



ارزیابی و مدل‌سازی سینتیک رهایش اسانس بومادران (*Achillea millefolium L.*) از فیلم فعال

ژلاتین-آلژینات سدیم به شبیه‌سازهای غذایی

پروانه کرمی^۱، محسن زندی^{۲*}، علی گنجلو^۳

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

چکیده

اطلاعات مقاله

تاریخ های مقاله :

تاریخ دریافت: ۱۴۰۰/۰۷/۲۳

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۰/۰۹/۱۵

کلمات کلیدی:

اسانس بومادران،

فیلم فعال ژلاتین-آلژینات سدیم،

مدل‌سازی ریاضی،

شبکه عصبی مصنوعی،

شبیه‌ساز غذایی.

در پژوهش حاضر، فیلم‌های ژلاتین-آلژینات سدیم با غلظت‌های مختلف اسانس بومادران تهیه شد. انتشار اسانس بومادران از فیلم‌های ژلاتین-آلژینات سدیم به شبیه‌سازهای غذایی آبی (آب مقطر)، اسیدی (استیک اسید ۳ درصد)، الکلی (اتانول ۱۰ درصد) و چرب (اتانول ۸۵ درصد) در دمای ۲۵ درجه سلسیوس اندازه‌گیری شد. فیلم‌ها در همه شبیه‌سازهای غذایی نمایه انتشار مشابهی با انتشار سریع اولیه و به دنبال آن انتشار آهسته پایدار داشتند. نتایج نشان داد که رهایش اسانس بومادران از فیلم‌ها در شبیه‌ساز غذایی آبی به دلیل تورم در آب، سریع‌تر می‌باشد. فیلم‌ها ساختار خود را تنها در شبیه‌ساز غذای چرب پس از ۲۴۰ ساعت حفظ کردند. از مدل‌های شبکه عصبی مصنوعی (ANN) و ریاضی (مرتبه اول، کوپچا، هیگوچی، کورسمیر-پپاس، ویبال و هیکسون-کرول) برای توصیف رهایش اسانس از فیلم‌ها استفاده شد. نتایج مدل‌سازی ریاضی نشان داد که مدل ویبال می‌تواند سینتیک رهایش اسانس را برای همه شبیه‌سازهای غذایی به‌طور رضایت‌بخشی توصیف کند (حداقل ضریب همبستگی (R^2) و میانگین خطای مربع (MSE) به ترتیب برابر ۰/۹۹۱ و ۱۰/۲۲). مدل شبکه عصبی مصنوعی با پیکربندی ۱-۱۵-۳ سینتیک رهایش اسانس بومادران از فیلم ژلاتین-آلژینات سدیم را در تمام شبیه‌سازهای غذایی با ضریب همبستگی برابر ۰/۹۹۹ و میانگین خطای مربع برابر ۰/۵۶ پیش‌بینی کرد.

DOI: 10.52547/fsct.19.122.183

DOR: 20.1001.1.20088787.1401.19.122.1.4

* مسئول مکاتبات:

Zandi@znu.ac.ir

۱- مقدمه

آگاهی از انتشار ترکیبات فعال در سیستم غذایی، درک بهتری از سازوکارهای انتقال مواد نگهدارنده را فراهم می‌کند. بر این اساس، درک کامل خواص انتقال مواد فعال فیلم عامل تعیین کننده‌ای در توسعه بسته‌بندی‌های فعال مواد غذایی است. این امر به نوبه خود، به معنای درک صحیح از خواص عمومی و ریزساختاری فیلم- غذا است [۱]. بسته‌بندی فعال یکی از مهم‌ترین فناوری‌های مورد استفاده برای حفظ کیفیت مواد غذایی از طریق رهاسازی مواد فعال از بسته‌بندی است [۲]. با هدف کاهش مقدار کلی مواد نگهدارنده اضافه‌شده به ماده غذایی، ممکن است پوشش یا فیلم خوراکی به‌گونه‌ای طراحی شود که حاوی مواد موثره باشد و از آلودگی اولیه میکروارگانیسم‌ها در محصولات غذایی بسته‌بندی‌شده و واکنش‌های اکسیداتیو که معمولاً در سطح مواد غذایی رخ می‌دهد، جلوگیری کند [۳]. بسته‌بندی‌های فعال می‌توانند با آزاد کردن ترکیبات زیست‌فعال طی نگهداری، اکسیداسیون چربی و رشد میکروبی را در مواد غذایی کاهش [۴، ۵] و یا اثرات ضد میکروبی و ضد اکسایشی را افزایش دهد و این امکان را فراهم می‌آورند تا استفاده از مواد نگهدارنده شیمیایی در مواد غذایی کاهش یابد [۶، ۷]. آلزینات و ژلاتین در بین بیوپلیمرها علاوه بر خصوصیات تشکیل فیلم مناسب، به‌صورت تجاری نیز در دسترس هستند؛ این بیوپلیمرها غیر سمی، سازگار با محیط‌زیست، قابل تجزیه بیولوژیکی و دارای منابع پایدار می‌باشند [۴، ۸].

با اختلاط ترکیبات زیست‌فعال نظیر اسانس‌ها به مخلوط پلیمری، فیلم بسته‌بندی می‌تواند به‌عنوان مخزنی عمل کند که از آن ترکیبات به غذا وارد می‌شوند و فساد میکروبی، فیزیکی و شیمیایی را مهار یا سرکوب می‌کند؛ حضور اولیه ترکیبات زیست‌فعال در شبکه فیلم، به‌تنهایی حفاظت از غذا را تضمین نمی‌کند. سطح آن‌ها در شبکه فیلم و نرخ انتشار متغیرهای قابل توجهی در کنترل اثربخشی این ترکیبات در بسته‌بندی فعال است. وجود مقادیر کم از ترکیبات زیست‌فعال در فیلم یا نرخ انتشار کم، سبب کاهش یا عدم اثربخشی عوامل زیست‌فعال در ساختار فیلم برای محافظت از مواد غذایی می‌گردد؛ در حالی‌که وجود مقادیر زیاد یا نرخ رهایش سریع می‌تواند علاوه بر آسیب

به کیفیت مواد غذایی، منجر به تولید ترکیبات نامطلوب و از دست دادن ترکیبات زیست‌فعال شود [۹]. رهایش کنترل‌شده در حقیقت آزادسازی ترکیبات فعال محبوس‌شده در فیلم طی زمان نگهداری است تا از مقدار مواد نگهدارنده شیمیایی اضافه‌شده در غذا کاهش یابد. این عمل، فرآیند رهایش را توصیف می‌کند که در آن مواد به محیط یا غذا وارد می‌شوند [۱۰]. با توجه به ترکیب و آرایش شبکه فیلم، فیلم‌های فعال وظیفه آزادسازی عوامل موثره در محیط خارجی را بر عهده دارند. رهایش کنترل‌شده، انتشار تدریجی ماده ضد میکروبی و ضد اکسایشی را به سطح غذا کنترل می‌کند و با مقدار بالاتر در سطح باعث ماندگاری می‌شود و غلظت ترکیبات ضد میکروبی را در کل مواد غذایی کاهش می‌دهد [۱].

برای بررسی میزان آزادسازی ترکیبات فعال از بسته‌بندی به ماده غذایی نیاز به بررسی سازوکار و سرعت رهایش این ترکیبات است. اندازه‌گیری غلظت مواد انتشار یافته به غذا، متداول‌ترین روش برای اندازه‌گیری میزان رهایش ترکیبات فعال از بسته‌بندی فعال، در تماس با ماده غذایی است. با این حال، دلیل ساختار پیچیده مواد غذایی و نیز امکان ترکیب و واکنش ماده فعال رهایش‌شده با ماده غذایی معمولاً برای مطالعات رهایش به‌جای ماده غذایی از سیمولانت یا شبیه‌سازهای غذایی استفاده می‌گردد. شبیه‌سازهای غذایی خواص فیزیکی و شیمیایی مشابه مواد غذایی را دارند و رفتار آن‌ها را تقلید می‌کنند، با این تفاوت که امکان شناسایی و تعیین کمی مواد انتشار یافته و ترکیبات فعال از بسته‌بندی را فراهم می‌کنند [۱۱]. سازگاری بین ترکیبات زیست‌فعال و شبیه‌ساز غذایی، بارگذاری اولیه ترکیبات زیست‌فعال در بسته‌بندی و وزن مولکولی آنها، ضخامت فیلم، ساختار فیلم، محتوای نمک، ویسکوزیته و فعالیت آبی و دما متغیرهایی هستند که بیشترین تأثیر را در رهایش ترکیبات زیست‌فعال دارند [۹، ۱۲].

از مدل‌سازی به منظور بررسی نحوه رهایش ترکیبات فعال در سیستم غذایی و سازوکار آزادسازی این ترکیبات فعال از یک شبکه پلیمری در یک محیط شبیه‌ساز استفاده می‌گردد [۱، ۱۲]. مدل‌سازی ریاضی فرآیند رهایش به‌عنوان یکی از روش‌های مدل‌سازی، یک ابزار ارزشمند می‌باشد که براساس آن نمایه

1. Simulant

است [۲۸]. اجزای اصلی اسانس بومادران شامل کامفر^۴، میرتنول^۵، ۱۸-سینئول^۶، بورنتول^۷، کامفن^۸، آلفا-پینن^۹، بتا-پینن^{۱۰}، آلفا-توجن^{۱۱}، بتا-توجن^{۱۲}، سابینن^{۱۳}، بتا-اودسمول^{۱۴}، شامازولن^{۱۵} می‌باشد [۲۲، ۲۴، ۲۷، ۲۹]. هدف از انجام این مطالعه، بررسی فرایند رهایش اسانس بومادران از فیلم فعال ژلاتین- آلژینات سدیم حاوی در محیط شبیه‌سازی شده غذایی و مدل‌سازی این فرایند با استفاده از روش‌های ریاضی و شبکه عصبی مصنوعی می‌باشد.

