



## مدل سازی ریاضی، منطق فازی و شبکه عصبی مصنوعی سینتیک استخراج اسانس از بومادران (*Achillea millefolium L.*) با روش تقطیر مقاومتی

پروانه کرمی<sup>۱</sup>، محسن زندی<sup>۲\*</sup>، علی گنجلو<sup>۳</sup>

۱ کارشناس ارشد، گروه علوم و مهندسی صنایع غذایی، دانشکده کشاورزی، دانشگاه زنجان، زنجان، ایران.

۲ استادیار، گروه علوم و مهندسی صنایع غذایی، دانشکده کشاورزی، دانشگاه زنجان، زنجان، ایران.

۳ دانشیار، گروه علوم و مهندسی صنایع غذایی، دانشکده کشاورزی، دانشگاه زنجان، زنجان، ایران.

### چکیده

### اطلاعات مقاله

تاریخ های مقاله :

تاریخ دریافت: ۱۴۰۰/۰۷/۲۰

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۰/۰۹/۱۶

کلمات کلیدی:

بومادران،

مدل ریاضی،

شبکه عصبی مصنوعی،

منطق فازی.

هدف پژوهش حاضر، پیش‌بینی سینتیک استخراج اسانس طی تقطیر مقاومتی با سه مدل مختلف (روش‌های رگرسیون غیر خطی (ریاضی)، شبکه عصبی مصنوعی (ANN) و منطق فازی) برای مقایسه دقت این مدل‌ها بود. بر اساس نتایج به دست آمده شبکه عصبی مصنوعی بهترین روش در بین همه مدل‌های اجرا شده برای پیش‌بینی عملکرد استخراج بود. چهار مدل ریاضی (مدل‌های مرتبه اول، مرتبه دوم، جذب و سیگموئید) بر داده‌های تجربی عملکرد استخراج برآزش گردید. نتایج نشان داد که مدل مرتبه اول می‌تواند عملکرد استخراج اسانس را با ضریب همبستگی ( $R^2$ ) برابر ۰/۹۸۸ و ریشه میانگین مربعات خطا (RMSE) برابر ۰/۰۰۱۴ به‌طور رضایت‌بخشی توصیف کند. شبکه عصبی با یک و دو لایه پنهان و ۴ تا ۳۰ نورون به‌طور تصادفی انتخاب شد و قدرت شبکه برای پیش‌بینی عملکرد استخراج برآورد شد. شبکه عصبی با ساختار پس‌انتشار پیش‌خور، الگوریتم آموزش لونیگ-مارکوآرت و پیکربندی ۳-۱۱-۱۱ دارای حداکثر  $R^2$  (۰/۹۹۹) و حداقل RMSE (۰/۰۰۰۴) هستند. ابزار منطق فازی درمطلب با مدل ممدانی در قالب قوانین اگر-آنگاه همراه با تابع عضویت مثلثی برای پیش‌بینی عملکرد استخراج استفاده گردید. علی‌رغم این واقعیت که منطق فازی نرخ برآزش کمتری ( $R^2=0/997$ ) نسبت به ANN را تضمین می‌کند، این یک تکنیک قدرتمند برای برآزش داده‌های تجربی عملکرد استخراج بود.

DOI: 10.52547/fsct.19.123.341

DOR: 20.1001.1.20088787.1401.19.123.12.7

\* مسئول مکاتبات:

Zandi@znu.ac.ir

## ۱- مقدمه

بومادران (*Achillea millefolium L.*) از تیره آچیلاد<sup>۱</sup> و یکی از مهم‌ترین جنس‌های خانواده آستراسه<sup>۲</sup> است که دارای حدود ۱۱۵ گونه می‌باشد و به طور گسترده‌ای در اروپا، شمال آمریکا و آسیا (ترکیه، ایران، قفقاز، آسیای مرکزی، افغانستان، پاکستان، عراق و سوریه) رشد می‌کند. در ایران در دامنه‌های البرز، تبریز، ارومیه، اشتران کوه، خوزستان، گلستان، اصفهان، مازندران، همدان، قزوین، کرج، دامغان، سمنان، شاهرود و به صورت علف هرز در نواحی دامنه‌ای کوهستانی، کنار جاده‌ها و حاشیه‌ی مزارع می‌روید [۱، ۲]. گونه میلفولیوم دارای گل‌های سفید رنگ می‌باشد و عمدتاً حاوی ترکیب‌های فلاونوئیدی، آلکالوئیدها و تانن‌ها است [۳].

استخراج اولین مرحله از مطالعه گیاهان دارویی است و نقش قابل توجه و مهمی در نتیجه نهایی دارد [۴]. روش استخراج با توجه به نوع و ساختار گیاه، میزان مواد موثره ذخیره شده، میزان عملکرد قابل انتظار و درجه خلوص محصول نهایی انتخاب می‌شود [۵]؛ فرآیند استخراج اسانس در طول زمان دستخوش تغییراتی بوده است. تقطیر آبی<sup>۳</sup> یکی از روش‌های حرارتی سنتی پرکاربرد است که از گذشته تا کنون بسیار مورد توجه بوده است [۶]؛ این روش استخراج علاوه بر مصرف بالای انرژی معیایی مانند زمان فرآیند طولانی، کیفیت پایین اسانس استخراجی (به دلیل گرمایش غیریکنواخت و طولانی)، عملکرد پایین استخراج و هزینه‌های بالای بهره‌برداری دارد. صنایع تولید اسانس به دنبال دستیابی به عملکردی بهتر فرآیند استخراج با تأثیرات مطلوب زیست محیطی هستند که محققان را به سمت توسعه روش‌های جدید سازگار با محیط‌زیست، ایمن و سودآور سوق می‌دهند [۷، ۸]. اخیراً تقطیر مقاومتی<sup>۴</sup> به عنوان تکنولوژی سبز<sup>۵</sup> مورد استفاده قرار گرفته است که سبب بهبود کارایی روش‌های سنتی استخراج گردیده است [۵]. تقطیر مقاومتی در بخش تقطیر از اصول فرآیند تقطیر معمولی پیروی می‌کند. برخلاف سیستم مرسوم تقطیر آبی، تقطیر مقاومتی تنها بر انتقال حرارت رسانش و

همرفت تکیه نمی‌کند. در فرآیند تقطیر مقاومتی گرما به طور مستقیم در داخل ماده گیاهی تولید می‌شود و در نتیجه زمان این فرآیند در مقایسه با روش‌های متداول نظیر تقطیر آبی بسیار کوتاه‌تر می‌باشد [۹-۱۱]. مطالعاتی در مورد عملکرد، ترکیب و فعالیت‌های بیولوژیکی اسانس‌های حاصل از تقطیر از گونه‌های مختلف گیاهان در سراسر جهان انجام شده است. با این حال، سینتیک تقطیر اسانس با وجود اهمیت آن نه تنها برای درک اساسی بلکه برای بهره‌برداری، بهینه‌سازی، کنترل و طراحی فرآیندهای تقطیر صنعتی به میزان بسیار کمتری مورد مطالعه قرار گرفته است.

مدل‌سازی سینتیکی عملکرد اسانس و ترکیبات اسانس برای فرآیندهای تقطیر از نظر فنی و اقتصادی حائز اهمیت است [۱۲]. در مورد توسعه مدل‌های ریاضی برای توصیف رفتار پویا در حین استخراج اسانس، چندین مدل تجربی و نظری پیشنهاد شده است. این مدل‌ها صرف‌نظر از مواد گیاهی یا قطبیت حلال، دو فرآیند هم‌زمان را طی فرآیند استخراج پیش می‌گیرند: الف) شستن<sup>۶</sup> اسانس از سطوح خارجی ذرات گیاه و ب) انتشار<sup>۷</sup> اسانس از داخل ذرات گیاه به سمت سطوح خارجی آن‌ها [۱۳]. رادیوویجیک و همکارانش در سال ۲۰۲۰ سینتیک استخراج اسانس گرده گیاه مریم‌گلی<sup>۸</sup> با استفاده از روش‌های تقطیر آبی و تقطیر به کمک مایکروویو را مدل‌سازی نمودند. نتایج پژوهش آنها نشان از موفقیت مدل‌های سینتیک ریاضی در توصیف و مدل‌سازی سینتیک فرآیند تقطیر داشت و مشخص گردید که مدل‌های مبتنی بر شستشو و انتشار هم‌زمان بهترین مطابقت را با داده‌های تجربی دارند [۱۴]. موفقیت مدل‌های ریاضی در مدل‌سازی سینتیکی استخراج روغن از چوب صندل<sup>۹</sup> به روش تقطیر با کمک مایکروویو توسط هری کوسوما و ماهفود [۱۳] و مدل‌سازی سینتیک تقطیر اسانس از توت سرکوهی (میوه ارس)<sup>۱۰</sup> با روش تقطیر آبی توسط میلوچهویچ سووتومیر و همکاران [۱۵] نیز گزارش گردیده است. اگرچه مدل‌های ریاضی دارا مزایای فراوان در شناسایی و پیش‌بینی رفتار شاخص‌ها در شرایط

