вплив попередньої швидкості; c_1 та c_2 – коефіцієнти прискорення, які відповідають, відповідно, за когнітивну та соціальну складові; r_1 і r_2 – випадкові величини, рівномірно розподілені на відріжку $[0; 1]$; $p_{i,best}$ – особисто найкраще положення частинки i ; $p_{g,best}$ – глобально найкраще положення, знайдене будь-якою частинкою; $x_i(t)$ – положення частинки i на ітерації t .

Після оновлення швидкостей положення частинок перераховуються за наведеним нижче рівнянням:

$$x_i(t+1) = x_i(t) + v_i(t+1). \quad (7)$$

Алгоритм виконується задану кількість ітерацій або до моменту досягнення задовільної якості розв'язку.

Експериментальна частина

Модельні суміші склалися з високоолеїнової соняшникової олії (вміст олеїнової кислоти – 86 % від загальної суми кислот) та суміші етилових естерів пальмітинової і стеаринової кислот (1 : 1, моль/моль); водночас мольне співвідношення суміші естерів до олії варіювали від 4 : 1 до 9 : 1 (substrate ratio, mol/mol).

Процес переетерифікування проводили за температур 50–75 °C у безперервному реакторі з нерухомим шаром ферментного препарату Lipozyme RM IM («Novozymes», Данія). Цей препарат є sn-1,3-специфічною мікробною ліпазою *Rhizomucor miehei*, іммобілізованою на макропористій аніонообмінній смолі.

Як реактор використовували скляну колону з внутрішнім діаметром 2.0 см і висотою 20 см, обладнану сорочкою для циркуляції термостатованої води з метою підтримання сталої температури процесу. Опорою для шару іммобілізованої ліпази масою 15.0 г слугувало сито з нержавіючої сталі (50 mesh). Сформований нерухомий ферментний шар характеризувався пустотністю 0.45.

Реакційне середовище, що містило високоолеїнову соняшкову олію та етилові естери пальмітинової та стеаринової кислот, готували в термостатованій ємності з магнітною мішалкою для забезпечення гомогенності. Суміш субстратів подавали до нижньої частини колони за допомогою перистальтичного насоса, забезпечуючи рух рідини знизу догори для запобігання ущільненню шару та утворенню каналів. Час перебування суміші субстратів у реакторі (residence time) змінювали у межах 15–60 хв, що відповідало діапазону об'ємної витрати від 0.4 до 1.5 см³/хв.

Вибір ферментного препарату та інтервалів варіювання параметрів був здійснений за результатами попередніх досліджень.

У кожному досліді проби для подальшого аналізу відбирали після кондиціонування нерухомого ферментного шару трьома порожнинними об'ємами суміші субстратів.

Триацилгліцерини (ТАГ), наявні в продуктах реакції, попередньо виділяли методом тонкошарової хроматографії (ТШХ).

Для цього відібрані проби розчиняли в хлороформі, наносили на пластинку для ТШХ та елюювали в системі розчинників петролейний етер/діетиловий етер/оцтова кислота (90 : 10 : 1, об./об./об.). Після завершення хроматографування пластинку висушували на повітрі, а зони розділення візуалізували в ультрафіолетовому світлі. Смугу, що відповідала фракції ТАГ, зішкрібали із пластинки, після чого ТАГ екстрагували тричі безводним діетиловим етером. Діетиловий етер видаляли продуванням азотом до повного упарювання розчинника. Сухий залишок виділеної фракції ТАГ зважували та використовували для подальшого аналізу.

Триацилгліцериновий склад виділеної фракції визначали методом високоефективної рідинної хроматографії. Зважену фракцію ТАГ повністю розчиняли в дихлорометані та доводили об'єм розчину до відомого значення, після чого ретельно перемішували до повного розчинення; перед ін'єкцією розчини фільтрували через гідрофобний мембранний фільтр з політетрафторетилену (PTFE) з розміром пор 0.45 мкм. Хроматографічну систему попередньо кондиціювали рухомою фазою до встановлення стабільної базової лінії рефрактометричного детектора. В хроматографічну систему вводили 10 мкл отриманого розчину; розділення здійснювали на рідинному хроматографі Waters 2690 (США) з рефрактометричним детектором за таких умов: дві колонки, з'єднані послідовно, розміром 4.6×250 мм, заповнені сорбентом LiChrosorb C18 (розмір часток 5 мкм; розмір пор близько 100 Å); режим елювання – ізократичний; рухома фаза – дихлорометан–ацетонітрил (1 : 1, об./об.); швидкість потоку – 1.0 мл/хв; температура колонки – 40 °C; температура комірки рефрактометричного детектора – 40 °C.

Розраховували площі всіх піків, за винятком системних. Співвідношення компонентів знаходили методом внутрішньої нормалізації, у відсотках (area%). Ідентифікацію піків виконували шляхом порівняння часів утримування зі стандартами Sigma-Aldrich. Кількісне визначення триацилгліцеринів SOS, SOP і POP виконували за калібрувальними кривими відповідних стандартів (метод зовнішнього стандарту). Сумарний вміст SOS+SOP+POP приймали за вихід еквівалента какао-масла, % мас. (CBE yield, % w/w), який обчислювали за формулою:

$$CBE\ yield = \frac{m_{SOS} + m_{SOP} + m_{POP}}{m_{TAG}} \cdot 100, \quad (8)$$

де m_{SOS} , m_{SOP} , m_{POP} – маси відповідних ТАГ, розраховані за калібруванням, а m_{TAG} – маса виділеної фракції ТАГ (сухий залишок після ТШХ-виділення та упарювання розчинника). Всі аналізи здійснювались для двох паралельних дослідів.

Отримані експериментальні дані (середні значення двох паралельних досліджень) використовували в якості вихідних для навчання та верифікації моделей штучного інтелекту.

Навчальну вибірку сформували із застосуванням ортогонального максимін-вибіркування за схемою латинського гіперкуба (*Orthogonal Maximin Latin Hypercube Sampling, LHS*), що дало змогу репрезентативно охопити багатовимірну область факторів за обмеженої кількості експериментальних запусків. Діапазон значень кожного керованого фактора попередньо стратифікували на N рівномірних підінтервалів (де N – кількість експериментальних точок), після чого з кожного підінтервалу відбирали по одному рівню відповідного фактора, а повну матрицю плану формували шляхом перестановок рівнів між факторами. Така процедура забезпечувала близьку до рівномірної одномірну репрезентацію кожного фактора в межах заданого діапазону та запобігала надмірній концентрації експериментальних точок у локальних ділянках області планування. Для підвищення інформативності вибірки LHS-конфігурацію оптимізували за максимін-критерієм (maximin) шляхом максимізації мінімальної попарної евклідової відстані між будь-якими двома експериментальними точками в факторному просторі. Із множини кандидатних LHS-конфігурацій обирали таку, для якої мінімальна відстань між точками була максимально можливою, що зменшувало утворення локальних кластерів та мінімізувало ймовірність появи «прогалін» у просторі факторів, забезпечуючи більш однорідне просторове заповнення досліджуваної області. Додатково забезпечували ортогональність факторів, мінімізуючи позадіагональні елементи кореляційної матриці між факторами. Це знижувало кореляцію між вхідними змінними та зменшувало ризик мультиколінеарності в навчальних даних, що, своєю чергою, підвищувало числову стійкість і відтворюваність навчання моделей штучного

інтелекту, зменшувало чутливість оцінок якості до випадкового розбиття даних під час крос-валідації та забезпечувало коректне порівняння альтернативних алгоритмів штучного інтелекту на однаковій навчальній вибірці.

