

بررسی عملکرد یک سیستم بینی الکترونیکی در طبقه‌بندی کیفی اسانس گل محمدی (*Rosa damascene Mill.*) به کمک شبکه عصبی مصنوعی

عباس گرجی چاکسپاری^۱، علی محمد نیکبخت^{۲*}، فاطمه سفیدکن^۳ و مهدی قاسمی ورنامخواستی^۴

۱- دانشجوی دکتری، گروه مکانیک بیوسیستم، دانشکده کشاورزی، دانشگاه ارومیه، ایران

۲- نویسنده مسئول، دانشیار، گروه مکانیک بیوسیستم، دانشکده کشاورزی، دانشگاه ارومیه، ایران

پست الکترونیک: alinikbakht87@yahoo.com

۳- استاد، بخش تحقیقات گیاهان دارویی و محصولات فرعی، مؤسسه تحقیقات جنگلها و مراتع کشور، سازمان تحقیقات، آموزش و ترویج کشاورزی، تهران، ایران

۴- استادیار، گروه مکانیک بیوسیستم، دانشکده کشاورزی، دانشگاه شهرکرد، ایران

تاریخ پذیرش: بهمن ۱۳۹۴

تاریخ اصلاح نهایی: دی ۱۳۹۴

تاریخ دریافت: مهر ۱۳۹۴

چکیده

به دلیل افزایش استفاده از گیاهان دارویی و معطر، توجه به امر طبقه‌بندی کیفی آنها نیز امری اجتناب‌ناپذیر می‌باشد. گل محمدی (*Rosa damascene Mill.*) نیز با ارزش بالای اسانس و خواص بی‌نظیر آن در صنایع بهداشتی، غذایی و دارویی یکی از این گیاهان است. از این رو، در این مطالعه طبقه‌بندی کیفی اسانس ۹ ژنوتیپ از گل محمدی با کمک یک سیستم بینی الکترونیکی براساس حسگرهای نیمه‌هادی اکسید فلزی (MOS) مورد بررسی قرار گرفت. ترکیب‌های اصلی تأثیرگذار در کیفیت اسانس گل محمدی با استفاده از روش کروماتوگرافی گازی (GC) و کروماتوگرافی گازی متصل به طیف‌سنج جرمی (GC-MS) شناسایی شدند و بر اساس درصد کل این ترکیب‌ها، نمونه‌ها در سه کلاس از نظر کیفی طبقه‌بندی شدند. سپس طبقه‌بندی این کلاس‌ها با استفاده از بینی الکترونیکی طراحی شده مورد ارزیابی قرار گرفت. در استفاده از ابزارهای کموتریک نتایج آنالیز مؤلفه‌های اصلی (PCA) نشان داد که با استفاده از دو مؤلفه اصلی اول (PC1، PC2) می‌توان ۸۵٪ واریانس داده‌ها را توجیه کرد. همچنین با استفاده از نمودار لودینگ حاصل از PCA، حسگرهایی که تأثیر بیشتری در تفکیک کلاس‌ها داشتند، شناسایی شدند. در ادامه دقت طبقه‌بندی با استفاده از شبکه عصبی پس انتشار پرسپترون چند لایه (Bp-MLP) به‌عنوان یک روش تحت نظارت، برای داده‌های آموزش و آزمون به ترتیب ۱۰۰٪ و ۹۶٪ بدست آمد. در پایان نتایج نشان داد که بینی الکترونیکی به‌عنوان ابزاری ارزان، دقیق، آسان و با قابلیت تبدیل به حالت زمان واقعی می‌تواند در راستای طبقه‌بندی کیفی اسانس گل محمدی و در نتیجه ژنوتیپ‌های آن مؤثر واقع شود.

واژه‌های کلیدی: گل محمدی (*Rosa damascene Mill.*)، بینی الکترونیکی، شبکه عصبی، طبقه‌بندی.

مقدمه

۱۰۰ میلیارد دلار در سال رسیده و پیش‌بینی می‌شود که تا سال ۲۰۵۰ میلادی به ۵۰۰۰ میلیارد دلار برسد، توجه به مسئله طبقه‌بندی کیفی این گیاهان امری

با توجه به ارزش بسیار بالای اقتصادی صنعت گیاهان دارویی و معطر در دنیا که در حال حاضر به

سیستم تشخیص الگوی مناسب برای شناسایی بوهای ساده یا پیچیده می‌باشد (Loutfi *et al.*, 2015). در این سیستم، اجزای فرار مواد معطر به صورت یک رد اثر یا الگو در فضای بالای نمونه شناسایی می‌شوند (Ghasemi-Varnamkhasti & Aghbashlo, 2014). در زمینه فرآوری برخی گیاهان دارویی و معطر از بینی الکترونیکی استفاده شده‌است، مانند تعیین کیفیت دو نوع سنبل کوهی به کمک بینی الکترونیکی و کروماتوگرافی لایه نازک با عملکرد بالا (Baby *et al.*, 2005). استفاده از ترکیب بینی الکترونیکی و زبان الکترونیک در کنار آزمون پنل برای تشخیص سه رقم نعناع (Laureati *et al.*, 2010) و همچنین گیاهان مختلفی مانند ارکید (Zhang *et al.*, 2014)، جینسینگ (Cui *et al.*, 2015) و شیرین بیان (Russo *et al.*, 2014). ولی تا به حال تحقیقی در زمینه گل محمدی انجام نشده است که از این لحاظ نتایج بررسی این موضوع می‌تواند در تحقیقات آینده مفید واقع شود. بنابراین با توجه به اهمیت مسئله طبقه‌بندی و مشکلات مربوط به آن در صنعت گیاهان دارویی و معطر، هدف از این تحقیق، بررسی عملکرد یک سامانه بینی الکترونیکی در ترکیب با روش GC-MS و ابزارهای کمومتریک (chemometrics) برای طبقه‌بندی اسانس ژنوتیپ‌های مختلف گل محمدی می‌باشد.

