

基于遗传算法与神经网络的微波浸提过程优化

周先汉, 阮少钧, 成 刚

(合肥工业大学生物与食品工程学院, 安徽 合肥 230009)

摘 要: 微波浸提是一个非线性、不确定因素较多的过程。本实验以荞麦皮粉总黄酮的萃取工艺为例, 采用神经网络对微波浸提过程进行模拟, 并用遗传算法进行工艺参数的优化, 得出荞麦皮粉中总黄酮的微波萃取过程的最佳工艺为: 液料比 6.25、乙醇浓度 54%、微波功率 456W、作用时间 11.3min、搅拌速率 483r/min。在该工艺条件下做了验证实验, 总黄酮提取率为 0.796%。并通过对比实验证实: 在达到相同的提取率时微波浸提在溶剂用量、溶剂回收率等方面均优于传统萃取方法。

关键词: 神经网络; 遗传算法; 优化; 总黄酮; 微波浸提

Optimization of Microwave Extraction Process by ANN and GA

ZHOU Xian-han, RUAN Shao-jun, CHENG Gang

(School of Biotechnology and Food Engineering, Hefei University of Technology, Hefei 230009, China)

Abstract: The process of microwave extraction is a non-linear and undetermined behaviour. In this paper, with the extraction of flavonoids as example, a new method was build: the microwave extraction process was simulated by artificial neural network, and the technical parameters were optimized by genetic algorithms. After optimization, the best technology was the ratio 6.25 between solvent and material, alcohol density of 54%, 456 microwave power, 11.3 minute extracting time, and stir-rate 483 r/min. Under these conditions, the actual output of flavonoids is 0.796%. Comparison experiment results confirmed that: with the objective of reaching the same rate of extraction, microwave method is better than conventional method on the dosage of impregnant and the recovery rate etc.

Key words neural network; genetic algorithms; optimization; flavonoids; microwave-Assisted extraction

中图分类号: TS201

文献标识码: A

文章编号: 1002-6630(2007)10-0180-04

微波浸提温度较低, 能有效保护食品中的功能成分, 具有较强的提取能力。陈菁菁等对桑叶和桑白皮黄酮提取做了微波浸提与水浴醇提的比较研究。结果表明, 提取率相同前提下, 前者的浸提时间比后者短得多, 溶剂的回收率明显高于后者^[1]。与传统醇提相比, 微波浸提将有可能减少使用大量有机溶剂造成的环境威胁。

但是, 微波浸提是一个非线性过程, 由于物料的尺寸、介电系数等许多不确定因素, 很难用明确的量化关系进行描述^[2]。Huang Tony 认为微波在腔体内的反射与散射是不确定和非线性的过程^[3]。因此, 微波浸提最优体系的建立通常较为困难。

遗传算法(GA)全局寻优能力优异, 能显著提高神经网络(ANN)的性能。国外在利用 GA 减少 ANN 的前期准备工作量^[4]、GA-ANN 混合逼近^[5]、利用 GA 辅助计算

以节省 ANN 的计算时间和提高精度^[6]等方面的研究进展较快, 用遗传算法优化神经网络, 可进一步对工艺参数寻优。目前, 利用 GA 和 ANN 对微波浸提过程进行完整模拟和优化的方案在国内少见报道。

本研究分析荞麦皮粉总黄酮浸提过程的影响因素, 研究 GA 与 ANN 在微波浸提过程中的应用, 最终优化工艺条件, 探索建立最优微波浸提体系的一般方法; 比较微波浸提与水浴醇提在溶剂用量、总黄酮提取率及乙醇溶剂回收率方面的差别。

1 材料与方法

1.1 材料与设备

1.1.1 材料

收稿日期: 2007-06-25

作者简介: 周先汉(1959-), 男, 副教授, 研究方向为生物资源综合利用。

荞麦皮 市售 芦丁标品 中国药品生物制品检定所。

1.1.2 仪器设备

NJL07-3实验微波炉 南京杰全公司; SpectrumLab52紫外分光光度计 上海棱光公司; TG16-WS 台式高速离心机 长沙湘仪公司; DHG-9240A干燥箱 厦门凯美特仪器公司; R-201 型旋转蒸发仪 上海申生公司。

1.2 工艺流程

1.2.1 荞麦皮粉制备

荞麦皮于 60℃干燥箱中烘 4h, 粉碎, 过 100 目筛, 备用。

1.2.2 萃取剂的选取

比较了水、乙酸乙酯、乙醇水溶液三种常用提取溶剂对黄酮的提取效果: 水提取不完全; 乙酸乙酯提出的杂质少但提取不完全; 乙醇水溶液在 70% 浓度以下提取率较高, 极少带出杂质。因此本实验采用乙醇水溶液作萃取剂。