6. Washing  
7. Diffusion  
8. Sage herbal dust  
9. Sandalwood  
10. Juniper berries

1. *Achillea*  
2. *Asteraceae*  
3. Hydrodistillation  
4. Ohmic-assisted hydrodistillation  
5. Green technology

پایگاه دانش، واحد تصمیم‌سازی و در نهایت غیرفازی سازی است؛ که کاربردهای متعددی در قسمت‌های مختلف تحقیقات غذایی [۲۸-۳۸] داشته است؛ ولی تاکنون در فرایند استخراج اسانس مورد بررسی قرار نگرفته است. هدف از انجام این مطالعه پیش‌بینی سینتیک استخراج اسانس بومادران با روش تقطیر مقاومتی با استفاده از مدل‌سازی با روش‌های ریاضی، شبکه عصبی مصنوعی و منطق فازی و مقایسه رفتار استخراج روش‌های تقطیر مقاومتی و تقطیر آبی می‌باشد.

## ۲- مواد و روش‌ها

### ۲-۱- مواد گیاهی و شیمیایی

گیاه بومادران خشک پس از تایید متخصص گیاهان دارویی از بازار محلی استان قزوین تهیه گردید و تا زمان انجام آزمایشات در جای خشک، خنک و به دور از نور نگهداری شد. سولفات سدیم بدون آب از شرکت مرک خریداری شد.

### ۲-۲- استخراج اسانس با روش تقطیر مقاومتی

در این پژوهش از سیستم تقطیر مقاومتی مجهز به بالن شیشه‌ای از جنس پیرکس (محفظه تیمار یا سلول تقطیر مقاومتی) با حجم ۲۰۰۰ میلی‌لیتر و قطر داخلی حدود ۱۴ سانتی‌متر دارای دو ورودی برای الکترودهای دستگاه، دو ورودی برای کنترل‌کننده دمایی و یک خروجی برای اتصال کلانوجر استفاده گردید. سطح مقطع الکترودها و فاصله بین آنها به ترتیب برابر ۴/۹۴ سانتی‌متر مربع و ۱۰ سانتی‌متر می‌باشد. به منظور انجام فرایند استخراج ۸۰ گرم از اندام هوایی گیاه بومادران خشک (*Achillea millefolium* L.) آسیاب گردید و از الک استاندارد با مش ۱۸ عبور داده شد. در ادامه با ۱۶۰۰ میلی‌لیتر آب نمک با غلظت ۰/۷ درصد (وزنی/حجمی) مخلوط و به مدت یک ساعت کاملاً خیسانده شد [۹]. نمونه‌های خیس خورده به بالن دستگاه تقطیر مقاومتی منتقل گردید و با قرار دادن الکترودها، انداختن چند سنگ جوش در محفظه تیمار و نصب کلانوجر<sup>۱۱</sup>، دستگاه آماده فرایند گردید. ولتاژ دستگاه تنظیم شد و پس از روشن نمودن دستگاه، فرایند استخراج بسته به زمان مورد نیاز انجام پذیرفت. اسانس استخراج شده پس از حذف رطوبت

مختلف دارند ولی عمدتاً در پیش‌بینی رفتارهای پیچیده دقت بالایی ندارند؛ مدل‌سازی پویا شامل شبکه عصبی مصنوعی و منطق فازی به سبب توانایی یادگیری در فرایندهای پیچیده و نیز پیش‌بینی روابط غیرخطی اخیراً بسیار مورد توجه قرار گرفته است.

شبکه عصبی مصنوعی به سبب خصوصیات قابل توجه و معتبر در مدل‌سازی روابط پیچیده بین متغیرها اخیراً به‌طور گسترده مورد توجه قرار گرفته است [۱۶-۲۳]. شبکه عصبی مصنوعی از گره‌های ریاضی متصل یا نورون‌ها<sup>۱۱</sup> به‌منظور ایجاد شبکه‌ای که قادر به مدل‌سازی روابط پیچیده عملیاتی است، استفاده می‌نماید [۱۷]. این شبکه برای درک رفتار سیستم عصبی بیولوژی انسان ابداع گردید و دقت، سرعت و قدرت بالای شبکه عصبی مصنوعی در شبیه‌سازی فرایندهایی کمتر شناخته شده، سبب گسترش بیشتر آن شده است و به‌عنوان ابزارهای ریاضی جایگزین در حل مشکلات مختلف در حوزه شناسایی سیستم، پیش‌بینی، شناسایی الگوها، طبقه‌بندی، کنترل فرایند و غیره توسعه یافت و مورد استفاده قرار گرفته است [۲۲، ۲۴]. تنها پژوهش انجام شده در زمینه استفاده از شبکه عصبی مصنوعی برای پیش‌بینی سینتیک استخراج اسانس با روش تقطیر مقاومتی مربوط به مطالعه زندی و همکاران در استخراج اسانس از گیاه بیدمشک<sup>۱۲</sup> (*Salix aegyptiaca* L.) بود که شبکه‌ای با یک لایه ورودی، یک لایه خروجی و دو لایه پنهان توانست عملکرد استخراج را با دقت بالایی پیش‌بینی نماید. استفاده از منطق فازی به‌عنوان روش جدید و کارآمدی است که به‌تازگی در مدل‌سازی فرایندهای پیچیده به‌خصوص فرایندهای غیرخطی استفاده می‌شود [۲۵]. تئوری منطق فازی به‌طور موثر برای حل مشکلات عدم قطعیت استفاده می‌شود و از آنجائی‌که نیاز به ورودی دقیق و بدون مشکل ندارد، ذاتاً قوی می‌باشد [۲۶، ۲۷]. یک سیستم فازی با قوانین اگر-آنگاه (If-Then) با معرفی توابع عضویت برای ورودی‌ها و خروجی‌ها تعریف می‌گردد. از نظر منطق فازی، حالت‌های سیستم مجموعه‌های فازی در نظر گرفته می‌شود که هر کدام با کلماتی مانند کم، متوسط، زیاد و غیره نشانه‌گذاری می‌شوند. یک سیستم استنتاج فازی اساساً شامل فازی‌سازی،

11. Neurons  
12. Pussy willow

13. Clevenger

مدل‌سازی گردد. برای این منظور مقدار روغن استخراج شده بر اساس میلی‌متر گزارش گردید.

## ۲-۶- مدل‌سازی سینتیک استخراج

### ۲-۶-۱- مدل‌سازی ریاضی

از مدل‌های ریاضی به‌منظور توصیف سینتیک استخراج اسانس استفاده می‌شود [۴۰]. معمولاً اکثر مدل‌های ریاضی براساس فرضیاتی نظیر غیرقابل اختلاط بودن اسانس با آب، برابر بودن ذرات گیاه از نظر اندازه، شکل و محتوای اسانس، ثابت بودن ضریب انتشار موثر اسانس استخراجی و رخ دادن جداسازی اسانس از طریق دو سازوکار همزمان "شستشو" اسانس از سطوح خارجی ذرات گیاه و انتشار اسانس از داخل ذرات گیاه به سمت سطوح خارجی استوار هستند [۷، ۴۱]. چهار مدل برای مدل‌سازی ریاضی استفاده گردید؛ مدل درجه اول به‌صورت رابطه ۲ می‌باشد [۴۲]:

$$\frac{q(t)}{q_{\infty}} = 1 - e^{-k_1 t} \quad (\text{رابطه ۲})$$

که در آن  $q(t)$  برابر عملکرد تولید اسانس (درصد) در زمان استخراج  $t$ ،  $q_{\infty}$  برابر عملکرد استخراج در زمان بی‌نهایت (درصد)، حداکثر عملکرد استخراج) و  $k_1$  برابر ثابت نرخ استخراج درجه اول است و این مدل تحت عنوان مدل درجه اول می‌باشد که بر اساس این اصل است که کل اسانس در داخل ذرات گیاهی است و به‌آرامی و به‌طور متناوباً گیاه خارج می‌گردد [۴۲]. از مدل سینتیکی درجه دوم هم می‌توان برای توصیف فرایند استخراج استفاده نمود:

$$\frac{dq_t}{dt} = k_2 - (q_{\infty} - q)^2 \quad (\text{رابطه ۳})$$

که  $k_2$  برابر ثابت نرخ استخراج درجه دوم است. مدل جذب، مدل تجربی دیگری است که بیشتر در فرایندهای استخراجی که خروج اسانس بیشتر از طریق شکسته شدن دیواره‌های سلولی رخ می‌دهد، نتایج رضایت‌بخش و دقیقی را فراهم می‌آورد [۴۳]:

$$q(t) = q_{\infty} \left[ \frac{t}{b + t} \right] \quad (\text{رابطه ۴})$$

اضافی با سولفات سدیم بدون آب، درون ویال شیشه‌ای تیره ریخته شد و تا زمان انجام آزمون‌ها در فریزر در دمای ۱۸- درجه سلسیوس نگهداری گردید [۳۹].