مواد و روش‌ها

آماده‌سازی نمونه‌های آزمایش (استخراج اسانس) ابتدا گلبرگ‌های ۹ ژنوتیپ مختلف از گل محمدی از مزرعه تحقیقاتی مؤسسه تحقیقات جنگل‌ها و مراتع کشور جمع‌آوری شدند. همچنین آزمایش‌های مربوط به تهیه اسانس و کروماتوگرافی در بخش تحقیقات گیاهان دارویی این مؤسسه انجام شد. سپس مقدار ۴۰۰ گرم گلبرگ از هر ژنوتیپ وزن شد و بعد به روش تقطیر با آب و در مدت ۲ ساعت فرایند اسانس‌گیری انجام شد. تجزیه و شناسایی اسانس‌ها با استفاده از GC و GC-MS انجام شد. شاخص‌های بازداري (Retention Indices) هر ترکیب

ضروری است و شناخت یک گونه از یک گیاه دارویی و معطر که بتواند اسانس با کیفیت‌تری تولید کند، می‌تواند در امر فرآوری و تولید محصولات جانبی با کیفیت بالاتر مفید واقع شود (Mohammadi, 2015). گیاه گل محمدی با نام علمی *Rosa damascena* گیاهی درختچه‌ای و از مهمترین گونه‌های معطر خانواده Rosaceae می‌باشد که در کشورهایمانند ایران، بلغارستان و ترکیه کشت می‌شود (Kaul *et al.*, 2009). فرآورده‌های این گیاه شامل گلاب، اسانس، گلبرگ و غنچه خشک می‌باشد که اسانس آن مهمترین محصول جانبی بوده و به دلیل محتوای روغن پایین و فقدان مواد مصنوعی دارای ارزش اقتصادی بسیار بالایی می‌باشد (Tabaei-Aghdaei *et al.*, 2007). از اسانس آن در صنایع عطرسازی، صنایع بهداشتی و آرایشی مانند انواع کرم‌های آرایشی، شامپو، صابون و لوسیون‌ها؛ صنایع غذایی به‌عنوان یک افزودنی غذایی، پودینگ و ژله استفاده می‌شود و در صنایع داروسازی به دلیل خواص ضد بیماری‌ایدز (HIV)، آنتی‌باکتریال، آنتی‌اکسیدان و آرام‌بخشی نیز کاربرد فراوانی دارد (Naquvi *et al.*, 2014).

در حال حاضر برای ارزیابی کیفی گیاهان دارویی و معطر از روش‌های گوناگونی استفاده می‌شود. یکی از این روش‌ها ارزیابی حسی یا آزمون پنل (panel test) می‌باشد. این روش با اینکه ممکن است سریع باشد ولی دارای محدودیت زیادی در پایداری، اندازه‌گیری استاندارد و قابلیت تکرار می‌باشد (Guohua *et al.*, 2015). روش دیگر استفاده از روش‌های آزمایشگاهی مانند کروماتوگرافی گازی- طیف‌سنجی جرمی (GC-MS) و یا کروماتوگرافی مایع با عملکرد بالا (HPLC) می‌باشد که با وجود دقیق بودن، روشی پرهزینه و زمان‌بر بوده و نیاز به کارشناس خیره دارد (Xiao *et al.*, 2014). به همین دلیل استفاده از روش‌های آسان، کم هزینه و دقیق مانند بینی الکترونیکی (Electronic Nose) در صنعت مورد نیاز می‌باشد. بینی الکترونیکی در واقع آرایه‌ای از حسگرهای شیمیایی با ویژگی جزئی در ترکیب با یک

دستگاه GC-MS

برای شناسایی نوع ترکیب‌های موجود در اسانس‌ها از یک دستگاه کروماتوگرافی گازی مدل Varian-3400 متصل به طیف‌سنج جرمی Saturn با ستون DB-5 (نیمه قطبی) به طول ۳۰ متر، قطر ۰/۲۵ میلی‌متر و با ۰/۲۵ میکرومتر ضخامت لایه فاز ساکن استفاده شد. برنامه‌ریزی حرارتی ستون ۲۵۰-۴۰ °C/min با افزایش ۴ °C/min انتخاب شد. دمای محفظه انتقال ۲۷۰ °C؛ دمای محفظه تزریق ۲۶۰ °C؛ انرژی یونیزاسیون ۷۰eV و گاز حامل، هلیوم با دبی ۰/۵ml/min بود.

بینی الکترونیکی

برای تهیه الگوی بوی ناشی از اسانس‌ها یک سامانه بینی الکترونیکی با ۷ حسگر گازی از نوع نیمه هادی اکسید فلزی (MOS) طراحی شد که طرح شماتیکی از این سامانه در شکل ۱ نشان داده شده‌است. این حسگرها بر مبنای اطلاعات بدست آمده از تحقیقات گذشته در مورد ترکیب‌های تشکیل‌دهنده اسانس گل محمدی انتخاب شده‌اند (Mirzaei *et al.*, 2015؛ Naquvi *et al.*, 2014). حسگرهای مورد استفاده در این سامانه نیز به همراه گازهای مورد سنجش در جدول ۱ آورده شده‌است.

