



Универзитет у Приштини
Факултет техничких наука

Драгана Радосављевић

КОРИШЋЕЊЕ МЕТОДА ИСТРАЖИВАЊА ПОДАТАКА ЗА
ОДРЕЂИВАЊЕ МАТЕМАТИЧКОГ МОДЕЛА КИНЕТИКЕ
ТЕХНОЛОШКИХ ПРОЦЕСА И ПРЕПОЗНАВАЊЕ
КАРАКТЕРИСТИКА УЗОРАКА

- докторска дисертација -

Косовска Митровица, 2017.

Садржај

Извод.....	1
Abstract.....	2
1. Увод.....	3
1.1. Предмет и циљ истраживања.....	3
1.2. Хипотезе и методе које су коришћене у истраживању.....	4
1.3. План истраживања и структура рада.....	5
2. Методе истраживања података.....	7
2.1. Прикупљање података.....	9
2.2. Препроцесирање података.....	9
2.3. Моделовање система – процеса.....	11
2.4. Оптимизација.....	14
2.5. Алгоритми истраживања података.....	14
2.5.1. Регресија.....	15
2.5.1.1. Левенберг-Маркварт алгоритам.....	18
2.5.2. Стабла одлучивања.....	22
2.5.2.1. Класификациона стабла.....	23
2.5.2.2. Регресиона стабла.....	25
2.5.3. Метода k најближих суседа.....	26
2.5.4. Наивни Бајесов класификатор.....	28
2.5.5. Метода потпорних вектора.....	29
2.5.6. Неуронске мреже.....	31
2.6. Евалуација модела.....	33
2.6.1. Евалуација модела класификације.....	34
2.6.2. Евалуација модела регресије.....	36
2.7. Алати за истраживање података.....	39
3. Процес хидродестилације и преглед досадашњих релевантних истраживања.....	41
3.1. Технолошки процеси.....	43
3.1.1. Поступци добијања етарских уља.....	43
3.2. Етарско уље клеке (<i>Juniperus communis</i> L.).....	44
3.3. Кинетика хидродестилације етарског уља – преглед досадашњих истраживања.....	46
3.3.1. Модел Бенјусефа.....	48
3.3.2. Модел Касел-Варгас.....	49
3.3.3. Модел Буткежире.....	50

3.3.4. Модели кинетике псеудо првог реда и дифузиони модели.....	52
3.3.5. Модел Совова-Алексовски	53
3.3.6. Модел Милојевића	54
3.3.7. Емпиријски модели	55
4. Експериментални подаци	56
4.1. Експериментални подаци за плодове клеке	56
4.2. Експериментални подаци за различите биљне материјале	64
5. Моделовање података.....	69
5.1. Моделовање кинетике процеса хидродестилације	69
5.2. Вредности добијене на основу модела.....	70
5.3. Поређење добијених резултата са познатим у литератури	75
5.3.1. Поређење резултата за клеку.....	78
5.3.2. Поређење резултата за остале биљне материјале	86
6. Процена потенцијално укупне количине издвојеног етарског уља.....	94
6.1. Модел.....	94
Модел 1 – модел Совова-Алексовски.....	94
Модел 2 – модел Милојевића.....	94
Модел 3 – полиномно логаритамски модел	95
6.2. Резултати процењене вредности за q_{∞} и поређење одређених вредности са експериментално добијеним резултатима	95
6.3. Коришћење процењених вредности параметра q_{∞}	106
6.4. Модел процеса хидродестилације без параметра q_{∞}	109
6.5. Процена економске исплативости	112
6.5.1. Софтверско решење	117
7. Откривање веза између атрибута узорака клеке применом алгоритама истраживања података	119
7.1. Класификациони модели	119
7.2. Оцењивање резултата класификације	120
Класификација према хидромодулу	122
Класификација према начину припреме биљне дроге	123
Класификација према дужини трајања припреме	125
Класификација према дужини трајања бубрења	126
Класификација према експозицији терена	128
Класификација према надморској висини	129
7.3. Уочене зависности	131
Закључак.....	132
Литература	134

<i>I - Аутор</i>
Име и презиме: Драгана Радосављевић
Датум и место рођења: 17. 06. 1972. Косовска Митровица
Садашње запослење: стручни сарадник
<i>II - Докторска дисертација</i>
Наслов: Коришћење метода истраживања података за одређивање математичког модела кинетике технолошких процеса и препознавање карактеристика узорака
Број страница: 146
Број слика: 39
Број библиографских података: 140
Установа и место где је рад израђен: Факултет техничких наука, Кос. Митровица
Научна област (УДК): Вештачка интелигенција - УДК 004.8
Ментор: др Синиша Илић, ванр. проф. ФТН Косовска Митровица
<i>III - Оцена и одбрана</i>
Датум пријаве теме: 20. 09. 2016. год.
Број одлуке и датум прихватања докторске дисертације: 1450/3-3; 14. 12. 2016.
Комисија за оцену подобности теме и кандидата: 1. др Синиша Илић, ванр. проф. ФТН Косовска Митровица 2. др Предраг Јаничић, ред. проф. Математички факултет Београд 3. др Алемпије Вељовић, ред. проф.. ФТН Чачак
Комисија за оцену докторске дисертације: 1. др Синиша Илић, ванр. проф. ФТН Косовска Митровица. - ментор 2. др Петар Спалевић, ред. проф. ФТН Косовска Митровица – председник 3. др Алемпије Вељовић, ред. проф.. ФТН Чачак – члан
Комисија за одбрану докторске дисертације: 1. др Синиша Илић, ванр. проф. - ментор 2. др Петар Спалевић, ред. проф. – председник 3. др Алемпије Вељовић, ред. проф. – члан
Датум одбране дисертације: 02. 11. 2017. год.

Захваљујем се мом ментору, проф. др Синиши Илићу на несебичној помоћи и непроцењиво вредним саветима који су били од пресудног значаја за успешну реализацију ове дисертације. Част је и привилегија имати таквог ментора!

Велику захвалност дугујем и проф. др Влади Вељковићу на подстицајима и саветима при изради овог рада. Такође се захваљујем и проф. др Предрагу Јаничићу на драгоценим сугестијама.

Изнад свега, захваљујем се Господу што ми је подарио дивну породицу и пријатеље који су ме све време, уз бескрајну љубав и разумевање, безрезервно подржавали.

Аутор

Извод

Истраживање података као мултидисциплинарно поље информатике које се бави откривањем знања у подацима је идеално за примену у научним истраживањима.

У оквиру овог рада приказани су резултати моделовања кинетике хидродестилације етарског уља. Главни циљ овог моделовања је заправо креирање математичког модела (облика једначине) који добро описује мерену промену издвојене количине етарског уља у току времена. У раду је развијен нови полиномно-логаритамски модел чији се параметри (кофицијенти) могу оптимизовати за сваки конкретни узорак и при томе се постиже боље слагање са експерименталним – мереним вредностима у односу на постојеће општеприхваћене кинетичке моделе овог процеса.

У досадашњим истраживањима, потенцијално укупна количина издвојеног етарског уља није могла да се одреди. У свим досадашњим резултатима за вредност потенцијално укупне количине узимана је последња измерена вредност у солидно великом временском тренутку. Предложени модел кинетике хидродестилације у раду омогућава и одређивање ове величине по први пут на основу експериментално измерених вредности издвојене количине етарског уља у почетном делу процеса хидродестилације. Експериментални резултати издвојене количине уља у великом временском интервалу се прилично тачно поклапају са израчунатим вредностима помоћу развијеног модела чиме се омогућава рано утврђивање потенцијално укупне количине етарског уља које се може издвојити из биљног материјала.

Како је процес хидродестилације скуп, у раду је развијен и алгоритам и софтвер за процену економске исплативости издвајања етарског уља у односу на утрошено време и ресурсе. Овако дефинисан софтвер може послужити као алат у процесу планирања хидродестилације у индустрији.

Приликом сакупљања узорака за обраду биљног материјала који је коришћен за моделовање, сваки узорак је описан одговарајућим карактеристикама (атрибутима). У раду су пронађене и везе између атрибута које се на први поглед нису уочавале применом различитих поступака класификације и те везе су детаљно описане.

Кључне речи: *истраживање података, предикција, кинетика хидродестилације, издвајање етарског уља, регресија, класификација*

Abstract

Data mining is ideal for use in scientific research as a multidisciplinary field of information technology that deal with knowledge discovery in data.

In this dissertation are presented the results of modelling of kinetics of essential oil hydro-distillation. The main objective of this modelling is actually creating a mathematical model (in equation form) that fit the measured change of extracted amounts of essential oils over time. A new polynomial-logarithmic model is developed, whose parameters (coefficients of equation) can be optimised for each specific sample. This model gives better matching of calculated and experimental (measured) values compared to the results of current generally accepted kinetic models of the process.

In the current literature, the potentially total quantity of extracted essential oil could not be calculated. In all former results, the last measured value taken in a decent time interval is treated as total quantity of essential oil extraction. The proposed model of kinetics of hydro-distillation enables for the first time the calculation of this value based on only several measured values of essential oil quantity extracted in the initial part of the hydro-distillation process. The measurements of quantity of oil extracted in a fair large time interval pretty well match with those obtained from the model. Hence, this model enables early estimation of the potential total quantity of essential oil which may be extracted from the plant material.