## ۲-۳- استخراج اسانس با روش تقطیر آبی

فرایند استخراج به روش تقطیر آبی با استفاده از یک دستگاه تقطیر آبی شامل بالن شیشه‌ای از جنس پیرکس با حجم ۲۰۰۰ میلی‌لیتر و قطر داخلی حدود ۱۴ سانتی‌متر، کلانوجر و شوف بالن انجام پذیرفت (شکل ۳-۲). برای این منظور اندام هوایی گیاه بومادران خشک شده، آسیاب گردید و از الک استاندارد با مش ۱۸ عبور داده شد. ۸۰ گرم از نمونه الک‌شده با ۱۶۰۰ میلی‌لیتر آب نمک با غلظت ۰/۷ درصد (وزنی/حجمی) مخلوط گردید و سپس به مدت یک ساعت در بالن خیس‌انده شد. در ادامه جهت کاهش تولید کف چند عدد سنگ جوش به بالن اضافه شد و با قرار دادن بالن در روی شوف بالن و نصب کلانوجر، فرایند استخراج به مدت ۱۸۰ دقیقه انجام پذیرفت. اسانس استخراج شده پس از حذف رطوبت اضافی با سولفات سدیم بدون آب، درون ویال شیشه‌ای تیره ریخته شد و تا زمان انجام آزمون‌ها در فریزر در دمای ۱۸- درجه سلسیوس نگهداری گردید [۳۹]. مقایسه روش تقطیر مقاومتی (شرایط بهینه) با روش استاندارد تقطیر آبی از طریق مقایسه سینتیک استخراج اسانس‌های حاصل از این روش‌ها و متغیرهای مدل حاصل از آنها انجام پذیرفت. در مطالعه پیشین (منبع) شرایط بهینه استخراج شامل گرادیان ولتاژ برابر ۱۲/۹۷ ولت بر سانتی‌متر، زمان استخراج برابر ۸۶/۵ دقیقه و غلظت نمک برابر ۰/۷ درصد (وزنی/حجمی) بدست آمد.

## ۲-۴- عملکرد استخراج و مصرف انرژی

برای اندازه‌گیری عملکرد استخراج استخراج شده از توزین مقدار عملکرد استخراج (درصد،  $Y$ ) با کمک وزن اسانس استخراجی (گرم،  $m_{EO}$ ) و وزن گیاه خشک (گرم،  $m_{dp}$ ) با استفاده از رابطه ۱ بدست آمد [۳۹]:

$$Y(\%) = \frac{m_{EO}}{m_{dp}} \times 100 \quad (\text{رابطه ۱})$$

## ۲-۵- سینتیک استخراج

محتوای اسانس در فواصل زمانی مشخص اندازه‌گیری گردید تا سینتیک استخراج با توجه به عملکرد تولید اسانس در زمان

توابع انتقال خطی (purelin) و سیگموئید لگاریتمی (logsig) برای نورون لایه خروجی انتخاب شدند. لایه ورودی دارای سه نورون شامل گرادیان ولتاژ (۵، ۱۰ و ۱۵ ولت بر سانتی‌متر)، زمان استخراج (۳۰، ۷۵ و ۱۲۰ دقیقه) و غلظت نمک (۰/۵، ۱ و ۱/۵ درصد) و لایه خروجی نیز دارای یک لایه خروجی با یک نورون (عملکرد استخراج) بود. از ۸۱ داده مورد استفاده ۶۵ داده برای آموزش شبکه (۸۰ درصد) و ۱۶ داده برای آزمایش شبکه (۲۰ درصد) (۱۲ داده برای آزمون (۱۵ درصد) و ۴ داده برای اعتبارسنجی (۵ درصد)) استفاده گردید. برای توسعه یک مدل آماری، شبکه‌ها حداقل چهار بار آموزش دیدند و بهترین مقادیر برای هر متغیر ثبت شد. مقیاس‌بندی داده‌ها نیز در محدوده عددی مشترک ۱ و ۱- انجام پذیرفت. جعبه ابزار شبکه عصبی نرم‌افزار متلب (R2019a، آمریکا) برای طراحی و آزمایش شبکه عصبی مصنوعی استفاده شد.

### ۲-۶-۳- منطق فازی

مدل‌سازی داده‌های تجربی استخراج اسانس با کمک ابزار منطق فازی نرم‌افزار متلب (R2019a، آمریکا) و روش ممدانی تحت قوانین فازی اگر-آنگاه برای متغیرهای ورودی و خروجی انجام شد. فرایند استخراج اسانس از بومادران در سه گرادیان ولتاژ (۵، ۱۰ و ۱۵ ولت بر سانتی‌متر)، سه زمان استخراج (۳۰، ۷۵ و ۱۲۰ دقیقه) و سه غلظت نمک (۰/۵، ۱ و ۱/۵ درصد) انجام گردید و این متغیرها به عنوان متغیرهای ورودی انتخاب شدند؛ همچنین عملکرد استخراج اسانس به‌عنوان خروجی مورد نظر انتخاب شد. در مدل‌سازی منطق فازی سه فرایند فازی سازی (تبدیل داده‌های عملکرد استخراج ورودی به ورودی فازی)، تغییر داده‌های ورودی فازی با استفاده از روش پیاده‌سازی ممدانی به داده‌های خروجی فازی، تبدیل داده‌های فازی خروجی به مقادیر واقعی عملکرد استخراج خروجی با استفاده از توابع غیرفازی‌سازی صورت پذیرفت. تابع عضویت نوع مثلثی برای تنظیم متغیرهای ورودی و خروجی استفاده گردید. برای نوشتن قوانین فازی، متغیرهای زبانی متفاوتی برای متغیرهای ورودی و خروجی تعریف شد. عملکرد استخراج اسانس در فواصل معین با در نظر گرفتن گرادیان ولتاژ در سه سطح با اصطلاحات فازی "کم" برای گرادیان ولتاژ برابر ۵ ولت بر سانتی‌متر، "متوسط" برای گرادیان ولتاژ برابر ۱۰ ولت بر سانتی‌متر و "زیاد" برای گرادیان ولتاژ برابر

که در آن  $b$  برابر ثابت است که به متغیرهای فرایند وابسته است. برخی اوقات مدل‌های فوق کارایی لازم جهت توصیف کامل فرایند استخراج و تقطیر اسانس را ندارند و تغییر سیگموئیدی در عملکرد استخراج اسانس طی فرایند تقطیر رخ می‌دهد [۴۴]. در این حالت از مدل سیگموئیدی استفاده می‌گردد:

$$q(t) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{t - t_0}{T_1}\right)} \quad (\text{رابطه ۵})$$

که  $t_0$  زمانی که میزان عملکرد استخراج به نیمه رسیده است و  $T_1$  برابر شیب قسمت تیز منحنی است و مربوط به ثابت زمان انتشار است [۴۵].

