



مدل سازی شرایط استخراج ترکیبات آنتی اکسیدانی گیاه چای کوهی با روش پاسخ سطح، شبکه

عصبی مصنوعی و هیبرید شبکه عصبی - الگوریتم ژنتیک

محمد هادی موحدنژاد^{۱*}، احمد رجایی^۲، سروش رحیمی خویگانی^۳

۱- استادیار دانشکده کشاورزی، دانشگاه صنعتی شاهرود.

۲- دانشیار دانشکده کشاورزی، دانشگاه صنعتی شاهرود.

۳- دانش آموخته کارشناسی ارشد دانشکده کشاورزی، دانشگاه صنعتی شاهرود.

چکیده

اطلاعات مقاله

اکسیداسیون چربی‌ها یکی از مهم‌ترین دلایل کاهش کیفیت روغن‌ها و چربی‌هایی باشد که لزوم استفاده از آنتی‌اکسیدان‌ها را به‌عنوان یک افزودنی در مواد غذایی مطرح می‌نماید. گیاه چای کوهی با نام علمی *Stachys Lavandulifolia* گیاهی دارویی با خواص آنتی‌اکسیدانی است. با توجه به اینکه تأثیر فناوری‌های جدید در مقایسه با روش‌های سنتی از نظر صرفه‌جویی در زمان، انرژی و همچنین افزایش بازده استخراج مشخص شده است. هدف از این مطالعه مدل‌سازی استخراج ترکیبات آنتی‌اکسیدانی از چای کوهی با روش استخراج با کمک امواج فراصوت بود. به همین منظور، برای مدل‌سازی راندمان استخراج ترکیبات آنتی‌اکسیدانی شبکه عصبی، هیبرید شبکه عصبی مصنوعی-الگوریتم ژنتیک و روش پاسخ سطح استفاده شد. بهترین مدل بر اساس نتایج مدل شبکه عصبی با روش بهینه‌سازی گرادیان، با تابع آموزش **trainbr** و تابع انتقال **tansig** و تعداد لایه‌های پنهان این ترکیب دو با تعداد نرون ۸ در لایه اول و ۴ در لایه دوم به دست آمد. برای این ساختار شبکه خطای ۰/۰۱۲۸ و ضریب همبستگی ۹۷/۳۰ درصد تعیین گردید. با مقایسه این روش با سطح پاسخ دقت مدل از ۹۲٪ به ۹۴/۶۸٪ ارتقا پیدا کرد. بهترین نتیجه برای مدل هیبریدی در الگوریتم یادگیری **trainbr** با تابع انتقال **tansig** با یک لایه پنهان و ۱۸ نرون رخ داد. میزان خطا و ضریب همبستگی در این روش به ترتیب برابر با ۰/۰۶۹۳ و ۸۳/۲۷ درصد گردید. با توجه به نتایج شبکه عصبی با روش گرادیان بهتر جواب داد و روش هیبرید الگوریتم ژنتیک با شبکه عصبی مدل مناسبی برای پیش‌بینی نبود. درنهایت می‌توان گفت که، چای کوهی می‌تواند به‌عنوان منبع بالقوه از ترکیبات آنتی‌اکسیدانی و شبکه عصبی مصنوعی می‌تواند به‌عنوان یک روش کاربردی موفق برای پیش‌بینی بازده استخراج ترکیبات آنتی‌اکسیدانی در نظر گرفته شود.

تاریخ های مقاله :

تاریخ دریافت: ۱۴۰۰/۰۸/۲۶

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۰/۱۰/۰۵

کلمات کلیدی:

چای کوهی،

شبکه عصبی مصنوعی،

الگوریتم ژنتیک،

ترکیبات آنتی‌اکسیدانی،

مدل‌سازی.

DOI: 10.52547/fsct.19.122.285

DOR: 20.1001.1.20088787.1401.19.122.26.9

* مسئول مکاتبات:

mhmovahed@shahroodut.ac.ir

۱- مقدمه

ترکیبات اکسیدکننده و رادیکال‌ها اساساً مولکول‌های واکنش‌گری هستند که از اکسیژن سه‌تایی، آب و مولکول‌های چربی غیراشباع به وجود می‌آیند. فراوانی تولید رادیکال‌های اکسیژن به‌ویژه رادیکال‌های هیدروکسیل می‌تواند با اثر بر چربی‌های غشاء سلولی تولید هیدروپراکسیدهای چربی و انواع اکسیژن‌واکنشگر نمایند که موجب انواعی از بیماری‌ها می‌شوند. اکسیداسیون لیپیدها از مهم‌ترین دلایل فساد مواد غذایی به‌حساب می‌آید که بر روی رنگ، طعم، بافت و ارزش تغذیه‌ای تأثیر می‌گذارد [۱]. ترکیبات دارای خاصیت ضد اکسیدان، آنتی‌اکسیدان نامیده می‌شوند [۲]. افزودن آنتی‌اکسیدان‌های سنتزی مانند بوتیل‌تد هیدروکسی‌آیزول، بوتیل‌تد هیدروکسی‌تولون^۲ و ترشباری بوتیل هیدروکسیون^۳ می‌تواند اکسیداسیون لیپیدها را در مواد غذایی کنترل کند. ولیکن استفاده از این آنتی‌اکسیدان‌های مصنوعی به دلیل خطراتی که در سلامتی دارند و به دلیل سمیت آن‌ها محدود شده است [۳]. اثرات سمی و سرطان‌زایی این آنتی‌اکسیدان‌های سنتزی بر روی انسان شناخته شده است. به همین دلیل امروزه تمایل به استفاده از آنتی‌اکسیدان‌های طبیعی افزایش پیدا کرده است [۴].

امروزه به‌منظور استخراج ترکیبات زیست‌فعال از روش‌هایی استفاده می‌شود که حداکثر بازده را داشته باشند و همچنین زمان استخراج و مصرف حلال را به حداقل برسانند. از روش‌های جدید می‌توان به استخراج‌توسط امواج فراصوت، امواج ماکروویو، سیال فوق بحرانی اشاره کرد [۵]. در بین فناوری‌های جدید، استفاده از امواج فراصوت به دلیل راندمان بالا، سازگاری با محیط‌زیست، کم‌خطر بودن، کاهش در زمان و هزینه‌ها و قابل‌استفاده بودن برای مواد غذایی مختلف، رواج بیشتری پیدا کرده است [۶]. علل افزایش راندمان استخراج ترکیبات فنولیک با امواج فراصوت عبارت‌اند از: ایجاد حباب‌های کاویتاسیونی، فشارهای مکانیکی و کاهش اندازه‌ی ذرات. تحقیقات زیادی در زمینه‌ی به‌کارگیری امواج فراصوت به‌منظور استخراج ترکیبات زیست‌فعال از گیاهان انجام شده که می‌توان به استخراج این ترکیبات از گیاه افستین، مرزنجوش و برگ‌بو اشاره کرد. تنوع در ترکیبات آنتی‌اکسیدانی باعث شده