Since the hydro-distillation is an expensive process, in this paper is presented an algorithm and software (application) for evaluation of economic costs effectiveness of essential oils extraction in relation to the operation time and resources. Such software can be used in industry as a tool for the planning of hydro-distillation process.

During the collection and storing of the plant material which is used for the modelling, appropriate characteristics (attributes) are assigned to each sample. Using the various methods of classification, the hidden relations between the attributes are discovered, and these relations are described in detail in dissertation.

Keywords: *data mining, prediction, hydro-distillation kinetics, extraction of essential oils, regression, classification*

1. Увод

Огромна количина података и стални раст броја база података које прате разне области рада појединца или организованих система превазилазе могућности обраде традиционалним средствима.

Употребом различитих метода, алгоритама и алата над великим колекцијама података, могу се пронаћи обрасци понашања и вредне „скривене зависности“ које су у вези са новим до тада непознатим чињеницама и релацијама које се могу искористити за добијање валидних предикција.

Савремене технологије омогућавају да сакупљање података буде једноставно а њихово складиштење јевтино. Подаци се могу сакупљати уз помоћ специјализованог хардвера, софтверских алата, или „ручно“. Тако сакупљени подаци се могу касније велики број пута анализирати различитим методама и за различите намене.

Сакупљање података је неизоставни део и научних истраживања праћених експериментима. Контролисано емпиријско сакупљање и дигитализовање величина од интереса у току времена за сваки експеримент је знатно олакшано употребом јевтиних микропроцесора и модерних сензора.

Реална је претпоставка да сваки процес који је предмет научног истраживања има своје законитости и да се извршава по одређеном правилу. Кинетика извршења сваког процеса зависи од одређених особина експерименталних узорака.

Довољан број експерименталних података пружа могућност да се применом метода вештачке интелигенције генерализује веза која постоји између својстава (улазних и излазних величина) експериментима праћеног процеса.

1.1. Предмет и циљ истраживања

Чињеница је да се етарска уља, као природни производи, налазе у живи научног интересовања. То се може уочити и из њихове све веће заступљености и комерцијалног значаја, посебно у медицини, фармацији, козметици, ветерини, прехранбеној индустрији, агрономији, индустрији ароматичних напитака, арома-терапији итд.

Пошто је у биљном материјалу етарско уље заступљено обично у веома малим количинама, неопходно је применити посебне технике да би се добио што већи принос етарског уља, односно - потребно је унапредити и оптимизовати процес производње етарских уља. Најзаступљенија техника добијања етарског уља је хидродестилација. Моделовањем кинетике хидродестилације етарских уља постиже се боља контрола и већа ефикасност овог скупог процеса.

У овом раду је истражена кинетика хидродестилације етарског уља из биљних материјала, с посебним освртом на етарско уље из бобица клеке (*Juniper communis* L.) На основу анализе сакупљених експерименталних података о приносу етарског уља у току времена, развијен је математички модел кинетике хидродестилације етарског уља, заснован на математичким законима, који је показао веома добро слагање са експериментално добијеним подацима.

За сваки узорак бобица клеке (из којих је изршено издвајање етарског уља) сакупљени су и подаци о географском пореклу, времену брања, надморској висини, експозицији терена на коме је убрана клека, као и подаци о: начину припреме, времену трајања бубрења, хидромодулу, брзини хидродестилације и густини издвојеног етарског уља.

Анализом ових података уочене су зависности између појединих атрибута који се односе не само на сам процес хидродестилације, већ и на припрему и порекло биљног материјала.

Циљеви истраживања овог рада су:

- Развијање и прилагођавање алгорита истраживања података на проблем хидродестилације, конкретно на издвајање етарског уља, развој математичког модела кинетике издвајања етарског уља и његово поређење са најпознатијим моделима из литературе. Добијени резултати су упоређени са реалним вредностима добијеним на основу експерименталних мерења и израчунато је њихово одступање коришћењем више квантитативних показатеља. Тачност тако добијених резултата је упоређена са тачношћу резултата који су објављени у литератури.
- Откривање метода за рано утврђивање потенцијално укупне количине етарског уља коју је могуће издвојити из сваког узорка. Утврђивање укупне количине етарског уља традиционалном методом експерименталног мерења је, иначе, скуп процес који захтева много времена.
- Оптимизација потрошње енергије и одређивање оптималног времена за завршетак процеса хидродестилације, коришћењем развијеног полиномно-логаритамског модела.
- Утврђивање законитости и веза које постоје међу атрибутима узорака бобица клеке и могућност препознавања једних атрибута на основу других.

1.2. Хипотезе и методе које су коришћене у истраживању

На основу задатих циљева и проучавања претходних истраживања из релевантне литературе и њихових закључака, могу се дефинисати хипотезе које представљају претпостављено објашњење чињеница и појава које се верификују у истраживању.

Основна хипотеза је:

- Употребом метода истраживања података, а на основу сакупљених података, могуће је, са тачношћу већом од оне доступне у литератури, генерисати математички модел одвијања процеса у времену и на основу почетних мерења предвидети даљи ток одвијања процеса.

Овај рад је заснован и на следећим релевантним посебним хипотезама:

- Правилном проценом оквирног модела процеса за који треба одредити параметре методом математичке регресије, добиће се тачнији резултати.
- Употребом методе математичке регресије са добро процењеним оквирним моделом добиће се тачнији модел од оних у доступној литератури.
- На основу мерених вредности величина које карактеришу почетни део одвијања процеса у току времена, могуће је предвидети промену истих у наставку тог процеса за сваки узорак који на одређени начин мења ток одвијања процеса.
- На основу анализе предикције будуће промене величина које карактеришу процес, могуће је израчунати процентуални однос количине података потребних за добијање задате високе тачности предикције и укупне количине података.
- Анализиране карактеристике узорака је могуће препознати на основу других карактеристика истих узорака, као и током извршења процеса над непознатим узорком.

За реализовање циљева истраживања коришћене су: метода математичке регресије, регресиона стабла, неуронске мреже, метода потпорних вектора (eng. *support vector machine*), стабла одлуке, наивни Бајесов метод, метод k најближих суседа.

У циљу једноставнијег и бољег сагледавања резултата и њихове прегледније упоредивости, коришћени су одговарајући табелрни и графички прикази.

За имплементацију наведених метода коришћени су програмски пакети R и WEKA.

1.3. План истраживања и структура рада

У уводном поглављу представљени су предмет и циљеви истраживања, полазне хипотезе, методологија и план реализације рада.

У другом поглављу су представљене методе истраживања података које су коришћене за остваривање циљева овог рада.

У трећем поглављу је описан процес хидродестилације и преглед досадашњих релевантних истраживања.

У четвртном поглављу су описани експериментално добијени подаци за узорке који се односе на бобице клеке и за узорке који се односе на различите биљне

материјале. Осим тога, за узорке који се односе на бобице клеке описани су параметри који прате процес хидродестилације.

У петом поглављу су анализирани подаци сакупљени у процесу издвајања етарског уља хидродестилацијом, показано је моделовање процеса помоћу математичке регресије и добијени резултати су упоређени са резултатима познатим у литератури.

У шестом поглављу је анализирана тачност процене потенцијално укупне количине издвојеног етарског уља, добијене на основу података из почетног дела процеса хидродестилације. Приказано је колико тако добијена вредност одступа од вредности одређене експериментом. У овом поглављу је описан и алгоритам и софтверско решење за процену економске исплативости издвајања етарског уља у односу на утрошено време и ресурсе.

У седмом поглављу су анализирани сакривене зависности својстава узорака клеке. На основу уочених зависности и веза које постоје између атрибута узорака, извршено је препознавање одређених атрибута узорака на основу других познатих атрибута.

У закључку су приказани конкретни остварени резултати, њихов допринос, као и план и правци могућих будућих истраживања.

У последњем поглављу је наведена коришћена литература.

2. Методе истраживања података

У савременим условима живота користи се огроман број података који се повећава из дана у дан. То су подаци из разних области људске делатности који се односе на кориснике услуга, клијенте банака, пацијенте болница, временске прилике, технолошке процесе, информације из разних научних области објављене на интернету и др. Извори тих података су различити (аналитички, интерни, екстерни), а информације нумеричке или дескриптивне. Велике количине сакупљених података складиште се у базама података, а резултат тога је „богатство“ подацима и недостатак корисних информација.

Наиме, сирови подаци сами по себи немају неку значајну вредност, али уколико се адекватно припреме и анализирају, они могу довести до откривања знања које потенцијално може бити од значаја.

Знање које се открива треба некако „извући“ из података, јер оно тамо није експлицитно описано. Идеја је да се из велике количине података аутоматским „просејавањем“ извуче комадић корисног знања.

За то се користе технике истраживања података (eng. *data mining*), „рударења“ података, или технике трагања кроз податке.

Истраживања података је релативно нова дисциплина која се најчешће примењује за „извлачење“ корисних знања из пословних података. Међутим, ова дисциплина је такође корисна и у неким научним применама где се традиционална анализа података све више допуњује емпиријским приступом.