### ۲-۶-۲- شبکه عصبی مصنوعی

برای فرایند مدل‌سازی شبکه عصبی مصنوعی داده‌های تجربی به‌طور تصادفی به دو بخش تقسیم می‌گردد؛ یک بخش برای آموزش شبکه و بخش دیگر برای آزمایش شبکه استفاده می‌شود. داده‌های آزمایش در دو بخش آزمون و اعتبارسنجی شبکه تقسیم می‌گردد. یک شبکه پرسپترون چند لایه‌ای<sup>۱۴</sup> با تعداد مختلف نورون (بین ۴ تا ۳۰) در یک یا دو لایه پنهان برای پیش‌بینی عملکرد استخراج اسانس با استفاده از داده‌های تجربی آموزش داده شد و در نهایت مورد آزمایش قرار گرفت. شبکه پرسپترون چند لایه‌ای با ساختاری ساده و در عین حال دقیق، مدلی ایجاد می‌نماید که روابط لایه‌های ورودی/خروجی را با استفاده از داده‌های تجربی به‌طور دقیق ترسیم کند تا بتواند در صورت عدم مشاهده خروجی مطلوب، از مدل استفاده کند. این شبکه بیشتر برای طبقه‌بندی الگوها، تشخیص، پیش‌بینی و تقریب روابط غیرخطی استفاده می‌شود [۱۷]. در پژوهش حاضر شبکه عصبی مصنوعی با الگوریتم پس‌انتشار پیش‌خور<sup>۱۵</sup> برای رسیدن بهترین پیش‌بینی عملکرد استخراج در تمام پیکربندی‌های شبکه عصبی مصنوعی استفاده گردید. آموزش شبکه با استفاده از الگوریتم‌های لونیگ-مارکوآرت<sup>۱۶</sup> و منظم‌سازی بیزی<sup>۱۷</sup> و چرخه آموزش ۱۰۰۰ دوره انجام پذیرفت. پس از انجام آزمایش و خطا، تابع انتقال سیگموئید مماس هذلولی (tansig) برای نورون‌های لایه پنهان و

14. Multi-layer perceptron

15. Feed Forward Back Propagation (FFBP)

16. Levenberg-Marquardt

17. Bayesian regulation

جمع‌آوری شده به ازای جرم مواد گیاهی خشک در بازه‌های زمانی مختلف اندازه‌گیری شد. نتایج حاصل از سیتیک رهایش در شرایط مختلف با چهار مدل درجه اول، درجه دوم، سیگموئیدی و جذب برازش گردید. برای ارزیابی متغیرهای این چهار مدل از تحلیل رگرسیون غیرخطی استفاده شد. مقادیر معیارهای آماری مورد استفاده برای ارزیابی درستی برازش (ریشه میانگین مربعات خطا (RMSE) و ضریب تبیین ( $R^2$ )) در جدول ۱ ارائه شده است.

**Table 1** The statistical comparison for prediction of yarrow essential oil extraction using ohmic-assisted hydro distillation.

Statistic criteria		Model
$R^2$	RMSE	
0.988	0.00014	First-order model
0.727	0.00549	Second-order model
0.911	0.00137	Adsorption
0.985	0.00016	Sigmoid

بر اساس معیار ضریب تبیین بالاتر از ۰/۹ و ریشه میانگین مربعات خطا کمتر از ۰/۱ به غیر از مدل درجه دوم، سایر مدل‌ها توانستند توصیف خوبی از سیتیک استخراج ارائه دهد؛ این نتایج نشان از موفقیت مدل ریاضی در پیش‌بینی داده‌های استخراج دارد. در بین این مدل‌ها بهترین عملکرد مربوط به مدل درجه یک با بیشترین ضریب تبیین و کمترین ریشه میانگین مربعات خطا بود که توانست رفتار داده‌های عملکرد استخراج را برای کل داده‌های استخراج با ضریب تبیین و ریشه میانگین مربعات خطا به ترتیب برابر ۰/۹۸۸ و ۰/۰۰۰۱۴ پیش‌بینی نماید. مدل سیگموئیدی نیز به مانند مدل درجه اول توانست رفتار داده‌های تجربی عملکرد استخراج را به خوبی پیش‌بینی نماید؛ به طوری که ضریب تبیین و ریشه میانگین مربعات خطا این مدل برای کل داده‌های استخراج به ترتیب برابر ۰/۹۸۵ و ۰/۰۰۰۱۶ بود. مقایسه ضریب همبستگی بین مقادیر پاسخ تجربی و پاسخ پیش‌بینی شده توسط مدل‌سازی ریاضی برای خروجی عملکرد استخراج در شکل ۱ ارائه شده است. همان‌طور که در این شکل مشاهده می‌گردد، همبستگی بالای این داده‌ها نشان دهنده دقت بالای مدل ریاضی انتخاب شده می‌باشد.

۱۵ ولت بر سانتی‌متر، زمان استخراج در سه سطح با اصطلاحات فازی "کم" برای زمان استخراج برابر ۳۰ دقیقه، "متوسط" برای زمان استخراج برابر ۷۵ دقیقه و "زیاد" برای زمان استخراج برابر ۱۲۰ دقیقه و غلظت نمک در سه سطح با اصطلاحات فازی "کم" برای غلظت نمک برابر ۰/۵ درصد، "متوسط" برای غلظت نمک برابر ۱ درصد و "زیاد" برای غلظت نمک برابر ۱/۵ درصد پیش‌بینی گردید. سیستم منطق فازی مورد استفاده در پژوهش حاضر دارای ۲۷ قانون بر اساس توابع عضویت در نظر گرفته شده برای ورودی‌ها می‌باشد. در نهایت با تعریف توابع عضویت و قواعد اگر-آنگاه فازی برای خروجی و استفاده از غیرفازی سازی، خروجی به عدد تبدیل شد. به طور مثال اگر گرادیان ولتاژ زیاد، زمان استخراج زیاد و غلظت نمک زیاد باشد، آنگاه عملکرد استخراج خیلی خیلی زیاد است.

## ۲-۷- تجزیه و تحلیل آماری

ارزیابی و مقایسه مدل با کمک ضریب تبیین ( $R^2$ ) و ریشه میانگین مربعات خطا (RMSE) انجام شد [۶-۴۹]:

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (O - P)^2}{\sum_{i=1}^n (O - \bar{P})^2} \quad (\text{رابطه ۶})$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{(O - P)^2}{n - p}} \quad (\text{رابطه ۷})$$

که  $O$ ،  $P$  و  $n$  به ترتیب داده تجربی، داده پیش‌بینی شده، تعداد مشاهده و تعداد متغیرهای مدل است. رسم نمودارها و محاسبه نوار خطا<sup>۱۹</sup> به ترتیب با کمک نرم‌افزارهای اکسل (نسخه ۲۰۱۶) و متلب (Matlab R2019a) صورت پذیرفت.

## ۳- نتایج و بحث

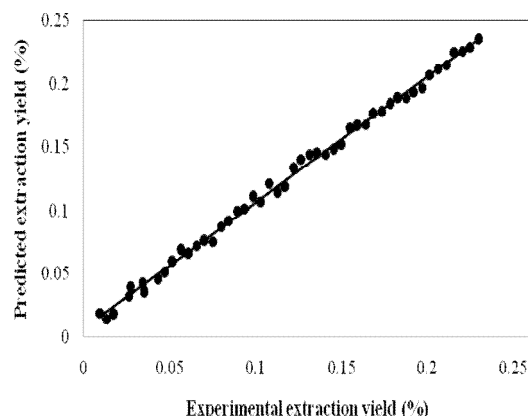
### ۳-۱- مدل‌سازی ریاضی

برای مدل‌سازی سیتیک استخراج اسانس از عملکرد استخراج در واحد زمان استفاده گردید، که به این منظور مقدار اسانس

18. Root Mean Square Error

19. Error bar

روش تقطیر آبی توسط چهار مدل ریاضی برازش گردید و مقادیر متغیرهای مدل‌ها و معیارهای آماری مورد استفاده برای ارزیابی درستی برازش در جدول ۲ ارائه شده است. همان‌طور که پیشتر مشخص گردید، بهترین عملکرد مربوط به مدل درجه اول بود که توانست رفتار داده‌های عملکرد استخراج را برای استخراج به روش‌های تقطیر مقاومتی و آبی به ترتیب با ضریب تبیین برابر ۰/۹۸۹ و ۰/۹۹۴ پیش‌بینی نماید. در مدل‌سازی با مدل درجه اول میزان ریشه میانگین مربعات خطا کمتر از ۰/۰۰۰۱۲ بود. مقادیر بالاتر ثابت مدل درجه اول در روش تقطیر مقاومتی (۰/۰۳۴۶) نسبت به روش تقطیر آبی (۰/۰۲۳۲) نشان از سرعت بالاتر فرایند استخراج با روش تقطیر مقاومتی دارد [۱۵].



**Fig 1** Predicted data versus experimental data for the extraction efficiency.

برای مقایسه روش تقطیر مقاومتی با روش استاندارد تقطیر آبی، سینتیک استخراج اسانس با شرایط بهینه تقطیر مقاومتی و نیز

**Table 2** The statistical comparison for prediction of yarrow essential oil extraction using ohmic-assisted hydrodistillation (OH) and hydrodistillation (HD).