است تا محققین، استخراج ترکیبات آنتی‌اکسیدانی را از منابع طبیعی مدل‌سازی کنند [۷]. بسیاری از عوامل مثل دما، زمان و نسبت حلال‌ها را می‌توان برای مدل‌سازی استخراج استفاده کرد [۸]. یکی از روش‌های مدل‌سازی استفاده از روش سطح پاسخ است. این روش مجموعه‌ای از تکنیک‌های آماری و ریاضی است که در مورد فرآیندهایی کاربرد دارد که چند متغیری هستند یا مکانیسم‌های مؤثر در آن‌ها به‌خوبی مشخص نشده است و اطلاعات موجود در مورد سیستم بسیار کم باشد، یا میان متغیرها برهم‌کنش وجود داشته و پاسخ غیرخطی است. روش دیگر شبکه عصبی مصنوعی (ANN) است که از پردازش اطلاعات سیستم عصبی زیستی الهام گرفته است. این روش یک سیستم محاسبه‌گر برای مدل‌هایی با متغیرهای زیاد و غیرخطی است که می‌تواند پاسخ‌های موردنظر را در مدل با توجه به داده‌هایی که قبلاً برای آموزش آن استفاده شده محاسبه کند. با وجود مزایای مختلف شبکه عصبی مصنوعی، یک سری محدودیت‌هایی در مدل‌سازی، این سیستم وجود دارد که می‌توان به فقدان روشی دقیق برای انتخاب محتمل‌ترین شبکه و پارامترهای آموزش الگوریتم اشاره کرد. بنابراین تخمین ساختار شبکه عصبی مانند تعداد نوروهای لایه پنهان و پارامترهای یادگیری توسط روش آزمون و خطا انجام می‌شود که روشی زمان‌بر و کم‌دقت است. استفاده از تکنولوژی‌های بهینه‌سازی مانند الگوریتم ژنتیک، روش مفیدی برای فائق آمدن بر کاستی‌های شبکه عصبی است. الگوریتم ژنتیک یک روش جستجوگر است که از سازوکار روند تکاملی موجودات زنده تقلید می‌کند. این روش برخلاف روش‌های بهینه‌سازی دیگر مانند برنامه‌ریزی خطی نیاز به دانش کمی از روند خود دارد [۹ و ۱۰].

چای کوهی یا سنبله زیبا با نام علمی *VahlStachys Lavandulifolia* گیاهی است پایا، کوتاه، کرک دار، با ساقه‌های متعدد و با رنگ سبز مایل به خاکستری که بزرگ‌ترین گونه از جنس سنبله (*Stachys.L.*) است و به‌صورت خودرو در ایران می‌روید (احمد قهرمان). این گیاه دارای خواص دارویی زیادی است. ۳۴ گونه از این جنس در ایران وجود دارد که ۱۳ گونه‌ی آن بومی ایران هستند. از خواص دارویی چای کوهی می‌توان به درمان اسهال، خواص

1. BHA
2. BHT
3. TBHQ

4. Artificial Neural Network
5. Anti-diarrhoeal

۲- مواد و روش‌ها

۲-۱- آماده‌سازی نمونه

چای کوهی از منطقه فریدن در ۱۲۰ کیلومتری غرب استان اصفهان جمع‌آوری شد. نمونه‌ها در سایه و در دمای اتاق خشک گردید و سپس آسیاب (moulinex) ساخت کشور چین) شد. نمونه‌های آسیاب شده در ظروف پلاستیکی بدون منفذ در دمای ۱۸- درجه سانتی‌گراد تا زمان آزمایش نگه‌داری شد.

۲-۲- استخراج به کمک امواج فراصوت

مقدار مشخصی از نمونه را با حجم مشخصی از حلال (با توجه به شرایط هر آزمایش) مخلوط کرده و سپس در زیر پروب مولد امواج فراصوت (Topsonic ساخت ایران) به گونه‌ای قرار داده شد که پروب تا عمق ۲ سانتی‌متر در نمونه قرار بگیرد و سپس شدت و مدت زمان با توجه به هر آزمایش تنظیم شد. در پایان، پس از هر استخراج، عصاره حاصل با کاغذ صافی صاف گردید و در فالکن‌های ۵۰ میلی‌لیتری در فریزر در دمای ۱۸- درجه سانتی‌گراد نگه‌داری شد.

۲-۳- تعیین فعالیت آنتی‌اکسیدانی

تعیین فعالیت آنتی‌اکسیدانی به وسیله معرف ۲،۲-دی فنیل ۱-پیکریل هیدرازین (DPPH) انجام شد. شرایط کار به این صورت بود که ۴۰ میکرولیتر از عصاره با ۱/۵ میلی‌لیتر محلول متانولی ۰/۱ میلی مولار رادیکال آزاد ۲،۲-دی فنیل ۱-پیکریل هیدرازیل، مخلوط شده و به مدت ۳۰ دقیقه در تاریکی و در دمای محیط نگهداری شد و سپس جذب آن در ۵۱۵ نانومتر با استفاده از اسپکتروفوتومتر (مدل Unico UV 2100 ساخت کشور آمریکا) خوانده شد. همه نمونه‌ها در ۳ تکرار انجام شد. درصد فعالیت آنتی‌اکسیدانی با استفاده از رابطه‌ی (۱) محاسبه می‌شود [۱۷].

(۱)

$$100 \times \frac{\text{جذب نمونه} - \text{جذب شاهد}}{\text{درصد فعالیت آنتی‌اکسیدانی}} = \text{جذب شاهد}$$

۲-۴- مدل‌سازی با استفاده از روش سطح

پاسخ

روش سطح پاسخ یک روش مدل‌سازی آماری تجربی است که به ما اجازه تعیین ترکیب فاکتورهای ورودی را می‌دهد. در این

ضدالتهابی^۶ و درمان زخم‌ها^۷ اشاره کرد. سنبله زیبا همچنین دارای خواص ضد میکروبی^۸ و آنتی‌اکسیدانی^۹ است که محققین، خواص آنتی‌اکسیدانی این گیاه را مرتبط با ترکیبات فنولیک آن می‌دانند [۱۱].