Основни задатак овог интердисциплинарног поља информатике је нетривијална екстракција информација из података, и то оних информација које су имплицитне, претходно непознате и потенцијално корисне.

Технике истраживања података се могу дефинисати као процес проналажења сакривених законитости и веза међу подацима. Ове технике, поред традиционалних алата за анализу података, користе и алате вештачке интелигенције, машинског учења и база података. Знање, откривено на тај начин, може се употребити за предвиђање величина које могу бити од интереса у неким будућим ситуацијама.

За решавање наведеног проблема примењују се следеће технике истраживања података (eng. *data mining*) [1]:

- Регресија (eng. *regression*) – предвиђање нумеричке вредности жељеног излаза за посматрани пример на основу вредности неких променљивих. Између променљивих чије су вредности познате и променљиве чија се вредност предвиђа постоје линеарне или нелинеарне зависности.
- Класификација (eng. *classification*) – одређивање припадности примера некој од преодређених постојећих класа на основу атрибута који га описују.

- Сумаризација (eng. *summarization*) – пресликавање података у подскупове са придруженим (једноставним) описима, при чему се из базе издвајају или изводе репрезентативне информације.
- Груписање или кластеровање (eng. *clustering*) – разврставање јединки у групе у којима је постигнута њихова највећа сличност. У оквиру овог поступка одређују се одговарајући атрибути како би се извршило најбоље груписање у кластере који нису унапред одређени.
- Придруживање (eng. *association rules*) – откривање потенцијално важних и интересантних веза међу атрибутима. То су правила АКО - ОНДА. Због експоненцијалног раста простора који се претражује, циљ је да се на најфикаснији начин издвоје најинтересантнији обрасци.
- Детекција девијација (или откривање аномалија) (eng. *change and deviation detection*) – проналажење ретких случајева који се понашају прилично различито у односу на претходне резултате или нормативне вредности.

Области примене техника истраживања података су бројне и разноврсне. Неке од њих су:

- препознавање писаног текста
- медицинска дијагностика
- препознавање звучних записа
- класификација слика
- процена ризика кредитирања
- предвиђање продаје
- предвиђање временске прогнозе
- кретање берзе
- моделовање процеса
- предвиђање оптерећења (код електрана, телефонских централа и др.)
- анализа тржишта
- откривање превара
- корпоративна анализа и управљање ризицима
- контрола производње
- спорт
- откривање нових законитости у науци
- паметно претраживање
- аутоматско превођење говора
- лоцирање (идентификација) и праћење објеката у сликама, на филму, online...

Примена истраживања података (eng. *data mining*) у науци има много заједничког са применом истраживања података на пословним подацима. У већини научних истраживања забележени подаци се упоређују са теоријом која је заснована на физичким законима. На основу добијеног оптималног математичког модела могу се одредити физички параметри. Осим тога, могуће

је да се емпиријским моделом и учењем из искуства добије теоријска генерализација која можда није фундаментална, али може дати добро разумевање физичких процеса и имати практичну корист. Било који резултат добијен применом неке технике истраживања података мора се уклопити у постојеће знање из тог домена, па је отуда укључивање експерата из тог домена кључно за процес истраживања података.

Процес истраживања података се састоји од прикупљања података, њиховог препроцесирања, анализирања и добијања корисних сазнања из података [2].



Слика 1. Истраживање података (data mining) [2]

2.1. Прикупљање података

Прикупљање података може захтевати примену специјализованог хардвера (нпр. мреже сензора), софтверских алата или рад истраживача (прикупљање анкета, визуелно мерење...) Иако је ова фаза веома специфична и често изван поља деловања аналитичара истраживања података, добар избор алата за прикупљање података може значајно утицати на читав процес. Сакупљени подаци се често чувају у специфичним базама података.

2.2. Препроцесирање података

Квалитет података је пресудан фактор од кога зависи успешно истраживање података (eng. *data mining*). Веома значајну улогу у постизању већег квалитета података имају различити поступци „чишћења“ података, као и препроцесирање података. Основна сврха препроцесирања је уклањање „шума“ (eng. *noise*) из скупа циљних података.

Подаци у изворном облику могу бити некомплетни, атрибути могу да садрже недостајуће вредности (eng. *missing values*) или се може појавити недостатак атрибута. Такође, у оквиру самих података може се појавити неконзистентност и сл.

Као најзначајнији методолошки процеси препроцесирања података, могу се издвојити:

- **Агрегација** – комбиновање два или више атрибута (или објеката) у један атрибут (или објекат).

Разлози за примену агрегације:

- Мањи сетови података, услед редукције података, захтевају мање меморије и краће време обраде, па самим тим агрегација омогућава примену захтевнијих алгоритама за истраживање података.
- Агрегација може деловати на промену обима и размере посматраног скупа података, пружајући, уместо ниског, висок ниво приказа података.
- Агрегирани подаци су стабилнији.

– **Дијагностика недостајућих вредности**

Постоји мноштво метода за решавање проблема недостајућих вредности, а избор одговарајуће зависи од проблема који се решава.

Неке од постојећих метода су:

- игнорисање примера,
- употреба глобалне константе за попуњавање непознатих вредности
- Употреба средње вредности или медијана, израчунатих коришћењем свих примера за попуњавање недостајућих вредности,
- употреба средње вредности или медијана, израчунатих коришћењем само примера који припадају истој класи, за попуњавање недостајућих вредности,
- употреба неке од техника истраживања података за предвиђање недостајућих вредности.

– **Узорковање** – главна техника за селекцију података

Често се користи због тога што је обрада целокупног скупа података од интереса најчешће превише скупа и временски захтевна. Подаци из узорка могу послужити подједнако добро као и целокупни скуп података, уколико је узорак репрезентативан.

– **Смањење димензионалности**

Са порастом димензионалности подаци постају све ређи у простору који заузимају. Смањењем броја димензија, односно броја атрибута који описују сваки објекат, одстрањују се ирелевантне одлике или се смањује шум, што директно утиче на боље резултате алгоритама за истраживање података. Тиме се, такође, олакшава визуелизација података, смањују временски и просторни захтеви алгоритама за истраживање података.

– **Селекција атрибута** (eng. *feature selection*) - то је поступак откривања и уклањања нерелевантних атрибута, односно други начин да се смањи димензионалност података. Уклањање редувантних и нерелевантних атрибута не доводи до губитака података, већ се тиме повећава брзина алгоритама истраживања података, а у неким случајевима се постиже и повећање прецизности, или чак и једноставнија интерпретација постигнутог знања.

Најчешћа подела техника селекције атрибута је на филтер технике (eng. *filter techniques*) и технике омотача (eng. *wraper techniques*). Технике омотача укључују селекцију атрибута у изградњи модела, док је код филтер техника евалуација подскупа независна од алгорита учења [3].

- **Креирање атрибута** – Подразумева креирање нових атрибута који могу да обухвате важније информације у скупу података, него што то чине иницијално изабрани атрибути.
- **Дискретизација и бинаризација** – Код неких алгоритама истраживања података неопходно је да вредности атрибута буду дискретног типа (неки класификациони алгоритми), док је код неких неопходно да вредности атрибута буду бинарног типа (нпр. алгоритми за проналажење асоцијативних правила), па је често неопходна њихова трансформација. Трансформација непрекидних (континуалних) у категоријске атрибуте (атрибуте дискретног типа) је дискретизација, а трансформација непрекидних и дискретних атрибута у бинарне атрибуте – бинаризација.
- **Трансформација атрибута** – Циљ је да комплетан скуп вредности добије неку жељену особину. Како би се целокупан скуп вредности (датог атрибута) мапирао на нови скуп вредности, бира се функција за трансформацију (или нормализацију), након чије примене се свака стара вредност може идентификовати помоћу једне од нових вредности.

2.3. Моделовање система – процеса

Модел се може дефинисати као опис суштинских особина реалног објекта који о њему у погодној форми исказује све неопходне информације [38]. Другим речима, може се рећи да модел представља хипотезу о начину на који ће се одвијати неки процес, при чему се анализом тог модела могу добити одговори о понашању оригиналног процеса.

Моделовање је процес коришћења модела уместо реалног објекта (система), тј. моделовање представља покушај веродостојне замене система одговарајућим моделом.

Полазну тачку за одређивање модела чине резултати посматрања и мерења која се односе на посматрани објекат (систем). То се објашњава чињеницом да сваки посебан резултат посматрања система има мање-више сличне (али не и идентичне) карактеристике и особине, што значи да је неопходно урадити више посматрања (мерења) да би се добио што веродостојнији модел посматраног реалног система. Ослањајући се на резултате посматрања, пројектује се модел који одговара реалном проблему, на основу кога се формирају закључци и употпуњују теоријска сазнања. Руководећи се овим закључцима, планирају се нови експерименти и посматрања чији је задатак да се потврде или оповргну та нова теоријска сазнања.

Процес моделовања занемарује споредне и мање вредне одлике оригиналног система, а наглашава његова битна својства у сврху ефикасније анализе његовог понашања. Неопходно је да модел не буде сувише комплексан да би могла да се врши даља математичка анализа, али, такође, треба одредити меру идеализације реалног процеса како не би биле запостављене његове примарне особине.