Distillation method		Statistic criteria and model parameters	Distillation method		Statistic criteria and model parameters
HD	OH		HD	OH	
<b>Second-order model</b>			<b>First-order model</b>		
0.9071	0.9380	$K_2$	0.0323	0.0232	(%/min) $t_{1/2}$
0.23	0.4	$q_{\infty}$	0.23	0.4	(%) $q_{\infty}$
0.748	0.872	$R^2$	0.994	0.997	$R^2$
0.00252	0.00072	RMSE	0.00010	0.00002	RMSE
<b>Sigmoid model</b>			<b>Adsorption model</b>		
0.1952	0.2218	$K_{TH}$	15.16	19.04	<b>B</b>
10.57	8.41	<b>C</b>	0.23	0.4	$q_{\infty}$
0.23	0.4	$q_{\infty}$	0.945	0.958	$R^2$
0.986	0.962	$R^2$	0.00066	0.00024	RMSE
0.00016	0.00026	RMSE			

استخراج اسانس از الگوی نمایی تبعیت نکند، برای توصیف آن استفاده می‌شود. در شکل ۲ به خوبی می‌توان داده‌های تجربی با مقادیر شبیه‌سازی شده را مشاهده و بهترین مدل را تشخیص داد. در این شکل سینتیک استخراج اسانس از بومادران با روش‌های تقطیر آبی و تقطیر مقاومتی که با مدل‌های سینتیکی مختلف برازش گردیده است، نشان داده شده است. همان‌طور که در این شکل مشاهده می‌گردد، مدل درجه اول و سیگموئیدی بسیار نزدیک به داده‌های تجربی است.

مدل سیگموئیدی نیز به مانند مدل درجه اول توانست رفتار داده‌های تجربی عملکرد استخراج را به خوبی پیش‌بینی نماید؛ به طوری که ضریب تبیین این مدل برای روش‌های تقطیر مقاومتی و آبی به ترتیب برابر ۰/۹۸۷ و ۰/۹۶۲ بود و ریشه میانگین مربعات خطا آن کمتر از ۰/۰۰۰۲۶ گردید. همان‌طور که متغیرهای مدل سینتیکی سیگموئیدی نشان می‌دهد، ثابت زمانی انتشار ( $T_1$ ) برای روش تقطیر آبی (۳/۹۴۸) بیشتر از روش تقطیر مقاومتی (۲/۷۵۴) است که نشان از سرعت بالای استخراج با روش تقطیر مقاومتی می‌باشد [۱۵]. از مدل سیگموئیدی زمانی که سینتیک

پیش‌بینی عملکرد استخراج برآورد گردید. عملکرد پیکربندی‌های مختلف شبکه عصبی مصنوعی با تعداد متغیرهای ورودی تعیین‌شده مورد بررسی قرار داده شد و بهترین پیکربندی‌ها در جدول ۳ نشان داده شده است. همان‌طور که در جدول مشاهده می‌گردد، اکثر پیکربندی‌ها با هر دو الگوریتم پس انتشار لونیگ-مارکوآرت و منظم‌سازی بیزی توانستند عملکرد استخراج را با دقت بالایی پیش‌بینی نماید. مقادیر بالای ضریب تبیین و ریشه میانگین مربعات خطا کم نشان‌دهنده تعمیم و پیش‌بینی خوب شبکه عصبی است. در بین پیکربندی‌های مختلف شبکه عصبی مصنوعی با پیکربندی ۱-۱۱-۱۱-۳ و تابع آموزش لونیگ-مارکوآرت بهترین عملکرد (کمترین خطا و بالاترین ضریب تبیین) را داشت که توانست رفتار داده‌های عملکرد استخراج را برای کل داده‌های استخراج با ضریب تبیین و ریشه میانگین مربعات خطا به ترتیب برابر ۰/۹۹۹ و ۰/۰۰۰۰۴ پیش‌بینی نماید. این پیکربندی دارای ۴ نورون در لایه ورودی، دو لایه پنهان با ۱۱ نورون در هر لایه و یک نورون در لایه خروجی است.

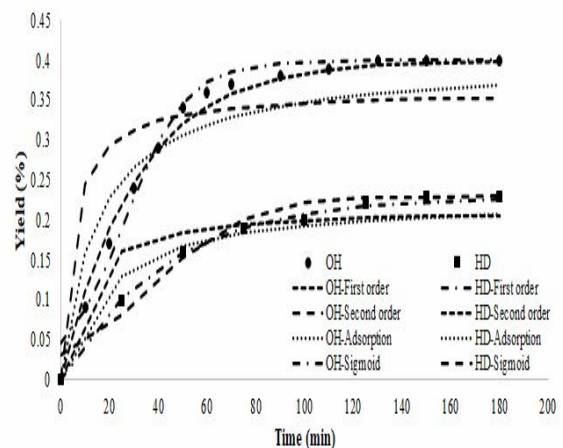


Fig 2 Predicted data for the extraction efficiency versus experimental data.

### ۲-۳- شبکه عصبی مصنوعی

در پژوهش حاضر ترکیبی از یک یا دو لایه پنهان با عملکردهای مختلف با تعداد نورون بین ۴ تا ۳۰ برای مدل‌سازی توسط شبکه عصبی پرسپترون استفاده شد و توانایی این روش مدل‌سازی برای

Table 3 Performance evaluation of the ANN topologies with three input parameter.

R <sup>2</sup>	RMSE	Network topology	Training algorithm	Network
0.974	0.00032	3-8-1	Levenberg-Marquardt (LM)	Feed Forward Back Propagation (FFBP)
0.965	0.00081	3-12-1		
0.970	0.00039	3-16-1		
0.998	0.00008	3-10-8-1		
<b>0.999</b>	<b>0.00004</b>	<b>3-11-11-1</b>		
0.988	0.00011	3-22-19-1		
0.976	0.00028	3-24-22-1	Bayesian regulation (BR)	Feed Forward Back Propagation (FFBP)
0.962	0.00089	3-10-1		
0.977	0.00025	3-12-1		
0.968	0.00076	3-14-1		
0.991	0.00010	3-19-1		
0.987	0.00013	3-11-9-1		
0.998	0.00009	3-13-11-1		
0.999	0.00005	3-14-12-1		
0.986	0.00016	3-19-16-1	Bayesian regulation (BR)	Feed Forward Back Propagation (FFBP)
0.982	0.00021	3-20-18-1		
0.979	0.00036	3-22-17-1		

ارتباطی با افزایش دقت ندارد؛ چنین ویژگی شبکه‌های عصبی مصنوعی نیز پیش‌تر توسط سایر محققان گزارش شده است [۱۷، ۵۰].

از آنجایی‌که سینتیک استخراج اسانس به صورت غیرخطی است و شبکه عصبی برای مدل‌سازی رفتارهای غیرخطی موفق‌تر می‌باشد [۱۷] نتایج پیش‌بینی بسیار دقیق است. با توجه به پیکربندی‌های مختلف، نتایج نشان داد که افزایش نورون و یا حتی لایه پنهان

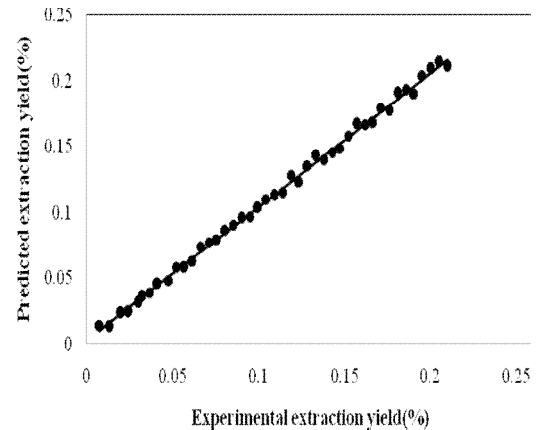


توانست رفتار داده‌های عملکرد استخراج را برای استخراج به روش‌های تقطیر مقاومتی (بهینه) و تقطیر آبی به ترتیب با ضریب تبیین برابر ۰/۹۹۹ و ۰/۹۹۸ پیش‌بینی نماید. در مدل‌سازی با شبکه عصبی مصنوعی میزان ریشه میانگین مربعات خطا کمتر از ۰/۰۰۰۰۸ بود.