Для зменшення впливу систематичних помилок, викликаних зовнішніми умовами, послідовність проведення експериментів була рандомізована.

Стандартизацію ознак застосовували для моделей, чутливих до масштабу вхідних змінних (SVR, PLSR, LASSO, MLR, KRR), з метою уніфікації шкал факторів і забезпечення коректного та обчислювально ефективного навчання за наявності відмінностей у діапазонах даних. Перетворення виконували за схемою z-стандартизації ($\mu=0$, $\sigma=1$):

$$x' = \frac{x - \mu}{\sigma}, \quad (9)$$

де x – початкове значення ознаки, x' – стандартизоване значення, μ – середнє значення ознаки, σ – її стандартне відхилення. Щоб уникнути витоку інформації (data leakage) під час валідації, параметри μ та σ обчислювали лише на навчальній підвибірці відповідного розбиття та застосовували до тестових даних у межах конвеєра оброблення (pipeline). Для деревоподібних ансамблів (XGB, RFR, ETR, GBR) стандартизацію ознак не застосовували, оскільки ці моделі ґрунтуються на розбитті простору ознак за пороговими значеннями, і лінійне масштабування змінних не впливає на структуру таких розбиттів та якість прогнозування.

Для одержання неупередженої оцінки прогностичної здатності моделей за одночасного налаштування їхніх гіперпараметрів застосовували вкладену крос-валідацію (nested cross-validation). У зовнішньому циклі крос-валідації (outer cross-validation) використовували k -фолдову схему з $k=6$: на кожній ітерації формували навчальну підвибірку зовнішнього фолда (outer-train set) та тестову підвибірку зовнішнього фолда (outer-test set), на якій оцінювали показники якості. Підбір гіперпараметрів здійснювали в внутрішньому циклі крос-валідації (inner cross-validation) із k -фолдовим розбиттям ($k=5$) у процедурі вичерпного пошуку за сіткою їхніх значень (GridSearchCV), яку проводили лише на навчальній підвибірці зовнішнього фолда. Після вибору оптимальних гіперпараметрів моделі перенавчали на всій навчальній підвибірці

зовнішнього фолда та оцінювали на тестовій підвбірці зовнішнього фолда.

Якість моделей оцінювали за стандартними метриками регресії: коефіцієнтом детермінації R^2 , коренем середньоквадратичної помилки RMSE та середньою абсолютною помилкою MAE:

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} \quad (10)$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2} \quad (11)$$

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_i - \hat{y}_i|, \quad (12)$$

де y_i – експериментально виміряне значення відклику для i -го спостереження, \hat{y}_i – прогнозоване моделлю значення відклику для i -го спостереження, \bar{y} – середнє значення відклику у вибірці, n – кількість спостережень; $i=1, \dots, n$ – індекс спостереження.

В зовнішньому циклі вкладеної крос-валідації значення метрик R^2 , RMSE та MAE обчислювали на кожному зовнішньому фолді та узагальнювали як середнє арифметичне \pm стандартне відхилення (mean \pm std) за фолдами. Додатково формували позафолдові прогнози (out-of-fold, OOF) зовнішнього циклу та на їх основі обчислювали агреговані оцінки R^2 (CV, OOF), RMSE (CV, OOF) і MAE (CV, OOF) як єдині значення метрик для всіх спостережень, спрогнозованих моделями, які не бачили відповідних спостережень під час навчання.

Порівняння моделей здійснювали за мінімізацією RMSE і MAE та за максимізацією R^2 , із акцентом на R^2 (CV, OOF) як стабільнішої узагальненій оцінці. Це зумовлено тим, що R^2 , обчислений на окремих зовнішніх фолдах, може набувати від'ємних значень у разі, коли модель на відповідному фолді прогнозує

гірше, ніж наївний базовий предиктор із константним прогнозом $\hat{y} = \bar{y}_{\text{train}}$, де \bar{y}_{train} – середнє значення відклику на навчальній підвбірці відповідного зовнішнього фолда; агрегування за OOF-прогнозами забезпечує більш узгоджену узагальнену оцінку метрики, оскільки зменшує вплив міжфолдової варіабельності на підсумкове значення R^2 .

Модель, що забезпечувала найкращі значення обраних метрик якості за результатами вкладеної крос-валідації, обирали як найбільш придатну. Після цього виконували фінальне налаштування гіперпараметрів у процедурі вичерпного пошуку за сіткою їхніх значень (GridSearchCV) та навчання моделі зі знайденими параметрами на повному наборі даних. Отриману модель надалі використовували як функцію пристосованості (fitness function) в алгоритмі рою частинок (Particle Swarm Optimization, PSO) для оптимізації параметрів процесу.

Моделювання та оптимізацію виконували мовою програмування Python із використанням бібліотек NumPy та pandas для оброблення даних, scikit-learn для реалізації моделей, вкладеної крос-валідації та оцінювання метрик, xgboost для реалізації XGB, а також matplotlib для побудови графіків.

Результати та їх обговорення

У табл. 1 наведений фрагмент матриці ортогонально-максимінного LHS-плану та експериментальні значення відклику, що слугували вихідними даними для навчання й крос-валідаційної верифікації моделей штучного інтелекту.

Table 1

Fragment of the orthogonal maximin Latin hypercube design matrix and experimental response values

Таблиця 1

Фрагмент матриці ортогонально-максимінного латинського гіперкубічного плану та експериментальні значення відклику

Run order	LHS design point ID	Substrate ratio (ethyl esters/sunflower oil), mol/mol	Temperature, °C	Residence time, min	CBE yield, % w/w
1	17	5	57	24	51.6
2	39	7	73	29	66.8
3	14	7	58	40	67.0
4	42	8	64	22	63.3
5	43	8	52	57	39.1
6	27	6	65	16	50.9
7	35	6	52	51	41.6
8	36	8	71	52	71.4
9	19	7	70	23	61.9
10	3	5	54	35	50.4
...					
39	20	6	58	56	68.5

Продовження табл. 1					
40	33	8	55	52	53.9
41	47	6	53	36	48.4
42	25	9	67	19	55.0
43	38	6	59	55	70.3
44	44	6	73	47	70.0
45	46	7	62	39	73.3
46	21	5	57	28	57.8
47	32	4	67	30	61.4
48	24	6	56	33	60.6

Результати порівняльного оцінювання прогностичної здатності моделей наведені в табл. 2.