Детаљним проучавањем оригинала долази се до модела чија се дијагностика практично може поистоветити са дијагностиком оригинала.

Постоје различите методологије моделовања, тако да се може извршити класификација модела на основу њихових различитих карактеристика. Пошто се сви инжењерски задаци решавају искључиво коришћењем математичког описа проблема, у овом раду ће посебна пажња бити посвећена математичким моделима.

Математички модел се може дефинисати као скуп математичких релација (формула, једначина, неједначина, логичких услова, оператора итд.) које описују функционисање система, односно дефинишу везе између појединих физичких величина у посматраном процесу.

Математички модел је само једна од могућих апроксимација реалног система. Он представља мање или више упрошћену верзију стварних веза између величина које карактеришу неки процес и одражава најважније карактеристике процеса. Добрим математичким моделом сматра се онај модел који одступа од реалне слике у границама толеранције, који притом није сувише комплексан, што би га практично чинило неупотребљивим за оптимизацију.

Математички модели се могу класификовати на неколико начина [39]:

- Линеарни и нелинеарни – Уколико сви оператори у математичком моделу показују линеарност, модел сматрамо линеарним. У супротном модел се сматра нелинеарним.
- Детерминистички и стохастички – Модел у коме је сваки скуп променљивих стања једнозначно одређен параметрима и скупом претходних стања ових променљивих, је детерминистички. Насупрот томе, стохастички модел садржи у себи случајности, а променљиве стања нису описане јединственим вредностима, већ углавном функцијама вероватноће.
- Статички и динамички - Статички модели се користе за опис система у стационарном стању, где су вредности улазних и излазних променљивих константе, које нису нужно и међусобно једнаке. За разлику од статичких, који не зависе од времена, динамички модели зависе од времена, па су промене променљивих обично приказане у облику диференцијалних једначина.
- Континуални и дискретни – Модели који се приказују у функцији од времена називају се континуални. Дискретни (дисконтинуални) модели не узимају у обзир време, вредности варијабли су међусобно неповезане и независне, и обично се приказују хистограмом.
- Дедуктивни, индуктивни и слободни модели - Дедуктивни модел чини логичка структура базирана на теорији и закључивању. Индуктивни модели настају из емпиријских сазнања и њихових генерализација. Слободни или „пливајући“ модели се базирају на процени очекиваних односа између променљивих.
- Модели црне, беле и сиве кутије. Када не постоји адекватно априорно знање о реалном процесу, модел система се креира на основу расположиве мерне информације о улазу и излазу система, често и без адекватних

информација о структури и релацијама унутар система – модел црне кутије (eng. *black box*). У случају када је модел изведен само помоћу дедуктивног приступа, применом физичких закона и процењених вредности параметара на основу физичких габарита реалног процеса, математички модел се дефинише као модел беле кутије (eng. *white box*). Код модела сиве кутије (eng. *gray box*), на основу физичких закона су дефинисане математичке релације између релевантних променљивих, али у општем случају нису познате нумеричке вредности одређеног броја параметара који у њима фигуришу.

- Механички и емпиријски модели [40] - Модели засновани на изучавањем механизмима и појавама могу се класификовати као механистички модели. За разлику од њих, емпиријски модели настају из мерења улазно-излазних података за моделовани систем, добијених на основу експеримената.

У пракси, моделовање укључује широк спектар задатака, знања и вештина потребних за стварање адекватног модела система који се испитује.

Математичко моделовање технолошких процеса је од велике важности с обзиром на то да својом применом омогућава релативно брзо и јефтино процењивање утицаја различитих процесних параметара на излазне варијабле процеса, уз смањење броја потребних експерименталних података [50].

Данас се у инжењерској пракси најчешће користе два основна начина моделовања система:

- Моделовање засновано на бази познатих теоријских сазнања. Оно произилази директно из познатих теоријских сазнања и кључних законитости математике и физике којима се описује посматрани процес (систем). У овом случају је неопходно познавање структуре самог система. Математички модел се представља помоћу система диференцијалних и парцијалних диференцијалних једначина. Решења добијена коришћењем математичког модела се упоређују са вредностима добијеним из реалног система (процеса) и на основу тога се доносе закључци о валидности формираног модела.
- Моделовање засновано на коришћењу различитих видова идентификације. Код овог начина моделовања полази се од експериментално снимљених функционалних зависности понашања реалног система (процеса). Коришћењем скупа улазних и излазних променљивих одређује се математички модел (процеса). У овом случају није неопходно познавање структуре процеса (система) и веза између његових параметара (атрибута), већ се посматрају само улазне величине и врши мерење величина на излазу (одзив), па се на тај начин формира база података за развој модела система. За успостављање математичког модела, за успостављање везе између улазних и излазних променљивих најчешће се користи регресиона анализа. Регресиона анализа представља концептуално једноставан метод за испитивање функционалних веза између променљивих, који се користи за предикцију, одређивање утицаја фактора и управљање [6].

Због комплексности технолошких процена, у највећем броју случајева методологија заснована на теоријским сазнањима (физичким законитостима) је сувише сложена, па се из тог разлога у савременој пракси све чешће користи други приступ за добијање математичког модела.

2.4. Оптимизација

Оптимизација је поступак налажења најбољег решења неког проблема у одређеном смислу и при одређеним условима [37].

Многи проблеми на које се наилази у пракси су у ствари оптимизациони проблеми. Њих карактерише релативно једноставно проналажење неког допустивог решења, али и тешко одређивање најбољег могућег - оптималног решења. Оптимално решење - најбоље (најприхватљивије) од понуђених решења, тежи да негативне (нежељене) ефекте сведе на минимум, а да при томе максимизира позитивне (пожељне) ефекте.

У пракси се граница оптимизације одређује на основу упрошћеног математичког модела процеса [37]. Избор математичког модела који одговара реалном проблему представља сложени задатак, али и предуслов за успешну оптимизацију. Неопходно је формулисати га тако да што верније описује процес који се оптимизује, при чему је још потребно да се изабрани модел егзактним методама може решити у реалном времену.

Оптимизација се, у инжењерском смислу, може представити као поступак максимизације и/или минимизације једног или више циљева у оквиру расположивих ресурса, уз задовољавање постојећих ограничења. Под траженим решењем не подразумева се само оно решење које ће задовољити постојеће пројектне услове, већ оно треба да задовољи и минимум трошкова свих ресурса (материјал, радна снага, енергија, уређаји).

2.5. Алгоритми истраживања података

Централна фаза сваког процеса истраживања података (*eng. data mining*) је да се из скупа пречишћених и трансформисаних података, помоћу аналитичких техника, откривају потенцијалне правилности и везе између података и/или њихових атрибута. Највећи изазов је – како применити различите алгоритме или различите технике на различитим групама података.

Истраживање података представља наставак традиционалне анализе података и статистичког приступа. Он сједињује у себи аналитичке технике преузете из низа дисциплина, укључујући (али не ограничавајући се на):

- нумеричку анализу
- поклапање шаблона и области вештачке интелигенције, као што је машинско учење
- неуронске мреже и генетске алгоритме

Приликом избора методе/алгоритма који се користи за истраживање података, неопходно је да се зна који је жељени циљ, тј. коју врсту резултата желимо да добијемо.

Истраживање података не функционише тако што се кроз алгоритме пропусте подаци и очекују последице. За добру анализу података неопходно је да аналитичари најпре направе селекцију алгоритама који са довољном поузданошћу могу предвидети зависне променљиве. За сваки data mining задатак постоји више одговарајућих алгоритама.

С обзиром на то да се истраживање података данас користи у два различита домена: у домену предвиђања и домену откривања облика или законитости у подацима [4], то се, уопштено говорећи, сви алгоритми истраживања података могу поделити у две групе: алгоритми за откривање нових знања (eng. *discovery data mining*) и алгоритме за предвиђање (eng. *predictive data mining*). Задатак алгоритама је да покушају да укалупе податке у неки модел. Избор алгоритма истраживања података представља одлучивање о методама откривања шаблона (eng. *pattern*) или методама подешавања модела према задацима (eng. *fitting models to data*).

Поред тога што се ослањају на мноштво различитих техника за обраду података из математике, статистике, вештачке интелигенције и др. методе истраживања података садрже и оригиналне технике, са алгоритмима који их реализују на различите начине.

Алгоритми истраживања података се могу поделити на: редуccionе алгоритме, стабла одлучивања, алгоритме за откривање асоцијативних правила, алгоритме за кластеровање, регресионе алгоритме и вештачке неуронске мреже [5].

Не постоји универзално добар алгоритам истраживање података. У наставку овог рада биће описани најпознатији алгоритми који ће се користити за реализацију практичног задатка.

2.5.1. Регресија

Регресиони алгоритми омогућавају да се зависност (корелација) између променљивих квантитативно изрази, тако да се добијени модел користи за предвиђање оних података за које немамо мерења, или се пак користе да би се дошло до вредности параметара који описују ту зависност.