در تحقیقی با شبکه عصبی فعالیت آنتی‌اکسیدان برای روغن‌های ضروری مدل‌سازی گردید. در این پژوهش ۳۰ ترکیب به‌عنوان ورودی و از سه لایه پنهان با تعداد نرون ۲۰، ۱۵، ۷ استفاده گردید. پارامتر خروجی نیز میزان فعالیت آنتی‌اکسیدان بود. مدل با دقت ۳/۱۶ و ۱/۴۶ درصد با دو روش DPPH و اسید لینولئیک (دو روش شیمیایی برای تعیین فعالیت آنتی‌اکسیدان) پیش‌بینی کرد [۱۲]. در یک پژوهش دیگر میزان فعالیت آنتی‌اکسیدان و ترکیبات فنولیک در شرایط مختلف خشک شدن با شبکه عصبی مدل و پیش‌بینی گردید. میزان ضریب همبستگی برای فعالیت آنتی‌اکسیدان برابر با ۰/۹۸ و ۰/۹۷ برای یادگیری و آزمون به‌دست آمد [۱۳]. در تحقیق دیگری روی میزان استخراج ترکیبات فنولیک به همراه فعالیت آنتی‌اکسیدان برای میوه توت‌فرنگی انجام گرفت. سپس با شبکه عصبی مدل گردید. نتایج نشان داد که بهترین توپولوژی‌های برای پیش‌بینی ترکیبات فنلی کل و فعالیت آنتی‌اکسیدانی دارای ساختار ۳-۹-۱، با الگوریتم‌های آموزشی trainlm با ترکیب تابع انتقال خطی و tansig با ضریب تبیین ۰/۹۸ و میانگین مربعات خطا ۰/۰۰۴۷ گردید [۱۴]. همچنین محقق دیگری برای سه نوع چای، میزان استخراج به همراه فعالیت آنتی‌اکسیدان را بررسی و با روش پاسخ سطح مدل کرد. نتایج نشان داد که میزان ضریب تعیین در بهترین حالت به ۰/۸۰ رسید [۱۵]. در پژوهشی نیز ترکیبات فنولیک و فعالیت آنتی‌اکسیدان بلوبری با شبکه عصبی مدل گردید. بر اساس نتایج ضریب همبستگی برای ترکیبات فنولی به ۹۷/۵ درصد رسید و میزان خطا میانگین نیز حدود ۰/۰۱۸ گردید [۱۶].

با توجه به مطالب ذکر شده هدف از این تحقیق مدل‌سازی شرایط استخراج به کمک امواج فراصوت ترکیبات آنتی‌اکسیدانی گیاه چای کوهی به سه روش سطح پاسخ، شبکه عصبی و هیبرید شبکه عصبی مصنوعی-الگوریتم ژنتیک و مقایسه کارایی این سه روش با یکدیگر بود.

6. Anti-inflammatory
7. Wound-healing
8. Antimicrobial activity
9. Antioxidant activity

b_j با یاس مرتبط با نورون j ام است [۱۸].

در این مطالعه، یک پیش‌خور چند لایه (پرسپترون) (MLP) شبکه عصبی مصنوعی بر اساس الگوریتم پس انتشار پیش‌خور (FFBP) برای برآورد راندمان ترکیبات آنتی‌اکسیدانی گیاه چای کوهی توسعه داده شد. برای مدل‌سازی آزمایش‌ها با استفاده از شبکه عصبی از نرم‌افزار MATLAB استفاده شد. داده‌ها در ابتدا در یک ماتریس وارد شده و سپس به شبکه فراخوان شد. سپس داده‌ها به دو صورت ورودی و خروجی تقسیم گردید. داده‌های هر دسته به‌طور تصادفی به دو قسمت، ۷۰٪، ۳۰٪ تقسیم گردید. قسمت اول برای یادگیری، قسمت دوم نیز برای آزمون مدل تعیین گردید. در ادامه داده‌ها برای شبکه نرمال‌سازی شد (رابطه ۴). معادلات نرمال‌سازی، تمام داده‌ها را بین منفی یک و یک قرار می‌دهد. معادلات نرمال‌سازی، تمام داده‌ها را بین منفی یک و یک قرار می‌دهد [۱۹].

(۴)

$$\text{Normalize}(x) = \frac{x - \min(x)}{\max(x) - \min(x)} * 2 - 1$$

برای آموزش داده‌ها در فضای نرم‌افزار برنامه‌ای نوشته شد. برای بهینه‌سازی مدل، چهار المان بررسی گردید. این المان‌ها شامل الگوریتم یادگیری، تابع آستانه، تعداد لایه‌های پنهان و تعداد نورن‌های لایه‌های پنهان بودند. الگوریتم‌های یادگیری شامل دو الگوریتم، لوبنبرگ-مارکواریت (LM)، تنظیم بیزین (BR)، بود. توابع آستانه مورد استفاده در مدل‌سازی سه تابع تانژانت‌های پربولیک سیگموئید (tansig) (رابطه ۵) و سیگموئید لگاریتمی (logsig) (رابطه ۶) و خطی (رابطه ۷) بودند [۱۹].

$$Y_i = \frac{2}{1 + e^{-2X_i}} - 1 \quad (5)$$

$$Y_i = \frac{1}{1 + e^{-X_i}} \quad (6)$$

$$Y_i = X_i \quad (7)$$

لایه‌های پنهان به صورت تک لایه‌ای بررسی شد. تعداد نورن نیز از ۴ تا ۲۰ نورن مورد بررسی قرار گرفت. سپس با برنامه نوشته‌شده سه المان تعداد نورن، الگوریتم آموزش، تابع آستانه بررسی شده و برای تمام ترکیب‌های ایجاد شده بر اساس چهار المان، خطا و بقیه پارامترهای ارزیابی تعیینی‌گردد. بر اساس

تحقیق طرح مرکب مرکزی با چهار فاکتور (قدرت امواج فراصوت (X1)، نسبت حلال به مواد جامد (X2)، زمان (X3) و درصد ترکیب حلال (X4)) و در ۵ سطح استفاده شد. معمولاً مدل‌های رگرسیون چندجمله‌ای درجه دوم (معادله ۲) برای تعیین نقطه بهینه استفاده می‌شود.

(۲)

$$Y = b_0 + \sum_{i=1}^4 b_i X_i + \sum_{i=1}^4 b_{ii} X_i^2 + \sum_{i=2}^3 \sum_{j=i+1}^4 b_{ij} X_i X_j$$

که Y پاسخ (فعالیت آنتی‌اکسیدانی) و b_0, b_i, b_{ii}, b_{ij} به ترتیب ضرایب رگرسیونی برای عرض از مبدأ، درجه اول، درجه دوم و برهمکنش هستند X_i و X_j متغیرهای مستقل هستند. داده‌های حاصل با استفاده از نرم‌افزار دیزاین اکسپرت (Design Expert program 7.0.0) تجزیه و تحلیل شد.

۲-۵- مدل‌سازی با استفاده از شبکه عصبی

مصنوعی

شبکه عصبی مصنوعی به عنوان یک روش پردازش داده قدرتمند برای پیش‌بینی خواص مواد در نظر گرفته شده است. مزایای اصلی شبکه عصبی مصنوعی عبارت‌اند از: (۱) به هیچ دانش خاصی برای شروع مدل مورد نیاز نیست (۲). داده‌های با نویز زیاد قابل قبول است و همچنین (۳) برای سیستم‌های پیچیده غیرخطی بسیار مؤثر است. شبکه عصبی مصنوعی شامل یک سری از عناصر پردازش (نورون‌ها) شامل معادلات پیچیده‌ای برای محاسبه خروجی بر اساس یک سری مقادیر ورودی می‌باشد. هر نورون شامل یک تابع انتقال، که به انجام محاسبات ریاضی پرداخته و یک سیگنال (وزن) انتقال از یک نورون ورودی به نورون خروجی می‌باشد. لایه‌های پنهان ورودی متغیر (مستقل) به خروجی (وابسته) متصل می‌شود. نورون در یک لایه واحد، پردازش را با دریافت خروجی وزنی از لایه قبلی انجام داده و نتیجه محاسبه به‌عنوان ورودی به لایه خروجی ارسال می‌شود. عملیات ریاضی یک نورون می‌تواند به صورت معادله (۳) بیان شود.