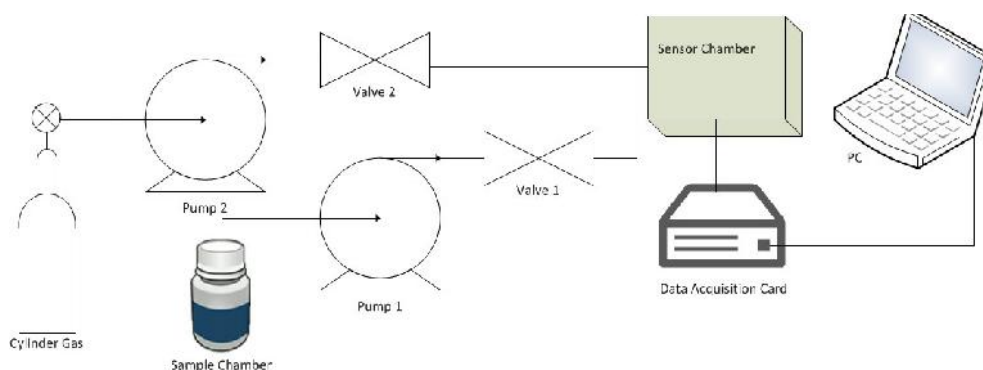
محاسبه شدند و طیف جرمی ترکیب‌ها نیز با کمک دستگاه GC-MS بدست آمد. شناسایی نوع و درصد ترکیب‌ها از طریق مقایسه شاخص‌های بازداری و طیف‌های جرمی بدست آمده با اطلاعات کتابخانه رایانه‌ای دستگاه (wiley 275-L) و اطلاعات موجود در منابع گذشته انجام شد (Adams, 2001). مشخصات دستگاه‌های استفاده شده برای GC و GC-MS در ادامه آورده شده‌است.

دستگاه GC

دستگاه GC مورد استفاده مدل Thermo-(GC) UFM با ستون Ph-5 (نیمه قطبی)، به طول ۱۰ متر، قطر ۰/۱ میلی‌متر و با ۰/۴ میکرومتر ضخامت لایه فاز ساکن (dimethyl polysiloxane 5%) استفاده شد. برنامه‌ریزی حرارتی ستون ۲۸۵-۶۰ °C/min با افزایش ۵ °C/min انتخاب شد. دمای آون به مدت ۵ دقیقه در دمای ۶۰ °C نگه داشته شد و بعد تا دمای ۲۸۵ °C با نرخ ۴۰ °C/min افزایش یافت و به مدت ۳ دقیقه در دمای نهایی نگه داشته شد. نوع آشکارساز FID با دمای ۲۸۰ °C، دمای تزریق ۲۸۰ °C، گاز حامل، هلیوم با دبی ۰/۵ml/min مدت زمان لازم برای شناسایی همه ترکیب‌ها در هر نمونه حدود ۹ دقیقه بدست آمد.

جدول ۱- لیست حسگرهای مورد استفاده در سامانه بینی الکترونیکی

شماره حسگر	نام حسگر	گاز هدف
S1	MQ-135	NH ₃ , NO _x , Alcohol, Benzene, Smoke, CO ₂
S2	MQ-5	LPG, Natural gas, Town gas
S3	MQ-136	H ₂ S
S4	-138	n-Hexane, Benzene, NH ₃ , Alcohol, Smoke, CO
S5	MQ-3 MQ	Alcohol
S6	TGS-832	Chloroflorocarbons
S7	TGS-822	Organic Solvent Vapors



شکل ۱- شماتیکی از سامانه ماشین بویایی

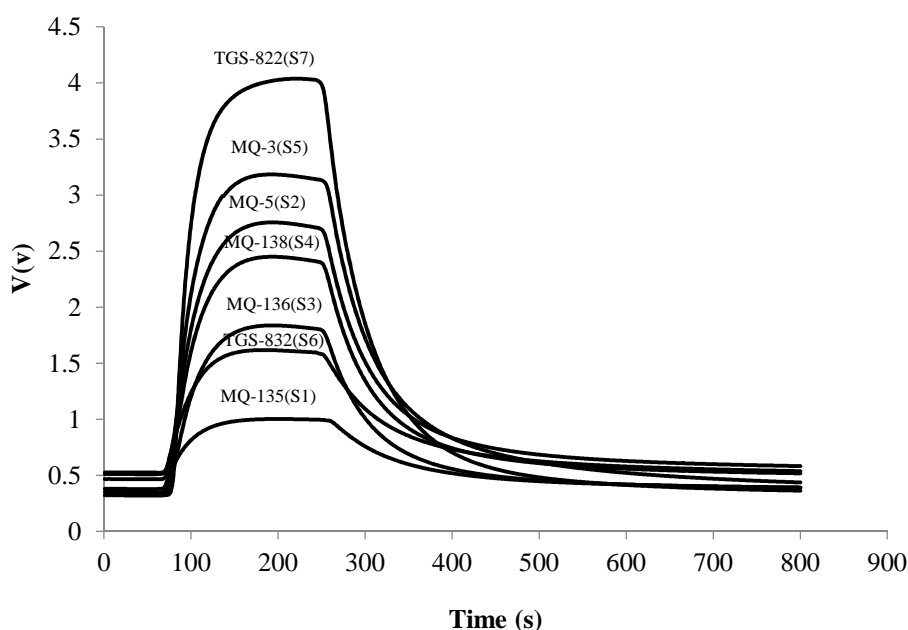
۲- مرحله تزریق نمونه (Injection) به محفظه حسگرها و ایجاد افزایش در تغییرات ولتاژ حسگرها به مدت ۲۰۰ ثانیه.

۳- مرحله پاکسازی (Purging) که طی آن دوباره الگوی پاسخ به حالت پایدار اولیه می‌رسد و ۵۰۰ ثانیه به طول می‌انجامد.

برای هر ژنوتیپ تعداد ۲۱ تکرار انجام شد و اطلاعات الگوی پاسخ حسگرها از طریق سیستم تحصیل داده (Data Acquisition) جمع‌آوری شد و برای ذخیره به رایانه ارسال گردید.