1.2.3 主要工艺流程

萃取剂 1 \ 微波浸提 → 回收溶剂 → 粗滤 → 离心 → 样液 1
原料烘干 /

粉碎过筛 \ 水浴醇提 → 回收溶剂 → 粗滤 → 离心 → 样液 2
萃取剂 2 /

1.2.4 黄酮含量的测定方法

硝酸铝法^[7]与紫外分光光度法。

1.2.5 测定波长的选择

对芦丁标品样液作波长扫描, 在 260nm 和 390nm 两个区域吸收峰明显; 扫描萃取样液发现, 在 390nm 处与芦丁标品有较吻合的吸收峰。由于 NaOH 溶液在 240nm 左右处有大的吸收峰^[8], 为避免干扰, 选取 390nm 为测定波长。

1.2.6 总黄酮提取率的计算

芦丁标准曲线的回归方程:

$$A = 0.8593V + 0.0042 \quad (R^2 = 0.9993)$$

总黄酮提取率:

$$T = 0.2746(A - 0.0042)V_{\text{溶剂}}/M_{\text{原料}}$$

式中, A 为吸光度; V 为样液体积, ml; V_{溶剂}为加入乙醇水溶液的体积; M_{原料}为处理的原料质量。

1.2.7 乙醇回收

用蒸馏法分别收集微波浸提与水浴提取后的乙醇, 测定回收率。

$$\text{乙醇回收率}(\%) = \frac{\text{回收乙醇体积} \times \text{回收乙醇浓度}}{\text{原乙醇溶液体积} \times \text{原乙醇溶液浓度}} \times 100$$

1.3 建模与优化

建模与优化过程如图 1 所示。

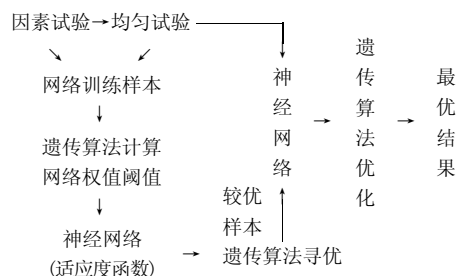


图 1 建模优化过程

Fig.1 Process of modeling and optimizing

2 结果与分析

2.1 影响因素分析

当微波作用腔内原料及溶剂量一定时, 温度取决于微波功率和作用时间, 不是独立因素。微波浸提中的可能影响因素有: 原料粒度、预浸时间、液料比、乙醇浓度、微波功率、作用时间、搅拌转速、浸提次数。由因素试验可知其中预浸时间、浸提次数影响不显著, 后续各试验均取预浸时间 1min, 浸提一次。确定考察因素为: 液料比、乙醇浓度、微波功率、作用时间、搅拌转速。

2.2 因素试验

以总黄酮萃取得率为指标, 因素试验结果如表 1~5 所示(表中未列因素固定水平分别为液料比 4, 乙醇浓度 70%, 微波功率 300W, 作用时间 5min, 搅拌转速 700r/min)。

2.3 均匀试验优选

在因素试验基础上, 确定合理的因素水平范围,

表 1 不同液料比下的提取得率

Table 1 Results of extraction rate on different ratios of liquid to solid

液料比	2	3	4	5	6	7	8
得率(%)	0.38	0.48	0.53	0.58	0.65	0.66	0.66

表 2 不同乙醇浓度下的提取得率

Table 2 Results of extraction rate on different concentrations of ethanol

乙醇浓度(%)	50	60	70	80	90
得率(%)	0.53	0.71	0.53	0.52	0.40

表 3 不同微波功率下的提取得率

Table 3 Results of extraction rate on different powers of microwave

功率(W)	100	200	300	400	500	600
得率(%)	0.33	0.36	0.46	0.62	0.59	0.60

表4 不同作用时间下的提取得率

Table 4 Results of extraction rate on different effective time

时间(min)	1	3	5	7	9	11	13
得率(%)	0.24	0.42	0.53	0.61	0.57	0.55	0.52

表5 不同搅拌转速下的提取得率

Table 5 Results of extraction rate on different speeds of stirring

转速(r/min)	300	500	700	900	1100	1300
得率(%)	0.52	0.54	0.53	0.52	0.51	0.50

设计均匀试验,使试验点尽可能多的分布在可行的试验因素范围之内。对时间、液料比、搅拌转速取十水平,乙醇浓度及微波功率取五水平,选用 $U_{11}(11^{10})$ 设计表及其使用表设计新的混合均匀设计表。试验方案及结果见表6。