$$Y_i = \sum_{i=1}^n f(W_{ij} X_i) + b_j \quad (3)$$

که در آن، Y خروجی و ترتیب ورودی و خروجی نورون، n تعداد ورودی به نورون، W_{ij} وزن ارتباط بین نورون i و نورون j و

10. Multi Layer Perceptron

11. Feed Forward Back Propagation

۶-۲- مدل سازی با استفاده از مدل هیبریدی

شبکه عصبی مصنوعی-الگوریتم ژنتیک

الگوریتم ژنتیک که بر اصل بقای داروینی در تکامل طبیعی است، یک فن آوری هوشمند تطبیقی و الگوریتم جستجوی موازی است که دارای یک توانایی بالا برای پیدا کردن مقدار بهینه یا نزدیک بهینه یک تابع پیچیده، بدون افتادن به بهینه محلی است [۲۰].

این الگوریتم براساس سه اپراتور انتخاب، ادغام و جهش به منظور بهینه سازی فرایند انجام می شود. این الگوریتم نسل هایی را براساس توابع سازگاری انتخاب می کند. کروموزوم با ارزش بالاتر از توابع برازش با احتمال بالاتر انتخاب می شوند. اپراتور تقاطع ژن هایی را از کروموزوم پدر و مادر انتخاب و فرزندان جدید ایجاد می کند. عملیات جهش به طور تصادفی فرزندان جدید ایجاد کرده و با توجه به احتمال جهش نسل را تغییر می دهد تا به شما اطلاعات جدید در جمعیت جدید بدهد. این اپراتور اثر بسیار مؤثری در جلوگیری از افتادن به یک بهینه محلی دارد. چرخه مذکور تا زمانیکه همگرایی مورد نظر برای راه حل های بهینه یا نیمه بهینه به دست آید ادامه می یابد [۲۱]. در این مطالعه، مدل سازی و بهینه سازی شبکه عصبی مصنوعی با الگوریتم ژنتیک توسط نرم افزار Matlab انجام شد. در هر آموزش شبکه وزن ها را تعیین و سپس وزن ها توسط الگوریتم ژنتیک بهینه سازی می گردید. در نهایت با توجه به تعداد نرون و لایه پنهان، روش آموزش و نوع تابع بهترین مدل توسط الگوریتم ژنتیک تعیین گردید. تابع مورد استفاده در لایه خروجی نیز تابع خطی انتخاب شد. تعداد تکامل برای الگوریتم ژنتیک ۵۰ نسل در نظر گرفته شد.

۳- نتایج و بحث

۳-۱- مدل سازی شرایط استخراج به کمک

امواج فراصوت با استفاده از روش سطح پاسخ

با توجه به نتایج به دست آمده از پیش تست، دامنه مناسب هر متغیر انتخاب شد و سپس برای نرم افزار سطوح هر متغیر تعریف شد و در ادامه کدگذاری گردید که نتایج آن در جدول (۱) آورده شده است.

کمترین میانگین مربعات خطا (MSE) (رابطه ۸) بهترین مدل برای هر دسته به دست آمد. پارامترهای ارزیابی دیگر شامل ریشه میانگین مربعات خطا^{۱۲} (رابطه ۹)، ضریب همبستگی^{۱۳} (R) (رابطه ۱۰)، ضریب تعیین^{۱۴} (R²) (رابطه ۱۱)، خطای مطلق میانگین^{۱۵} (E_{ma}) (رابطه ۱۲) می باشد [۱۹].

$$MSE = \frac{\sum_1^n (y - \hat{y})^2}{n} \quad (8)$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_1^n (y - \hat{y})^2}{n}} \quad (9)$$

$$R = \sqrt{\frac{\sum_1^n (y - \bar{y})^2 - (y - \bar{y})^2}{\sum_1^n (y - \bar{y})^2}} \quad (10)$$

$$R^2 = \frac{\sum_1^n (y - \bar{y})^2 - (y - \bar{y})^2}{\sum_1^n (y - \bar{y})^2} \quad (11)$$

$$E_{ma} = \frac{1}{n} \sum_1^n |y - \hat{y}| \quad (12)$$

بهترین نتایج برای هر دسته آزمایشی برای الگوریتم های منتخب و دو تابع آستانه در دو ترکیب تعداد لایه و تعداد نورون در جدولی ارائه شد. همچنین در برنامه نوشته شده R² داده های خروجی پیش بینی شده توسط شبکه نسبت به داده های خروجی واقعی نیز به دست می آید. این اطلاعات نیز برای حالات بهینه ارائه گردید.

لایه ورودی شامل چهار متغیر فرایند (قدرت امواج فراصوت (وات)، نسبت حلال به مواد جامد، زمان (دقیقه) و درصد ترکیب حلال (درصد متانول)) و لایه خروجی شامل درصد فعالیت آنتی اکسیدانی عصاره حاصله بود. برای ایجاد ساختار شبکه عصبی دو روش آموزش (trainlm و trainbr) به همراه سه تابع خطی، logsig و tansig استفاده گردید. همچنین لایه های پنهان نیز به صورت یک و دولایه با نرون های ۴ الی ۲۰ عدد نیز بررسی گردید. در هر آموزش شبکه وزن ها را تعیین و به دو روش وزن ها در راستای کاهش خطای مدلبه روش گرادیان بهینه سازی گردید. روش گرادیان خطا پیش فرض روش شبکه عصبی می باشد.

فرایند آموزش در ۱۰۰۰ دوره و یا تا زمانی که اعتبار متقاطع میانگین مربع خطا (MSE) ایجاد شود (معادله ۶)، یعنی برای ۱۰۰ دوره MSE که بهبود نمی یافت (برای جلوگیری از بیش برازندگی شبکه) انجام شد.

12. Root Mean Sum Square

13. Correlation Coefficient

14. Coefficient of Determination

15. Absolute Mean Error

Table 1 Levels of variables coded and encoded

Process variables	surface				
	2	1	0	-1	-2
X1 (power of ultrasonic waves (W))	350	300	250	200	150
X2 (sample to solvent ratio)	70	60	50	40	30
X3 (time(min))	18	14	10	6	2
X4 (concentration of methanol v/v %)	90	70	50	30	10

رگرسیون می‌باشد و اگر عدد آزمون عدم برازش بزرگ‌تر از ۰/۰۵ باشد نشان‌دهنده این است که این آزمون معنی‌دار نیست و مدلی که آزمون عدم برازش آن معنی‌دار نباشد مدل مناسبی برای فرایند استخراج است. با توجه به مطالب ذکر شده و نتایج جدول (۳) مدل درجه دوم برای پاسخ میزان فعالیت آنتی‌اکسیدانی مناسب است. در مدل‌سازی، ضرایب رگرسیونی مدل تخمین زده می‌شود که این ضرایب در جدول (۴) آورده شده است. میزان ضریب تعیین برای فعالیت آنتی‌اکسیدان حدود ۹۲ درصد گردید، که در مقایسه با تحقیقی که روی فعالیت آنتی‌اکسیدان سه نوع چای با ضریب تعیین ۸۰ درصد، دقت بالاتری به دست آمد [۱۵].