### ۳-۳- منطق فازی

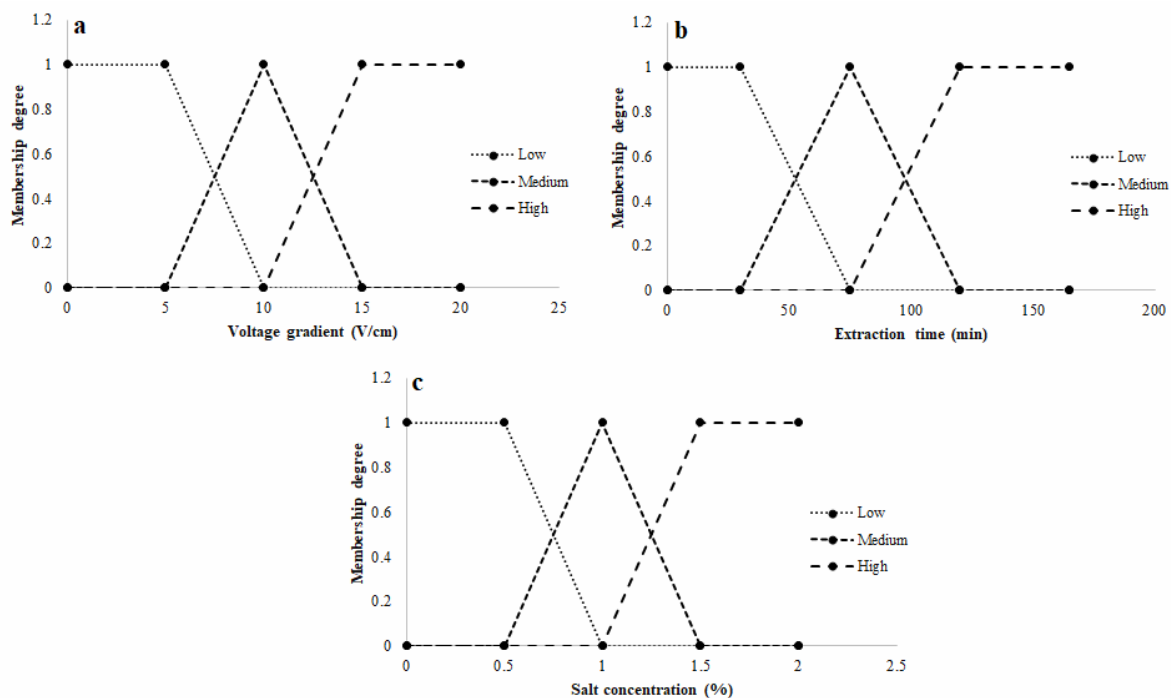
به منظور شبیه‌سازی و مدل‌سازی فرآیند استخراج اسانس از بومادران، تابع عضویت مثلثی برای گرادیان ولتاژ، زمان استخراج و تغییر عملکرد استخراج در فواصل زمانی مشخص با استفاده از ابزار منطق فازی در متلب طراحی شد. به طور مشابه قواعد فازی متغیرهای ورودی و خروجی تعریف شد. شکل ۴ نمونه‌ای از توابع عضویت ورودی و شکل ۵ هم توابع عضویت خروجی را نشان می‌دهد. به طور کلی، ۸۱ قاعده "اگر-آنگاه" و توابع "و" برای استخراج اسانس به دست آمد.

داده‌های عملکرد استخراج پیش‌بینی شده نسبت به داده‌های عملکرد استخراج تجربی در شکل ۳ نشان داده شده است.



**Fig 3** Dispersion curve for the measured and the predicted values of extraction yield (%).

همان‌طور که نتایج مشخص می‌نماید، این داده‌ها همبستگی بالایی دارند. شبکه عصبی مصنوعی با پیکربندی منتخب (۱-۱۱-۳)



**Fig 4** Membership functions for (a) Voltage gradient, (b) Extraction time and (c) Salt concentration.

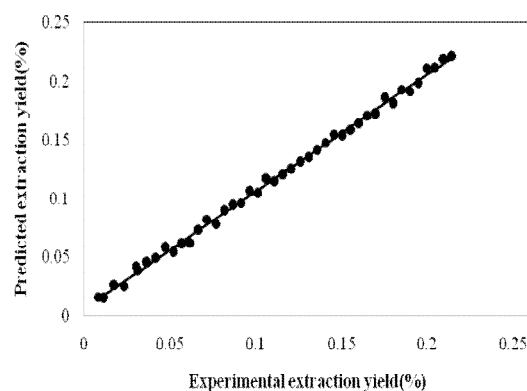


Fig 6 Dispersion curve for the measured and the predicted values of extraction yield (%).

### ۳-۴- مدل‌سازی شبکه عصبی مصنوعی

مدل‌های مختلف شامل مدل ریاضی، شبکه عصبی مصنوعی، منطق فازی برای پیش‌بینی سینتیک استخراج اسانس بومادران با روش تقطیر مقاومتی مورد استفاده قرار گرفتند. برای کنترل و متعاقباً بررسی ظرفیت عملکرد مدل‌های مورد استفاده، شاخص‌های ضریب تبیین و ریشه میانگین مربعات خطا محاسبه شد. شبکه عصبی مصنوعی با اعمال الگوریتم‌های آموزشی توسعه داده می‌شود و با توجه به اینکه داده‌ها تمام مراحل آموزش، آزمون و اعتبارسنجی را می‌گذرانند، ضریب همبستگی بین داده‌های تجربی و پیش‌بینی افزایش می‌یابد و میزان خطا در مقایسه با سایر روش‌های مدل‌سازی کاهش پیدا می‌کند؛ از این رو همانطور که در جدول ۴ نیز مشاهده می‌شود، روش شبکه عصبی مصنوعی بالاترین دقت را در بین سایر روش‌ها در پیش‌بینی سینتیک استخراج نشان داد.

Table 4 Comparing the different method used for predicting the extraction yield.

Statistic criteria		Model
R <sup>2</sup>	RMSE	
0.988	0.00014	Mathematical model (First-order model)
0.999	0.00004	Artificial neural network
0.997	0.00010	Fuzzy logic

منطق فازی با اختلاف اندک و پس از شبکه عصبی مصنوعی می‌تواند ظرفیت عملکرد بالاتری در پیش‌بینی سینتیک استخراج در مقایسه با مدل ریاضی ارائه دهد.

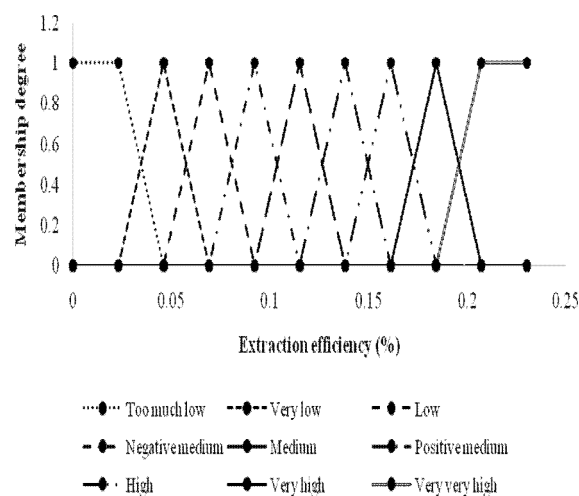


Fig 5 Output membership function of the yarrow essential oil extraction efficiency.

پس از اتمام مدل‌سازی، عملکرد مدل فازی با استفاده از معیارهای ضریب تبیین و ریشه میانگین مربعات خطا مورد ارزیابی قرار گرفت. با توجه به نتایج مدل‌سازی، مشخص گردید که مدل فازی قادر به پیش‌بینی عملکرد استخراج اسانس با ضریب تبیین و ریشه میانگین مربعات خطا به ترتیب برابر ۰/۹۹۷ و ۰/۰۰۰۱ بود. به منظور ارزیابی دقت درونیابی و تایید مدل فازی به دست آمده، داده‌های عملکرد استخراج از نمودارهای تداخل فازی استخراج گردید و با نمونه‌های تجربی مقایسه شد (شکل ۶). همبستگی زیاد این داده‌ها سطح بالایی از دقت را برای مدل فازی انتخاب شده نشان می‌دهد. مدل فازی توانست رفتار داده‌های عملکرد استخراج را برای استخراج به روش‌های تقطیر مقاومتی (بهینه) و تقطیر آبی به ترتیب با ضریب تبیین برابر ۰/۹۹۶ و ۰/۹۹۶ پیش‌بینی نماید. در مدل‌سازی با منطق فازی میزان ریشه میانگین مربعات خطا کمتر از ۰/۰۰۰۱۲ بود. تا کنون پژوهشی به منظور استفاده از مدل‌سازی فازی برای پیش‌بینی استخراج اسانس خصوصاً با روش تقطیر مقاومتی گزارش نشده است ولی گزارشات زیادی در زمینه استفاده از سیستم فازی ممدانی برای پیش‌بینی خشک کردن محصولات مختلف غذایی توسط محققان مختلف منتشر گردیده است [۳۰، ۳۲، ۳۳، ۵۱، ۵۲]، همچنین استفاده از منطق فازی در طبقه‌بندی لیمو شیرین نیز گزارش شده است [۳۷].