Регресиона анализа испитује зависност једне континуалне променљиве од једне или више независних променљивих, са циљем да се дефинише аналитички израз те повезаности, тј. модел који може да служи у аналитичке или предиктивне сврхе. Регресиони модел није сам по себи циљ регресије, већ представља средство које служи да се у зависности од вредности независно променљиве/променљивих, оцене и предвиде вредности зависно променљиве.

У зависности од броја независних променљивих, модели могу бити модели једноструке или вишеструке регресије, док у зависности од облика математичке функције којом су дефинисани, модели могу бити линеарни и нелинеарни.

Регресиони модел омогућава, не само објашњавање зависности посматраних појава, већ и процењивање вредности зависне променљиве за унапред задату вредност бар једне независне променљиве.

Најважнији и најтежи део сваког експерименталног истраживања представља избор регресионе једначине која би требало да омогући да апроксимативна зависност буде најбоље прилагођена експерименталним подацима.

Линеарни регресиони модел (eng. *linear regression*) је линеарна функција којом се апроксимира релација између зависне променљиве (Y) која се мери, и једне или више независних објашњавајућих променљивих којима се управља (x_i).

Прост линеарни регресиони модел се обично задаје формулом [6]:

$$Y = \beta_0 + \beta_1 x + \varepsilon \quad (1)$$

где су:

Y – зависно променљива (променљива одговора)

β_0 – одсечак на Y оси

β_1 – градијент или нагиб линије регресије

x – независна променљива (предиктор)

ε – случајна грешка.

Други тип линеарне регресије је вишеструка линеарна регресија која у ствари представља модел линеарне регресије у коме егзистира једна зависна и више независних променљивих. Општи облик вишеструке линеарне регресије може се представити формулом [6]:

$$Y = \beta_0 + \beta_1 f_1(x_1) + \beta_2 f_2(x_2) + \dots + \beta_p f_p(x_p) + \varepsilon \quad (2)$$

где су:

Y – зависно променљива

$\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_p$ – регресиони коефицијенти

x_1, x_2, \dots, x_p – независно променљиве у моделу

f_1, f_2, \dots, f_p – елементарна математичка функција

ε – грешка (која је обично праћена нормалном расподелом са $E(\varepsilon) = 0$ и константом варијансе $Var(\varepsilon) = \sigma^2$).

Општија презентација регресионог модела може се дати у облику:

$$y = E(y) + \varepsilon \quad (3)$$

где је:

$E(y)$ – математичко очекивање променљиве одговора.

Када је $E(y)$ линеарна комбинација предиктора (x_1, x_2, \dots, x_k), тада је регресија линеарна (за $k = 1$ проста линеарна), а у случају када је $E(y)$ нелинеарна комбинација предиктора (x_1, x_2, \dots, x_k), регресија је нелинеарна.

Типична проста линеарна регресиона анализа се добија посматрањем n парова података: (x_1, y_1) (x_2, y_2) ... (x_n, y_n) из посматраног научног експеримента и модела у облику n парова података који се могу записати у облику:

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \varepsilon_i \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (4)$$

Следећи корак је добра процена параметара β_0 и β_1 који најбоље описују податке прикупљене посматрањем научног експеримента. У статистичком жаргону, проналажење параметара који најбоље апроксимирају дати скуп података назива се „фитовање“. Природни критеријум за избор линије која најбоље апроксимира дати скуп података јесте минимизирање суме квадрата грешака које одговарају једном пару (x_i, y_i) .

У случају да подаци показују нелинеарне зависности, тада линеарни модел није добро решење.

Нелинеарни регресиони модели (eng. *nonlinear regression*) нелинеарном функцијом апроксимирају везу између зависне и једне или више независних променљивих. Постоји могућност да се неки одређени нелинеарни регресиони модели, који су линеарни по свим непознатим параметрима, једноставном сменом трансформишу у линеарне [7].

За разлику од линеарне регресије која има један основни линеарни регресиони модел, нелинеарна регресија може имати више различитих облика (нелинеарних функција) па је неопходно да аналитичар одреди функцију (модел) са скупом параметара која се најбоље поклапа са експерименталним подацима.

Нелинеарни регресиони модели су нелинеарни по параметрима модела и могу се записати у општем облику:

$$y_i = f(x_i, \beta) + \varepsilon_i \quad (5)$$

где су: $x_i = \begin{bmatrix} 1 \\ x_{i1} \\ \vdots \\ x_{ip} \end{bmatrix}$, $\beta = \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_p \end{bmatrix}$ f је нелинеарна по β

y_i – променљива одговора континуалног (непрекидног) типа

x_i – предиктор вектор који садржи различите типове променљивих

Циљ нелинеарне регресије је одређивање вредности параметара регресионог модела како би се пронашла крива која најближе описује експерименталне податке, или прецизније: проналажење вредности параметара који ће са највећом вероватноћом бити одговарајући.

До недавно, док софтверски алати за одређивање параметара нелинеарне регресије нису били лако доступни, најбољи начин за анализу података између којих постоји нелинеарна зависност била је њихова трансформација до линеарног регресионог модела, који представља најједноставнији случај за описивање везе (корелације) између зависне и независне променљиве. Имајући у виду да је овакав начин анализе података непрецизан јер трансформација

повећава (већ евентуално почињену) експерименталну грешку, пожељно је, уместо овог приступа, користити нелинеарну регресију која даје прецизније резултате.

Да би се одредили параметри нелинеарног регресионог модела, неопходно је проценити почетне вредности параметара, а затим кроз адекватни итеративни поступак (коришћењем одговарајућих софтверских алата) доћи до најбољих вредности параметара.

Једна од главних предности нелинеарне регресије је широк опсег функција које се могу користити.

Најчешће коришћени нелинеарни регресиони модели:

$$\begin{array}{l}
 y = a + bx + cx^2 + \varepsilon - \text{полиномијална регресија} \\
 y = a + \frac{b}{x} + \varepsilon - \text{хиперболичка} \\
 y = a + b\sqrt{x} - \text{квадратна једначина}
 \end{array}
 \left. \vphantom{\begin{array}{l} y = a + bx + cx^2 + \varepsilon \\ y = a + \frac{b}{x} + \varepsilon \\ y = a + b\sqrt{x} \end{array}} \right\} \begin{array}{l} \text{могу се} \\ \text{трансформисати} \\ \text{у линеарне} \end{array}$$

$$\begin{array}{l}
 y_i = ab^{x_i} \cdot \varepsilon_i \\
 y_i = ae^{b^{x_i}} \cdot \varepsilon_i \\
 y_i = ax_i^b \cdot \varepsilon_i \\
 y_i = a + b \ln(x)
 \end{array}
 \left. \vphantom{\begin{array}{l} y_i = ab^{x_i} \cdot \varepsilon_i \\ y_i = ae^{b^{x_i}} \cdot \varepsilon_i \\ y_i = ax_i^b \cdot \varepsilon_i \\ y_i = a + b \ln(x) \end{array}} \right\} \begin{array}{l} \text{нелинеарно} \\ \text{оцењивани} \\ \text{параметри} \end{array}$$

Алгоритам оцене параметара модела:

1. Бирају се почетне вредности параметара
2. Генерише се крива чији су параметри једнаки одабраним текућим вредностима параметара
3. Применом адекватног алгоритма (Gauss–Newton, Newton, Levenberg-Marquardt) коригују се вредности параметара са циљем да се крива приближи мереним вредностима
4. Кораци 2 и 3 се понављају све док разлика између сума квадрата грешке две узастопне итерације не буде мања од унапред задате вредности.

Избор почетних вредности параметара може утицати на тачност решења модела. Почетне вредности параметара су директно пропорционалне степену растурања података, као броју непознатих параметара. Лоше одабране почетне вредности могу довести до споре конвергенције ка тачном решењу, или пак до тога да параметри уопште не конвергирају ка решењу, већ ка нпр. локалном минимуму функције.

Нелинеарна регресија веома ефикасно користи податке и може да да добре процене непознатих параметара модела на релативно малој групи података [8].

2.5.1.1. Левенберг-Маркварт алгоритам

Левенберг-Маркварт (Levenberg-Marquardt - LM) алгоритам важи за напредан и најбржи стандардни алгоритам за нелинеарну оптимизацију. Познат је још и под називом: метода пригушених најмањих квадрата (eng. *damped last squares*).

Овај алгоритам користи итеративно побољшање вредности параметара да би се смањила сума квадрата разлика између измерених и моделом процењених вредности. LM алгоритам користи метод најбржег спуста¹, када се вредности параметара налазе далеко од оптимума, док се у случају када се вредности параметара приближавају њиховим оптималним вредностима користи метод развоја у Тејлоров (Taylor) ред [9].

