

## Összefoglaló

Az illóolajok régóta fontos szerepet töltenek be a vegyipar finomkémiai ágazataiban, gyártásuk azonban szintetikus úton nem gazdaságos, így a mai napig, ipari szinten is növényi alapanyagokból nyerik ki őket. Ezen fizikai-kémiai eljárások egyike az adott illóolajat tartalmazó növény részeinek szuperkritikus extrakciója, mely az oldószer kiváló oldási képességei mellett számos további előnye is kiemeli a hagyományos anyagelválasztási módszerek közül. Munkám célja a közönséges levendulában (*Lavandula angustifolia*) található szuperkritikus extrakció révén kinyert illóolaj összetételének megismerése. Kísérleti eredmények felhasználásával vizsgálom az extrakció során kinyert illóolaj összetétele és az extrakció üzemeltetési paramétereinek közötti összefüggést regressziós modellek segítségével. Munkám során LMG és LASSO regressziós módszereket alkalmazok az egyes extrakciós műveleti paraméterek és a növényt érő környezeti hatások relatív súlyának meghatározására a kinyert illóolaj tulajdonságaira gyakorolt befolyásuk szempontjából. A kapott összefüggéseket felhasználva optimális üzemeltetési paramétereket lehet választani a művelthez elvárt mennyiségű és összetételű illóolaj kinyerésére.

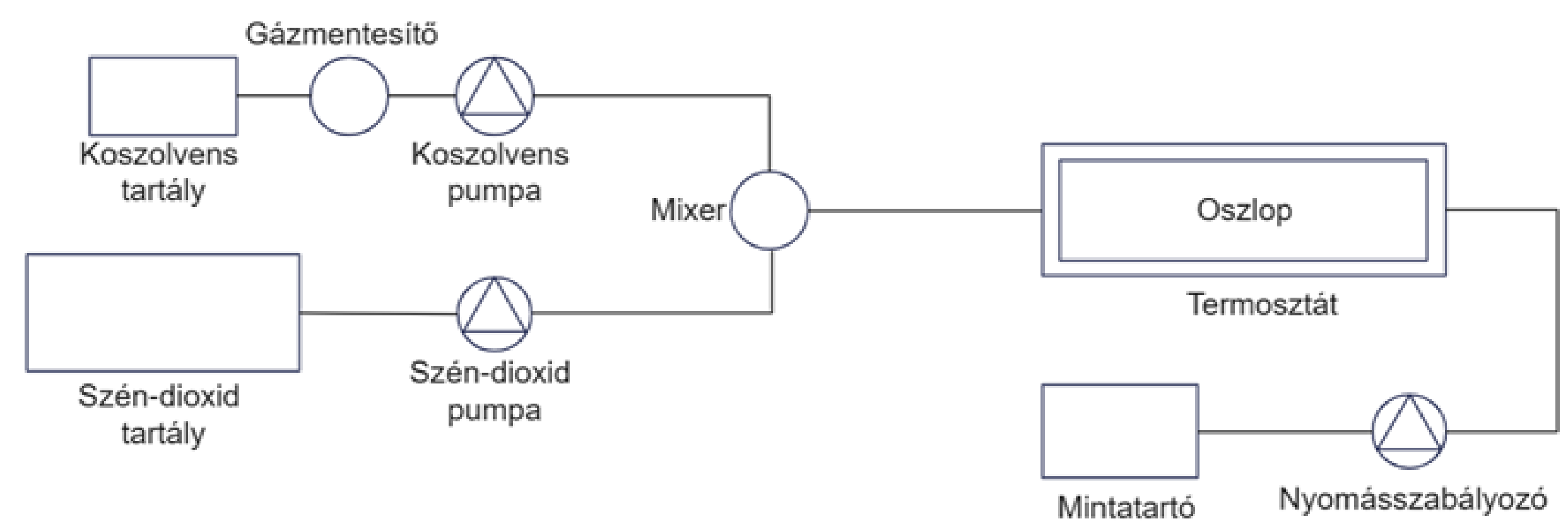
## A levendulaolaj összetétele

A levendulaolajra több hatályban lévő szabvány is vonatkozik. Pontosán ezen szabályozások miatt szükséges a kinyert illóolaj összetételét befolyásolni.