Table 2

Summary model performance metrics from nested cross-validation: R^2 , RMSE, and MAE (mean \pm standard deviation across outer folds) and aggregated estimates computed from outer-loop out-of-fold predictions (CV, OOF)

Таблиця 2

Узагальнені метрики якості моделей за результатами вкладеної крос-валідації: R^2 , RMSE та MAE (середнє значення \pm стандартне відхилення за зовнішніми фолдами, mean \pm std) і агреговані оцінки за позафолдовими прогнозами зовнішнього циклу (CV, OOF)

Model	R^2 (CV, mean \pm std)	RMSE (CV, mean \pm std)	MAE (CV, mean \pm std)	R^2 (CV, OOF)	RMSE (CV, OOF)	MAE (CV, OOF)	R^2 (Train)	RMSE (Train)	MAE (Train)
MLR	-0.291 \pm 1.723	10.04 \pm 2.63	8.27 \pm 2.18	0.414	10.32	8.27	0.494	9.59	7.70
PLSR	-0.296 \pm 1.709	10.15 \pm 2.64	8.41 \pm 2.16	0.402	10.43	8.41	0.494	9.59	7.70
LASSO	-0.270 \pm 1.675	10.01 \pm 2.65	8.25 \pm 2.19	0.416	10.30	8.25	0.494	9.59	7.70
SVR	0.935 \pm 0.042	2.66 \pm 0.99	1.97 \pm 0.52	0.957	2.80	1.97	0.996	0.82	0.52
KRR	0.872 \pm 0.144	3.40 \pm 0.93	2.55 \pm 0.59	0.932	3.51	2.55	0.992	1.22	1.01
XGB	0.896 \pm 0.118	3.08 \pm 1.65	2.41 \pm 1.31	0.936	3.42	2.41	1.000	0.13	0.10
RFR	0.729 \pm 0.264	5.22 \pm 3.07	3.96 \pm 2.19	0.807	5.93	3.96	0.973	2.23	1.40
ETR	0.716 \pm 0.253	5.47 \pm 2.65	3.70 \pm 1.41	0.803	5.98	3.70	1.000	0.00	0.00
GBR	0.885 \pm 0.108	3.46 \pm 2.05	2.75 \pm 1.73	0.915	3.94	2.75	1.000	0.20	0.16

Аналіз даних, наведених в табл. 2, свідчить, що лінійні моделі (MLR, PLSR, LASSO) демонструють незадовільну прогностичну здатність: середні значення R^2 за зовнішніми фолдами є від'ємними і супроводжуються дуже великим стандартним відхиленням. Це вказує на суттєву міжфолдову варіабельність і нестійкість лінійного наближення для наявної структури даних (на окремих фолдах прогноз гірший за наївний базовий предиктор $\hat{y} = \bar{y}_{\text{train}}$). Водночас їхні агреговані значення R^2 (CV, OOF) на рівні ~ 0.40 – 0.42 поєднуються з високими похибками (RMSE ≈ 10.30 – 10.43 ; MAE ≈ 8.25 – 8.41), що вказує на обмеженість лінійної гіпотези для опису досліджуваної нелінійної залежності відклику від факторів.

Нелінійні моделі забезпечують істотно вищу точність прогнозування, причому найкращий і водночас найбільш стабільний результат забезпечує SVR з RBF-ядром: R^2 (CV, mean \pm std) = 0.935 \pm 0.042 із найменшою міжфолдовою варіабельністю серед усіх моделей, а агрегована оцінка R^2 (CV, OOF) = 0.957 супроводжується мінімальними похибками RMSE (CV, OOF) = 2.80 і MAE (CV, OOF) = 1.97. Практично це означає, що SVR відтворює основну частку дисперсії

експериментального відклику та дає найменшу типову абсолютну помилку прогнозу, причому результати відтворюються узгоджено на різних зовнішніх розбиттях.

Група сильних конкурентів представлена моделями XGB, KRR та GBR. Вони мають високі агреговані значення R^2 (CV, OOF) ≈ 0.915 – 0.936 і помірні похибки (RMSE ≈ 3.42 – 3.94 ; MAE ≈ 2.41 – 2.75). Моделі RFR та ETR демонструють середній рівень узагальнення (R^2 (CV, OOF) ≈ 0.803 – 0.807) за відносно вищих похибок (RMSE ≈ 5.93 – 5.98 ; MAE ≈ 3.70 – 3.96). Водночас аналіз «розриву узагальнення» між навчальними та крос-валідаційними оцінками вказує на різний ступінь схильності до перенавчання: для XGB, GBR та деревоподібних ансамблів загалом спостерігаються майже ідеальні навчальні метрики, тоді як крос-валідаційна якість є помітно нижчою – типовий прояв високої гнучкості моделі й потреби в ретельній регуляризації. Для KRR та SVR навчальні показники також високі, однак їхній розрив із крос-валідаційними оцінками є більш помітним, що свідчить про краще керування компромісом «зміщення–дисперсія» та, відповідно, про надійнішу прогностичну здатність.

Візуальна інтерпретація результатів, позафолдових прогнозів зовнішнього циклу наведених у табл. 2, подана на рис. 1 у вигляді вкладеної крос-валідації. діаграм «фактичне-прогнозоване» для