2.4 网络的建立

从因素试验与均匀试验得到的41个样本中抽取30个作为网络的训练样本。由于单隐层的前馈式(BP)分层ANN能以任意精度逼近任何非线性连续函数^[9],这里采用单隐层的BP神经网络。经试算,隐层单元数为16时网络的收敛性能最好。因直接建立BP网络在确定网络参数时工作量很大且难以保证收敛,故采用GA构建网络的权值与阈值^[10]。考虑归一化,隐层和输出层传递函数分别采用在[0,1]之间连续可微的tansig和logsig。运行过程的方差平方和与适应度值变化见图2、3所示。用未参加训练的11个样本检验已建网络,结果见表7。平均相对偏差为5.97%,说明网络有较好的预测性能。

2.5 参数寻优

以2.4建立的神经网络作为适应度函数,以提取得率作为适应度值进一步用遗传算法对微波浸提过程的工艺参数寻优。以上述均匀试验样本为初始种群,子串长度为10,染色体长度为50,用gaot工具箱作浮点编码;选择概率为0.09,arithXover交叉运算两次,用多样非均匀变异算法(non unif mutation)进行突变运算。随着遗传代数的增加,结果的适应度值呈递增的趋势。每一代有10组输出值,经过五次100代进化计算,从

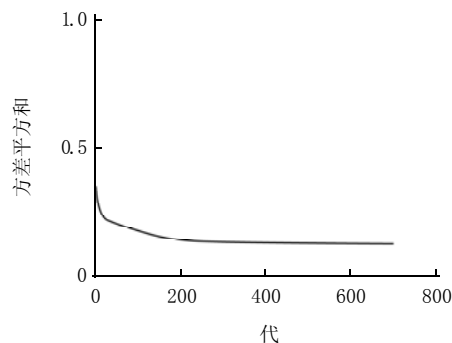


图2 遗传算法的方差平方和

Fig.2 Descending of sum-squared error in GA

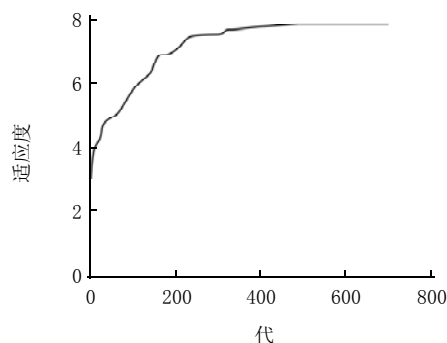


图3 遗传算法适应度变化

Fig.3 Changes of fitness in GA

表7 网络检验结果

Table 7 Results of testing ANN

测试样本	1	2	3	4	5	6
液料比	4	4	4	5	4	4
乙醇浓度(%)	70	60	70	70	70	70
微波功率(W)	100	400	300	300	300	300
时间(min)	5	5	5	5	9	5
搅拌转速(r/min)	700	700	300	700	700	700
试验值(%)	0.43	0.57	0.52	0.52	0.62	0.55
预测值(%)	0.38	0.62	0.53	0.52	0.57	0.52

计算结果中挑选较为理想的方案并通过试验验证预测得率,试验方案和结果见表8。从表8中可看出指标值较

表6 均匀试验方案与结果

Table 6 Schema and result of uniform design

试验号	液料比	乙醇浓度(%)	微波功率(W)	时间(min)	搅拌转速(r/min)	原料(g)	吸光度	得率(%)
1	2(4)	5(60)	7(500)	1(3)	3(500)	9.9998	0.703	0.77
2	4(5)	10(80)	3(300)	2(4)	6(800)	10.0010	0.429	0.58
3	6(6)	4(50)	10(600)	3(5)	9(1100)	10.0010	0.405	0.66
4	8(7)	9(80)	6(400)	4(6)	1(300)	10.0000	0.303	0.57
5	10(8)	3(50)	2(200)	5(7)	4(600)	10.0000	0.292	0.63
6	1(3.5)	8(70)	9(600)	6(8)	7(900)	10.0010	0.758	0.72
7	3(4.5)	2(90)	5(400)	7(9)	10(1200)	10.0000	0.407	0.50
8	5(5.5)	7(70)	1(200)	8(10)	2(400)	9.9995	0.411	0.61
9	7(6.5)	1(90)	8(500)	9(11)	5(700)	10.0000	0.350	0.62
10	8(7.5)	6(60)	4(300)	10(12)	8(1000)	10.0010	0.360	0.73