مراحل کار با بینی الکترونیکی به سه مرحله زمانی تقسیم‌بندی شد و الگوی پاسخ (response pattern) حسگرها به صورت نمودار ولتاژ- زمان ثبت گردید (شکل ۲). برای محاسبه مدت زمان لازم برای هر مرحله، به صورت سعی و خطا عمل شد، به این طریق که در هر مرحله بیشترین زمان لازم برای حسگری که آن مرحله را تکمیل می‌کند به عنوان شاخص در نظر گرفته شد. این سه مرحله زمانی شامل مراحل زیر بودند:

۱- مرحله رسیدن به حالت پایداری در پاسخ حسگرها (Baseline) به مدت ۶۰ ثانیه.

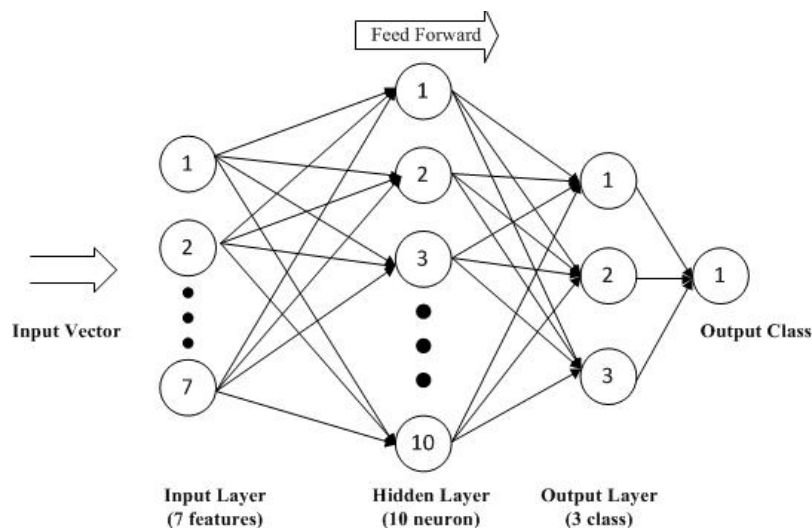


شکل ۲- الگوی پاسخ حسگرها برای یک نمونه اندازه‌گیری

روش تحلیل نتایج

دقت طبقه‌بندی داده‌های آموزش و آزمون مورد ارزیابی قرار گرفت (شکل ۳). تابع فعال‌سازی در این شبکه تابع سیگموئید (sigmoid function) در نظر گرفته شد. انتخاب تعداد لایه، نرون و نوع تابع فعال‌سازی به صورت سعی و خطا و با در نظر داشتن کاهش خطای شبکه انجام شد. قابل ذکر است که ۶۰٪ داده‌ها به‌عنوان داده آموزش (training set) برای یادگیری شبکه، ۱۰٪ داده‌ها برای اعتبارسنجی (validation) مدل و ۳۰٪ بقیه به‌عنوان داده آزمون (test set) برای ارزیابی شبکه مورد استفاده قرار گرفتند. داده‌های اعتبارسنجی تنها برای تخمین و اصلاح خطاهای احتمالی ایجاد شده در مدل استفاده می‌شوند تا دقت شبکه را افزایش دهند (Hastie et al., 2009).

ابتدا داده‌های بدست آمده از مجموع ۷ حسگر در قالب یک ماتریس که ستون‌های آن تعداد حسگرها و ردیف‌های آن تعداد نمونه‌ها بودند، قرار گرفتند و بعد با توجه به روش‌های موجود در منابع پیش‌پردازش و نرمال‌سازی شدند (Pearce et al., 2006). به این صورت که برای استخراج ویژگی‌ها از روش کسری و برای نرمال‌سازی داده‌ها در بازه ۰-۱ از روش مقیاس بازه استفاده شد. در ادامه روش PCA به‌عنوان یک روش کمومتریک، خطی و بدون نظارت (unsupervised) برای کاهش بعد داده مورد استفاده قرار گرفت. سپس مدل شبکه عصبی پس انتشار پرسپترون چند لایه (Bp-MLP) با ۱۰ نرون در یک لایه به‌عنوان یک روش تحت نظارت (supervised) برای محاسبه



شکل ۳- ساختار شبکه عصبی پس انتشار خطا پرسپترون با یک لایه مخفی و ۱۰ نرون

(Mirzaei et al., 2015). مشخصات این شش ترکیب و درصد این ترکیب‌ها برای هر ژنوتیپ در جدول ۲ آورده شده‌است. با افزایش میزان درصد کل این شش ترکیب در یک اسانس می‌توان گفت که کیفیت آن اسانس بالاتر بوده و ارزش اقتصادی بیشتری دارد. بنابراین با توجه به نتایج، با تغییر ژنوتیپ‌ها از g1 به g9 کیفیت اسانس‌ها افزایش یافته است. ولی چون اختلاف زیادی بین سه ژنوتیپ اول

نتایج

آزمایش GC و GC-MS

با توجه به نتایج بدست آمده از این آزمایش‌ها نوع و درصد ترکیب‌های موجود در نمونه‌ها مشخص شد. در ادامه با توجه به تحقیقات گذشته شش ترکیب اصلی که کیفیت و ارزش اسانس را تعیین می‌کنند از میان ترکیب‌های موجود در هر اسانس شناسایی شد (Naquvi et al., 2014)؛

(کیفیت متوسط) و C3 (کیفیت بالا) طبقه‌بندی شدند. به طوری که ژنوتیپ‌هایی که دارای درصد مجموع ترکیب‌های کمتر از ۵٪ بودند (g1, g2, g3) جزو کلاس اول (C1)، نمونه‌هایی که بین ۴۰-۱۰ درصد بودند (g4, g5, g6) جزو کلاس دوم (C2) و در نهایت نمونه‌هایی با مجموع ترکیب‌های بالاتر از ۵۰٪ (g7, g8, g9) جزو کلاس سوم (C3) قرار گرفتند.