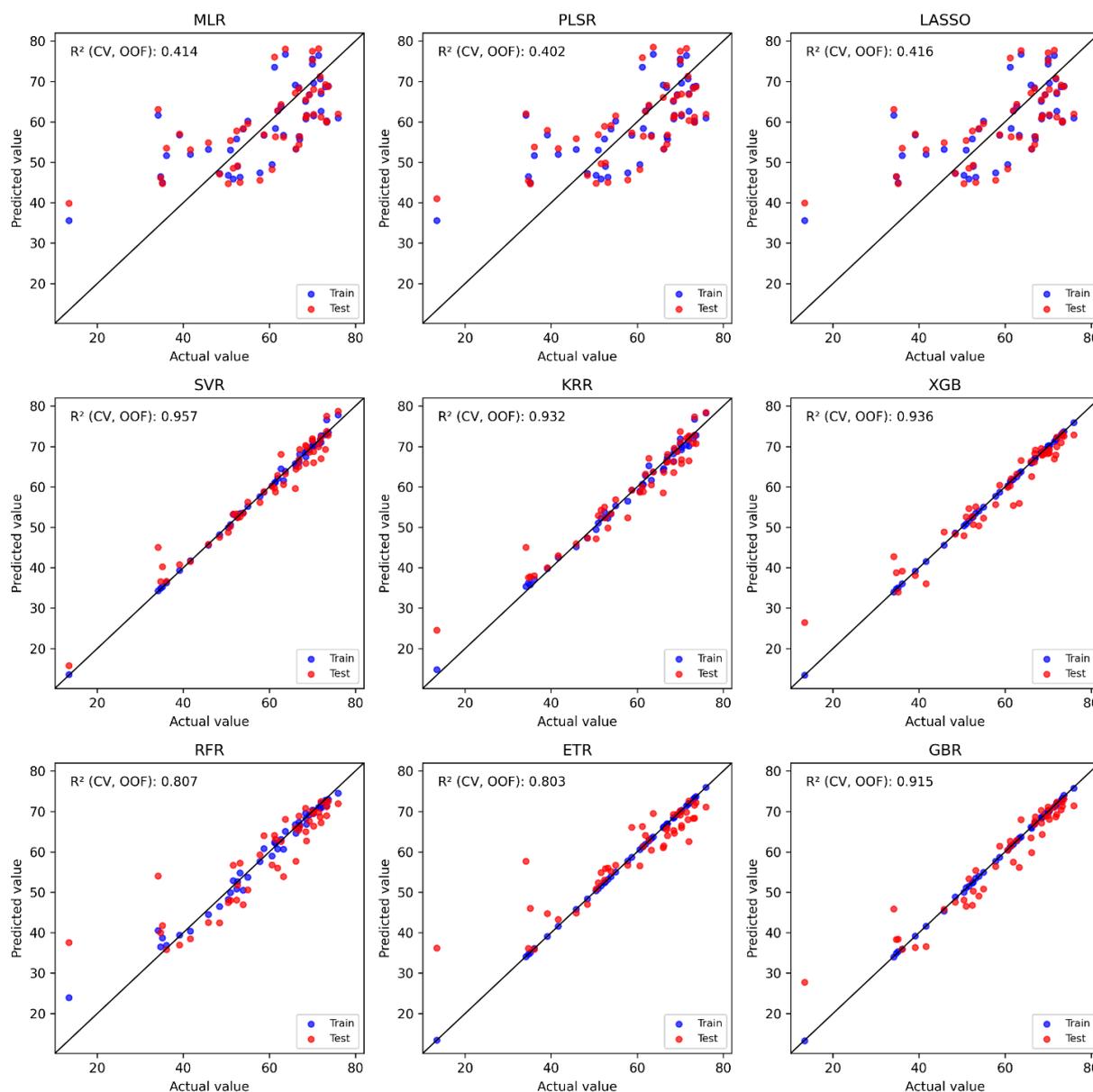


Fig. 1. Comparison of actual vs. predicted response values for the AI models based on nested cross-validation (out-of-fold predictions from the outer loop): blue markers denote training points and red markers denote test points; the solid line indicates the ideal agreement ($y = x$)

Рис. 1. Порівняння фактичних і прогнозованих значень відклику для моделей штучного інтелекту за результатами вкладеної крос-валідації (позафолдові прогнози зовнішнього циклу): сині маркери – навчальні точки, червоні – тестові; суцільна лінія відповідає лінії ідеальної відповідності ($y = x$)

Формат діаграм на рис. 1 дозволяє оцінити не лише інтегральний рівень точності, а й характер похибок: наявність систематичних зсувів, залежність розкиду від рівня відклику та вплив поодиноких атипових спостережень. Для лінійних моделей помітний ефект «стиснення амплітуди» – тяжіння прогнозів до середніх значень із гіршим відтворенням крайових зон діапазону відклику, що проявляється широким розсіюванням навколо лінії ідеальної відповідності $y = x$. Нелінійні

підходи формують суттєво компактнішу смугу вздовж $y = x$, однак відрізняються рівномірністю узгодження: для деревоподібних ансамблів місцями простежуються ділянки підвищеного розкиду тестових точок і поодинокі значні відхилення, що вказує на локальну чутливість прогнозів до окремих спостережень та підвибірок.

Найбільш узгоджений вигляд діаграм демонструє SVR: точки як навчання, так і тестування переважно прилягають до

діагоналі без виражених систематичних викривлень по всьому діапазону відклику, а відхилення мають радше випадковий, ніж структурний характер. У поєднанні з підсумковими метриками табл. 2 це свідчить, що SVR забезпечує не лише високу середню точність, а й стабільну каліброваність прогнозів за позафолдовими оцінками зовнішнього циклу вкладеної крос-валідації. Відтак, саме регресію на основі опорних векторів з радіально-базисним ядром було обґрунтовано обрано як базову модель і надалі застосовано як функцію пристосованості в алгоритмі рою частинок (PSO) для оптимізації параметрів процесу ферментативного переетерифікування.

На наступному етапі виконано фінальне налаштування гіперпараметрів SVR на повному наборі експериментальних даних із використанням конвеєра StandardScaler → SVR та k-фолдової крос-валідації (k = 8) як внутрішньої процедури добору параметрів. У межах сіткового пошуку оптимальними виявилися наступні значення гіперпараметрів: C = 1000, $\gamma = 0.1$, $\epsilon = 0.2$, що відповідає достатньо «гнучкій» нелінійній апроксимації за одночасного пригнічення впливу дрібномасштабного шуму через параметр ϵ -інсенситивної зони.

Адекватність отриманої SVR-моделі оцінювали як за показниками крос-валідації, так і за якістю відтворення наявних експериментальних даних. Середнє значення R^2 у k-фолдовій крос-валідації становило 0.955 ± 0.038 , що узгоджується з оцінками, отриманими на етапі вкладеної крос-валідації (табл. 2), і підтверджує відтворюваність моделі на різних розбиттях. Після перенавчання моделі з оптимальними гіперпараметрами на повному наборі даних отримано високу точність відтворення: $R^2=0.9986$, RMSE=0.51, MAE=0.37 відсоткового пункту виходу CBE (тобто абсолютної похибки на шкалі CBE yield, %). Водночас середній залишок був близьким до нуля (0.006), а максимальна абсолютна похибка не перевищувала 1.80. Додаткові індикатори надійності прогнозу свідчили, що 93.75 % експериментальних точок мають $|e| \leq 1.0$ відсоткового пункту, а 100 % – $|e| \leq 2.0$ відсоткових пунктів (де $e = y - \hat{y}$), що є важливим для подальшої оптимізації, оскільки PSO концентрує пошук у ділянках факторного простору з найвищим прогнозованим відкликом.

Алгоритм PSO запускався з 40 частинками та 100 поколіннями; інерційний коефіцієнт становив $w = 0.7$, когнітивний і соціальний коефіцієнти – $c_1 = c_2 = 1.5$ (початкове зерно випадковості 42). Така конфігурація є компромісом між глобальним пошуком (достатня кількість частинок і помірна інерція) та здатністю до стабілізації в області максимуму (симетричні c_1 і c_2 сприяють балансуванню «індивідуального досвіду» та «колективного тяжіння» рою).

Еволюцію найкращого прогнозованого значення відклику та звуження діапазонів факторів у популяції наведено на рис. 2.