表8 初步优化试验方案与结果
Table 8 Schema and result after primary optimization

试验号	液料比	乙醇浓度(%)	微波功率(W)	时间(min)	搅拌转速(r/min)	模型得率(%)	实际得率(%)
1	6.67	53.084	465.40	11.9527	481.26	0.7743	0.77
2	6.67	61.452	434.45	11.1431	582.06	0.7214	0.73
3	4.17	52.704	529.95	11.4962	410.25	0.7634	0.75
4	4.00	58.652	546.70	11.9384	916.14	0.7188	0.69
5	4.17	52.704	528.10	11.4962	410.34	0.6829	0.65
6	6.67	50.556	508.15	11.4412	394.41	0.7461	0.76
7	6.67	51.912	472.50	11.4159	783.66	0.7102	0.71
8	4.76	53.008	534.00	11.5732	451.02	0.7381	0.72
9	4.17	53.940	524.40	11.4863	411.51	0.6594	0.64
10	4.55	53.360	514.80	11.5930	487.47	0.7135	0.73

先前均匀设计试验结果有所提高。

以表6均匀试验及表8优化试验的20组数据作为样本用神经网络再次建模,建模方法同2.4,经试差确定隐层神经元数目为7。用未参加训练的样本对模型进行检验,网络的平均相对误差为4.21%,说明模型的预测性有改进;再对得到的网络再使用遗传算法进行优化。最终得到的最佳工艺为:液料比6.25、乙醇浓度54%、微波功率456W、作用时间11.3min、搅拌速率483r/min。此条件下预测得率为0.81%。三次验证实验实际得率均值为0.796%,相对误差为2.73%,在可接受的范围。

2.6 微波提取与水浴提取的结果比较

在液料比为10%、70%乙醇溶剂的条件下,水浴中提取90min时总黄酮提取率为0.62%,乙醇溶剂回收仅在70%左右;在2.5的最佳工艺条件下仅需8min左右即可达到相近的提取率,且溶剂经回收可达90%以上。并且有文献报道传统的水浴提取荞麦黄酮时需要80%浓度乙醇,液料比高达50^[11]。相比之下,本实验的微波提取工艺,在处理等量的原料或得到等量的目标产物时,乙醇用量、乙醇向环境的耗散要少的多,回收更为充分。

3 结 论

3.1 本实验环境下提取相同量的总黄酮,微波浸提法比传统的水浴提取法省时、节能,且溶剂回收率高,能有效减少溶剂耗散对环境的污染。

3.2 利用GA和ANN建立了最优微波浸提体系的一般方法:以因素试验和均匀试验获得ANN的样本,由GA训练给出ANN的权值和阈值,通过GA结合ANN优化可得出工艺过程的最优参数。

3.3 用GA与ANN对荞麦皮粉中总黄酮的微波辅助提取工艺参数进行模拟、优化,得出荞麦皮粉中总黄酮

的MAE过程的最佳工艺为:液料比6.25、乙醇浓度54%、微波功率456W、作用时间11.3min、搅拌速率483r/min。总黄酮实际提取得率为0.796%。

参考文献:

- [1] 陈菁菁,李向荣,等.微波萃取法提取桑叶和桑白皮的黄酮类成分[J].中药材,2006,10(10):1090-1092.
- [2] 刘伟.现代微波化学技术及设备综述[J].现代科学仪器,1999(4):19-23.
- [3] HUANG Tony, ANANDA S. Microwave imaging of three-dimensional dielectric objects using micro-genetical algorithm[C]//Proceedings of the IASTED International Conference on Antennas, Radar, and Wave Propagation, Proceedings of the International Conference on Antennas, Radar, and Wave Propagation. 2004: 111-114.
- [4] MICHAEL V M, et al. Applications of neural networks optimized by the genetic algorithm to microwave systems[C]//IEEE Antennas and Propagation Society, AP-S International Symposium (Digest), 1999(4): 2580-2583.
- [5] GUNEL T, et al. Combination of artificial neural network model with genetic algorithm for the synthesis of microstrip radial stubs[J]. AEU-Archiv fur Elektronik und Ubertragungstechnik, 2000, 54(4): 241-243.
- [6] PRATAP R J, SARIAR S, STEPHANE P, et al. Modeling and optimization of multilayer RF passives using coupled neural networks and genetic algorithms[J]. IEEE MTT-S International Microwave Symposium Digest, 2004(3): 1557-1560.
- [7] 中国药典[M].北京:化学工业出版社,2005:281.
- [8] 刘飞,谢镇远.吸光光度法测定荞麦花叶中总黄酮[J].理化检验,2005,41(2):94.
- [9] 神经网络理论与MATLAB7实现[M].北京:电子工业出版社,2005:260-271.
- [10] PATTHAIAK S S, KHUNTIA B, PANDA D C, et al. Application of a genetic algorithm in an artificial neural network to calculate the resonant frequency of a tunable single-shorting post rectangular patch antenna[J]. International Journal of RF and Microwave Computer-Aided Engineering, 2005, 15(1): 140-144.
- [11] 孙艳华,苗靖.酶法提取荞麦茎叶中黄酮的研究[J].食品工业,2006(3):16-18.