Erre számos paraméter képes, melyek többek között a növényt ért környezeti hatások és műveleti paraméterek. Pontosán emiatt a széleskörű befolyásolás miatt a munka célja, hogy ezen paraméterek fontosságát rangsoroljam az olaj összetételét tekintve.

## Szuperkritikus fluidum extrakció (SFE)

A levendulaolaj kinyerésére számos módszer található az irodalomban, melyek közül a szuperkritikus fluidum extrakciót alkalmaztam számos előnye miatt. Az alkalmazott berendezés felépítése a 1. ábrán látható.



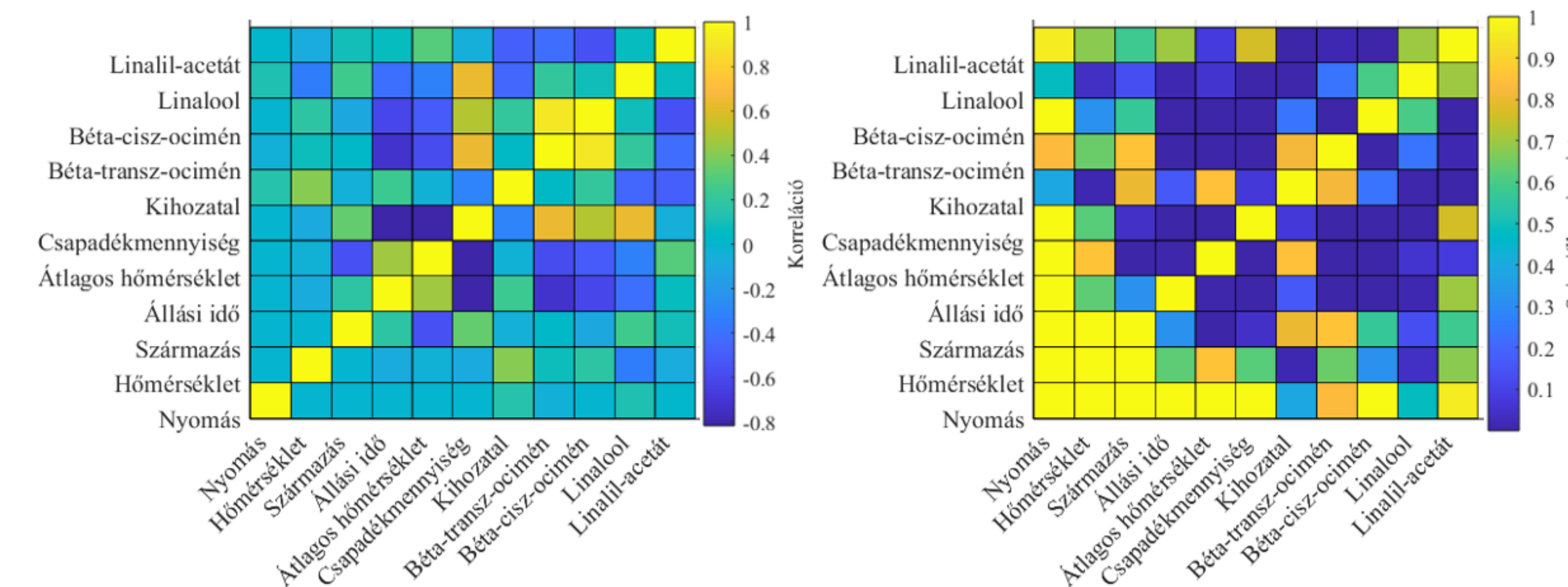
ábra 1. Az alkalmazott szuperkritikus extrakciós berendezés.