(g1, g2 و g3) با هم، سه ژنوتیپ دوم (g4, g5 و g6) با هم و سه ژنوتیپ آخر (g7, g8 و g9) با یکدیگر از نظر کیفیت مشاهده نشد. سعی شد نوع کلاس‌بندی در محدوده‌های خاصی از درصد کل این ترکیب‌ها انجام شود. به طوری که سه کلاس کیفی متفاوت به صورت کیفیت پایین، متوسط و بالا داشته باشیم. بنابراین با توجه به درصد کل این ترکیب‌ها در هر اسانس، نمونه‌ها در سه کلاس C1 (کیفیت پایین)، C2

جدول ۲- مشخصات شش ترکیب اصلی موجود در اسانس گل محمدی و درصد این ترکیب‌ها در هر ژنوتیپ

درصد ترکیب‌های در هر ژنوتیپ									نام ترکیب	شماره ترکیب
g9	g8	g7	g6	g5	g4	g3	g2	g1		
۰/۷	۰/۲	۰/۶۲	۰/۵	۰/۲	-	-	-	-	phenyl ethyl alcohol	۱
۱/۱	۰/۵	۰/۵	۰/۸	۰/۴	۰/۲	۰/۳	۰/۱	۰/۲	trans rose oxide	۲
۲۳/۴	۵۴/۱	۳۵/۷	۹	۲/۴	۶/۳	۰/۵	۰/۴	۰/۱	citronellol	۳
۱۸/۲	۲/۶۱	۷/۳	-	-	۰/۶	-	-	-	nerol	۴
۳۴/۰	۱۱/۲	۲۴/۳	۲۸/۱	۸/۱	۳/۵	۲/۷	۲/۱	۰/۸	geraniol	۵
۰/۴	۰/۳	۰/۳	-	۰/۲	-	۰/۱	-	-	geranial	۶
۷۷/۷۷	۶۸/۸۲	۶۸/۶۲	۳۸/۴	۱۱/۲۱	۱۰/۶۱	۳/۶۶	۲/۶۴	۱/۱۴	درصد کل	

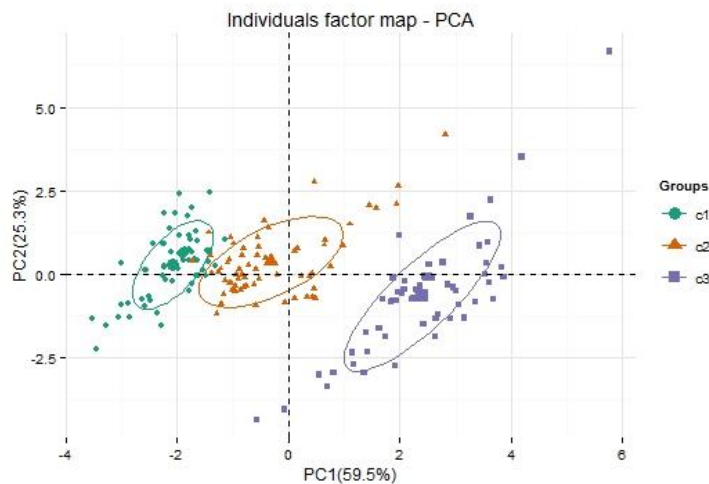
بینی الکترونیکی

این شکل هرچه توزیع متغیرها نسبت به یک مؤلفه اصلی، از مبدأ مختصات دورتر باشد در واقع آن متغیر تأثیر بیشتری در طبقه‌بندی کلاس‌ها بر روی مؤلفه اصلی مربوطه از خود نشان می‌دهد. بنابراین از روی اطلاعات نمودار لودینگ می‌توان حسگرهایی را که تأثیر کمتری در تفکیک بین کلاس‌ها دارند شناسایی کرده و از سیستم حذف کرد که این مسئله در راستای کاهش هزینه ساخت بینی الکترونیکی می‌تواند کمک بسزایی بکند (GhaseMi-VarnaMkhashi et al., 2012). بنابراین با توجه به شکل ۵، مشخص است که حسگرهای S2, S4, S5 و S7 نسبت به مؤلفه اصلی اول و حسگرهای S1, S3 و S6 نسبت به مؤلفه اصلی دوم می‌توانند تفکیک خوبی بین کلاس‌ها ایجاد کنند. از طرفی چون مؤلفه اصلی اول واریانس بیشتری را تشریح می‌کند، بنابراین تأثیر حسگرهای S2, S4, S5 و S7 در تفکیک