به کمک تقطیر مقاومتی و مدل‌سازی سینتیک رهایش کنترل‌شده آن از فیلم فعال در محیط شبیه‌سازی شده غذایی" می‌باشد. از دانشگاه زنجان که با فراهم آوردن امکانات تحقیق ما را یاری کردند، سپاسگزاری می‌نماییم.

## ۶-منابع

- [1] Ahmadi, D.A., et al., Comparison of Essential Oil of *Achillea millefolium* with Chemical Antioxidants and Preservatives. 2019.
- [2] Ijaz, F., et al., Yarrow, in Medicinal Plants of South Asia. 2020, Elsevier. p. 685-697.
- [3] Salvagnini, L.E., et al., Evaluation of efficacy of preservatives associated with *Achillea millefolium* L. extract against *Bacillus subtilis*. Brazilian Journal of Microbiology, 2006. 37(1): p. 75-77.
- [4] Azmir, J., et al., Techniques for extraction of bioactive compounds from plant materials: A review. Journal of food engineering, 2013. 117(4): p. 426-436.
- [5] Hashemi, S.M.B., et al., Voltage and NaCl concentration on extraction of essential oil from *Vitex pseudonegundo* using ohmic-hydrodistillation. Industrial Crops and Products, 2019. 141: p. 111734.
- [6] Gavahian, M. and A. Farahnaky, Ohmic-assisted hydrodistillation technology: A review. Trends in Food Science & Technology, 2018. 72: p. 153-161.
- [7] Meziane, I.A.A., et al., Modelling and optimization of energy consumption in essential oil extraction processes. Food and Bioproducts Processing, 2020. 119: p. 373-389.
- [8] Zandi, M., et al., Migration of ohmic heating electrode components into a food. Iranian Journal Food Science and Technology Research, 2015. 11(3): p. 273-278.
- [9] Gavahian, M., et al., Comparison of ohmic-assisted hydrodistillation with traditional hydrodistillation for the extraction of essential oils from *Thymus vulgaris* L. Innovative Food Science & Emerging Technologies, 2012. 14: p. 85-91.
- [10] Ramaswamy, H.S., et al., Ohmic heating in food processing. 2014: CRC press.
- [11] Zandi, M. and M. Niakousari, Design, manufacture and performance evaluation of a batch ohmic heating system. 2012.

علی‌رغم این واقعیت که مدل ریاضی، نرخ برازش کمتری نسبت به منطبق فازی فراهم می‌کند؛ با این وجود مدل‌های ریاضی می‌توانند تغییرات عملکرد اسانس را طی فرآیند استخراج به‌عنوان تابعی از زمان با دقت بالا پیش‌بینی کنند.

## ۴-نتیجه‌گیری

در پژوهش حاضر سینتیک استخراج اسانس از گیاه بومادران با روش تقطیر مقاومتی توسط مدل‌های مختلف برازش گردید و مشخص شد که هر دو روش مدل‌سازی ایستا (ریاضی) و روش‌های مدل‌سازی پویا (شبکه عصبی مصنوعی و منطق فازی) قادر به پیش‌بینی سینتیک استخراج اسانس طی فرایند استخراج با دقت بالایی هستند. با توجه به برخی از شاخص‌های عملکرد مدل از جمله ضریب تبیین و ریشه میانگین مربعات خطا، روش‌های مدل‌سازی شبکه عصبی مصنوعی، منطق فازی و ریاضی به ترتیب بهترین روش‌های پیش‌بینی بودند؛ به‌طوری سینتیک استخراج اسانس را با ضریب تبیین و ریشه میانگین مربعات خطا به ترتیب حداقل برابر ۰/۹۸۸ و ۰/۰۰۰۱۴ پیش‌بینی نماید. نتایج برازش سینتیک رهایش با چهار مدل درجه اول، درجه دوم، سیگموئیدی و جذب مشخص نمود که به غیر از مدل درجه دوم، سایر مدل‌ها توانستند توصیف خوبی از سینتیک استخراج فراهم آورد؛ در بین این مدل‌ها بهترین عملکرد مربوط به مدل درجه یک با بیشترین ضریب تبیین و کمترین ریشه میانگین مربعات خطا بود. نتایج مشخص نمود که شبکه عصبی مصنوعی با پیکربندی ۱-۱۱-۱۱-۳ و تابع آموزش لونیگ-مارکوآت بهترین عملکرد در پیش‌بینی عملکرد استخراج برای کل داده‌های استخراج با ضریب تبیین و ریشه میانگین مربعات خطا به ترتیب برابر ۰/۹۹۹ و ۰/۰۰۰۰۴ داشت. منطق فازی نیز دارای دقت بالایی در تعیین سینتیک استخراج اسانس بومادران بود که نشان دهنده همبستگی زیاد بین داده‌های به‌دست آمده از قوانین فازی ممدانی و موارد تجربی طی فرآیند استخراج بود.

## ۵-تقدیر و تشکر

مقاله حاضر حاصل از بخشی از پایان‌نامه کارشناسی ارشد خانم پروانه کرمی با عنوان "بهینه‌سازی و مدل‌سازی استخراج روغن ضروری اندام هوایی بومادران (*Achillea millefolium* L.)

- [22] Khajeh, M., M.G. Moghaddam, and M. Shakeri, Application of artificial neural network in predicting the extraction yield of essential oils of *Diplotaenia cachrydifolia* by supercritical fluid extraction. *The Journal of Supercritical Fluids*, 2012. 69: p. 91-96.
- [23] Kuvendziev, S., et al., Artificial neural network modelling of supercritical fluid CO<sub>2</sub> extraction of polyunsaturated fatty acids from common carp (*Cyprinus carpio* L.) viscera. *The Journal of Supercritical Fluids*, 2014. 92: p. 242-248.
- [24] Mjalli, F.S., S. Al-Asheh, and H. Alfadala, Use of artificial neural network black-box modeling for the prediction of wastewater treatment plants performance. *Journal of Environmental Management*, 2007. 83(3): p. 329-338.
- [25] Zadeh, L.A., Fuzzy sets. *Information and control*, 1965. 8(3): p. 338-353.
- [26] Ligus, M. and P. Peternek, Determination of most suitable low-emission energy technologies development in Poland using integrated fuzzy AHP-TOPSIS method. *Energy Procedia*, 2018. 153: p. 101-106.
- [27] Sakthivel, G., D. Saravanakumar, and T. Muthuramalingam, Application of failure mode and effect analysis in manufacturing industry-an integrated approach with FAHP-fuzzy TOPSIS and FAHP-fuzzy VIKOR. *International Journal of Productivity and Quality Management*, 2018. 24(3): p. 398-423.
- [28] Birlle, S., M. Hussein, and T. Becker, Fuzzy logic control and soft sensing applications in food and beverage processes. *Food Control*, 2013. 29(1): p. 254-269.
- [29] Fashi, M., L. Naderloo, and H. Javadikia, The relationship between the appearance of pomegranate fruit and color and size of arils based on image processing. *Postharvest Biology and Technology*, 2019. 154: p. 52-57.
- [30] Jafari, S.M., et al., Mathematical, fuzzy logic and artificial neural network modeling techniques to predict drying kinetics of onion. *Journal of Food Processing and Preservation*, 2016. 40(2): p. 329-339.
- [31] Gharibi, H., et al., A novel approach in water quality assessment based on fuzzy logic. *Journal of Environmental Management*, 2012. 112: p. 87-95.
- [32] Abbaspour-Gilandeh, Y., A. Jahanbakhshi, and M. Kaveh, Prediction kinetic, energy and exergy of quince under hot air dryer using
- [12] Hashemi, S.M.B. and R. Roohi, Ohmic heating of blended citrus juice: Numerical modeling of process and bacterial inactivation kinetics. *Innovative Food Science & Emerging Technologies*, 2019. 52: p. 313-324.
- [13] Kusuma, H. and M. Mahfud, Comparison of kinetic models of oil extraction from sandalwood by microwave-assisted hydrodistillation. *International Food Research Journal*, 2017. 24(4).
- [14] Radivojac, A., et al., Conventional versus microwave-assisted hydrodistillation of sage herbal dust: Kinetics modeling and physico-chemical properties of essential oil. *Food and Bioproducts Processing*, 2020. 123: p. 90-101.
- [15] Milojević, S.Ž., et al., Modeling the kinetics of essential oil hydrodistillation from plant materials. *Hemijska industrija*, 2013. 67(5): p. 843-859.
- [16] Okeleye, A.A. and E. Betiku, Kariya (*Hildegardia barteri*) seed oil extraction: comparative evaluation of solvents, modeling, and optimization techniques. *Chemical Engineering Communications*, 2019. 206(9): p. 1181-1198.
- [17] Bahmani, L., et al., ANN modeling of extraction kinetics of essential oil from tarragon using ultrasound pre-treatment. *Engineering in agriculture, environment and food*, 2018. 11(1): p. 25-29.
- [18] Pavlić, B., et al., Microwave-assisted extraction of peppermint polyphenols–Artificial neural networks approach. *Food and Bioproducts Processing*, 2019. 118: p. 258-269.
- [19] Akbar, A., et al., Application of artificial neural network modeling for optimization and prediction of essential oil yield in turmeric (*Curcuma longa* L.). *Computers and Electronics in Agriculture*, 2018. 148: p. 160-178.
- [20] Shojaeimehr, T., et al., A modeling study by response surface methodology (RSM) and artificial neural network (ANN) on Cu<sup>2+</sup> adsorption optimization using light expended clay aggregate (LECA). *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, 2014. 20(3): p. 870-880.
- [21] Xi, J., et al., Artificial neural network modeling and optimization of ultrahigh pressure extraction of green tea polyphenols. *Food chemistry*, 2013. 141(1): p. 320-326.