با توجه به تعریف سطوح متغیرها برای نرم‌افزار سطح پاسخ و تعداد این متغیرها، نرم‌افزار یک سری آزمایش‌هایی را طراحی می‌کند که آزمایش‌ها به ترتیبی که نرم‌افزار پیشنهاد کرده است انجام شد.

ساخت یک مدل یکی از مهم‌ترین مراحل در بهینه‌سازی فرایند استخراج است. در واقع مدل‌سازی شامل برقراری روابط کمی بین متغیرهای فرایند و پاسخ‌های مورد نظر براساس داده‌های آزمایش است. بهترین مدلی که برای پاسخ فعالیت آنتی‌اکسیدانی نرم‌افزار پیشنهاد کرد مدل درجه دوم چندجمله‌ای بود که در جدول (۳) مواردی مانند ضریب همبستگی و عدم برازش مدل درجه دوم آورده شده است. مقدار عددی R^2 نشان‌دهنده میزان انحراف داده‌ها از مدل

Table 2 Results of quadratic analysis of variance

Error	(R ²)	ValueP	F	MS	SS	Response
0.38	0.92	0.0001	12.29	333.56	4669.84	Antioxidant activity

Table 3 Correlation coefficients of the quadratic model predicted for the antioxidant activity response

Parameters	r	Parameters	r	Parameters	r
b ₁₃	2.06 ^{ns}	b ₁₁	-0.24 ^{ns}	b ₀	52.91
b ₁₄	3.01*	b ₂₂	3.84**	b ₁	1.69 ^{ns}
b ₂₃	-0.046 ^{ns}	b ₃₃	1.98 ^{ns}	b ₂	-9.8***
b ₂₄	-1.39 ^{ns}	b ₄₄	-4.7***	b ₃	4.67***
b ₃₄	-1.48 ^{ns}	b ₁₂	0.0065 ^{ns}	b ₄	2.52*

* Significant difference at 5% level, ** Significant difference at 1% level and *** Significant difference at 0.1% level

۲-۲- مدل‌سازی شرایط استخراج به کمک امواج فراصوت با استفاده از شبکه عصبی مصنوعی

بر اساس برنامه‌ای که در متلب نوشته شد. حالت‌های مختلفی از ترکیب عوامل مؤثر در شبکه عصبی بهترین مدل‌های استخراج گردید. در جدول ۴ مدل‌های منتخب از بین صدها مدل انتخاب شد. بر اساس نتایج بهترین مدل با خطای ۰/۰۱۲۸ و ضریب همبستگی ۹۷/۳۰ درصد با تابع آموزش trainbr و تابع انتقال tansig به دست آمد. تعداد لایه‌های پنهان این

باتوجه به جدول ضرایب (۴) اثر خطی نسبت نمونه به حلال و اثر درجه دوم غلظت حلال بر روی فعالیت آنتی‌اکسیدانی با سطح اطمینان ۹۹/۹ درصد معنی‌دار و منفی است و اثر خطی زمان (با سطح اطمینان ۹۹/۹) و غلظت حلال (سطح اطمینان ۹۵ درصد) و اثر درجه دوم نسبت نمونه به حلال (با سطح اطمینان ۹۹ درصد) معنی‌دار و مثبت است و همچنین اثر متقابل قدرت امواج فراصوت و غلظت حلال معنی‌دار و مثبت است. معادله نهایی مطابق معادله (۱۳) خواهد بود.

(۱۳)

$$Y=53.91+1.69X_1-9.88 X_2+4.67 X_1+2.52 X_4+3.1 X_1 X_4+3.84 X_2^2-4.7 X_4^2$$

شبکه عصبی مورد تأیید قرار دارد [۱۶ و ۱۴]. جنیون و همکاران ضریب همبستگی ۹۷ درصد را برای فعالیت آنتی‌اکسیدان گزارش کردند. با توجه به دقت مدل این تحقیق، پیش‌بینی مناسب شبکه عصبی در تخمین فعالیت آنتی‌اکسیدانی را ذکر نمود [۱۳].

ترکیب دو با تعداد نرون ۸ در لایه اول و ۴ در لایه دوم به دست آمد. روش بهینه‌سازی ضرایب شبکه نیز با روش گرادینان تعیین گردید. با مقایسه این روش با سطح پاسخ دقت مدل از ۹۲٪ به ۹۴/۶۸٪ ارتقا پیدا کرد. با توجه به این نتیجه شبکه عملکرد بهتری داشت. در کارهای مشابه نیز عملکرد مناسب

Table 4 Evaluation parameters for optimal models in threshold functions, training algorithm and number of hidden layers for model output

RMSE	Mae%	R2	r	MSE	L ₂	L ₁	Function	Algorithm	Hidden Layer
0.5430	46.163	0.6882	0.8295	0.2949	0	12	logsig	'trainbr'	1_Layer
0.5412	45.968	0.6776	0.8231	0.2929	0	16	logsig		
0.5302	44.827	0.6690	0.8179	0.2811	0	6	logsig		
0.2452	12.234	0.7921	0.8900	0.0601	0	10	tansig	'trainlm'	1_Layer
0.2905	17.465	0.7247	0.8512	0.0844	0	2	tansig		
0.2909	13.343	0.6718	0.8196	0.0846	0	6	tansig		
0.5425	46.083	0.6665	0.8164	0.2943	8	4	logsig	'trainbr'	2_Layer
0.5425	46.083	0.6427	0.8016	0.2943	16	4	logsig		
0.5425	46.083	0.6288	0.7929	0.2943	20	16	logsig		
0.1131	5.396	0.9468	0.9730	0.0128	4	8	tansig	'trainlm'	2_Layer
0.1367	6.955	0.9107	0.9543	0.0187	4	4	tansig		
0.1487	7.468	0.9098	0.9538	0.0221	8	8	tansig		

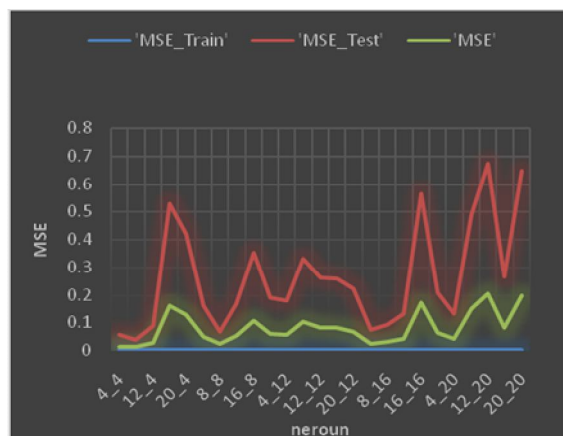


Fig 1 Error process for training and testing based on MSE

بر اساس شکل ۱ میزان خطا برای آموزش بسیار پایین بوده و نسبت به آزمون در مقدار پایین‌تری قرار دارد. علت این امر تعداد بیشتر داده‌ها برای مرحله آموزش می‌باشد. برای اساس شکل دو ضریب خط برازش داده‌های تجربی با داده‌های پیش‌بینی شده توسط مدل هم در مرحله آموزش و آزمون نزدیک ۱ بوده که از دقت بالای پیش‌بینی حکایت دارد. همچنین ضریب تعیین مرحله آموزش داده‌ها ۹۹/۱۹ درصد گردید. همچنین این میزان برای آزمون هم به مقدار قابل قبول ۸۵/۳۵ درصد رسید. در کل میزان ضریب R^2 برای این مدل برابر با ۹۴/۶۸ درصد شد.

