

الحمد لله
الحمد لله



دانشگاه شاهرود

مدیریت تحصیلات تکمیلی

دانشکده علوم

گروه شیمی

پایان نامه جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد در رشته شیمی

**بهینه‌سازی استخراج ترکیبات فنولی و آنتوسیانین از انگور قرمز با
استفاده از روش استخراج مایکروویو و حلال‌های یوتکتیک طبیعی بر
پایه قند به کمک روش‌های یادگیری ماشین و شبیه‌سازی مونت کارلو**

استاد راهنما :

دکتر مصطفی خواجه

استاتید مشاور:

دکتر منصور غفاری مقدم

دکتر جمشید پیری

تهیه و تدوین :

فرشته سادات آریایی فر

شهریور ۱۴۰۴

چکیده

در این مطالعه، اولین تلاش برای بررسی عملکرد روش سطح پاسخ پیش‌بینی‌شده با مدل‌های رگرسیون بردار پشتیبان (PRSM-SVR) و گروه جنگل تصادفی (ERF) در پیش‌بینی بازده ترکیبات فعال بیولوژیکی از انگور قرمز با استفاده از حلال‌های یوتکتیک عمیق طبیعی (NADES) بر پایه قند انجام شده است. شبیه‌سازی مونت کارلو برای تولید دو مجموعه داده جامع حاوی نقاط داده بزرگ در نتیجه ۴۰ اجرای آزمایشی با تغییرات سیستماتیک در پنج پارامتر عملیاتی شامل توان مایکروویو (۷۰۰-۹۰۰ وات)، دما (۵۰-۷۰ درجه سانتیگراد)، زمان استخراج (۱۰-۳۰ دقیقه)، جرم نمونه (۰/۵-۱/۰ گرم) و نرخ افزایش دما (۲/۵-۰/۵ درجه سانتیگراد در دقیقه) استفاده شد. در نتیجه این مجموعه داده‌ها، نتایج استخراج برای محتوای آنتوسیانین کل (TAC) و محتوای فنولی کل (TPC) شبیه‌سازی شد. در مجموعه داده‌های بزرگتر، مدل PRSM-SVR با RMSE برابر با ۰/۱۵ میلی‌گرم بر گرم و RPD برابر با ۲/۸۲ برای TAC و RMSE برابر با ۰/۷۶ میلی‌گرم بر گرم و RPD برابر با ۱/۸۸ برای TPC، دقت پیش‌بینی بالاتری را نشان داد. علاوه بر این، تخمین چگالی هسته، هم‌ترازی بهتری بین مدل و الگوهای توزیع واقعی در مجموعه داده‌های ۵۰۰۰ نقطه‌ای نشان داد که نشان‌دهنده قابلیت اطمینان مدل است. این مطالعه پایه محکمی برای توسعه و اعتبارسنجی فناوری‌های استخراج سبز فراهم می‌کند و با ادغام داده‌های تجربی و شبیه‌سازی شده، روش‌های پردازش پایدار را در آینده پیش می‌برد.

کلمات کلیدی: یادگیری ماشین، شبیه‌سازی مونت کارلو، حلال‌های یوتکتیک عمیق طبیعی، استخراج به

کمک مایکروویو، استخراج سبز

Abstract

In this study, a first attempt is made to investigate the performance of predicted response surface methodology with support vector regression (PRSM-SVR) and Random Forest Ensemble (ERF) models when used to predict the yields of biologically active compounds from red grapes utilizing natural deep eutectic solvents (NADES) based on sugar. The Monte Carlo simulation was utilized to generate two comprehensive datasets containing large data points as a result of 40 experimental runs with systematic variations in five operational parameters including microwave power (700–900 W), temperature (50–70°C), extraction time (10–30 min), sample mass (0.5–1.0 g), and ramping rate (0.5–2.5°C/min). As a result of these datasets, we simulated the extraction outcomes for total anthocyanins content (TAC) and total phenolics content (TPC). In the larger dataset, the PRSM-SVR model showed superior predictive accuracy, with an RMSE of 0.15 mg/g and a RPD of 2.82 for TAC, and an RMSE of 0.76 mg/g and a RPD of 1.88 for TPC. Moreover, kernel density estimation showed a better alignment between the model and actual distribution patterns in the 5000-point dataset, demonstrating the model's reliability. The study provides a robust foundation for the development and validation of green extraction technologies and advances sustainable processing methods in the future by integrating experimental and simulated data.

Keywords: Machine learning, Monte Carlo simulation, Natural deep eutectic solvents, Microwave-assisted extraction, Green extraction



University of Zabol
Graduate school
Faculty of science
Department of chemistry

**The Thesis Submitted for the Degree of Master of Science (In the
field of Analytical Chemistry)**

**Optimization of Phenolic and Anthocyanin
Compounds Extraction from Red Grape
Using Microwave-Assisted Extraction
Method and Sugar-Based Natural Deep
Eutectic Solvents by Machine Learning
Methods and Monte Carlo Simulation**

Supervisor:

Dr. Mostafa Khajeh

Advisors:

Dr. Mansour Ghaffari-Moghaddam

Dr. Jamshid Piri

By:

Fereshte Aryaeifar

September 2025