- Vetenskapsakad. Handlingar, 1898. 24: p. 1-39.
- [43] Babu, G.D.K. and B. Singh, Simulation of Eucalyptus cinerea oil distillation: A study on optimization of 1, 8-cineole production. *Biochemical Engineering Journal*, 2009. 44(2-3): p. 226-231.
- [44] Ho, Y.-S., et al., Kinetics and model building of leaching of water-soluble compounds of Tilia sapwood. *Separation and Purification Technology*, 2005. 45(3): p. 169-173.
- [45] Stanković, M.Z., et al., The effect of hydrodistillation technique on the yield and composition of essential oil from the seed of *Petroselinum crispum* (Mill.) Nym. ex. AW Hill. *Hemijaska industrija*, 2004. 58(9): p. 409-412.
- [46] Mandal, B.B., J.K. Mann, and S. Kundu, Silk fibroin/gelatin multilayered films as a model system for controlled drug release. *European Journal of Pharmaceutical Sciences*, 2009. 37(2): p. 160-171.
- [47] Arrieta, M.P., et al., Plasticized poly (lactic acid)-poly (hydroxybutyrate)(PLA-PHB) blends incorporated with catechin intended for active food-packaging applications. *Journal of agricultural and food chemistry*, 2014. 62(41): p. 10170-10180.
- [48] Chen, X., et al., Release kinetics of tocopherol and quercetin from binary antioxidant controlled-release packaging films. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 2012. 60(13): p. 3492-3497.
- [49] Crank, J., *The mathematics of diffusion*. 1979: Oxford university press.
- [50] Hashemi, A., et al., An artificial neural network modeling for force control system of a robotic pruning machine. *Journal of Information and Organizational Sciences*, 2014. 38(1): p. 35-41.
- [51] Nadian, M.H., et al., An intelligent integrated control of hybrid hot air-infrared dryer based on fuzzy logic and computer vision system. *Computers and Electronics in Agriculture*, 2017. 137: p. 138-149.
- [52] Banakar, A., et al., Combined application of decision tree and fuzzy logic techniques for intelligent grading of dried figs. *Journal of food process engineering*, 2017. 40(3): p. e12456.
- ANNs and ANFIS. *Food Science & Nutrition*, 2020. 8(1): p. 594-611.
- [33] Rad, S.J., et al., Fuzzy logic, artificial neural network and mathematical model for prediction of white mulberry drying kinetics. *Heat and Mass Transfer*, 2018. 54(11): p. 3361-3374.
- [34] Iraj, M.S. and A. Tosinia, Classification tomatoes on machine vision with fuzzy the mamdani inference, adaptive neuro fuzzy inference system based (anfis-sugeno). *Australian Journal of Basic and Applied Sciences*, 2011. 5(11): p. 846-853.
- [35] Goel, N. and P. Sehgal, Fuzzy classification of pre-harvest tomatoes for ripeness estimation—An approach based on automatic rule learning using decision tree. *Applied Soft Computing*, 2015. 36: p. 45-56.
- [36] Papageorgiou, E.I., et al., Development and evaluation of a fuzzy inference system and a neuro-fuzzy inference system for grading apple quality. *Applied Artificial Intelligence*, 2018. 32(3): p. 253-280.
- [37] Zandi, M., et al., Application of fuzzy logic and neural-fuzzy inference system (ANFIS) for prediction of physicochemical changes and quality classification of coated sweet lemon during storage. *Iranian Food Science and Technology Research Journal*, 2021. 17(2): p. 339-351.
- [38] Zandi, M., A. Ganjloo, and M. Bimakr, Applying Adaptive Neuro-Fuzzy Inference System and Artificial Neural Network to the Prediction of Quality changes of Hawthorn Fruit (*Crataegus pinnatifida*) during Various Storage Conditions. *Journal of Agricultural Machinery*, 2021. 11(2): p. 343-357.
- [39] Tunç, M.T. and İ. Koca, Ohmic heating assisted hydrodistillation of clove essential oil. *Industrial Crops and Products*, 2019. 141: p. 111763.
- [40] Franco-Vega, A., et al., Studying microwave assisted extraction of *Laurus nobilis* essential oil: Static and dynamic modeling. *Journal of Food Engineering*, 2019. 247: p. 1-8.
- [41] Marković, M.S., et al., A new kinetic model for the common juniper essential oil extraction by microwave hydrodistillation. *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 2019. 27(3): p. 605-612.
- [42] Lagergren, S.K., About the theory of so-called adsorption of soluble substances. *Sven.*



## Mathematical, fuzzy logic and artificial neural network modeling of extraction kinetics of essential oil from aerial parts of yarrow (*Achillea millefolium L.*) using ohmic-assisted hydrodistillation

Karami, P.<sup>1</sup>, Zandi, M.<sup>2\*</sup>, Ganjloo, A.<sup>3</sup>

1. MSc degree, Department of Food Science and Engineering, Faculty of Agriculture, University of Zanjan, Zanjan, Iran.
2. Assistant Professor, Department of Food Science and Engineering, Faculty of Agriculture, University of Zanjan, Zanjan, Iran.
3. Associate Professor, Department of Food Science and Engineering, Faculty of Agriculture, University of Zanjan, Zanjan, Iran.

### ABSTRACT

The aim of present research was to predict the kinetics of essential oil extraction during ohmic-assisted hydrodistillation by three different modeling (nonlinear regression techniques (mathematical), artificial neural networks (ANN), and fuzzy logic) techniques to compare the accuracy of those models. Based on the results obtained the ANN was the best technique among all implemented models in predicting of extraction yield. Four mathematical models (first order, second order, adsorption and sigmoid models) describing essential oil extraction has been fitted to the extraction yield experimental data. Results indicated that first order model could satisfactorily describe the extraction kinetics of essential oil with correlation coefficient ( $R^2$ ) equal 0.988 and root mean square error (RMSE) equal 0.00014. Neural network with one and two hidden layers and 4–30 neurons were randomly selected and network power was estimated for predicting the extraction yield. ANNs with Feedforward–backpropagation structure, Levenberg–Marquardt training algorithm and 3-11-11-1 topology deserved the maximum  $R^2$  (0.999) and minimum RMSE (0.0004). Fuzzy logic tool in MATLAB with Mamdani model in the form of If–Then rules along with triangular membership function was used for predict the extraction yield. Despite the fact that fuzzy logic warranted lower fitting rates ( $R^2 = 0.997$ ) than that of ANN, it was a powerful technique for fitting of extraction yield experimental data.

### ARTICLE INFO

#### Article History:

Received 2021/ 10/ 12  
Accepted 2021/ 12/ 07

#### Keywords:

*Achillea millefolium L.*,  
Mathematical modeling,  
Artificial neural network,  
Fuzzy logic.

**DOI:** 10.52547/fsct.19.123.341

**DOR:** 20.1001.1.20088787.1401.19.123.12.7

\*Corresponding Author E-Mail:  
Zandi@znu.ac.ir