۲- مواد و روش‌ها

۲-۱- مواد گیاهی و شیمیایی

گیاه بومادران خشک (*Achillea millefolium* L) پس از تأیید متخصص گیاهان دارویی از بازار محلی استان قزوین تهیه گردید؛ آلژینات سدیم، گلیسرول، استیک اسید و تئین ۸۰^{۱۴} از شرکت سیگما (آمریکا)، سولفات سدیم بدون آب از شرکت مرک و اتانول و نیترات منیزیم نیز از شرکت دکتر مجللی (ایران) خریداری شد.

۲-۲- استخراج اسانس

از سیستم تقطیر مقاومتی مجهز به بالن شیشه‌ای با حجم ۲۰۰۰ میلی‌لیتر و کلاونجر^{۱۵} استفاده گردید. ابتدا ۸۰ گرم اندام هوایی بومادران به نسبت ۱:۲۰ (وزنی/حجمی) با آب نمک با غلظت ۰/۷ درصد (وزنی/حجمی) مخلوط گردید و به مدت یک ساعت کاملاً خیسانده شد [۳۰]؛ پس از انداختن چند سنگ جوش در محفظه تیمار، فرایند استخراج در گرادیان ولتاژ برابر ۱۲/۹۷ ولت بر سانتی‌متر و زمان استخراج برابر ۸۶/۵ دقیقه انجام پذیرفت. اسانس استخراجی پس از حذف رطوبت اضافی با سولفات سدیم

ترکیبات زیست‌فعال از فیلم به سیستم غذا را می‌توان پیش‌بینی کرد. هدف اصلی مدل‌های ریاضی توصیف رهایش ترکیبات فعال (موثره) از فیلم‌های خوراکی به ماده غذایی (شبیه‌ساز غذایی) است؛ زیرا قادر به پیش‌بینی رضایت‌بخش تجربی می‌باشند. در مدل‌سازی تمام فرضیه‌های ساده‌سازی در نظر گرفته شده، کاملاً منطقی و از نظر فیزیکی مناسب هستند [۳، ۱۳]. با این‌حال، مدل‌های ریاضی برای فرایندهای پیچیده مانند رهایش بسیار دقیق نیستند و این درحالی است که روش‌های هوشمند مدل‌سازی نظیر شبکه عصبی مصنوعی (ANN) و سیستم استنتاج فازی-عصبی سازگار (ANFIS) ابزارهای قوی‌تری و موثرتری در مدل‌سازی شرایط پیچیده می‌باشند [۱۴]. انگیس یک مدل پیش‌بینی خوب و بسیار دقیق برای حالت‌هایی تنها با یک ورودی می‌باشد [۱۵]. با این‌حال، برای سیستم‌های با بیش از یک ورودی یا خروجی، شبکه عصبی مصنوعی گزینه بهتری می‌باشد [۱۶]. در مقایسه با مدل‌های ریاضی سنتی، زمان کمتری برای اجرای شبکه عصبی مصنوعی لازم است، توصیف ریاضی پدیده‌ها مورد نیاز نیست و برخی آزمایش‌ها برای توسعه مدل کافی است. در روش شبکه عصبی مصنوعی مانند بسیاری از روش‌های هوشمند دیگر از مجموعه داده‌های ورودی-خروجی برای مدل‌سازی سیستم‌های پیچیده استفاده می‌گردد [۱۴]. شبکه عصبی مصنوعی سیستم غیر خطی هستند که از سیستم عصبی بیولوژیکی الهام گرفته‌اند و قابلیت اطمینان و انعطاف‌پذیری بالایی دارند [۱۷].

بومادران (*Achillea millefolium* L.) از تیره آچیلاد که اثرات دارویی آن از نظر علمی اثبات شده است و گونه میلفولیوم آن دارای گل‌های سفید رنگ می‌باشد و عمدتاً حاوی ترکیب‌های فلاونوئیدی، آلکالوئیدها و تانن‌ها است [۱۸-۲۰]. این گیاه برای ترمیم زخم‌ها، درمان مشکلات گوارشی [۲۱]، کاهش عفونت‌های تنفسی و بهبود بیماری‌های پوستی، درمان بیماری‌های کبدی استفاده می‌شود و به‌عنوان آرام‌بخش ملایم، داروی ضدالتهاپی، ضد‌رماتیسم، ضداسپاسم، ضد‌عفونی‌کننده، تسکین‌دهنده، قابض^۲، هضم‌کننده و خلط‌آور کاربرد دارد [۲۲-۲۵]. همچنین دارای خاصیت ضداسکایشی [۲۲، ۲۶] و ضد میکروبی [۲۷] نسبتاً قوی

2. Antispasmodic
3. Astringent

4. Camphor
5. Mirtenol
6. 1,8-Cineole
7. Borneol
8. Camphene
9. α -pinene
10. α -thujone
11. Sabinene
12. β -eudesmol
13. Chamazulene
14. Tween
15. Clevenger

بررسی قرار گرفت [۳۲]. نمونه فیلم‌های فعال (۳ × ۳ سانتی‌متر) در ۵۰ میلی‌لیتر شبیه‌سازهای غذایی درون ویال شیشه‌ای ۱۰۰ میلی‌لیتری درب‌دار غوطه‌ور شد و آزمون رهایش در شرایط تاریکی و در دمای محیط (۲۵ درجه سلسیوس) انجام گردید. پس از آن، ۴ میلی‌لیتر از محلول‌های نمونه به‌صورت دوره‌ای و در زمان‌های از پیش تعیین‌شده (۰، ۱، ۲، ۴، ۶، ۸، ۱۰، ۲۴، ۴۸، ۷۲، ۹۶، ۱۴۴، ۱۶۸، ۱۹۲، ۲۱۶ و ۲۴۰ ساعت) نمونه‌گیری شد و مقدار اسانس بومادران آزاد شده از فیلم فعال با اندازه‌گیری میزان جذب آن توسط دستگاه طیف‌سنج نوری-فرابنفش در طول موج ۲۷۳ نانومتر به‌دست آمد [۳۳]. منحنی استاندارد با استفاده از جذب غلظت‌های مختلف مشخص شده اسانس بومادران در اتانول ۱۰ و ۸۵ درصد، استیک اسید ۳ درصد و آب مقطر در طول موج ۲۷۳ نانومتر تهیه شد. پس از هر اندازه‌گیری، نمونه برداشته‌شده دوباره به شبیه‌ساز غذایی اضافه شدند. سرانجام، سینتیک رهاسازی بر اساس مقدار آزاد شده در مدت زمان (ساعات) بدست آمد. تمام تجزیه‌وتحلیل‌ها در چهار تکرار با ویال‌های شیشه‌ای مختلف اندازه‌گیری شد [۱، ۱۳].

۲-۵-مدل‌سازی رهایش

۲-۵-۱-مدل‌سازی ریاضی

به‌منظور توصیف رفتار رهایشی ترکیبات به‌صورت کنترل‌شده از سیستم‌های پلیمری چه به‌صورت انتشار و چه به‌صورت تخریب باشد، می‌توان داده‌های رهایش از فیلم فعال را با روابط مختلف مدل نمود. ضرایب نفوذ^{۱۷} در سیستم‌های پلیمری را می‌توان با قرار دادن داده‌ها در برخی معادلات به‌دست آورد. مدل درجه صفر^{۱۸} [۳۴] مدلی خطی برای توصیف فرایند می‌باشد:

$$\frac{M_t}{M_{\infty}} = k_0 t \quad (\text{رابطه ۱})$$

که M_t ، M_{∞} و t به‌ترتیب برابر مقدار اسانس آزاد شده در زمان t ، مقدار اسانس آزاد شده در زمان بی‌نهایت، زمان رهایش و نرخ انتشار ثابت می‌باشند. مدل درجه یک^{۱۹} [۳۴] برابر است با:

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

بدون آب، تا زمان استفاده درون ویال شیشه‌ای تیره و در دمای ۱۸- درجه سلسیوس نگهداری شد [۳۱].

۲-۳-تهیه فیلم فعال ژلاتین - آلژینات سدیم

فیلم‌های خوراکی ژلاتین - آلژینات سدیم با استفاده از روش ریخته‌گری تهیه شد؛ برای این منظور ابتدا ۱۰۰ میلی‌لیتر محلول ۴ درصد (وزنی/حجمی) ژلاتین از طریق افزودن تدریجی ۴ گرم ژلاتین به آب مقطر تهیه گردید و محلول حاصل به مدت ۱۵ دقیقه در حمام آب‌گرم در دمای ۶۰ درجه سلسیوس هم‌زده شد. در ادامه دمای حمام آب‌گرم تا ۴۵ درجه سلسیوس کاهش یافت و ۰/۱۲ گرم آلژینات به مخلوط اضافه گردید و محلول ۳۰ دقیقه دیگر در دمای ۴۵ درجه سلسیوس هم‌زده شد. در ادامه، ۱/۲ گرم گلیسرول اضافه گردید و به مدت ۱۵ دقیقه بر روی هم‌زن مغناطیسی در دمای ۴۰ درجه سلسیوس هم‌زده شد. سپس اسانس استخراج شده با توئین ۸۰ (۳۰ درصد (وزنی/وزنی) نسبت به اسانس) به‌عنوان امولسی‌فایر به‌طور جداگانه مخلوط گردید و در سه سطح غلظتی ۱، ۲ و ۳ درصد به محلول اضافه شد و مخلوط با استفاده از هم‌زن مغناطیسی به مدت ۳۰ دقیقه در دمای ۴۰ درجه سلسیوس هم‌زده شد. سپس ۹ گرم از محلول در ظروف پتری‌دیش پلاستیکی با قطر ۹۰ میلی‌متر ریخته شد و در رطوبت نسبی ۶۰ درصد برای حدود ۴۸ ساعت در دمای محیط خشک گردید. در نهایت فیلم‌ها از صفحات ریخته‌گری جدا شد و قبل از تجزیه‌وتحلیل و آزمون‌های مدنظر برای مدت زمان ۴۸ ساعت در دمای ۲۵ درجه سلسیوس و رطوبت نسبی ۵۳ درصد در دسیکاتور حاوی محلول‌های اشباع نیترات منیزیم^{۱۶} قرار داده شد تا به تعادل رطوبتی برسد [۷]. فیلم با روش فوق و بدون افزودن اسانس به عنوان نمونه شاهد در نظر گرفته گردید.