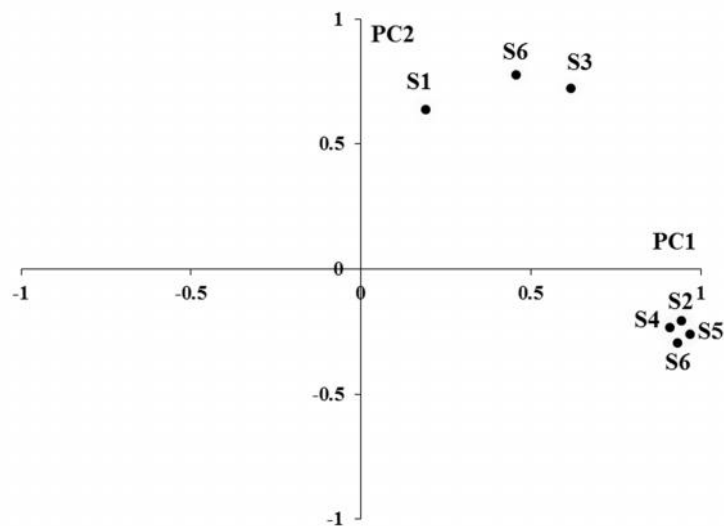
نتایج تجزیه مؤلفه‌های اصلی (PCA) نشان داد که دو مؤلفه اصلی اول ۸۵٪ واریانس کل داده‌ها را توجیه می‌کنند و برای طبقه‌بندی کلاس‌ها مناسب هستند (شکل ۴). این دو مؤلفه در واقع ترکیبی خطی از تمام متغیرهای اولیه می‌باشند. همان‌طور که از شکل ۴ مشخص است، مؤلفه اصلی اول حدود ۶۰٪ واریانس بین داده‌ها را توجیه می‌کند و نسبت به مؤلفه اصلی دوم با ۲۵٪ تشریح واریانس، اختلاف بین کلاس‌ها را بهتر می‌تواند نمایش دهد. همچنین با بدست آوردن نمودار توزیع متغیرها (حسگرها) بر روی دو مؤلفه اصلی اول که به نمودار لودینگ مشهور است، می‌توان حسگرهایی که تأثیر بیشتری در تفکیک کلاس‌ها از خود نشان داده‌اند را شناسایی کرد. نمودار لودینگ بدست آمده برای این هفت حسگر در شکل ۵ نشان داده شده‌است. در

بوده است، می توان نتیجه گرفت که تأثیر این دو حسگر در طبقه بندی کلاس ها بیشتر بوده است. برای بررسی دقت طبقه بندی سیستم از مدل شبکه عصبی استفاده شد که نتایج آن در ادامه آمده است.

کلاس ها بیشتر است. همچنین می توان گفت در بین این چهار حسگر به دلیل اینکه فاصله توزیع حسگرهای S5 و S7 از مبدأ بیشتر است و از سوی دیگر با توجه به الگوی پاسخ حسگرها در شکل ۱ که نشان می دهد میزان تغییرات حسگرهای S5 و S7 نسبت به بقیه حسگرها بیشتر



شکل ۴- پراکنش نمونه ها بر روی دو مؤلفه اصلی اول با مجموع واریانس ۸۵٪



شکل ۵- نمودار توزیع حسگرها بر روی دو مؤلفه اصلی اول (نمودار لودینگ)

۹۶٪ به ترتیب برای داده های آموزش و آزمون طبقه بندی کند. در مورد داده های مجموعه آموزش، چون روش پیش رو یک روش تحت نظارت می باشد و در مرحله آموزش شبکه

نتایج شبکه عصبی MLP در مورد طبقه بندی کلاس ها نشان داد که یک شبکه عصبی پرسپترون با یک لایه و تعداد ۱۰ نرون در لایه مخفی می تواند کلاس ها را با دقت ۱۰۰٪ و

استفاده از تعداد نمونه‌هایی که به درستی طبقه‌بندی شده‌اند، مشخص می‌گردد. به این صورت که تعداد کل این نمونه‌ها بر تعداد کل مجموعه آزمون تقسیم می‌شود و حاصل به صورت درصد بیان می‌گردد. در نتیجه با توجه به جدول ۳ مشخص می‌شود که از بین نمونه‌های کلاس C2 و C3 تمام موارد به درستی طبقه‌بندی شده‌اند ولی در مورد کلاس C1 دو نمونه به اشتباه در کلاس C2 قرار گرفته‌اند که در اصطلاح گفته می‌شود که تعداد طبقه‌بندی‌های نادرست (misclassifications) برای این طبقه‌بندی برابر دو می‌باشد. بنابراین با تقسیم تعداد ۵۵ نمونه با پیش‌بینی صحیح بر تعداد ۵۷ داده مجموعه آزمون دقت شبکه ۹۶٪ محاسبه می‌شود.

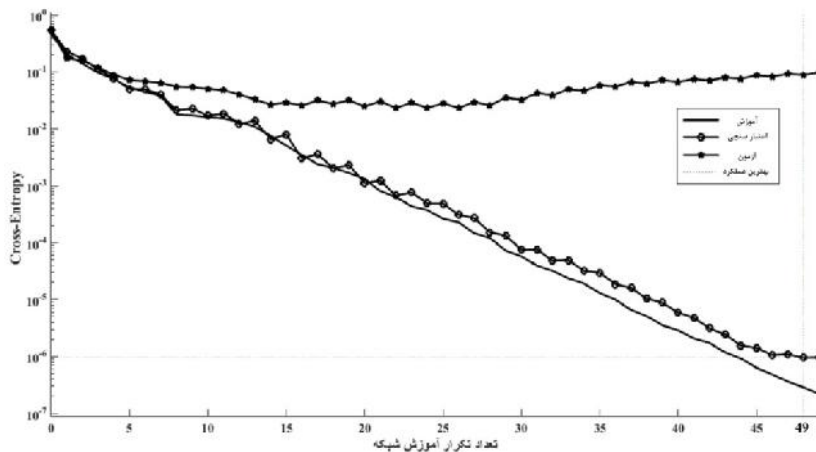
خروجی‌ها از پیش مشخص هستند، طبیعتاً دقت بسیار بالا بوده (۱۰۰٪) و همه نمونه‌ها به درستی طبقه‌بندی شده‌اند. ولی در مسائل طبقه‌بندی منظور از دقت الگوریتم طبقه‌بندی در واقع دقتی است که از نتیجه آزمون الگوریتم مورد نظر با استفاده از داده‌های مجموعه آزمون بدست می‌آید. نتیجه دقت طبقه‌بندی شبکه عصبی MLP برای مجموعه داده‌های آزمون به صورت ماتریس اغتشاش (confusion matrix) بیان می‌گردد که در جدول ۳ نمایش داده شده است. این ماتریس در واقع یک ماتریس مربعی بوده که ستون‌های آن مشخص‌کننده کلاس‌های پیش‌بینی شده به وسیله شبکه و ردیف‌های آن بیانگر کلاس‌های واقعی نمونه‌ها می‌باشد. درصد دقت طبقه‌بندی شبکه به وسیله این ماتریس و با