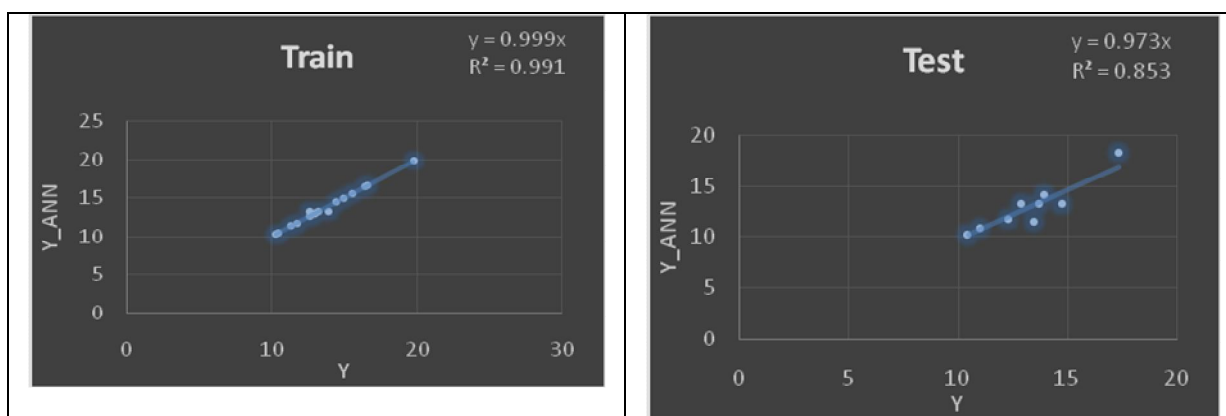


Fig 2 The accuracy of the training and testing process based on the coefficient of determination

داده شدند. در این بخش روش الگوریتم ژنتیک برای بهینه‌سازی ضرایب شبکه استفاده شد. در این روش نیز چهار پارامتر مدل شبکه بررسی گردید و با روش الگوریتم ژنتیک خطای مدل کمینه گردید و نتایج در جدول ۵ ذکر گردید. بهترین نتیجه در الگوریتم یادگیری *trainbr* با تابع انتقال *tansig* با یک لایه پنهان و ۱۸ نرون رخ داد. میزان خطا و ضریب همبستگی در این روش به ترتیب برابر با ۰/۰۶۹۳ و ۸۳/۲۷ درصد گردید. با توجه به نتایج روش سطح پاسخ و شبکه عصبی با روش گردیان بهتر جواب داد و روش هیبرید الگوریتم ژنتیک با شبکه عصبی مدل مناسبی برای پیش‌بینی نبود.

۳-۳- مدل‌سازی شرایط استخراج به کمک امواج فراصوت با استفاده از مدل هیبریدی شبکه عصبی مصنوعی و مدل ترکیب با الگوریتم ژنتیک

همان‌طور در روش کار بیان شد. شبکه عصبی مصنوعی با ۴ تا ۲۰ نرون به همراه یک و دو لایه پنهان و با روش‌های یادگیری (*trainlm*, *trainbr*) و تابع (*pureline*, *logsig*, *tansig*) با استفاده از دو روش گردیان و الگوریتم ژنتیک برای پیدا کردن تنظیمات شبکه و یادگیری پارامترهای بهینه برای برآورد راندمان استخراج ترکیبات آنتی‌اکسیدانی آموزش

Table 5 Best results of neural network training from genetic algorithm optimization method (50 generations) for antioxidant compounds based on mse

Mae%	R2	r	MSE	L2	L1	Function	Algorithm	Hidden Layer
20.321	0.6934	0.8327	0.0639	0	18	tansig	' <i>trainbr</i> '	1_Layer
20.700	0.6674	0.8169	0.0713	0	20	tansig	' <i>trainbr</i> '	
19.657	0.6648	0.8154	0.0719	0	2	tansig	' <i>trainbr</i> '	
22.032	0.6749	0.8215	0.0761	0	6	tansig	' <i>trainlm</i> '	
20.865	0.6654	0.8157	0.0721	0	10	tansig	' <i>trainlm</i> '	
22.140	0.6273	0.7920	0.0897	0	14	tansig	' <i>trainlm</i> '	
20.708	0.6819	0.8258	0.0735	16	20	tansig	' <i>trainbr</i> '	2_Layer
20.831	0.6794	0.8243	0.0746	20	20	tansig	' <i>trainbr</i> '	
20.702	0.6638	0.8147	0.0742	8	12	tansig	' <i>trainbr</i> '	
21.364	0.6916	0.8316	0.0842	16	16	tansig	' <i>trainlm</i> '	
19.793	0.6857	0.8281	0.0706	12	12	tansig	' <i>trainlm</i> '	
20.335	0.6852	0.8278	0.0688	12	20	tansig	' <i>trainlm</i> '	

گردید. همچنین این میزان برای آزمون هم به ۶۲/۳۴ درصد رسید. این دقت برای مدل‌سازی نسبت به دو روش دیگر بسیار کمتر می‌باشد.

برای اساس شکل ۳ ضریب خط برازش داده‌های تجربی با داده‌های پیش‌بینی شده توسط مدل هم در مرحله آموزش و آزمون می‌باشد. ضریب تعیین مرحله آموزش داده‌ها ۶۵/۳۶ درصد

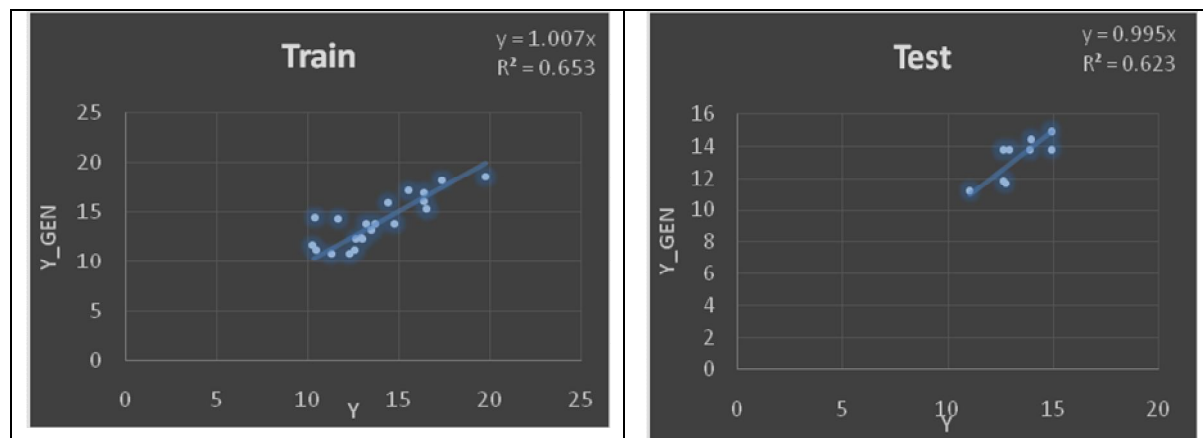


Fig 3 Accuracy of training and testing process based on coefficient of explanation in neural network method-genetic algorithm