۲-۴-آزمون رهایش

مهاجرت اسانس از فیلم‌های ژلاتین- آلژینات سدیم به مواد غذایی با استفاده از چهار شبیه‌ساز غذایی شامل شبیه‌ساز محیط آبی (آب)، شبیه‌ساز مواد غذایی الکلی توسط اتانول ۱۰ درصد (حجمی/حجمی)، شبیه‌ساز مواد غذایی اسیدی توسط استیک اسید ۳ درصد (حجمی/حجمی) و شبیه‌ساز مواد غذایی چرب متوسط تا زیاد توسط اتانول ۸۵ درصد (حجمی/حجمی) مورد

17. Diffusion coefficients

18. Zero-order

19. First-order

16. Saturated solutions of Magnesium nitrate (Mg(NO3)2)

که L و D به ترتیب برابر نصف ضخامت فیلم و ضریب انتشار می‌باشند. هنگامی که انتشار آرام است و در پایان آزمایش به تعادل نرسد، می‌توان از معادله زیر نیز استفاده نمود [۴۰، ۴۱]:

$$\frac{M_t}{M_{\infty}} = \frac{4}{2L} \left(\frac{Dt}{\pi} \right)^{0.5} \quad (\text{رابطه ۹})$$

۲-۵-۲- شبکه عصبی مصنوعی

یکی از مشکلات اصلی در پیش‌بینی و مدل‌سازی رهایش ترکیبات فعال از فیلم، دشواری دستیابی به مدلی است که نمایه و سرعت سینتیک رهایش را با توجه به متغیرهای فرایند و فرمولاسیون فیلم نشان دهد. شبکه عصبی مصنوعی را می‌توان یک سیستم هوشمند دانست که از چندین واحد محاسبه غیرخطی (نورون) تشکیل شده است که به‌طور موازی عمل می‌نمایند. بدین منظور در ابتدا سه ورودی غلظت اسانس در فیلم، نوع محیط رهایش (چهار شبیه‌ساز غذایی اسیدی، الکلی، آبی و چرب) و زمان و یک خروجی میزان رهایش تجمعی انتخاب گردید. پیاده‌سازی شبکه‌های عصبی پرسپترون چندلایه‌ای^{۲۷} در سه مرحله یادگیری، آزمایش و اعتبارسنجی انجام گرفت. داده‌های سینتیک رهایش به سه بخش تقسیم شدند و برای یادگیری (۷۵ درصد)، آزمایش (۱۵ درصد) و اعتبارسنجی (۱۰ درصد) استفاده شد. شبکه عصبی مصنوعی ابتدا از طریق ارزیابی متوسط خطای آزمون ناشی از پیش‌بینی رهایش تجمعی (درصد) اسانس از فیلم بهینه گردید. به این منظور، ابتدا از شبکه با یک لایه پنهان و تعداد نورون بین ۲۰-۳ و ۲۰۰۰ تکرار (چرخه آموزش) با تغییر در وزن‌ها و انحراف‌ها استفاده گردید و نمودار متوسط خطای آزمون به‌دست آمد تا تعداد تکراری که سبب حداقل خطای آزمون گردیده است، مشخص شود. مسیر مشابهی برای شبکه‌ای با دو و سه لایه پنهان طی گردید. برای مرحله آموزش از الگوریتم لونیگ-مارکوآت استفاده شد. انتخاب بهترین پیکربندی از طریق ترسیم نمودار رگرسیونی حاصل از داده‌های پیش‌بینی و داده‌های تجربی و اندازه‌گیری میزان ضریب تبیین و شیب نمودار حاصله انجام پذیرفت. پیکربندی با نزدیک‌ترین مقدار ضریب تبیین به ۱، به‌عنوان بهترین پیکربندی انتخاب شد. پس از انجام آزمایش و خطا، از توابع انتقال سیگموئید لگاریتمی و سیگموئید مماس

که k_1 برابر ثابت رهایش درجه یک می‌باشد. مدل کوپچا^{۲۰} [۳۵] به صورت رابطه ۳ است:

$$M_t = A \times t^{0.5} + B \times t \quad (\text{رابطه ۳})$$

که A و B برابر ثابت‌های رهایش کوپچا می‌باشند. مدل هیگوچی^{۲۱} برابر است با:

$$\frac{M_t}{M_{\infty}} = k_H t^{0.5} \quad (\text{رابطه ۴})$$

که k_H برابر ثابت رهایش هیگوچی می‌باشد. مدل کورسمیر-پپاس^{۲۲} یا رایتر-پپاس^{۲۳} [۳۶، ۳۷] به صورت زیر می‌باشد:

$$\frac{M_t}{M_{\infty}} = k_{KP} t^n \quad (\text{رابطه ۵})$$

که k_{KP} برابر ثابت رهایش کورسمیر-پپاس، n برابر نما رهایش کورسمیر-پپاس (خصوصیت نمایی انتشار مکانیسم رهایش) می‌باشد.

مدل ویبال^{۲۴} [۳۸] برابر است با:

$$\frac{M_t}{M_{\infty}} = 1 - e^{-\frac{-(t-T_i)^{\beta}}{\alpha}} \quad (\text{رابطه ۶})$$

که T_i برابر زمان تاخیر اندازه‌گیری شده توسط فرایند انحلال (اغلب برابر صفر می‌باشد)، β برابر توصیف‌کننده شکل پیشرفت منحنی انحلال، α برابر مقیاس زمانی فرایند می‌باشد. مدل هایگسون-کروول^{۲۵} [۳۸] از رابطه ۷ به‌دست می‌آید:

$$W_0^{1/3} - W_t^{1/3} = k_{HC} \times t \quad (\text{رابطه ۷})$$

که k_{HC} برابر ثابت رهایش هایگسون-کروول، W_0 و W_t به ترتیب برابر مقدار اولیه اسانس در فیلم (مقدار باقیمانده اسانس در زمان صفر) و مقدار باقی مانده اسانس در فیلم در زمان t می‌باشند. قانون دوم انتشار فیک^{۲۶} بر اساس دو فرضیه (۱) شرایط مرزی ثابت و (ب) توزیع همگن مولکول‌های مدل استوار شده است [۳۹، ۳۴]:

$$\frac{M_t}{M_{\infty}} = 1 - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{8}{(2n+1)^2 \pi^2} \exp\left(-\frac{(2n+1)^2 \pi^2}{4L^2} Dt\right)$$

20. Kopcha
21. Higuchi
22. Korsmeyer-Peppas
23. Ritger-Peppas
24. Weibull function
25. Hixson-crowell
26. Fick's second law of diffusion

27. Multi-layer perceptron

اول، رهاسازی اولیه پشت سر هم به دلیل غلظت بالای اسانس به دام افتاده در سطح پلیمرها رخ می‌دهد. پس از این مرحله، به دلیل کاهش غلظت و اختلاف غلظت اسانس در فیلم ژلاتین - آلژینات سدیم، سرعت انتشار اسانس کاهش می‌یابد و از این رو رهایش کند می‌گردد [۴۴]. طبق قانون فیک رهایش متناسب با اختلاف غلظت در سیستم است [۴۱]؛ در مرحله اولیه، در شبیه‌سازی غذایی هیچ اسانسی وجود ندارد. این باعث ایجاد شیب غلظتی زیادی بین فیلم فعال و شبیه‌سازی غذایی می‌شود (شکل‌های ۱ تا ۴) و منجر به درصد انتشار بالا در مرحله اولیه می‌شود. در طول مرحله انتشار، ضریب انتشار به دلیل افزایش غلظت اسانس در شبیه‌سازی غذا و کاهش غلظت اسانس در فیلم ژلاتین - آلژینات سدیم کاهش یافت.

همان‌طور که در شکل ۱ مشخص است در محیط آبی تقریباً ۱۰۰ درصد رهایش اسانس در ۴۸ ساعت اول صورت گرفته است. دلیل آن احتمالاً به حلالیت بالای ژلاتین در آب، تورم و تخریب اولیه شبکه پلیمری مرتبط می‌باشد. رهایش ترکیبات فعال محلول در آب از فیلم‌های پلیمری ارتباط نزدیکی با خصوصیات توری پلیمر مورد استفاده دارد [۴۵].

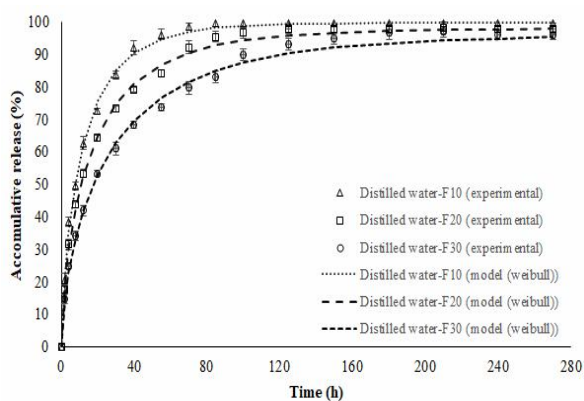


Fig 1 *In vitro* release profiles of yarrow essential oil from gelatin-sodium alginate active films incubated in watery food simulant (distilled water) as a function of time. F10: film contain 1% yarrow essential oil; F20: film contain 2% yarrow essential oil; F30: film contain 3% yarrow essential oil.