جدول ۳- ماتریس سردرگمی برای مجموعه آموزش و آزمون

مجموعه داده‌ها	پیش‌بینی شده/واقعی	C1	C2	C3	دقت طبقه‌بندی
مجموعه آزمون	C1	۱۷	۲	۰	۹۶٪
	C2	۰	۲۰	۰	
	C3	۰	۰	۱۸	

بهترین عملکرد برای شبکه آموزش‌دیده است و بیان می‌کند که از این تکرار به بعد دیگر خطای شبکه افزایش می‌یابد. شکل ۶ مقدار تغییرات آنتروپی متقابل را در برابر تعداد تکرارهای شبکه در این تحقیق نشان می‌دهد. همانطور که در شکل ۶ دیده می‌شود، کمترین مقدار خطا برای این شبکه می‌تواند در تکرار ۴۹ آموزش بدست آید و آنتروپی در این حالت حدود 10^{-6} می‌باشد. این مسئله نشان می‌دهد که سرعت آموزش شبکه بالا بوده و در کمتر از ۵۰ تکرار توانسته است به مقدار کمینه خطا دست پیدا کند.

یکی دیگر از نتایج مهمی که از شبکه پیاده‌سازی شده می‌توان بدست آورد، بررسی پارامتری به نام آنتروپی متقابل (Cross-Entropy) به عنوان جایگزینی برای میانگین مربع خطاها (MSE) می‌باشد. از این پارامتر برای بررسی عملکرد مجموعه داده‌های اعتبارسنجی شبکه استفاده می‌شود. در مسائل طبقه‌بندی با پیشروی تعداد دفعات آموزش شبکه، مقدار آنتروپی کاهش پیدا کرده تا به صفر برسد ولی این روند کاهشی، برای داده‌های مجموعه اعتبارسنجی از یک تکرار آموزش شبکه به بعد تغییر کرده و دیگر کاهش نمی‌یابد. محل تلاقی این تکرار با مقدار آنتروپی متقابل در واقع بیانگر



شکل ۶- بررسی عملکرد داده‌های اعتبارسنجی شبکه عصبی MLP با استفاده از آنتروپی متقابل

سپاسگزاری

نویسندگان کمال تشکر و قدردانی خود را از تلاش‌های مسئولان دانشگاه ارومیه و مؤسسه تحقیقات جنگل‌ها و مراتع کشور اعلام می‌دارند. همچنین از دانشگاه ارومیه به دلیل حمایت مالی این تحقیق سپاسگزاری می‌شود.

منابع مورد استفاده

- Adams, R.P., 2001. Identification of Essential Oil Components by Gas-Chromatography/Mass Spectroscopy. Allured Publishing, Carol Stream, USA, 456p.
- Baby, R., Cabezas, M., Castro, E., Filip, R. and Walsõe de Reça, N.E., 2005. Quality control of medicinal plants with an electronic nose. Sensors and Actuators B: Chemical, 106: 24-28.
- Cui, S., Wang, J., Yang, L., Wu, J. and Wang, X., 2015. Qualitative and quantitative analysis on aroma characteristics of ginseng at different ages using E-nose and GC-MS combined with chemometrics. Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis, 102: 64-77.
- Ghasemi-Varnamkhasti, M. and Aghbashlo, M., 2014. Electronic nose and electronic mucosa as innovative instruments for real-time monitoring of food dryers. Trends in Food Science & Technology, 38: 158-166.
- Ghasemi-Varnamkhasti, M., Mohtasebi, S.S., Siadat, M., Razavi, S.H., Ahmadi, H. and Dicko, A., 2012. Discriminatory power assessment of the sensor array of an electronic nose system for the detection of non

بحث

با توجه به رشد روزافزون استفاده از گیاهان دارویی و معطر در دنیا و اقتصاد قابل توجه این صنعت، لزوم استفاده از ابزارهای سریع، دقیق، ارزان و آسان مانند بینی الکترونیکی که قابلیت استفاده به صورت برخط را نیز دارند در کنترل کیفیت این گیاهان بیشتر به چشم می‌خورد. در این تحقیق نتایج آزمایش GC-MS توانست اسانس ۹ ژنوتیپ مختلف از گل محمدی را در سه کلاس مجزا طبقه‌بندی کند و در ادامه با پیاده‌سازی یک بینی الکترونیکی بر پایه حسگرهای گازی، صحت این طبقه‌بندی با ابزارهای کمومتریک ارزیابی شد. نتایج PCA نشان داد که با استفاده از دو مؤلفه اصلی اول می‌توان ۸۵٪ واریانس نمونه‌ها را توجیه کرد و همچنین با استفاده از نمودار لودینگ مشخص شد که متغیرهایی (حسگرها) مانند S5 و S7 تأثیر بیشتری در طبقه‌بندی کلاس‌ها دارند. همچنین مدل ایجاد شده به وسیله شبکه عصبی پرسپترون با یک لایه و تعداد ۱۰ نرون در لایه مخفی توانست داده‌های آموزش و آزمون را به ترتیب با دقت ۱۰۰٪ و ۹۶٪ طبقه‌بندی کند. نتایج این تحقیق نشان داد که می‌توان از بینی الکترونیکی به عنوان ابزاری مفید و به صرفه در راستای کنترل کیفی اسانس گل محمدی استفاده کرد.