## Eredmények – Pearson korreláció és szignifikanciaszint

Az eredmények elsődleges értékelésére Pearson korreláció (1) lett alkalmazva, mely két változó közötti lineáris kapcsolatot értékeli.

$$R(A, B) = \frac{1}{(N-1)} \sum_{i=1}^N \left( \frac{A_i - \mu_A}{\sigma_A} \right) \left( \frac{B_i - \mu_B}{\sigma_B} \right) \quad (1)$$

Az adathalmaz Pearson korrelációs mátrixa és az egyes értékek szignifikanciaszintje a 2. ábrán látható.



ábra 2. Az egyes fő komponensek korrelációs mátrixának (balra) és p-értékek mátrixának (jobbra) szintértéke.

## A paraméterek rangsorolására alkalmazott módszerek

### LMG indexek

Az egyes prediktorokhoz tartozó LMG indexek megadják, hogy átlagosan mennyivel ad pontosabb becslést a felállított lineáris regressziós modell amennyiben benne van a prediktorok között a vizsgált változó, ahhoz képest, amikor nincsen benne. Az LMG indexek a 2-es és 3-as összefüggések alapján számíthatók.

$$seqR^2_{y(X_j|X_{\pi})} = R^2_{y(X_{\nu \cup \{j\}})} - R^2_{y(X_{\nu})} \quad (2)$$

$$LMG_j = \frac{1}{d!} \sum_{\pi \in P\{1, \dots, d\}} seqR^2_{y(X_j|X_{\pi})} \quad (3)$$

Az illesztett modell predikciós képességének értékelése kersztvalidáció segítségével lett elvégzve.

## LASSO regresszió

A LASSO regresszió egy olyan lineáris regressziós becslés, mely során a súlyozó paraméterek számításakor egy büntetőparaméter ( $\lambda$ ) is belekerül az egyenletbe (4). Az optimális  $\lambda$  kiválasztása után az illesztett modell preikciós képessége keresztvalidáció segítségével lett értékelve.

$$\hat{\beta} = \operatorname{argmin}_{\beta} (y - X\beta)^T (y - X\beta) + \lambda \|\beta\|_1 \quad (4)$$