میزان تورم در فیلم به دلیل خاصیت آب‌دوستی ژلاتین افزایش می‌یابد. آزاد شدن سریع اسانس در محیط آبی می‌تواند به دلیل خاصیت آب‌دوستی ژلاتین باشد. دونگ و همکاران (۲۰۰۶) رهایش سیپروفلوکساسین هیدروکلراید از فیلم ژلاتین - آلژینات

هذلولی به ترتیب برای لایه پنهان و خروجی استفاده گردید. در نهایت اعتبارسنجی مدل با مجموعه‌ای از داده‌های دیگر انجام پذیرفت. جعبه ابزار شبکه عصبی نرم‌افزار متلب (R۲۰۱۹a، آمریکا) برای طراحی و آزمایش شبکه عصبی مصنوعی استفاده شد.

۲-۶- تجزیه و تحلیل آماری

ارزیابی و مقایسه مدل با کمک ضریب تبیین (R^2) و میانگین مربعات خطا (MSE^2) انجام شد [۳۴، ۳۹-۴۱]:

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

$$RMSE = \frac{\sum_{i=1}^n (O-P)^2}{n-p} \quad \text{(رابطه ۷)}$$

که O, P, n به ترتیب داده تجربی، داده پیش‌بینی شده، تعداد مشاهده و تعداد متغیرهای مدل است. رسم نمودارها و محاسبه نوار خطا^{۲۹} به ترتیب با کمک نرم‌افزارهای اکسل (نسخه ۲۰۱۶) و متلب (Matlab R2019a) صورت پذیرفت.

۳- نتایج و بحث

۳-۱- نمایه رهایش

نمایه (پروفایل)^{۳۰} انتشار اسانس بومادران از فیلم‌های فعال ژلاتین - آلژینات سدیم حاوی غلظت‌های مختلف اسانس بومادران در شکل‌های ۱ تا ۴ ارائه شده است. مهاجرت اسانس از فیلم‌های ژلاتین - آلژینات سدیم به مواد غذایی با استفاده از چهار شبیه‌سازی غذایی صورت گرفت [۳۲]. رهایش، مهاجرت یک ترکیب با وزن مولکولی کم از یک شبکه پلیمری متورم شده است که می‌تواند در نتیجه: (۱) انتشار از حلال بیرونی (شبیه‌سازی غذایی) به درون شبکه فیلم، (۲) تضعیف شدن شبکه ماکرومولکولی، (۳) انتشار ترکیبات فعال از شبکه پلیمری متورم‌شده به حلال بیرونی (شبیه‌سازی غذایی) صورت گیرد [۴۲].

درصد انتشار اسانس به ترکیب آن و قطبیت ناشی از شکل ساختاری ترکیبات سازنده و گروه‌های عملکردی آن دارد [۴۳]. رهایش به‌طور معمول دارای دو مرحله است. در طول ساعت

28. Mean Square Error
29. Error bar
30. Profile

و با تبدیل ژلاتین به پلیمر پلی‌الکترولیت، موجبات نفوذ عمیق‌تر حلال و انحلال سریع‌تر ژلاتین را پدید می‌آورد [۴۸]. در محیط الکلی (شکل ۳، اتانول ۱۰ درصد) در ۴۰ ساعت اول نیز حدود ۵۰ درصد رهایش اسانس رخ داد که تقریباً مشابه محیط اسیدی بود. از آنجایی که هر دو محیط اسیدی و الکلی قطبیت تقریباً یکسانی دارند، رهایش تقریباً یکسانی را نشان دادند. در مقابل، انتشار ناقص اسانس در محیط چرب (شکل ۴، اتانول ۸۵ درصد) صورت گرفت به طوری که فقط ۴۵ درصد رهایش اسانس از فیلم ژلاتین- آلژینات سدیم در پایان ۱۰ روز مشاهده شد. قطبیت بیشتر و غلظت کمتر شبیه‌ساز محیط الکلی (اتانول ۱۰ درصد) نسبت به شبیه‌ساز غذاهای چرب (اتانول ۸۵ درصد) سبب هیدراتاسیون^{۳۱} بیشتر فیلم پلیمری و تضعیف پلیمر می‌گردد [۴۹]. در نتیجه سرعت رهایش در شبیه‌ساز محیط الکلی بیشتر از شبیه‌ساز مواد غذایی چرب می‌باشد و در نتیجه استفاده از فیلم ژلاتین- آلژینات سدیم حاوی اسانس بومادران در مواد غذایی الکلی که عمر انبارمانی پایین و سرعت فساد بالایی دارند مناسب است تا رهایش اسانس بومادران به سرعت و در مراحل اولیه صورت گیرد. به طور کلی، رهایش اسانس بومادران از فیلم فعال ژلاتین- آلژینات سدیم به محیط روغنی کند است.

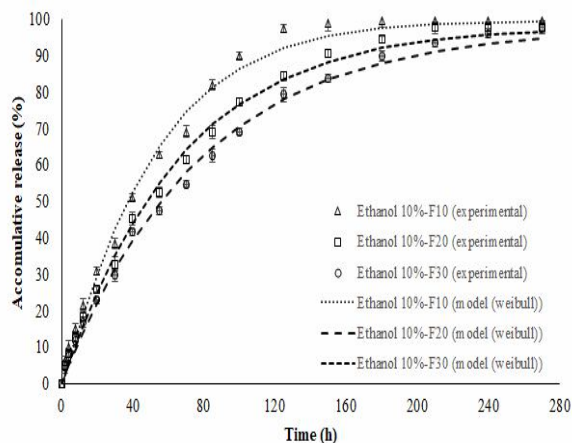


Fig. 3. In vitro release profiles of yarrow essential oil from gelatin-sodium alginate active films incubated in alcoholic food simulant (ethanol 10%) as a function of time. F10: film contain 1% yarrow essential oil; F20: film contain 2% yarrow essential oil; F30: film contain 3% yarrow essential oil.

سدیم را بررسی کردند و گزارش دادند که با افزایش محتوای ژلاتین در فیلم، سرعت و مقدار رهایش افزایش می‌یابد [۴۶]. از آنجا که ژلاتین نوعی ماکرومولکول محلول در آب است، زمانی که حل می‌شود فیلم را ترک می‌کند که این امر رهایش و انتشار ماده فعال را از شبکه فیلم تسریع می‌کند [۴۶]. اما در همان محیط آبی با افزایش غلظت اسانس حدود ۸۰ درصد از رهایش ظرف ۴۸ ساعت صورت گرفت و ۲۰ درصد باقیمانده طی ۱۰ روز به آرامی آزاد گردید. رهایش اولیه می‌تواند به توزیع ماده فعال در پلیمر مرتبط باشد، در حالی که انتشار آهسته را می‌توان به مقدار ماده فعال بارگذاری شده در پلیمر نسبت داد [۴۷]. در محیط اسیدی (شکل ۲، استیک اسید ۳ درصد) در ۴۰ ساعت اول حدود ۵۵ درصد رهایش بومادران از فیلم ژلاتین- آلژینات سدیم صورت گرفت که در مقایسه با محیط آبی رهایش کم‌تری داشته است و تا ۱۶۰ ساعت رهایش روند رو به افزایشی داشت و پس از آن تقریباً به تعادل رسید.

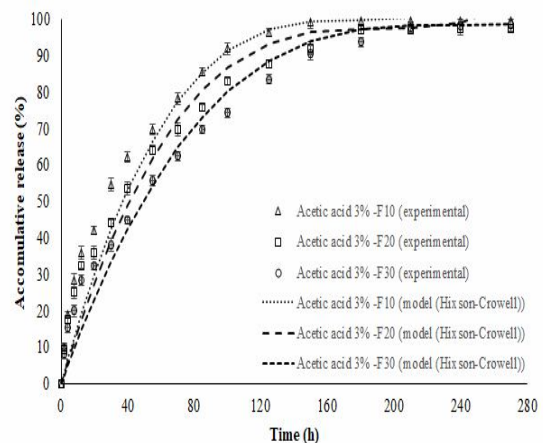


Fig 2 In vitro release profiles of yarrow essential oil from gelatin-sodium alginate active films incubated in acidic food simulant (acetic acid 3%) as a function of time. F10: film contain 1% yarrow essential oil; F20: film contain 2% yarrow essential oil; F30: film contain 3% yarrow essential oil.

رهایش بیشتر اسانس بومادران از فیلم در شرایط اسیدی به حالیت بالای ژلاتین نسبت داده می‌شود؛ حضور ژلاتین در محیط‌های بازی یا اسیدی سبب ایجاد بارهای سطحی (در محیط بازی، بار منفی و در محیط اسیدی، بار مثبت می‌گیرد) می‌گردد

که می‌تواند توسط مایع (مانند آب) صورت گیرد. مولکول‌ها یا ترکیبات قطبی به احتمال زیاد در شبکه پلی‌ساکارید پخش می‌شوند و باعث بزرگ شدن منافذ فیلم می‌شوند که در نتیجه آن انتشار عامل باکتریواستاتیک از شبکه پلی‌ساکارید تسهیل می‌گردد. از آنجا که اتانول ۱۰ درصد قطبیت بیشتری نسبت به اتانول ۹۵ درصد دارد به راحتی می‌تواند شبکه فیلم پلیمری ضد باکتری را تضعیف کند. هنگامی که قطبیت شبیه‌ساز غذایی با مواد بسته‌بندی متفاوت است، برهم‌کنش بین دو فاز حداقل است و بنابراین رهایش کند می‌گردد [۴۹]. رضایی و همکاران (۲۰۱۸) به مطالعه رهایش گالیک اسید از فیلم‌های کامپوزیت کیتوزان-ژلاتین به شبیه‌ساز غذای چرب پرداختند. در این پژوهش گالیک اسید به دو صورت آزاد و درون‌پوشانی شده با استفاده از روش‌های مختلف از جمله افزودن ساده، مخلوط با دو غلظت توئین ۸۰ (۵۰ و ۱۰۰ درصد)، مخلوط با اتانول و مخلوط با بتا-سیکلودکسترین به فیلم‌ها اضافه گردید؛ این محققان به این نتیجه رسیدند که حداقل میزان رهایش از فیلم ترکیبی کیتوزان-ژلاتین-گالیک اسید و اتانول در شبیه‌ساز غذایی (اتانول ۹۶ درصد) صورت گرفت که دلیل آن را توزیع مناسب گالیک اسید در حضور اتانول به عنوان حلال توضیح داده شد [۱۲].