Характер збіжності є типовим для задач із локалізованою областю високих значень відклику: найкраще значення цільової функції (global best), оцінене SVR-моделлю, різко зростає в перших 10–15 поколіннях, після чого виходить на плато та надалі практично не змінюється. Така стабілізація найкращого прогнозу свідчить про досягнення стаціонарного режиму пошуку та локальне уточнення координат максимуму без істотного дрейфу розв'язку. Графіки розмаху (min–max) значень для кожного керованого фактора (мольне співвідношення субстратів, температура та час перебування суміші субстратів в реакторі) додатково підтверджують конвергенцію рою за координатами частинок: від майже повного покриття меж у перших поколіннях – до вузьких інтервалів поблизу оптимальних значень у фінальній частині оптимізації.

За результатами PSO отримано оптимальну неперервну комбінацію параметрів: мольне співвідношення суміші етилових естерів до олії 6.23 моль/моль, температура 65.39 °C, час перебування суміші субстратів у реакторі 37.62 хв, для якої SVR прогнозує максимальний відклик – вихід CBE yield = 77.5 %. Для практичної інтерпретації додатково розглянутий варіант округлення до цілих значень керованих факторів: [6; 65; 38], де прогноз становить 77.4 %. Зменшення цільового показника після округлення є незначним (0.1 відсоткового пункту), що вказує на робастність оптимуму та відсутність «вузького піку», чутливого до мінімальних змін параметрів. Це є позитивною ознакою з технологічної точки зору: робочий режим менше залежить від неминучих коливань температури, витрати та складу суміші, а також спрощує масштабування.

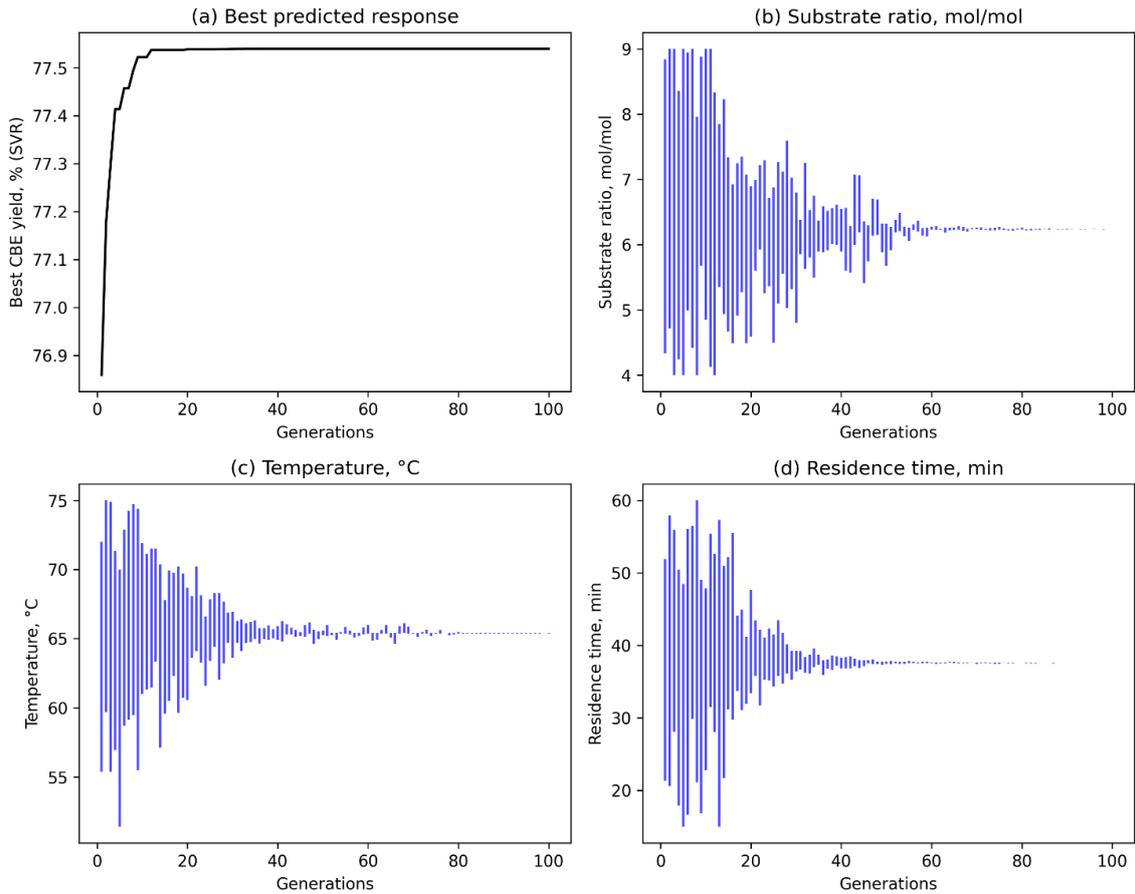
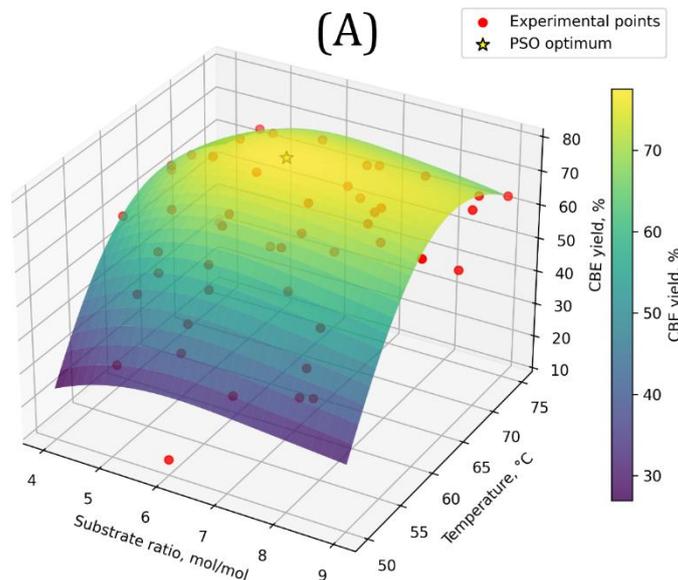


Fig. 2. Optimization of the biocatalytic technology for cocoa butter equivalent production
Рис. 2. Процес оптимізації біокаталітичної технології виробництва еквівалента какао-масла

З метою вивчення основних закономірностей впливу предикторів на відклик було побудовано 3D-поверхні відклику, апроксимовані SVR, для всіх пар факторів із фіксацією третього фактора на оптимальному рівні за результатами PSO (рис. 3). Усі поверхні відображають

експериментальні точки та положення оптимуму (маркер PSO optimum), що дозволяє одночасно оцінити форму прогнозованої залежності та те, наскільки оптимум лежить у зоні, підтриманій експериментальними спостереженнями.