به مواد جامد، زمان و ترکیب حلال) مورد مطالعه قرار گرفت. از سوی دیگر، روش شبکه عصبی، هیبرید شبکه عصبی مصنوعی- الگوریتم ژنتیک و روش سطح پاسخ برای پیش‌بینی ترکیبات آنتی‌اکسیدانی با یکدیگر مقایسه شد. بیشترین بازده استخراج در شرایط استخراج قدرت امواج فراصوت ۳۰۰ وات، نسبت حلال به مواد جامد ۴۰، زمان ۱۴ دقیقه و ترکیب حلال ۶۰ درصد متانول به دست آمد. بر اساس نتایج مدل شبکه عصبی با روش بهینه‌سازی گرادیان، بهترین مدل با خطای ۰/۰۱۲۸ و ضریب همبستگی ۹۷/۳۰ درصد با تابع آموزش trainbr و تابع انتقال tansig به دست آمد. تعداد لایه‌های پنهان این ترکیب دو با تعداد نرون ۸ در لایه اول و ۴ در لایه دوم به دست آمد. با مقایسه این روش با سطح پاسخ دقت مدل از ۹۲٪ به ۹۴/۶۸٪ ارتقا پیدا کرد. بهترین نتیجه برای مدل هیبریدی در الگوریتم یادگیری trainbr با تابع انتقال tansig با یک لایه پنهان و ۱۸ نرون رخ داد. میزان خطا و ضریب همبستگی در این روش به ترتیب برابر با ۰/۰۶۹۳ و ۸۳/۲۷ درصد گردید. با توجه به نتایج روش سطح پاسخ و شبکه عصبی با روش گردیدان بهتر جواب داد و روش هیبرید الگوریتم ژنتیک با شبکه عصبی مدل مناسبی برای پیش‌بینی نبود.

۵- منابع

- [1] Dezashibi, Z. 2006. Evaluation of antioxidant activity of henna leaf extract. Master Thesis, Sabzevar Branch of Azad University.
- [2] Shahidi, F. 1997. Natural antioxidants chemistry, health effects, and application. AOCS Rress, Champaign, I LLinois, pp 414.
- [3] Susi, E. Asmah, Rahmat., 2002. Anticarcinogenic properties and antioxidant activity of henna. Journal of Medical Science, 2, 194-197.
- [4] Hayouni, E. A., Abedrabba, M., Bouix, M., Hamdi, M., 2007. The effects of solvents and extraction method on the phenolic "contents and biological activities in vitro of Tunisian Quercus coccifera L. and Juniperus phoenicea L. fruit extracts, Food Chemistry, 105, 1126-1134.
- [5] Pan, G., Yu, G., Zhu, C., Qiao, J., 2012. Optimization of ultrasound-assisted extraction (UAE) of flavonoids compounds (FC) from hawthorn seed (HS). Ultrasonics

بهترین برازش (کمترین MSE) به دست آمده در طول هر نسل از بهینه‌سازی الگوریتم ژنتیک در نسل بعدی کاهش یافت تا اینکه پس از ۱۱ نسل (شکل ۴) نسبتاً ثابت شد.

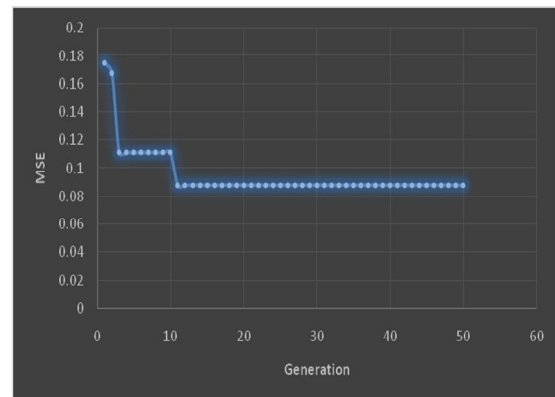


Fig 4 Best fit (least error) versus generation in the artificial neural network optimization process - Genetic algorithm

برای درک بهتر میزان تطبیق داده‌های تجربی با داده‌های پیش‌بینی‌شده توسط مدل دو روش شبکه عصبی و هیبرید شبکه عصبی- الگوریتم ژنتیک در شکل ۵ آورده شده است. بر اساس شکل فوق دقت مناسب شبکه قابل مشاهده است.

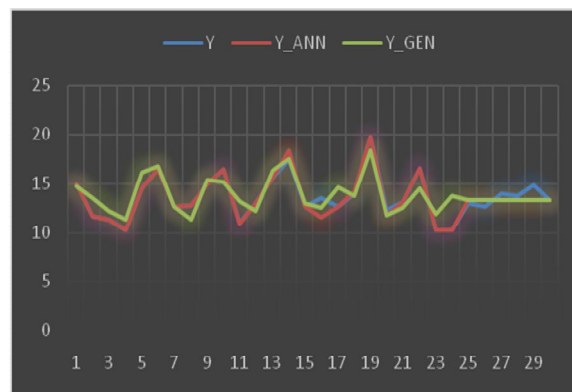


Fig 5 Fitting experimental data with predicted data by modeling method

نتایج حاصل از مطالعه حاضر نشان داد که سیستم مدل‌سازی شبکه عصبی مصنوعی در مقایسه با روش سطح پاسخ دارای ضریب همبستگی بالاتر بوده و برای پیش‌بینی عملکرد استخراج ترکیبات آنتی‌اکسیدانی کارآمدتر بود. نتایج این تحقیق برتری شبکه‌های هوشمند به روش سطح پاسخ را نشان داد که با یافته‌های کارهای گذشته مطابقت داشت [۲۲].