همان‌طور که در شکل‌های ۱ تا ۴ مشاهده می‌شود، با افزایش غلظت اسانس در فیلم ژلاتین-آلژینات سدیم، میزان رهایش کاهش می‌یابد. ونگ و دو نیز اشاره نمودند که با افزایش غلظت مواد فعال بارگذاری شده، سرعت رهایش آن کاهش می‌یابد. بنابراین می‌توان با افزایش مقدار بارگذاری ماده فعال، رهایش مداوم‌تری داشت [۴۶]. زید و همکاران نیز در سال ۲۰۱۹ در بررسی نمایه رهایش اسانس‌های آویشن، رزماری و پونه کوهی از فیلم‌های پلی‌لاکتیک اسید به نتایج مشابهی دست یافتند. نتایج پژوهش آنها نشان داد که سرعت رهایش از فیلم‌های پلی‌لاکتیک اسید در شبیه‌سازهای غذایی آبی به‌طور معنی‌داری بیشتر از شبیه‌ساز غذاهای چرب (ایزوکتان) است ($p < 0.05$) [۵۲]. سرعت رهایش با ضخامت فیلم نیز مرتبط است، ضخامت فیلم‌های ساخته شده تغییر چندانی نداشت و بین ۰/۰۴-۰/۰۵ میلی‌متر متغیر بود. ممکن است هیدراتاسیون سریع فیلم نازک باعث رهایش سریع ترکیبات فعال در همان ابتدای فرآیند شود و سرعت انتشار ترکیبات به شبیه‌ساز را افزایش دهد و این در حالی

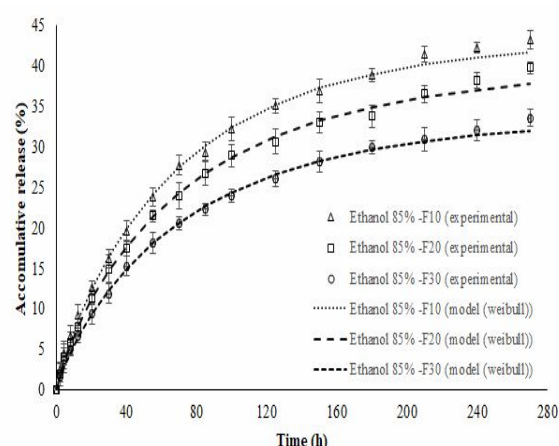


Fig 4 In vitro release profiles of yarrow essential oil from gelatin-sodium alginate active films incubated in fatty food simulant (ethanol 85%) as a function of time. F10: film contain 1% yarrow essential oil; F20: film contain 2% yarrow essential oil; F30: film contain 3% yarrow essential oil.

محیط رهایش (شبیه‌سازهای مختلف غذایی) بر میزان رهایش مواد فعال از محیط فیلم موثر است و تفاوت‌ها به اصل "مانند محلول‌های مشابه"^{۳۳} نسبت داده می‌شود [۵۰]. در مطالعه صورت گرفته توسط چن و همکاران (۲۰۱۲) در خصوص اثرات دما بر رهایش اوژنول و ایزوژنول از فیلم‌های جدا شده پروتئین سویا به شبیه‌ساز مواد غذایی چرب، نشان داده شده است که تفاوت بین قطبیت شبیه‌ساز غذا و قطبیت فیلم بسته‌بندی می‌تواند بر انتشار عامل باکتریواستاتیک^{۳۳} تأثیر بگذارد [۵۱]. لیو و همکاران (۲۰۱۷) در مطالعه خود در خصوص رهایش کنترل‌شده پلی‌فنول چای از فیلم‌های ژلاتینی با نسبت‌های مختلف پلی‌فنول‌های چای آزاد و درون‌پوشانی شده در شبیه‌سازهای غذای چرب (اتانول ۵۰ و ۹۵ درصد) گزارش کردند که در هر شبیه‌ساز، همه فیلم‌ها نمایه انتشار مشابهی داشتند که شامل انتشار سریع اولیه و به دنبال آن انتشار آهسته پایدار بود؛ آنها به این نتیجه رسیدند که میزان آزادسازی پلی‌فنول چای بستگی به مقدار پلی‌فنول چای آزاد موجود در شبکه ژلاتین دارد که این میزان نیز به راندمان درون‌پوشانی مربوط است [۳۲]. کی و همکاران (۲۰۱۹) در مطالعه خود بیان کردند که انتشار اولیه عامل باکتریواستاتیک از فیلم نشاسته ضدباکتری مستلزم تضعیف شبکه ساختاری است،

32. "like dissolves like"
33. Bacteriostatic

مشخصات رهایش اسانس بومادران از طریق برازش مدل‌های درجه صفر، درجه یک، کوپچا، کورسمیر-پپاس، هیگوچی، ویبال و هایگسون-کروول بر داده‌های تجربی رهایش در محیط‌های شبیه‌ساز شده آبی، الکلی، اسیدی و چرب مورد ارزیابی قرار گرفت. ثابت‌های رهایش و متغیرهای ارزیابی مدل‌ها (ضریب تبیین (R^2) و میانگین مربعات خطا (MSE)) برای مدل‌های سینتیکی مختلف در جدول ۱ نشان داده شده است.

است که با افزایش ضخامت فیلم انحلال و آب‌گیری آن کاهش می‌یابد که این امر سبب کاهش سرعت رهایش ترکیبات فعال از ساختار فیلم می‌گردد [۱۱].

۳-۲- مدل‌سازی ریاضی

۳-۲-۱- سینتیک رهایش

مدل‌های سینتیکی ریاضی یکی از ابزار مهم در درک سینتیک رهایش ماده فعال از فیلم فعال می‌باشد [۵۳]. در پژوهش حاضر

Table 1 Kinetic parameters and statistical values of various mathematical models.

Release condition	Ethanol 85% (Fatty Food)			Acetic acid 3% (Acidic food)			Ethanol 10% (Alcoholic Food)			Distilled water		
	Film	F10	F20	F30	F10	F20	F30	F10	F20	F30	F10	F20
Zero-order model												
k_0	0.0213	0.0191	0.0162	0.0532	0.0499	0.0475	0.0574	0.0556	0.0531	0.0543	0.0514	0.05
R^2	0.856	0.863	0.865	0.773	0.847	0.887	0.443	0.54	0.663	0.718	0.787	0.852
MSE	34.06	26.05	18.53	348.45	212.47	145.34	584.88	481.6	354.69	362.57	254.27	179.88
First-order model												
k_1	0.0145	0.0135	0.0136	0.0192	0.0152	0.0129	0.0804	0.057	0.0356	0.0262	0.0207	0.0161
R^2	0.997	0.995	0.996	0.994	0.997	0.996	0.988	0.981	0.979	0.989	0.987	0.987
MSE	0.81	1.01	0.56	9.94	4.6	4.73	12.85	19.87	22.17	13.93	14.92	15.36
Kopcha model												
A	0.2918	0.2608	0.2213	0.7371	0.6808	0.6439	0.85	0.8116	0.7612	0.768	0.7187	0.6891
B	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001
R2	0.978	0.981	0.982	0.931	0.969	0.984	0.69	0.78	0.876	0.91	0.949	0.977
MSE	4.94	3.46	2.40	105.60	43.11	20.39	325.65	230.38	130.27	115.31	60.76	28.33
Korsmeyer- Peppas model												
k_{kp}	0.0825	0.0783	0.0777	0.1033	0.0746	0.06	0.3842	0.3149	0.2325	0.171	0.1371	0.0984
n	0.4593	0.4642	0.4666	0.4321	0.4855	0.5186	0.1927	0.2279	0.2808	0.338	0.3744	0.4312
R^2	0.983	0.985	0.986	0.943	0.971	0.983	0.891	0.925	0.958	0.955	0.974	0.984
MSE	3.903	2.762	1.946	87.15	40.82	21.68	114.79	78.66	43.92	57.15	31.43	19.29
Higuchi model												
k_H	0.2918	0.2608	0.2213	0.7371	0.6808	0.6439	0.85	0.8116	0.7612	0.768	0.7187	0.6891
R^2	0.979	0.982	0.983	0.931	0.969	0.984	0.691	0.781	0.877	0.91	0.949	0.977
MSE	4.94	3.46	2.40	105.97	42.9	20.27	325.17	229.91	129.87	114.9	60.45	28.14
Weibull function												
A	40.37	37.85	39.90	71.03	74.63	76.38	6.6	7.28	9.59	17.95	20.98	31.38
B	0.8742	0.8439	0.8577	1.0779	1.0297	0.9964	0.746	0.6904	0.681	0.7969	0.7894	0.8372
R^2	0.998	0.997	0.998	0.994	0.997	0.996	0.998	0.998	0.996	0.994	0.991	0.988
MSE	0.53	0.53	0.32	8.54	4.36	4.75	2.55	2.53	3.69	7.69	10.22	14.4
Hixson-Crowell model												
K_{HC}	0.0064	0.0058	0.0055	0.0109	0.0088	0.0075	0.0133	0.013	0.0124	0.0121	0.0112	0.0092
R^2	0.992	0.988	0.991	0.997	0.998	0.997	0.789	0.873	0.944	0.978	0.986	0.988
MSE	1.88	2.35	1.30	4.84	2.74	3.59	221.81	133.3	59.31	27.65	17.19	14.95

شبهه‌ساز غذای به‌جزه اسیدی رهایش به‌صورت سهموی با شیب اولیه بالا و پس از آن به‌صورت نمایی است و سازوکار رهایش نیز در محیط چرب و آبی ترکیبی از انتشار فیک و انتشار پیچیده می‌باشد، اما در محیط اسیدی سازوکار انتشار پیچیده و در محیط الکلی از نوع انتشار فیک می‌باشد. مدل درجه اول هم نیز به‌مانند مدل ویبال توانست سینتیک رهایش برای کلیه محیط‌های شبهه-ساز غذای با ضریب تبیین بالای ۰/۹۸ مدل‌سازی نماید. مدل درجه اول، یک مدل ریاضی است، که انتشار ترکیبات بارگذاری شده از ساختارهای متخلخل را توصیف می‌کند [۵۴].