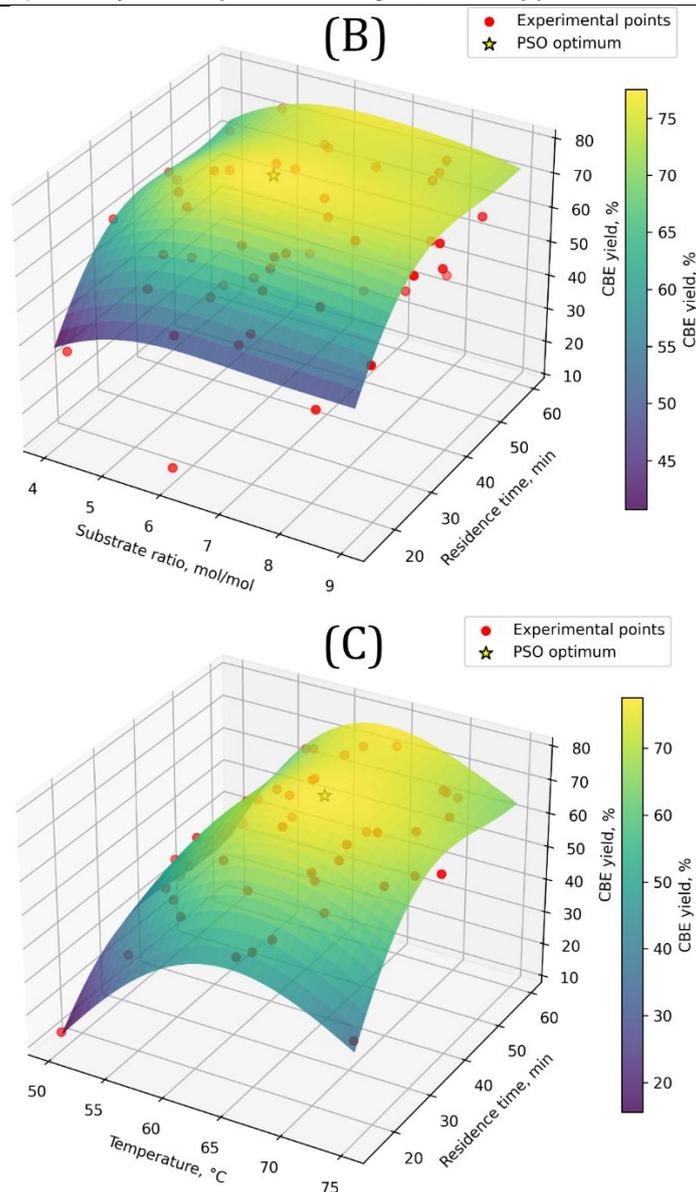


Fig. 3. 3D response surface plots showing the effects of: (A) substrate molar ratio and temperature; (B) substrate molar ratio and residence time; (C) temperature and residence time

Рис. 3. Тривимірні (3D) поверхні відклику, що відображають вплив факторів: (А) мольне співвідношення субстратів і температура; (В) мольне співвідношення субстратів і час перебування суміші субстратів в реакторі; (С) температура і час перебування суміші субстратів в реакторі

Побудовані поверхні відклику (рис. 3) демонструють наявність чітко локалізованої області максимуму та широкого плато високих значень виходу СВЕ, в межах якого розташований PSO-оптимум. Зі збільшенням мольного співвідношення суміші етилових естерів (C16:0/C18:0) до олії від 4 до ≈ 6 моль/моль вихід СВЕ істотно зростає, що узгоджується з підвищенням доступності ацильних донорів і зміщенням рівноваги реакції переетерифікування в бік утворення структурованих ТАГ – POP, SOP і SOS; за подальшого підвищення співвідношення спостерігається насичення ефекту й місцями слабе зниження за рахунок погіршенням

умов масоперенесення в нерухомому шарі. Температурний фактор проявляє виражений оптимум поблизу 65 °C: за нижчих температур обмежувальними стають швидкість ферментативного обміну ацилів та дифузія субстратів у пористий носій, в той час як за підвищення температури вище оптимуму зменшення виходу СВЕ пов'язано з частковою термоінактивцією іммобілізованої ліпази; додатково високі температури прискорюють неферментативну міграцію ацильних груп у проміжних ацилгліцерилах і ТАГ, що знижує позиційну специфічність і зменшує частку POP/SOP/SOS у сумарній ТАГ-фракції. Вплив часу перебування відповідає кінетиці

проточного процесу: за малих значень (≈ 15 – 25 хв) система не досягає близького до стаціонарного/квазі рівноважного стану, тому цільові ТАГ накопичуються неповною мірою; збільшення часу до ≈ 38 хв забезпечує вихід на плато високого значення відклику, а подальше подовження контакту навпаки, майже не покращує результат і навіть спричиняє незначне зниження через накопичення вторинних перегрупвань, насамперед ацильної міграції, що зменшує селективне збагачення продукту триацилгліцеринами POP, SOP і SOS.

Для експериментальної валідації результатів моделювання та PSO-оптимізації виконаний додатковий перевірючий експеримент у точці практичної реалізації оптимуму ([6; 65; 38]) (моль/моль; °C; хв) у п'яти незалежних повторюваностях із рандомізацією порядку запусків. Модель SVR прогнозувала вихід CBE $\hat{y} = 77.4\%$. За результатами експерименту отримано $\bar{y}_{\text{exp}} = 77.0 \pm 1.1\%$ (mean \pm SD), що відповідає абсолютному відхиленню $|e| = 0.4$ відсоткового пункту та відносному відхиленню $\delta = 0.52\%$. Отримана розбіжність є істотно меншою за очікуваний рівень помилки моделі за позафолдовими оцінками зовнішнього циклу вкладеної крос-валідації (табл. 2), а варіабельність результатів у повторностях є низькою (відносне стандартне відхилення, RSD, становило 1.43%). Це підтверджує адекватність SVR у зоні оптимуму та методологічну коректність використання моделі як функції пристосованості в PSO для пошуку параметрів процесу.

References

- [1] Dantas, T.E.T., de-Souza, E.D., Destro, I.R., Hammes, G., Rodriguez, C.M.T., Soares, S.R. (2021). How the combination of circular economy and Industry 4.0 can contribute towards achieving the Sustainable Development Goals. *Sustain. Prod. Consum.*, 26, 213–227. <https://doi.org/10.1016/j.spc.2020.10.005>
- [2] Raven, D.B., Chikkula, Y., Patel, K.M., Al Ghazal, A.H., Salloum, H.S., Bakhurji, A.S., Patwardhan, R.S. (2024). Machine learning and conventional approaches to process control and optimization: industrial applications and perspectives. *Comput. Chem. Eng.*, 189, 108789. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2024.108789>
- [3] Castro-Amoedo, R., Granacher, J., Maréchal, F. (2024). A combined genetic algorithm and active learning approach to build and test surrogate models in process systems engineering. *Comput. Chem. Eng.*, 181, 108517. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2023.108517>
- [4] Hassoun, A., Prieto, M.A., Carpena, M., Bouzembrak, Y., Marvin, H.J.P., Pallarés, N., Barba, F.J., Punia Bangar, S., Chaudhary, V., Ibrahim, S., Bono, G. (2022). Exploring the role of green and Industry 4.0 technologies in achieving sustainable development goals in food sectors. *Food Res. Int.*, 162 (Pt B), 112068. <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2022.112068>
- [5] Ghobakhloo, M., Iranmanesh, M., Tseng, M.L., Grybauskas, A., Stefanini, A., Amran, A. (2023). Behind the definition of Industry 5.0: a systematic review of technologies, principles, components, and values. *J. Ind. Prod. Eng.*, 40(6), 432–447. <https://doi.org/10.1080/21681015.2023.2216701>
- [6] Abass, T., Itua, E.O., Bature, T., Eruaga, M.A. (2024). Innovative approaches to food quality control: AI and machine learning for predictive analysis. *World Journal of Advanced Research and Reviews*, 21 (3), 823–828. <https://doi.org/10.30574/wjarr.2024.21.3.0719>