۴- نتیجه‌گیری

در مطالعه حاضر، کاربرد بالقوه چای کوهی به عنوان یک منبع بالقوه از ترکیبات آنتی‌اکسیدانی و اثر شرایط مختلف استخراج به کمک امواج فراصوت (قدرت امواج فراصوت، نسبت حلال

- [14] Golpour I., Ferrão A. C., Gonçalves F., Correia P. M. R., Blanco-Marigorta A. M. and Guiné R. P. F. 2018. Extraction of Phenolic Compounds with Antioxidant Activity from Strawberries: Modelling with Artificial Neural Networks (ANNs). *Foods*. 10(2228): 1-13.
- [15] Ferreira Zielinski A. A., Granato D., Alberti A., Nogueira A., Demiate I. M., Isidoro Haminiuk C. W. 2015. Modelling the extraction of phenolic compounds and in vitro antioxidant activity of mixtures of green, white and black teas (*Camellia sinensis* L. Kuntze). *Journal of Food Science and Technology* 52: 6966–6977
- [16] Raquel P.F. G., Christophe G., Susana M., Fernando G., Daniela C. V. T. A., Mateus M. 2018. Modelling through artificial neural networks of the phenolic compounds and antioxidant activity of blueberries. 37(2): 193-212.
- [17] Hatamnia A. A. Abbaspour N. and Darvishzadeh R. 2014. "Antioxidant activity and phenolic profile of different parts of *Bene (Pistacia atlantica subsp. kurdica)* fruits" *Food Chemistry*, 145, pp 306-311.
- [18] Kashiri, M., Daraei Garmakhany, A. and Deghani, A.A., 2012. Modeling of sorghum soaking using artificial neural networks (MLP). *Quality Assurance and Safety of Crops & Foods* 4: 179-184.
- [19] Demuth, H., and Beale, M. 2009. *Neural Network Toolbox For Use with MATLAB*. The MathWorks, Inc.
- [20] Morimoto, T., 2006. Genetic algorithm. In: Sablani, S.S., Datta, A.K., Rehman, M.S. and Mujumdar, A.S. (ed.). *Handbook of food and bioprocess modeling techniques*. CRC press, New York, NY, USA.
- [21] Shahabi Ghahfarrokhi, I., Daraei Garmakhany, A., Kashaninejad, M. and Deghani, A. A., 2012. Estimation of peroxidase activity in red cabbage by artificial neural network. *Quality Assurance and Safety of Crops & Foods* 5: 163-167.
- [22] Salarbashi, D., Khanzadeh, F., Hosseini, S.M., Mohamadi, M., Rajaei, A. Draei Garmakhani, A. (2014). Prediction of the extraction yield using artificial neural network and response surface methodology: ultrasound-assisted extraction from *Achillea berbresteinii* L. *Quality Assurance and Safety of Crops & Foods* 6: 431-438.
- Sonochemistry 19, 486-490.
- [6] Tao, Y., Zhang, Z., Sun, D.-W., (2014). Kinetic modeling of ultrasound-assisted extraction of phenolic compounds from grape marc: Influence of acoustic energy density and temperature. *Ultrasonics Sonochemistry* 21, 1461-1469.
- [7] Şahin, S. Aybastier, Ö. & Işık, E. (2013) "Optimisation of ultrasonic-assisted extraction of antioxidant compounds from *Artemisia absinthium* using response surface methodology". *Food Chemistry*, 141, 1361-1368.
- [8] Mizubuti, I.Y., Junior, O.B., de Oliveira souza L.W., dos Santos Ferrera da Silva R.S., da E.I. 2000. "Response surface methodology for extraction optimization of pigeon pea protein" *Food Chemistry*, 70, 259-265.
- [9] Aghajani, N., Kashaninejad, M., Deghani, A.A. and Daraei Garmakhany, A., 2012. Comparison between artificial neural networks and mathematical models for moisture ratio estimation in two varieties of green malt. *Quality Assurance and Safety of Crops & Foods* 4: 93-101.
- [10] Salarbashi, D., Fazly Bazzaz, B. S., Karimkhani, M. M., Sabeti Noghabi, Z., Khanzadeh, F. and Sahebkar, A., 2014a. Oil stability index and biological activities of *Achillea biebersteinii* and *Achillea wilhelmsii* extracts as influenced by various ultrasound intensities. *Industrial Crops and Products*, 55: 163-172.
- [11] Khadivi-Khub A. Aghaei Y. and Mirjalili M. H. 2014. "Phenotypic and phytochemical diversity among different populations of *Stachys lavandulifolia*" *Journal of Biochemical Systematics and Ecology*, 54, pp 272-278.
- [12] Cabrera A. C. and Prieto J. M., 2010. Application of artificial neural networks to the prediction of the antioxidant activity of essential oils in two experimental in vitro models. *Food Chemistry*. 118: 141–146.
- [13] Guine R. P. F., Barroca M. J., Gonçalves F. J., Alves M., Oliveira S., Mendes M. 2015. Artificial neural network modelling of the antioxidant activity and phenolic compounds of bananas submitted to different drying treatments. *Food Chemistry* 168: 454–459.



Modeling the extraction conditions of antioxidant compounds of *Stachys lavandulifolia* by surface response method, artificial neural network and, hybrid neural network - Genetic algorithm

Movahednejad, M. H. ^{1*}, Rajaei, A. ², Rahimi Khoigani, S. ³

1. Assistant professor, Faculty of Agriculture, Shahrood University of Technology, Shahrood, Iran.
2. Associated professor, Faculty of Agriculture, Shahrood University of Technology, Shahrood, Iran.
3. Graduate Student, Faculty of Agriculture, Shahrood University of Technology, Shahrood, Iran.

ARTICLE INFO

Article History:

Received 2021/ 11/ 17
Accepted 2021/ 12/ 26

Keywords:

Stachys lavandulifolia,
Artificial neural network,
Genetic algorithms,
Antioxidant compounds,
Modeling.

DOI: 10.52547/fsct.19.122.285

DOR: 20.1001.1.20088787.1401.19.122.26.9

*Corresponding Author E-Mail:
mhmovahed@shahroodut.ac.ir

ABSTRACT

Lipid oxidation is important issue that can lead to the degradation and destruction of foods containing lipids. Some antioxidants have been used to solve this problem. *Stachys lavandulifolia* is a medicinal herb with antioxidant properties. Given that the impact of new technologies compared to traditional methods in terms of saving time, energy, and increasing the efficiency of extraction have been identified. The aim of this study was to model the extraction of antioxidant compounds from *Stachyslavandulifolia* by ultrasound-assisted extraction method. For this purpose, to model the extraction efficiency of neural network antioxidant compounds, artificial neural network hybrids - genetic algorithm and response surface methodology were used. The best model was obtained based on the results of the neural network model with gradient optimization method, with trainbr training function and tansig transfer function and the number of hidden layers of this combination with two neurons 8 in the first layer and 4 in the second layer. For this network structure, an error of 0.0128 and a correlation coefficient of 97.30% was determined. By comparing this method with the response level, the model accuracy increased from 92% to 94.68%. The best result for the hybrid model occurred in the trainbr learning algorithm with the tansig transfer function with a hidden layer and 18 neurons. The error rate and correlation coefficient in this method was equal to 0.0693 and 83.27%, respectively. According to the results of the neural network with the logger method, it answered better and the hybrid method of the genetic algorithm with the neural network was not a suitable prediction model. Finally, it can be said that mountain tea can be considered as a potential source of antioxidant compounds and an artificial neural network can be considered as a successful application method to predict the extraction efficiency of antioxidant compounds.