در مدل کورسمیر-پیاس یا رایتر-پیاس، سازوکار انتشار با مقادیر n یا نما رهایش تعیین می‌شود؛ برای $n \leq 0/45$ سازوکار انتشار فیک، $n = 0/89$ نشان دهنده سازوکار انتشار پیچیده (نفوذ، تورم و فرسایش همزمان) و $n < 0/89$ مربوط به سینتیک انتشار ترکیبی از انتشار فیک و انتشار پیچیده (نفوذ غیر فیکی) می‌باشد [۵۵]. در مواردی که سازوکار اصلی انتشار ترکیبی از انتقال فیک (انتشار) و غیر فیک است، معادله کورسمیر-پیاس بهترین مدل نیمه تجربی ساده برای توضیح مشخصات انتشار خواهد بود [۵۶]. در مطالعه حاضر، برای شبهه‌سازهای غذایی آبی و الکلی (اتانول ۱۰ درصد) $n \leq 0/45$ است و در نتیجه انتشار از نوع فیک و برای رهایش در شبهه‌سازهای غذای اسیدی (استیک اسید ۳ درصد) و چرب (اتانول ۸۵ درصد) $n < 0/89$ در نتیجه از نوع ترکیبی از انتشار فیک و پیچیده می‌باشد. در مدل هایگسون-کروول ثابت رهایش (K_{HC}) است که رابطه حجم-سطح را توصیف می‌کند. با توجه به ضریب تبیین بالای ۰/۹۸ در محیط شبهه‌ساز چرب، اسیدی و آبی می‌توان تفسیر کرد که تغییر در سطح فیلم در طول فرآیند رهایش تأثیر قابل توجهی بر انتشار مواد فعال دارد [۵۳]. به گفته دیاس و همکاران (۲۰۱۸)، ثابت رهایش هایگسون-کروول (K_{HC}) بیانگر ویژگی‌های ساختاری و هندسی شبکه است [۵۷]. با این حال، مطالعاتی وجود ندارد که تأثیر ثابت رهایش (K_{HC}) را بر روند انتشار مرتبط کنند. مدل کوپچا، بر اساس انتشار ترکیبات زیست فعال از یک سیستم رهایش و تحویل توسط سازوکارهای انتشار یا فرسایش است [۵۸]. همانطور که در جدول ۱ نشان داده شده است، در مدل کوپچا، نسبت A/B بیشتر از ۱ است که

بر اساس معیارهای ارزیابی، انتخاب بهترین مدل برای توصیف انتشار مواد فعال از شبکه پلیمری فیلم تولید شده بر اساس بیشترین ضریب تبیین و کمترین میانگین مربعات خطا انجام گردید. نتایج نشان داد که همه مدل‌ها به‌غیر از مدل درجه صفر ضریب تبیین بالای ۰/۹۳ درصد در برازش داده‌های تجربی داشتند و از این‌رو به‌غیر از مدل درجه صفر سایر مدل‌های سینتیکی مورد استفاده می‌توانند فرایند رهایش اسانس بومادران از فیلم ژلاتین-آلژینات سدیم را با دقت بالایی مدل‌سازی و پیش‌بینی نمایند. مدل درجه صفر بیشتر برای توصیف رهایش خطی و مداوم ماده فعال از شبکه پلیمری مورد استفاده قرار می‌گیرد، به‌طوری که میزان ماده فعال رهایش‌یافته طی زمان رهایش ثابت بماند [۵۳]؛ نتایج برازش داده‌های رهایش در این پژوهش نشان داد که سینتیک رهایش اسانس بومادران از شبکه فیلم ژلاتین-آلژینات سدیم در هر ۴ محیط شبهه‌سازی شده دارای روند غیر خطی است که این امر در نمایه تجربی رهایش اسانس در این محیط‌ها (شکل ۱ تا ۴) کاملاً مشهود است. نتایج نشان داد که مدل ویبال توانست سینتیک انتشار اسانس بومادران در محیط‌های شبهه‌ساز چرب، الکلی و آبی را با ضریب تبیین بیش از ۰/۹۸۸ مدل‌سازی نماید و اگرچه این مدل برای پیش‌بینی رهایش اسانس بومادران در محیط شبهه‌سازی شده اسیدی موفق عمل نمود (ضریب تبیین بیش از ۰/۹۹۴) ولی مدل هایگسون-کروول با ضریب تبیین بیش از ۰/۹۹۶ دقیق‌تر عمل نمود. در مدل ویبال، مقدار متغیر β شکل منحنی رهایش یا انحلال را مشخص می‌نماید؛ شکل منحنی رهایش زمانی که مقدار β برابر یک، بیشتر از یک و کمتر از یک است نیز به‌ترتیب به‌صورت نمایی، سیگموئید یا S شکل با انحنای رو به بالا و پس از آن یک نقطه چرخش و سهموی با شیب اولیه بالا و پس از آن به‌صورت نمایی می‌باشد.

اگر مقدار β کمتر از ۰/۷۵ و بیشتر از ۱ باشد، نشان‌دهنده این است که رهایش ماده فعال از فیلم به‌ترتیب از طریق سازوکار انتشار فیک و انتشار پیچیده (نفوذ، تورم و فرسایش همزمان) هدایت می‌گردد. برای مقادیر β بین ۰/۷۵ تا ۱، رهایش ماده فعال با سازوکاری ترکیبی از انتشار فیک و انتشار پیچیده پیروی می‌نماید [۳۸]. بر این اساس شکل منحنی رهایش اسانس بومادران از فیلم ژلاتین-آلژینات سدیم در همه محیط‌های

ضرب انتشار سرعت انتقال ترکیبات فعال از شبکه پلیمری به محیط اطراف را تعیین می‌کند [۵۹]. تفاوت بین ضرب انتشار می‌تواند به میل ترکیبی اسانس با شبکه فیلم، خواص ترکیبات فعال اسانس، حلالیت اسانس، خصوصیات فیلم (پلیمرهای بسته‌بندی) و عوامل محیطی (شبیه‌سازهای مختلف غذایی) مربوط باشد [۶۰]. تخریب پلیمر بر رهائش اسانس و نیز ضرب انتشار تأثیر می‌گذارد [۳۴].

نشان‌دهنده غالب بودن پدیده انتشار (رفتار فیک) در انتشار اسانس بومادران در همه محیط‌ها است.

۳-۲-۱- ضرب انتشار

با برازش قانون دوم انتشار فیک، ضرب انتشار (D) اسانس بومادران منتشر شده از فیلم‌های ژلاتین-آلژینات سدیم به محیط‌های آب مقطر، اتانول ۱۰ درصد (شبیه‌ساز غذایی الکلی)، اسید استیک ۳ درصد (شبیه‌ساز غذایی اسیدی) و اتانول ۸۵ درصد (شبیه‌ساز غذایی چرب) محاسبه گردید (جدول ۲).

Table 2 Diffusion Coefficient (D) of yarrow essential oil released from gelatin-sodium alginate films into distilled water, ethanol 10% (alcoholic food simulant), acetic acid 3% (acidic food simulant), and ethanol 85% (fatty food simulant).

	F30	F20	F10
Distilled water	1.650	1.380	1.060
Acetic acid 3% (Acidic food)	0.495	0.443	0.362
Ethanol 10% (Alcoholic food)	0.298	0.239	0.181
Ethanol 85% (Fatty food)	0.048	0.043	0.036

عصبی مصنوعی گردید؛ از ۱۹۲ داده حاصل از ۴ محیط و ۳ تکرار با ۱۶ نقطه زمانی، تعداد ۱۴۴ داده برای آموزش شبکه استفاده شد. ۴۸ داده باقیمانده نیز صرف آزمون (۲۹ داده) و اعتبارسنجی (۱۹ داده) شبکه توسعه داده گردید. برای بهینه‌سازی شبکه عصبی مصنوعی، سه متغیر ورودی زمان، نوع محیط و غلظت اسانس در فیلم که تأثیر مستقیم بر رهائش دارند به عنوان نوروها در لایه ورودی انتخاب گردید؛ نتایج حاصل از ۱۰ پیکربندی منتخب در جدول ۳ نشان داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، این شبکه توانست خطای نسبی را به مقدار زیادی کاهش دهد. نتایج مشخص نمود که شبکه عصبی مصنوعی با پیکربندی ۱-۱۵-۱۷-۳ یعنی شبکه‌ای با سه ورودی، دو لایه پنهان با ۱۷ و ۱۵ نورو و یک لایه خروجی توانست فرایند رهائش اسانس از فیلم را با دقت بالایی پیش‌بینی نماید. ضرب تبیین و میانگین مربعات خطا این پیکربندی به ترتیب برابر ۰/۹۹۹ و ۰/۵۶ بود که نشان‌دهنده نزدیکی داده‌های تجربی و پیش‌بینی است. این نتیجه قابلیت مدل شبکه عصبی مصنوعی توسعه یافته را برای پیش‌بینی نمایه رهائش اسانس از فیلم‌های فعال را نشان می‌دهد، که می‌تواند در مطالعات آتی در آزمون‌های تجربی سبب صرفه‌جویی در زمان و محصول گردد.