Висновки

Доведена доцільність і ефективність використання штучного інтелекту під час розробки оптимальних режимів біокаталітичних процесів у харчових технологіях. Це підтверджено на прикладі оптимізації ферментативного переетерифікування високоолеїнової соняшникової олії та суміші етилових естерів пальмітинової і стеаринової кислот для одержання еквівалента какао-масла в безперервному реакторі з нерухомим шаром біокаталізатора.

За результатами вкладеної крос-валідації найвищу та найстабільнішу прогностичну здатність продемонструвала SVR з RBF-ядром ($R^2(\text{CV}, \text{OOF}) = 0.957$; $\text{RMSE} = 2.80$; $\text{MAE} = 1.97$), що обґрунтовує її вибір як базової моделі процесу.

Інтеграція SVR як функції пристосованості з глобальною оптимізацією PSO дозволила визначити оптимальні умови процесу ферментативного переетерифікування: мольне співвідношення субстратів 6 моль/моль, температура 65 °C і час перебування суміші субстратів в реакторі 38 хв.

Побудовані SVR-апроксимовані поверхні відклику вказують на локалізовану область максимуму та плато високих значень виходу, що узгоджується з компромісом між доступністю ацильних донорів, масоперенесенням у шарі та температурною стабільністю біокаталізатора.

Перевірючий експеримент у п'яти незалежних повторностях підтвердив адекватність моделі в зоні оптимуму: вихід еквівалента какао-масла становив $77.0 \pm 1.1\%$ за відносного відхилення $\delta = 0.52\%$.

- [7] Esmaily, R., Razavi, M.A., Razavi, S.H. (2024). A step forward in food science, technology and industry using artificial intelligence. *Trends Food Sci. Technol.*, 143, 104286. <https://doi.org/10.1016/j.tifs.2023.104286>
- [8] Harris, N., Gonzalez Viejo, C., Barnes, C., Fuentes, S. (2023). Non-invasive digital technologies to assess wine quality traits and provenance through the bottle. *Fermentation*, 9(1), 10. <https://doi.org/10.3390/fermentation9010010>
- [9] Zhou, Q., Zhang, H., Wang, S. (2022). Artificial intelligence, big data, and blockchain in food safety. *Int. J. Food Eng.*, 18(1), 1–14. <https://doi.org/10.1515/ijfe-2021-0299>
- [10] Barthwal, R., Kathuria, D., Joshi, S., Kaler, R.S.S., Singh, N. (2024). New trends in the development and application of artificial intelligence in food processing. *Innov. Food Sci. Emerg. Technol.*, 92, 103600. <https://doi.org/10.1016/j.ifset.2024.103600>
- [11] Bidyalakshmi, T., Jyoti, B., Mansuri, S.M., Srivastava, A., Mohapatra, D., Kalnar, Y.B., Narsaiah, K., Indore, N. (2025). Application of artificial intelligence in food processing: current status and future prospects. *Food Eng. Rev.*, 17, 27–54. <https://doi.org/10.1007/s12393-024-09386-2>
- [12] Garti, N., Widlak, N.R. (2012). *Cocoa butter and related compounds*. USA: AOCs Press.
- [13] Norazlina, M.R., Hasmadi, M., Jahurul, M.H.A. (2024). Production of cocoa butter alternatives from blending bambangan kernel fat stearin and palm stearin for potential applications. *J. Food Meas. Charact.*, 18, 6900–6911. <https://doi.org/10.1007/s11694-024-02701-9>
- [14] Ramos Ramos, M.R., García Londoño, V.A., Borroni, M.V., Candal, R.J., Herrera, M.L. (2023). Crystallization and polymorphic behaviors of cocoa butter alternatives: A review. *J. Am. Oil Chem. Soc.*, 100(10), 759–773. <https://doi.org/10.1002/aocs.12730>
- [15] Ray, J., Bhattacharya, D. K., Dutta, S. (2022). Crystallization and polymorphism of cocoa butter equivalents from blends of palm mid fraction and hard stearins produced by enzymatic acidolysis of high oleic sunflower oil. *Eur. J. Lipid Sci. Technol.*, 124(9), 2100228. <https://doi.org/10.1002/ejlt.202100228>
- [16] Mutia, T. A., Andarwulan, N., & Hariyadi, P. (2021). Characterization of cocoa butter equivalent from formulated hard palm oil mid-fraction and canola oil blend. *IOP Conf. Ser. Earth and Environmental Science*, 807(4), 042075. <https://doi.org/10.1088/1755-1315/807/4/042075>
- [17] Sonprasert, K., Kaewprapan, K., Duangmal, K., Danthine, S. (2022). Synthesis of confectionery fat from illipé butter stearin and palm mid-fraction blend via enzymatic interesterification. *Int. J. Food Sci. Technol.*, 57(6), 3648–3658. <https://doi.org/10.1111/ijfs.15648>
- [18] Remonatto, D., Miotti, R.H., Monti, R., Bassan, J.C., de Paula, A.V. (2022). Applications of immobilized lipases in enzymatic reactors: a review, *Proc. Biochem.* 114, 1–20, <https://doi.org/10.1016/j.procbio.2022.01.004>
- [19] Freitas, A.N., Remonatto, D., Miotti Junior, R.H., do Nascimento, J.F.C., da Silva Moura, A.C., de Ebinuma, V.C.S. (2024). Adsorption of extracellular lipase in a packed-bed reactor: an alternative immobilization approach, *Bioprocess. Biosyst. Eng.* 47 1735–1749, <https://doi.org/10.1007/s00449-024-03066-5>.
- [20] Cozentino, I.D.S.C., Rodrigues, M.D.F., Mazziere, V.T., Cerri, M.O., Cavallini, D.C.U., de Paula, A.V. (2022). Enzymatic synthesis of structured lipids from grape seed (*Vitis vinifera* L.) oil in associated packed bed reactors. *Biotechnol. Appl. Biochem.*, 69(1), 101–109. <https://doi.org/10.1002/bab.2085>
- [21] Pacheco, B.J.S., Andrade, G.S.S., de Paula, A.V. (2024). Lipase from *Rhizopus oryzae* immobilized on corn cob powder: a new approach for dietetic triglyceride synthesis in a fixed bed reactor. *Quim. Nova*, 47(7), e-20240025. <https://doi.org/10.21577/0100-4042.20240025>
- [22] Mutia, R., Abang Zaidel, D.N., Muhamad, I.I. (2016). Optimization of cocoa butter equivalent production from formulated hard palm oil mid-fraction and canola oil blends. *J. Teknol. (Sci. Eng.)*, 78(6-12), 127–134. <https://doi.org/10.11113/jt.v78.9243>
- [23] Nekrasov, P.O., Berezka, T.O., Nekrasov, O.P., Gudz, O.M., Molchenko, S.M. (2025). Improving the efficiency of vegetable oil extraction by biocatalytic treatment of oilseed raw materials. *Journal of Chemistry and Technologies*, 33(1), 146–152. <https://doi.org/10.15421/jchemtech.v33i1.322422>
- [24] Nekrasov, P.O., Berezka, T.O., Nekrasov, O.P., Gudz, O.M., Molchenko, S.M. (2024) Investigation of the basic laws of the kinetics of biocatalytic hydrolysis of vegetable oil. *Journal of Chemistry and Technologies*, 32(1), 191–197. <https://doi.org/10.15421/jchemtech.v32i1.298927>
- [25] Nekrasov, P.O., Berezka, T.O., Nekrasov, O.P., Gudz, O.M., Molchenko, S.M., Rudneva, S.I. (2023). Optimization of the parameters of biocatalytic hydrolysis of vegetable oil using the methods of neural networks and genetic algorithms. *Journal of Chemistry and Technologies*, (1), 140–146. <https://doi.org/10.15421/jchemtech.v31i1.274704>
- [26] Nekrasov, P.O., Berezka, T.O., Nekrasov, O.P., Gudz, O.M., Rudneva, S.I., Molchenko, S.M. (2022). Study of biocatalytic synthesis of phytosterol esters as formulation components of nutritional systems for health purposes. *Journal of Chemistry and Technologies*, 30(3), 404–409. <https://doi.org/10.15421/jchemtech.v30i3.265174>
- [27] Nekrasov, P.O., Tkachenko, N.A., Nekrasov, O.P., Gudz, O.M., Berezka, T.O., Molchenko, S.M. (2021). Oxidation resistance and sorption of oleogels as new-generation fat systems. *Voprosy khimii i khimicheskoi tehnologii – Issues of Chemistry and Chemical Technology*, (4), 89–95. <https://doi.org/10.32434/0321-4095-2021-137-4-89-95>
- [28] Nekrasov, P.O., Gudz, O.M., Nekrasov, O.P., Kishchenko, V.A., Holubets, O.V. (2019). [Fatty systems with reduced content of trans-fatty acids]. *Voprosy khimii i khimicheskoi tehnologii – Issues of Chemistry and Chemical Technology*, (3), 132–138 (in Ukrainian). <https://doi.org/10.32434/0321-4095-2019-124-3-132-138>
- [29] Senthil, H., Janve, M. (2025). AI technologies shaping the future of the cocoa industry from farm to fork: a comprehensive review. *Food Sci. Biotechnol.*, 34(14),