Нека је зависно променљива (Y) дефинисана изразом:

$$Y = f(x_i, \beta) = E(y) = f(x_1, x_2, \dots, x_m; \beta_1, \beta_2, \dots, \beta_k) \quad (6)$$

где су:

x_1, x_2, \dots, x_m - независно променљиве,

$\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_k$ - вредности параметара модела

Y - очекивана вредност зависно променљиве

Нека су експериментално измерени подаци обележени са $(Y_i, X_{1i}, X_{2i}, \dots, X_{mi})$, $i = 1, 2, \dots, n$. Проблем је одредити вредности параметара $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_k$ тако да сума разлике квадрата између измерених и израчунатих вредности (помоћу модела) S буде минимална.

$$S = \sum_{i=1}^n [Y_i - \hat{Y}_i]^2 = \|Y - \hat{Y}\|^2 \quad (7)$$

где је:

\hat{Y}_i - вредност предикције на i -тој позицији у једначини (6)

Да би се израчунала екстремна вредност (у овом случају минимум), неопходно је да буде испуњен услов (стационарне тачке):

$$\frac{\partial S}{\partial \beta_i} = 0 \quad \forall i = 1, 2, \dots, k \quad (8)$$

и израчунате вредности другог парцијалног извода модела (6) по параметрима. Пошто други изводи могу бити врло сложени, додатни проблем је и одређивање почетних параметара. Параметре је могуће одредити и на други начин: минимизацијом функције, коришћењем њеног развоја у Тејлоров (Taylor) ред у близини тачних вредности параметара (Гаус-Њутнов метод), при чему се добија једначина:

$$Y(x_i, \beta + \Delta\beta) = f(x_i, \beta) + \sum_{j=1}^k \left(\frac{\partial f_i}{\partial \beta_j}\right) \Delta\beta_j \quad (9)$$

тј. сада је суму разлике квадрата између измерених и израчунатих вредности могуће записати у облику:

$$S = \sum_{i=1}^n \left(y_i + \sum_{j=1}^k \frac{\partial y_i}{\partial \beta_j} \Delta\beta_j - \hat{y}_i \right)^2 \quad (10)$$

¹ Метода најбржег спуста је градијентна метода код које се величина корака бира тако да се у свакој итерацији (корак) методе постиже максимално опадање вредности функције циља.

Примењујући услов минимума:

$$\frac{\partial S}{\partial \beta_j} = 0$$

$\forall j = 1, 2, \dots, k$, добија се једначина:

$$\frac{\partial S}{\partial \beta_l} = 2 \sum_{i=1}^n (y_i + \sum_{j=1}^k \frac{\partial y_i}{\partial \beta_j} \Delta \beta_j - \hat{y}_i) \frac{\partial y_i}{\partial \beta_l} = 0; \quad \forall l = 1, 2, \dots, k \quad (11)$$

односно:

$$\sum_{j=1}^k \Delta \beta_j \sum_{i=1}^n \frac{\partial y_i}{\partial \beta_j} \frac{\partial y_i}{\partial \beta_l} = \sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - y_i) \frac{\partial y_i}{\partial \beta_l} \quad (12)$$

што се у матричној форми може записати у облику:

$$A_\beta = G \quad (13)$$

где су $A_{k \times k}$, β и $G_{k \times 1}$ матрице чији су елементи:

$$a_{i,j} = \sum_{l=1}^n \frac{\partial y_i}{\partial \beta_l} \frac{\partial y_i}{\partial \beta_j} \quad (14)$$

за $i = 1, 2, \dots, k; j = 1, 2, \dots, k$

$$g_j = \sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - y_i) \frac{\partial y_i}{\partial \beta_j} \quad (15)$$

за $j = 1, 2, \dots, k$

$$\beta = [\Delta \beta_1, \Delta \beta_2, \dots, \Delta \beta_k]^T \quad (16)$$

Решавањем једначине (13) израчунавају се вредности прираштаја параметара, помоћу којих се добијају тачније вредности параметара:

$$\beta_j^{(i)} = \beta_j^{(i-1)} + t \Delta \beta_j^{(i)} \quad (17)$$

за $0 < t \leq 1, j = 1, 2, \dots, k$

где су:

i - редни број итерације

t - број из интервала $(0, 1]$, одабран тако да се сума квадрата одступања у свакој следећој итерацији смањује.

Дакле, поступак израчунавања параметара је итеративан, и реализује се на следећи начин:

- Најпре се претпостављају почетне вредности параметара модела на основу којих се рачунају парцијални изводи и вредности функције (6) за све експериментално задате тачке.
- Решавањем једначине (13), уз корекцију помоћу једначине (17), добијају се параметри који ће бити коришћени у следећој итерацији.
- Итеративни поступак се понавља све док се не достигне минимум суме квадрата одступања (S).

Главни недостатак ове методе је осетљивост на избор почетних вредности параметара. Да би се тај недостатак превазишао, Маркварт (Marquardt) [9, 10] је модификовао приказану методу тако да се сада решава модификовани систем:

$$(A + \lambda I)\Delta\beta = G \quad (18)$$

где су:

I - јединична матрица

λ - Лагранжов мултипликатор (чиницац)

Како би се алгоритам учинио још ефикаснијим са нумеричког аспекта, потребно је трансформисати (прилагодити) матрице A^* и G^* :

$$A^* = (a_{ij}^*) = \left(\frac{a_{i,j}}{\sqrt{a_{ii}}\sqrt{a_{jj}}} \right) \quad (19)$$

за $j = 1, 2, \dots, k; i = 1, 2, \dots, k,$

$$G^* = (g_j^*) = \left(\frac{g_j}{\sqrt{a_{jj}}} \right) \quad (20)$$

за $j = 1, 2, \dots, k$

па решавајући Тејлоров ред за кориговане вредности $A^*\beta^* = G^*$ важи:

$$\beta_j = \beta_j^* / \sqrt{a_{jj}} \quad (21)$$

Користећи модификовани алгоритам, једначина r -те итерације гласи:

$$(A^{*(r)} + \lambda^{(r)}I)\Delta\beta^{*(r)} = G^{*(r)} \quad (22)$$

чија су решења прираштаји параметара, па се помоћу (21) рачунају нове вредности параметара. Рачунање нових вредности параметара

$$\beta^{(i+1)} = \beta^{(i)} + \Delta\beta^{(i)} \quad (23)$$

се итеративно понавља све док се не постигне жељени критеријум конвергенције.

$$\frac{|\Delta\beta_j^{(r)}|}{\tau + |\beta_j^{(r)}|} < \varepsilon \quad (24)$$

$\forall j$, за неко довољно мало $\varepsilon > 0$ (нпр. 10^{-5}) и неко одговарајуће τ (нпр. 10^{-3}) [10].

Овде је од суштинског значаја правилан избор вредности за $\lambda^{(r)}$ у свакој итерацији (без обзира на полазне процене параметара) како би се сума квадрата одступања смањивала у свакој итерацији, тј. $S^{(k+1)} < S^{(k)}$.

Због тога се може направити стратегија избора $\lambda^{(r)}$ на следећи начин [10]:

Нека је $\nu > 1$ (ν је произвољан број – у пракси се показало да је $\nu = 10$ добар избор).

Нека $\lambda^{(r-1)}$ означава вредност λ из претходне итерације и нека је иницијално: $\lambda^{(0)} = 10^{-2}$.

Израчунати $S(\lambda^{(r-1)})$ и $S(\lambda^{(r-1)}/\nu)$

I Ако је $S(\lambda^{(r-1)}/\nu) \leq S^{(r)}$, тада је $\lambda^{(r)} = \lambda^{(r-1)}/\nu$

II Ако је $S(\lambda^{(r-1)}/\nu) > S^{(r)}$ и $S(\lambda^{(r-1)}) \leq S^{(r)}$, тада је $\lambda^{(r)} = \lambda^{(r-1)}$, и

III Ако је $S(\lambda^{(r-1)}/\nu) > S^{(r)}$ и $S(\lambda^{(r-1)}) > S^{(r)}$, тада се λ повећава сукцесивним множењем са ν све док за неко довољно мало ω не буде $S(\lambda^{(r-1)}\nu^\omega) \leq S^{(r)}$, па је тада $\lambda^{(r)} = \lambda^{(r-1)}\nu^\omega$.

Уколико вредност λ буде смањена у мери да је занемарљива у односу на број њених значајних цифара, ова вредност се даље не смањује, а уколико пређе усвојену горњу границу, даље се не повећава, већ се за израчунавање нових параметара користи једначина (17).

2.5.2. Стабла одлучивања

Стабла одлучивања (eng. *decision trees*) представљају веома моћне и популарне алгоритме за решавање класификационих и предикционих (регресионих) проблема. Само име потиче од структуре која подсећа на стабло на коме се разликују крајњи чворови и чворови одлуке, који су међусобно повезани гранама.

Крајњи чвор (eng. *leaf node*) је чвор којим се завршава одређена грана стабла, а чвор одлуке (eng. *decision node*) је чвор из кога, на основу одређеног критеријума (који је у облику вредности одређеног атрибута) излазе гране које задовољавају одређене вредности тог атрибута.

Алгоритам стабла одлучивања пружа могућност да се развије класификациони систем који предвиђа или групише будућа стања, на основу низа правила одлучивања.

Суштина алгоритама стабла одлучивања, било да се ради о класификационим или регресионим стаблима, јесте да се на основу обуке на одређеном скупу узорака прогнозира непозната величина на новом узорку, који се у општем случају у потпуности не поклапа (не подударе) ни са једним узорком присутним у скупу за обуку.

Основна разлика између класификационих и регресионих алгоритама је у следећем. Класификациони алгоритми на основу вредности мерљивих обележја новог узорка покушавају да га сврстају у неку од коначно много класа којима припадају и узорци из скупа за обуку, док регресиони алгоритми на основу вредности мерљивих обележја (атрибута) новог узорка покушавају да предвиде непознату континуалну вредност коју има одређени атрибут (обележје) новог узорка.