طبق جدول ۲، با افزایش آب دوستی شبیه‌ساز غذای (اتانول ۸۵ درصد > اتانول ۱۰ درصد > استیک اسید ۳ درصد > آب مقطر) ضرب انتشار افزایش یافته است که این رفتار با توجه افزایش سرعت رهائش با تشدید میزان آب موجود در محیط و نیز خصوصیت آب دوستی فیلم انتظار می‌رفت. در مطالعه صورت گرفته توسط ماندال و همکاران (۲۰۰۹) مشخص گردید که ضرب انتشار با افزایش محتوای ژلاتین افزایش یافت [۳۹]. بنابراین بدلیل خاصیت آب‌دوستی ژلاتین موجود در فیلم فعال ژلاتین-آلژینات سدیم و جذب بیشتر آب در محیط شبیه‌سازی آبی و اسیدی و به دنبال آن تورم و تخریب پلیمر، ضرب انتشار در این دو محیط بیشتر بوده است. علاوه بر این، وجود رطوبت بیشتر در محیط اتانول ۱۰ درصد نسبت به اتانول ۸۵ درصد منجر به جذب آب بیشتر فیلم در این محیط می‌گردد که این امر سبب افزایش ضرب انتشار می‌شود. نتایج نشان داد که افزایش غلظت اسانس بومادران منجر به کاهش سرعت رهائش گردید (جدول ۲). علت این امر را می‌توان به کاهش خاصیت آب‌دوستی فیلم با افزایش میزان اسانس نسبت داد.

۳-۳- شبکه عصبی مصنوعی

بخش زیادی از داده‌های تجربی صرف آموزش و توسعه شبکه

الکی در ۴۰ ساعت اول حدود ۵۵ درصد رهایش بومادران از فیلم ژلاتین- آلژینات سدیم صورت گرفت که در مقایسه با محیط آبی رهایش کم‌تری داشت. از آنجائی‌که هر دو محیط اسیدی و الکی قطبیت تقریباً یکسانی دارند، رهایش تقریباً یکسانی را نشان دادند. انتشار ناقص اسانس در محیط چرب (۴۵ درصد در پایان ۱۰ روز) مرتبط با قطبیت کمتر آن است که منجر به هیدراتاسیون کندتر فیلم می‌گردد. نتایج مدل‌سازی ریاضی نشان داد که همه مدل‌ها به‌غیر از مدل درجه صفر ضریب تبیین بالای ۹۳ درصد در برازش بر داده‌های تجربی رهایش اسانس داشتند و تنها مدل درجه صفر به‌سبب غیرخطی بودن رهایش اسانس بومادران از فیلم فعال ژلاتین- آلژینات سدیم نتوانست با دقت بالایی رهایش را مدل‌سازی نماید. مدل ویبال در بین مدل‌ها بهترین عملکرد را داشت؛ نتایج مدل‌سازی با شبکه عصبی مصنوعی نشان از موفقیت این مدل با پیکربندی ۱-۱۵-۱۷-۳ در پیش‌بینی نمایه رهایش اسانس داشت (با ضریب تبیین و میانگین مربعات خطا این پیکربندی به‌ترتیب برابر ۰/۹۹۹ و ۰/۵۶). نمایه انتشار اسانس بومادران از فیلم‌های فعال ژلاتین- آلژینات سدیم نشان داد که به دلیل بالا بودن خاصیت هیگروسکوپی فیلم ژلاتین- آلژینات سدیم بهتر است که در بسته‌بندی غذاهای چرب استفاده شود.

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*) 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] Remedio, L.N., et al., Characterization of active chitosan films as a vehicle of potassium sorbate or nisin antimicrobial agents. *Food Hydrocolloids*, 2019. 87: p. 830-838.

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

Network topology	MSE	R ²
3-6-1	3.928	0.983
3-10-1	2.34	0.988
3-13-1	2.77	0.986
3-7-5-1	2.49	0.988
3-11-9-1	1.02	0.994
3-12-10-1	0.85	0.996
3-17-15-1	0.56	0.999
3-19-18-1	0.93	0.996
3-10-9-9-1	2.11	0.989
3-12-11-11-1	1.65	0.992

نمودار همبستگی برای داده‌های تجربی و پیش‌بینی‌شده رهایش اسانس از فیلم ترسیم شد (شکل ۵) و نزدیک بودن نقاط به نیم‌ساز نشان‌دهنده برازش کامل داده‌ها و تطابق کامل بین داده‌های تجربی و پیش‌بینی می‌باشد. این نتیجه خود تصدیق‌کننده توانایی شبکه عصبی مصنوعی به عنوان ابزار پیش‌بینی می‌باشد.

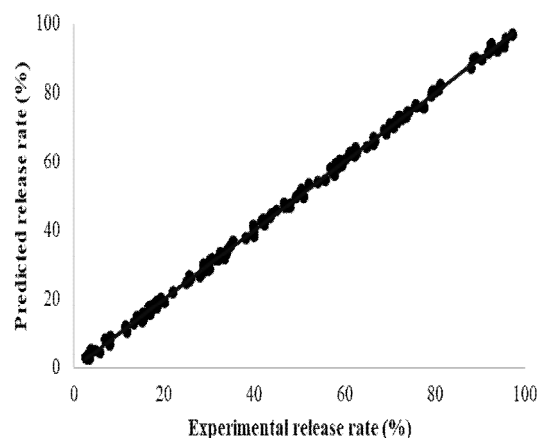


Fig 5 Dispersion curve for the measured and the predicted values of cumulative release (%).

۴- نتیجه‌گیری

انتشار اسانس از فیلم‌های ژلاتین- آلژینات سدیم به مواد غذایی به چهار شبیه‌ساز غذایی شامل شبیه‌ساز محیط آبی، الکی، اسیدی و چرب مورد بررسی قرار گرفت. نتایج نشان داد که در محیط آبی تقریباً ۱۰۰ درصد رهایش اسانس در ۴۸ ساعت اول صورت گرفت. دلیل آن احتمالاً به حلالیت بالای ژلاتین در آب، تورم و تخریب اولیه شبکه پلیمری مرتبط می‌باشد؛ در محیط اسیدی و

- food and a food simulant. *Packaging Technology and Science*, 2017. 30(12): p. 791-798.
- [12] Rezaee, M., et al., Effect of organic additives on physiochemical properties and anti-oxidant release from chitosan-gelatin composite films to fatty food simulant. *International journal of biological macromolecules*, 2018. 114: p. 844-850.
- [13] Gomaa, M., et al., Use of the brown seaweed *Sargassum latifolium* in the design of alginate-fucoidan based films with natural antioxidant properties and kinetic modeling of moisture sorption and polyphenolic release. *Food Hydrocolloids*, 2018. 82: p. 64-72.
- [14] Lefnaoui, S., et al., Artificial neural network for modeling formulation and drug permeation of topical patches containing diclofenac sodium. *Drug delivery and translational research*, 2020. 10(1): p. 168-184.
- [15] Rebouh, S., et al., Neuro-fuzzy modeling of ibuprofen-sustained release from tablets based on different cellulose derivatives. *Drug delivery and translational research*, 2019. 9(1): p. 162-177.
- [16] Lefnaoui, S., et al. Artificial neural network modeling of sustained antihypertensive drug delivery using polyelectrolyte complex based on carboxymethyl-kappa-carrageenan and chitosan as prospective carriers. in 2018 International conference on applied smart systems (ICASS). 2018. IEEE.
- [17] 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.
- [18] 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.
- [19] Ahmadi, D.A., et al., Comparison of Essential Oil of *Achillea millefolium* with Chemical Antioxidants and Preservatives. 2019.
- [20] Ijaz, F., et al., *Yarrow*, in *Medicinal Plants of South Asia*. 2020, Elsevier. p. 685-697.
- [2] Tonyali, B., et al., Release kinetics of cinnamaldehyde, eugenol, and thymol from sustainable and biodegradable active packaging films. *Food Packaging and Shelf Life*, 2020. 24: p. 100484.
- [3] Chiarappa, G., et al., Mathematical modeling of L-(+)-ascorbic acid delivery from pectin films (packaging) to agar hydrogels (food). *Journal of Food Engineering*, 2018. 234: p. 73-81.
- [4] De Oliveira Filho, J.G., et al., Active food packaging: Alginate films with cottonseed protein hydrolysates. *Food Hydrocolloids*, 2019. 92: p. 267-275.
- [5] Takma, D.K. and F. Korel, Active packaging films as a carrier of black cumin essential oil: Development and effect on quality and shelf-life of chicken breast meat. *Food Packaging and Shelf Life*, 2019. 19: p. 210-217.
- [6] Da Silva Dannenberg, G., et al., Essential oil from pink pepper as an antimicrobial component in cellulose acetate film: Potential for application as active packaging for sliced cheese. *LWT-Food Science and Technology*, 2017. 81: p. 314-318.
- [7] Dou, L., et al., Physical properties and antioxidant activity of gelatin-sodium alginate edible films with tea polyphenols. *International journal of biological macromolecules*, 2018. 118: p. 1377-1383.
- [8] Bonilla, J., et al., Antioxidant potential of eugenol and ginger essential oils with gelatin/chitosan films. *Food bioscience*, 2018. 23: p. 107-114.
- [9] Mihaly Cozmata, A., et al., Assessment of the Effective Antioxidant Activity of Edible Films Taking into Account Films-Food Simulants and Films-Environment Interactions. *Packaging Technology and Science*, 2017. 30(1-2): p. 3-20.
- [10] Benbettaieb, N., et al., Modeling of the release kinetics of phenolic acids embedded in gelatin/chitosan bioactive-packaging films: Influence of both water activity and viscosity of the food simulant on the film structure and antioxidant activity. *International Journal of Biological Macromolecules*, 2020.
- [11] Ribeiro - Santos, R., et al., Potential of migration of active compounds from protein - based films with essential oils to a