- of Kohgiluyeh-va-Boyerahmad province from Iran due to employment creation and permanent development. *Biological Forum-An International Journal*, 7(1): 749-751.
- Naquvi, K.J., Ansari, S.H., Ali, M. and Najmia, K., 2014. Volatile oil composition of *Rosa damascene*. *Journal of Pharmacognosy and Phytochemistry*, 2(5): 130-134.
 - Pearce, T.C., Schiffman, S.S., Nagle, H.T. and Gardner J.W., 2006. *Handbook of Machine Olfaction: Electronic Nose Technology*. Wiley, 624p.
 - Russo, M., Serra, D., Suraci, F., Di Sanzo, R., Fuda, S. and Postorino, S., 2014. The potential of e-nose aroma profiling for identifying the geographical origin of licorice (*Glycyrrhiza glabra* L.) roots. *Food Chemistry*, 165: 467-474.
 - Tabaei-Aghdaei, S.R., Babaei, A., Khosh-Khui, M., Jaimand, K., Rezaee, M.B., Assareh, M.H. and Naghavi, M.R., 2007. Morphological and oil content variations amongst Damask rose (*Rosa damascena* Mill.) landraces from different regions of Iran. *Scientia Horticulturae (Amsterdam)*, 113: 44-48.
 - Xiao, Z., Yu, D., Niu, Y., Chen, F., Song, S., Zhu, J. and Zhu, G., 2014. Characterization of aroma compounds of Chinese famous liquors by gas chromatography-mass spectrometry and flash GC electronic-nose. *Journal of chromatography B., Analytical technologies in the biomedical and life sciences*, 945: 92-100.
 - Zhang, B., Huang, Y., Zhang, Q., Liu, X., Li, F. and Chen, K., 2014. Fragrance discrimination of Chinese *Cymbidium* species and cultivars using an electronic nose. *Scientia Horticulturae*, 172: 271-277.
 - alcoholic beer aging. *Czech Journal of Food Sciences*, 30(3): 236-240.
 - Guohua, H., Jiaojiao, J., Shanggui, D., Xiao, Y., Mengtian, Z., Minmin, W. and Dandan, Y., 2015. Winter jujube (*Zizyphus jujuba* Mill.) quality forecasting method based on electronic nose. *Food Chemistry*, 170: 484-491.
 - Hastie, T., Tibshirani, R. and Friedman, J., 2009. *The Elements of Statistical Learning Data Mining, Inference, and Prediction*. Springer, 764p.
 - Kaul, K., Karthigeyan, S., Dhyani, D., Kaur, N., Sharma, R.K. and Ahuja, P.S., 2009. Morphological and molecular analyses of *Rosa damascena* × *Rosa bourboniana* interspecific hybrids. *Scientia Horticulturae (Amsterdam)*, 122: 258-263.
 - Laureati, M., Buratti, S., Bassoli, a., Borgonovo, G. and Pagliarini, E., 2010. Discrimination and characterisation of three cultivars of *Perilla frutescens* by means of sensory descriptors and electronic nose and tongue analysis. *Food Research International*, 43: 959-964.
 - Loutfi, A., Coradeschi, S., Mani, G.K., Shankar, P. and Rayappan, J.B.B., 2015. Electronic noses for food quality: A review. *Journal of Food Engineering*, 144: 103-111.
 - Mirzaei, M., Ahmadi, N., Sefidkon, F., Shojaeiyan, A. and Mazaheri, A., 2015. Evaluation of phytochemical profiling of damask rose (*Rosa damascena* Mill.) at various post-harvest incubation conditions and determination of the best hydro-distillation time. *Iranian Journal of Medicinal and Aromatic Plants*, 31: 732-742.
 - Mohammadi, A., 2015. A Review of Medicinal plants

Investigation of electronic nose system in classification of *Rosa damascena* Mill. essential oil by artificial neural network

A. Gorji Chakespari¹, A. Mohammad Nikbakht^{2*}, F. Sefidkon³ and M. Ghasemi-Varnamkhasti⁴

1- Department of Mechanical Engineering of Biosystem, Faculty of Agriculture, Urmia University, Urmia, Iran

2*- Corresponding author, Department of Mechanical Engineering of Biosystem, Faculty of Agriculture, Urmia University, Urmia, Iran, E-mail: alinikbakht87@yahoo.com

3- Research Institute of Forests and Rangelands, Agricultural Research, Education and Extension Organization (AREEO), Tehran, Iran

4- Department of Mechanical Engineering of Biosystem, Faculty of Agriculture, Shahrekord University, Shahrekord, Iran

Received: October 2015

Revised: December 2015

Accepted: January 2016

Abstract

Due to the increased use of medicinal plants, the qualitative classification is inevitable. *Rosa damascena* Mill. with a high value of essential oil and its unique properties in the health, food and pharmaceutical industries is one of these plants. In this study, after essential oil extraction from nine genotypes of *Rosa*, the essential oil components were identified by GC and GC-MS analysis. The genotypes were divided into three classes (C1, C2, C3) based on the total percentage of six most important compounds, which have a major role in essential oil quality (phenyl ethyl alcohol, trans rose oxide, citronellol, nerol, geraniol, geranial). Then, the classes were tested by an electronic nose (EN) system designed based on metal oxide semiconductor (MOS) sensors. The sensor response pattern was recorded and analyzed by chemometric methods in the next step. Results of principal component analysis (PCA) showed that 85% of the data variance was explained by the two first principal components (PC1, PC2). An artificial neural network based on backpropagation multilayer perceptron (Bp-MLP) was performed, and classification accuracy was achieved 100% and 96% for training and test sets, respectively. These results showed that EN could be used as a quick, easy, accurate and inexpensive system to classify *Rosa damascene* Mill. essential oil.

Keywords: *Rosa damascene* Mill., electronic nose, neural network, classification.