Улазне вредности атрибута за обе врсте стабала могу имати или симболичке или континуалне вредности. Међутим, излазна вредност која се једноставно одређује спуштањем низ стабло гранама које одговарају вредностима атрибута,

ће у случају класификације бити нека конкретна вредност (припадност одговарајућој класи), а у случају регресије нумеричка (континуална) вредност.

Ова врста алгоритама је релативно робуствна у случају мањка података и омогућава не само једноставну интерпретацију и обраду добијених резултата, већ и статистички селекује најзначајније атрибуте и омогућава комбиновање нумеричких и категоричких вредности атрибута.

2.5.2.1. Класификациона стабла

Класификациона стабла (eng. *classification trees*) се користе за решавање класификационих проблема, тј. она на основу знања о припадности одређеног броја узорака једној од датих класа, нови до тада непознати узорак сврставају у једну од тих класа. Она настају гранањем као последица испуњења услова класификационих питања. Свако питање дели податке у подскупе који су хомогенији у односу на виши скуп. Уколико питање има два одговора, тада ће као одговор на то питање настати два подскупа (бинарно стабло), односно - број одговора на питање одређује број подскупова који ће настати. Самим тим се врши класификација појединих података.

У литератури постоји мноштво алгоритама за изградњу стабала одлучивања. Међу најзапаженијим алгоритмима налазе се ID3 [11], C4.5 [12] и CART [10], који су уграђени у већину софтверских алата за истраживање података.

Сви алгоритми за изградњу класификационих стабала могу се математички описати на следећи начин [10]:

Нека је X простор мерних вектора x , таквих да сваком узорку одговара мерни вектор $x = \{a_1, a_2, \dots, a_n\}$, описан са n унапред специфицираних атрибута, и нека је $C = \{c_1, c_2, \dots, c_n\}$ скуп класа C . За конструкцију класификационог стабла користи се скуп података за учење: $\mathcal{L} = \{(x_1, c_1), (x_2, c_2), \dots, (x_k, c_k)\}$, где је $x_i \in X$, $c_i \in C$, $i = 1, 2, \dots, k$ ($k < n$). Дакле, сваки елемент скупа за учење је уређени пар чији је први елемент мерни вектор а други класа којој посматрани узорак припада. Класификационо стабло се формира сукцесивним поделама скупа \mathcal{L} на дисјунктне подскупе тако да сваки чвор стабла репрезентује неки подскуп скупа за учење \mathcal{L} . Алгоритам конструише стабло од корена према листовима тако што се у сваком чвору, на основу одређеног критеријума који задовољава изабрани атрибут, доноси одлука о начину поделе тог чвора. Дисјунктни подскупови се додељују чворовима-потомцима, све док се не стигне до крајњих чворова чија подела више није могућа. Избор одговарајућег критеријума поделе чвора, тј. начин избора атрибута (координате мерног вектора) је, поред процене да ли се чвор проглашава крајњим или се наставља са поделама, пресудан за квалитет коначног резултата. Правило избора одређује како ће се у сваком кораку извршити подела, а правило заустављања – коју класу доделити крајњим чворовима.

Да би се одредио најбољи атрибут за наставак гранања стабла, неопходно је измерити степен нечистоће (eng. *impurity*) у чворовима. За мерење нечистоће чвора код класификационих стабала користе се: функције ентропије (eng. *entropy* или *deviance*), гини индекс (eng. *gini index*) и грешка класификације (*missclassification error*).

Ентропија представља меру неуређености система, тј. неизвесности о томе коју одлуку треба донети. Ентропија се може израчунати помоћу формуле [14]:

$$Entropy = - \sum_{i=1}^k p_i \cdot \log_2 p_i \quad (25)$$

где је p_i – вероватноћа да елемент припада i -тој класи (C_i) у том чвору.

Ентропија се мери у битовима и може бити представљена као минимална количина информације потребне да се кодира класификација случајно одабраног примера (из \mathcal{L}). Ентропија има највећу вредност када су све класе подједнако вероватне (најједноставнија ситуација), а најмању вредност једнаку нули, једино у случају када сви објекти припадају истој класи (што је идеално).

Гини индекс (коефицијент) је статистичка мера за процену очекиване нечистоће чвора и може се израчунати коришћењем формуле [15]:

$$Gini_index = 1 - \sum_{i=1}^k p_i^2 \quad (26)$$

где је p_i – вероватноћа да елемент припада i -тој класи у том чвору.

Гини индекс се може интерпретирати као математичко очекивање грешке класификације. Мера нечистоће, мерена гини индексом, је најмања у случају када сви објекти припадају истој класи, тј. када је вероватноћа припадности елемента једној класи једнака јединици а свим осталим класама једнака нули, а највећа када су те вероватноће једнаке. Мала вредност за гини индекс указује да се ради о „чистим чворовима“.

Грешка при класификацији (eng. *misclassification error*) у задатом чвору може се израчунати по формули [16]:

$$Misclassification\ error = 1 - \max\{p_i\} \quad (27)$$

где је p_i вероватноћа да елемент припада i -тој класи у задатом чвору.

Најмање интересантне информације од грешке при класификацији се добијају када она достиже максимум, тј. када су објекти (слогови) равномерно дистрибуирани у свим класама, док је најбоље решење, када се ради о потпуно „чистом“ скупу података, тј. када сви слогови припадају једној класи.

Да би се одредио који је „најбољи“ атрибут за наставак гранања није довољно само израчунати степен нечистоће (помоћу предложених функција) већ је неопходно измерити квалитет потенцијалног гранања коришћењем статистичке функције „добитак“ (eng. *gain*). То је квантитативна мера вредности атрибута за класификацију примера којом се мери колико добро дати атрибут раздваја примере према њиховој класификацији [17].

Добитак представља разлику нечистоће чвора родитеља и тежинске суме нечистоћа чворова деце. Отуда се највећи добитак добија када се минимизира тежинска сума нечистоћа чворова деце употребом изабране мере нечистоће.

Најутицајнији атрибут за класификацију у датом чвору је онај са највећом вредношћу информационог добитка. За тако одабрани атрибут у чвору стабло се разгранавља, а затим се рекурзивно понавља дељење подграна са атрибутом који је најбољи за разликовање класа.

2.5.2.2. Регресиона стабла

Регресиона стабла (eng. *regression trees*) се користе приликом решавања регресионих проблема. Веома су слична класификационим стаблима. За разлику од класификационих стабала која у сваком чвору садрже константну вредност, регресиона стабла у сваком чвору садрже одговарајући регресиони модел заснован на неким вредностима атрибута. Регресиони модел је функција која може бити константна (нпр. средња вредност излаза свих примера у чвору), линеарна (која зависи од једног или више атрибута) или произвољна (нелинеарна).

Процес креирања модела је тзв. рекурзивно партиционисање (eng. *recursive partitioning*) односно понављано дељење података на партиције (делове) све до крајњег чвора који садржи предвиђену вредност излазне променљиве.

Најчешће се регресиона стабла израђују помоћу софтверских алата који користе различите алгоритме, међу којима су најзаступљенији: CART [10], M5 [13], M5P (обележава се и као M5') [18].

Ако се користи математичка нотација, алгоритми за изградњу регресионих стабала могли би се описати на следећи начин [10]:

Нека је X простор мерних вектора x , таквих да сваком узорку одговара мерни вектор $x = \{a_1, a_2, \dots, a_n\}$ описан са n унапред специфицираних атрибута, а Y скуп мерења представљених као вектор реалних бројева (континуалне променљиве). Сваком мерном вектору одговара једна вредност скупа мерења променљиве одговора Y (зависна променљива). Регресиона стабло се формира на основу скупа података за учење $\mathcal{L} = \{(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_k, y_k)\}$, где је $x_i \in X, y_i \in Y; i = 1, 2, \dots, k (k < n)$. Сваки елемент скупа за учење је уређени пар чији је први елемент мерни вектор а други - вредност одговарајуће променљиве одговора.

Конструкција регресионог стабла је слична конструкцији класификационог стабла. Скуп за учење \mathcal{L} се дели на дисјунктне подскупе. Поделом скупа који је представљен у датом чвору добијају се дисјунктни подскупи на основу критеријума који се односи на један или више атрибута мерних вектора анализираних у том чвору. Дисјунктни подскупи се придружују чворовима-потомцима све док се не стигне до крајњих чворова у којима ће излазна варијабла попримити одговарајућу вредност y_i . Као и код класификационих алгоритама, и овде се као кључни проблем намеће избор одговарајућег критеријума поделе чвора, који ће узорке који припадају том чвору разделити на два што је могуће „чистија“ подскупа.