- oils from *Thymus vulgaris* L. *Innovative Food Science & Emerging Technologies*, 2012. 14: p. 85-91.
- [31] Tunç, M.T. and İ. Koca, Ohmic heating assisted hydrodistillation of clove essential oil. *Industrial Crops and Products*, 2019. 141: p. 111763.
- [32] Liu, F., et al., Controlled-release of tea polyphenol from gelatin films incorporated with different ratios of free/nanoencapsulated tea polyphenols into fatty food simulants. *Food Hydrocolloids*, 2017. 62: p. 212-221.
- [33] Rakmai, J., et al., Encapsulation of yarrow essential oil in hydroxypropyl-beta-cyclodextrin: physicochemical characterization and evaluation of bio-efficacies. *CyTA-Journal of Food*, 2017. 15(3): p. 409-417.
- [34] Crank, J., *The mathematics of diffusion*. 1979: Oxford university press.
- [35] Kopcha, M., N.G. Lordi, and K.J. Tojo, Evaluation of release from selected thermosoftening vehicles. *Journal of pharmacy and pharmacology*, 1991. 43(6): p. 382-387.
- [36] Ritger, P.L. and N.A. Peppas, A simple equation for description of solute release II. Fickian and anomalous release from swellable devices. *Journal of controlled release*, 1987. 5(1): p. 37-42.
- [37] Ritger, P.L. and N.A. Peppas, A simple equation for description of solute release I. Fickian and non-fickian release from non-swellable devices in the form of slabs, spheres, cylinders or discs. *Journal of controlled release*, 1987. 5(1): p. 23-36.
- [38] Faidi, A., et al., Application of sodium alginate extracted from a Tunisian brown algae *Padina pavonica* for essential oil encapsulation: Microspheres preparation, characterization and in vitro release study. *International journal of biological macromolecules*, 2019. 136: p. 386-394.
- [39] 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.
- [40] 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*
- [21] Mahady, G.B., et al., In vitro susceptibility of *Helicobacter pylori* to botanical extracts used traditionally for the treatment of gastrointestinal disorders. *Phytotherapy Research: An International Journal Devoted to Pharmacological and Toxicological Evaluation of Natural Product Derivatives*, 2005. 19(11): p. 988-991.
- [22] Farhadi, N., et al., Changes in essential oil compositions, total phenol, flavonoids and antioxidant capacity of *Achillea millefolium* at different growth stages. *Industrial Crops and Products*, 2020: p. 112570.
- [23] Applequist, W.L. and D.E. Moerman, Yarrow (*Achillea millefolium* L.): a neglected panacea? A review of ethnobotany, bioactivity, and biomedical research. *Economic Botany*, 2011. 65(2): p. 209.
- [24] Dastjerdi, L.S. and A. Mazoji, Comparative chemical composition of the essential oils of Iranian *Achillea oxyodonta* from different ecological regions. *Journal of Applied Pharmaceutical Science*, 2015. 5(5): p. 106-109.
- [25] Benedek, B., et al., Yarrow (*Achillea millefolium* L. sl): pharmaceutical quality of commercial samples. *Die Pharmazie-An International Journal of Pharmaceutical Sciences*, 2008. 63(1): p. 23-26.
- [26] El-Kalamouni, C., et al., Antioxidant and antimicrobial activities of the essential oil of *Achillea millefolium* L. grown in France. *Medicines*, 2017. 4(2): p. 30.
- [27] Verma, R.S., et al., Chemical composition and allelopathic, antibacterial, antifungal and in vitro acetylcholinesterase inhibitory activities of yarrow (*Achillea millefolium* L.) native to India. *Industrial Crops and Products*, 2017. 104: p. 144-155.
- [28] Chandler, R.F., S.N. Hooper, and M.J. Harvey, Ethnobotany and phytochemistry of yarrow, *Achillea millefolium*, Compositae. *Economic botany*, 1982. 36(2): p. 203-223.
- [29] Rohloff, J., et al., Production of yarrow (*Achillea millefolium* L.) in Norway: essential oil content and quality. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 2000. 48(12): p. 6205-6209.
- [30] Gavahian, M., et al., Comparison of ohmic-assisted hydrodistillation with traditional hydrodistillation for the extraction of essential

- Industrial Crops and Products, 2019. 140: p. 111563.
- [51] Chen, M., et al., Effects of temperature on release of eugenol and isoeugenol from soy protein isolate films into simulated fatty food. *Packaging Technology and Science*, 2012. 25(8): p. 485-492.
- [52] Zeid, A., et al., Preparation and evaluation of antioxidant packaging films made of polylactic acid containing thyme, rosemary, and oregano essential oils. *Journal of Food Processing and Preservation*, 2019. 43(10): p. e14102.
- [53] Gouda, R., H. Baishya, and Z. Qing, Application of mathematical models in drug release kinetics of carbidopa and levodopa ER tablets. *J. Dev. Drugs*, 2017. 6(02): p. 1-8.
- [54] Costa, P. and J.M.S. Lobo, Modeling and comparison of dissolution profiles. *European journal of pharmaceutical sciences*, 2001. 13(2): p. 123-133.
- [55] Arora, G., K. Malik, and I. Singh, Formulation and evaluation of mucoadhesive matrix tablets of taro gum: optimization using response surface methodology. *Polimery w medycynie*, 2011. 41(2): p. 23-34.
- [56] Mehregan, H. and S. Mortazavi, The release behavior and kinetic evaluation of diltiazem HCl from various hydrophilic and plastic based matrices. 2005.
- [57] Dias, M.V., et al., Thermal and morphological properties and kinetics of diffusion of antimicrobial films on food and a simulant. *Food packaging and shelf life*, 2018. 16: p. 15-22.
- [58] Rezaeinia, H., et al., Electrohydrodynamic atomization of Balangu (*Lallemantia royleana*) seed gum for the fast-release of *Mentha longifolia* L. essential oil: Characterization of nano-capsules and modeling the kinetics of release. *Food Hydrocolloids*, 2019. 93: p. 374-385.
- [59] Stoll, L., et al., Poly (acid lactic) films with carotenoids extracts: Release study and effect on sunflower oil preservation. *Food chemistry*, 2019. 281: p. 213-221.
- [60] Colín-Chávez, C., et al., Diffusion of natural astaxanthin from polyethylene active packaging films into a fatty food simulant. *Food research international*, 2013. 54(1): p. 873-880.
- agricultural and food chemistry, 2014. 62(41): p. 10170-10180.
- [41] 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.
- [42] Li, M., et al., Controlled release system by active gelatin film incorporated with β -cyclodextrin-thymol inclusion complexes. *Food and Bioprocess Technology*, 2018. 11(9): p. 1695-1702.
- [43] Oussalah, M., et al., Antimicrobial effects of alginate-based film containing essential oils for the preservation of whole beef muscle. *Journal of Food Protection*, 2006. 69(10): p. 2364-2369.
- [44] Acevedo-Fani, A., R. Soliva-Fortuny, and O. Martín-Belloso, Photo-protection and controlled release of folic acid using edible alginate/chitosan nanolaminates. *Journal of Food Engineering*, 2018. 229: p. 72-82.
- [45] Türe, H., Characterization of hydroxyapatite-containing alginate-gelatin composite films as a potential wound dressing. *International journal of biological macromolecules*, 2019. 123: p. 878-888.
- [46] Dong, Z., Q. Wang, and Y. Du, Alginate/gelatin blend films and their properties for drug controlled release. *Journal of Membrane Science*, 2006. 280(1-2): p. 37-44.
- [47] Madhumathi, K., L.J. Rekha, and T.S. Kumar, Tailoring antibiotic release for the treatment of periodontal infrabony defects using bioactive gelatin-alginate/apatite nanocomposite films. *Journal of Drug Delivery Science and Technology*, 2018. 43: p. 57-64.
- [48] Williams, P.A., *Handbook of industrial water soluble polymers*. 2008: John Wiley & Sons.
- [49] Ke, J., et al., The study of diffusion kinetics of cinnamaldehyde from corn starch-based film into food simulant and physical properties of antibacterial polymer film. *International journal of biological macromolecules*, 2019. 125: p. 642-650.
- [50] Souza, V.G.L., et al., In vitro bioactivity of novel chitosan bionanocomposites incorporated with different essential oils.



Investigation and modeling of the release kinetics of yarrow (*Achillea millefolium* L.) essential oil from gelatin-sodium alginate active film into food simulants

Karami, P. ¹, Zandi, M. ^{2*}, Ganjloo, A. ³

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, Iran.
3. Associate Professor, Department of Food Science and Engineering, Faculty of Agriculture, University of Zanjan, Iran.

ARTICLE INFO

Article History:

Received 2021/10/15
Accepted 2021/12/06

Keywords:

Yarrow essential oil,
Gelatin-sodium alginate active films,
Mathematical modeling,
Artificial neural network,
Food simulant .

DOI: 10.52547/fsct.19.122.183

DOR: 20.1001.1.20088787.1401.19.122.1.4

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

ABSTRACT

In the present research, gelatin-sodium alginate films incorporated with various concentrations of yarrow essential oil were prepared. The release of yarrow essential oil from gelatin-sodium alginate films into watery (distillated water), acidic (acetic acid 3%), alcoholic (ethanol 10%) and fatty (ethanol 85%) food simulants was measured at 25 °C. In each simulant, all films had similar release profiles with an initial fast release followed by a sustained slow release. Results indicated that yarrow essential oil released faster from film in watery food stimulant due to the swelling in water. Films maintained their structures in fatty food simulant after 240 h. The artificial neural network (ANN) and mathematical (first order, Kopcha, Higuchi, Korsmeyer-Peppas, Weibull function and Hixson-crowell) models were applied to describing essential oil release from film. Mathematical modeling results indicated that Weibull model could satisfactorily describe the release kinetics of essential oil for all food simulant (minimal correlation coefficient (R²) and mean square error (MSE) of 0.991 and 10.22, respectively). The ANN model with 3-17-15-1 topology accurately predicted the kinetic release of yarrow essential oil from gelatin-sodium alginate film in all food simulant with R² = 0.999 and MSE = 0.5.