- 3127–3151. <https://doi.org/10.1007/s10068-025-01848-5>
- [30] Guru Prasad, M.S., Naveen Kumar, H.N., Jain, A.K., Syed, J., Baig, R.U. (2025). Convergence of improved particle swarm optimization based ensemble model and explainable AI for the accurate detection of food adulteration in red chilli powder. *J. Food Compos. Anal.*, 143, 107577. <https://doi.org/10.1016/j.jfca.2025.107577>
- [31] Yakoubi, S. (2025). Sustainable Revolution: AI-Driven enhancements for composite polymer processing and optimization in intelligent food packaging. *Food Bioprocess Technol.*, 18(1), 82–107. <https://doi.org/10.1007/s11947-024-03449-2>
- [32] Kurtanjek, Ž. (2024). Causal artificial intelligence models of food quality data. *Food Technol. Biotechnol.*, 62(1), 102–109. <https://doi.org/10.17113/ftb.62.01.24.8301>
- [33] Li, W., Yu, J., Ren, N., Huang, L., Dang, Y., Wu, Y., Li, G. (2025). Exploration of the prediction and generation patterns of heterocyclic aromatic amines in roast beef based on Genetic Algorithm combined with Support Vector Regression. *Food Chem.*, 463 (Pt 1), 141059. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2024.141059>
- [34] Wang, Q., Han, F., Wu, Z., Lan, T., Wu, W. (2020). Estimation of free fatty acids in stored paddy rice using multiple-kernel support vector regression. *Appl. Sci. (Basel)*, 10(18), 6555. <https://doi.org/10.3390/app10186555>
- [35] Long, T., Tang, X., Liang, C., Wu, B., Huang, B., Lan, Y., Xu, H., Liu, S., Long, Y. (2024). Detecting bioactive compound contents in Dancong tea using VNIR-SWIR hyperspectral imaging and KRR model with a refined feature wavelength method. *Food Chem.*, 460, 140579. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2024.140579>
- [36] Wang, L., Niu, D., Zhao, X., Wang, X., Hao, M., Che, H. (2021). A comparative analysis of novel deep learning and ensemble learning models to predict the allergenicity of food proteins. *Foods*, 10(4), 809. <https://doi.org/10.3390/foods10040809>
- [37] Moneravilla, V.B., Rodrigo, D., Dharmaratne, G., Purasingha, S., Pushpakumara, A., Abeyasinghe, N., Jayaweera, H., Jayanetti, S., Gunewardene, S. (2026). Random Forest Regression assisted Raman spectroscopy for authenticating the purity of virgin coconut oil. *J. Food Compos. Anal.*, 149, 108784. <https://doi.org/10.1016/j.jfca.2025.108784>
- [38] Lanjewar, M.G., Morajkar, P.P., Parab, J.S. (2023). Hybrid method for accurate starch estimation in adulterated turmeric using Vis-NIR spectroscopy. *Food Addit. Contam. A*, 40(9), 1131–1146. <https://doi.org/10.1080/19440049.2023.2241557>
- [39] Zheng, R., Jia, Y., Ullagaddi, C., Allen, C., Rausch, K., Singh, V., Schnable, J.C., Kamruzzaman, M. (2024). Optimizing feature selection with gradient boosting machines in PLS regression for predicting moisture and protein in multi-country corn kernels via NIR spectroscopy. *Food Chem.*, 456, 140062. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2024.140062>
- [40] Zhang, Y., Yu, H., Zhang, H., Tang, X. (2023). Bread staling prediction with a multiobjective particle swarm optimization-based bread constitutive modeling method. *J. Texture Stud.*, 54(4), 498–509. <https://doi.org/10.1111/jtxs.12775>
- [41] Sarkar, T., Salauddin, M., Mukherjee, A., Shariati, M.A., Rebezov, M., Tretyak, L., Pateiro, M., Lorenzo, J.M. (2022). Application of bio-inspired optimization algorithms in food processing. *Curr. Res. Food Sci.*, 5, 432–450. <https://doi.org/10.1016/j.crf.2022.02.006>