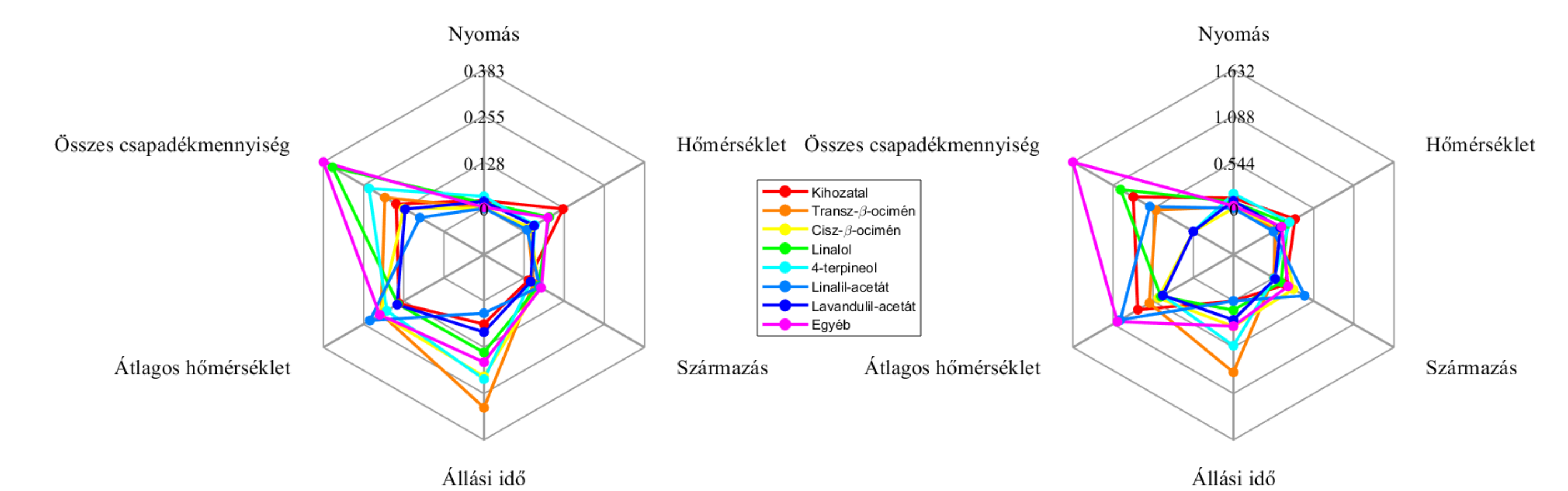
## Eredmények

A predikciós képesség értékelése (kersztvalidáció) során kapott átlagos  $R^2$  értékek a legfontosabb prediktor változók esetében 2. táblázatban láthatók. A LASSO regresszió esetében az optimális  $\lambda$  értéket alkalmazva kapott  $R^2$  értékek lettek feltüntetve.

Becsült változó	Átlagos $R^2$ érték lineáris regresszió esetében	Optimális LASSO paraméter ( $\lambda$ ) [-]	Átlagos $R^2$ érték LASSO regresszió esetében
Kihozatal	0.596	0.025	0.846
E- $\beta$ -ocimén	0.623	0.020	0.801
Z- $\beta$ -ocimén	0.495	0.040	0.698
Linalool	0.636	0.045	0.887
Linalil-acetát	0.528	0.025	0.612
Egyéb	0.674	0.025	0.852

táblázat 2. A predikciós képesség értékelése során kapott átlagos  $R^2$  értékek mindkét módszer esetében, illetve a LASSO regresszió során alkalmazott optimális  $\lambda$  értékek a főkomponensek esetében.

A kapott LMG indexek és LASSO regresszió során kapott súlyozó paraméterek a 3. ábrán láthatók pókhálódiagramon ábrázolva.



ábra 3. A regresszorok fontosságai vizsgálata során LMG indexek (bal) és súlyok a LASSO regresszióból (jobb).

## Mérési paraméterek

### Műveleti paraméterek:

$T$ [°C]	40°C	45°C	50°C	55°C	60°C
100	7M, 28M, 31M, 34M	10M, 16M	1M, 22M	13M, 19M	4M, 25M
150	8M, 29M, 32M, 35M	12M, 17M	2M, 23M	14M, 20M	5M, 26M
200	9M, 30M, 33M, 36M	11M, 18M	3M, 24M	15M, 21M	6M, 27M

táblázat 1. A szuperkritikus extrakció vizsgálatához alkalmazott kísérleti mátrix.

### Időjárási paraméterek:

- virágzás alatti átlagos hőmérséklet
- virágzás alatti összes csapadékmennyiség

### Feldolgozási paraméterek:

- származás helye
- szüretelés és extrakció között eltelt idő (állási idő)

## Összefoglalás

Összegezve az alkalmazott módszerek azt mutatták, hogy az olajösszetételt legnagyobb mértékben az időjárást jellemző paraméterek befolyásolják, azonban az extrakciós hőmérséklet is nagy szerepet játszik az olaj kihozatal befolyásolásában. A modellek illesztése során a lineáris regresszió predikciós képességének  $R^2$  értékei általában 0.5 és 0.7 között mozogtak és minden változó esetében 0.6 és 0.9 közé növekedtek a LASSO regresszió esetében.

## Hivatkozások

- [1] Ulrike Grömping. Variable importance in regression models. *Wiley interdisciplinary reviews: Computational statistics*, 7(2):137–152, 2015.
- [2] Jonas Ranstam and Jonathan A Cook. Lasso regression. *Journal of British Surgery*, 105(10):1348–1348, 2018.
- [3] Philip Sedgwick. Pearson's correlation coefficient. *Bmj*, 345, 2012.