Код регресионих проблема се за мерење нечистоће чвора T чија су деца-чворови T_1, T_2, \dots, T_m може користити функција варијансе [10]:

$$S^2(T) = \frac{1}{N(T)} \sum_{i \in T} (y_i - \hat{y})^2 \quad (28)$$

где су:

$N(T)$ – број посматраних примера у чвору T

\hat{y} – средња вредност излазних величина свих примера унутар посматраног скупа

односно,

$$\Delta S^2(T) = S^2(T) - \sum_{j=1}^m P(T_j) S^2(T_j) \quad (29)$$

где је $P(T_j)$ – однос броја података у чвору T_j и укупног броја података

Коришћење варијансе као мере нечистоће оправдава се чињеницом да је најбоља вредност променљиве предиктора у неком чвору очекивана вредност променљиве предиктора, имајући у виду да подаци припадају том чвору. Варијанса је самим тим и средња квадратна грешка овог најбољег предиктора.

Бирајући на овај начин „најутицајније“ чворове, алгоритам прави поделу података на партиције све док сума квадрата разлика средњих вредности не добије вредност нула или сви чворови не достигну величину (у смислу броја примера) прага коју је корисник дефинисао.

Када је стабло конструисано, користи се за предвиђање излазних вредности обележја нових примера који нису учествовали у изградњи стабла. Предвиђање излазних вредности се своди на „спуштање“ низ стабло, низ одговарајуће гране, а завршава се у једном од крајњих чворова стабла у коме ће му, на основу функције помоћу које се израчунава излаз, бити додељена израчуната вредност.

2.5.3.Метода k најближих суседа

Због свог начина функционисања, који је веома сличан људском начину размишљања, метода k - најближих суседа (eng. *k-Nearest Neighbors k-NN*) је веома једноставна. Може се констатовати да она припада методама које су засноване на примерима (инстанцама), тзв. лење методе (eng. *lazy methods*)[19].

Реализује се тако што се у скупу примера за учење траже примери који имају најсличнија својства и познато понашање, па се претпоставља да ће се посматрани пример најсличније понашати као његов најближи сусед.

За разлику од осталих техника, овде не постоји никакав процес учења како би се креирао експлицитан модел. Имплицитан модел представљају подаци (примери) који се користе за учење. За анализирање сваког новог примера, помоћу алгоритма се анализирају сви подаци у бази како би се пронашао подскуп података који му најбоље одговара, па се на основу тога врши предвиђање. Може се користити за решавање класификационих и регресионих проблема.

Нека је сваки пример из скупа примера за учење представљен као тачка у n -димензионом простору \mathbb{R}^n . $x = \{a_1, a_2, \dots, a_n\} \Leftrightarrow (a_1(x), a_2(x), \dots, a_n(x))$ где су a_i вредности одговарајућих атрибута посматраних примера.

Циљна функција код овог алгоритма може имати или дискретне или непрекидне вредности. У случају дискретних вредности резултат предвиђања је ознака класе којој припада већина од k најближих суседа. Када се ради о резултату који је непрекидна величина, рачуна се средња вредност излаза k најближих суседа [20].

Како би алгоритам k најближих суседа био што ефикаснији, потребно је извршити добар избор за вредност k , јер се за веома мало k јавља осетљивост на „шум“, а за веома велико k суседи могу да укључе и примере из других класа. Обично се у пракси усваја неки непаран број (1, 3, 5, ...) како би се избегли случајеви када једнак број суседа „упада“ у више класа.

За одређивање најближих суседа алгоритам израчунава удаљеност (растојање, разлику) између посматраног и свих примера за учење. Удаљеност између примера x_i и x_j најчешће се дефинише Еуклидским растојањем (eng. *Euclidean distance*) [19]

$$d(x_i, x_j) = \sqrt{\sum_{k=1}^n (a_k(x_i) - a_k(x_j))^2} \quad (30)$$

мада се могу користити и

Манхетн удаљеност (eng. *Manhattan distance*)

$$d(x_i, x_j) = \sum_{k=1}^n |a_k(x_i) - a_k(x_j)| \quad (31)$$

или

удаљеност Минковског (eng. *Minkowski distance*)

$$d(x_i, x_j) = \left(\sum_{k=1}^n (a_k(x_i) - a_k(x_j))^p \right)^{\frac{1}{p}} \quad (32)$$

Као побољшање овог алгоритма намеће се чињеница да у пракси неретко различити атрибути не утичу подједнако на резултат. То се реализује увођењем тежинских фактора (фактора важности атрибута a_i) ω_i који се рачуна као инверзна вредност квадрата његове удаљености од посматраног примера.

Због увођења тежинских фактора, удаљени примери ће имати веома мали утицај, па нестаје потреба да се ограничи број суседа који се обрађује.

2.5.4. Наивни Бајесов класификатор

Пробабалистички (вероватносни) класификатори проблем класификације сагледавају са становишта теорије вероватноће. Наиме, идеја је да се оптимално закључивање о новом примеру може извести из вероватноће припадности некој од постојећих класа. У пракси се показало да овакав приступ омогућава ефикасно решавање низа класификационих проблема.

Наивни Бајесов класификатор (eng. *naïve Bayesian classifier*) је типичан представник оваквог начина решавања проблема. Овај алгоритам је базиран на Бајесовој теорему.

Бајесова теорема (Thomas Bayes 1702-1761)[19]: Ако се догађаји H_1, H_2, \dots, H_n међу собом искључују и чине потпун систем догађаја из поља S које одговара експерименту и ако је A произвољан догађај из S , такав да је $P(A) \neq 0$, онда је

$$P(H_i|A) = \frac{P(A|H_i)P(H_i)}{P(A)} \quad (33)$$

где су:

$P(H_i)$ – вероватноћа хипотезе H_i

$P(A)$ – вероватноћа произвољног догађаја A

$P(A|H_i)$ – условна вероватноћа догађаја A уколико важи хипотеза H_i

$P(H_i|A)$ – условна вероватноћа хипотезе H_i уколико имамо догађај A .

Односно, алгоритам наивног Бајесовог класификатора предвиђа вероватноће припадности постојећим класама помоћу формуле:

$$P(C_i|x_j) = \frac{P(x_j|C_i)P(C_i)}{P(x_j)} \quad (34)$$

где су:

$P(C_i)$ – вероватноћа класе C_i ($C = \{C_1, C_2, \dots, C_k\}$)

$P(x_j)$ – вероватноћа улазног вектора x_j ($X = \{a_1, a_2, \dots, a_m\}$)

$P(x_j|C_i)$ – условна вероватноћа улазног вектора x_j за задату класу C_i

$P(C_i|x_j)$ – условна вероватноћа класе C_i за улазни вектор x_j

Ако претпоставимо да не постоји детерминистичка веза између атрибута инстанце и класе, класу и вредности атрибута инстанци можемо посматрати као случајне променљиве.

У циљу смањења прорачунске захтевности, како би се условне вероватноће једноставније израчунавале код наивног Бајесовог класификатора се полази од претпоставке да су вредности различитих атрибута инстанци међусобно независне, па отуда потиче и назив „наивни“. Независност значи да присуство/одсуство неке вредности неког атрибута не утиче на присуство/одсуство неке вредности неког другог атрибута.

Претпоставка условне независности даје могућност да се за израчунавање $P(C_i|x_j)$ користи формула

$$P(C_i|x_j) = \prod_{r=1}^m P(x_j(a_r)|C_i) \quad (35)$$

где су:

m – укупан број атрибута ($X_j = \{a_1, a_2, \dots, a_m\}$)

a_r – вредности одговарајућих атрибута посматране инстанце (примера)

Израчунавање вероватноће $P(x_j(a_r)|C_i)$ разликује се у зависности од врсте атрибута.

У случају дискретних атрибута

$$P(x_j(a_r)|C_i) = \frac{n(x_j(a_r); C_i)}{n(C_i)} \quad (36)$$

где су:

$n(C_i)$ – број инстанци (примера) који припадају класи C_i

$n(x_j(a_r); C_i)$ - број инстанци (примера) који припадају класи C_i и имају вредност атрибута a_r у вектору x_j , односно то је вероватноћа са којом ће улазни вектор x_j имати задату вредност атрибута a_r када припада класи C_i .

Претпоставка је да вредности континуалног атрибута прате неку статистичку расподелу. Најчешће се користи нормална (Gauss-ова) расподела, па се условна вероватноћа рачуна по формули [19].

$$P(x_j(a_r)|C_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_{C_i, x_j(a_r)}} \cdot e^{-\frac{(x_j(a_r) - \mu_{C_i, x_j(a_r)})^2}{2\sigma_{C_i, x_j(a_r)}^2}} \quad (37)$$

где су:

$\mu_{C_i, x_j(a_r)}$ – средња вредност, а

$\sigma_{C_i, x_j(a_r)}$ - стандардна девијација атрибута a_r улазног вектора x_j који припада класи C_i .

У реалним ситуацијама услов независности је релативно строг и може да представља проблем, међутим због једноставности имплементације, малог захтева за меморијом, брзог учења и задовољавајућих резултата, показао се као веома користан. Осим тога, наивни Бајесов класификатор је и робустан не само на грешке већ и на небитне атрибуте, али је и осетљив на корелисане атрибуте.

2.5.5. Метода потпорних вектора

Метода потпорних вектора (eng. *Support Vector Machine – SVM*) (или метода вектора подршке) представља скуп сличних алгоритама надгледаног учења који спадају у групу најуспешнијих алгоритама који се користе како за проблеме класификације, тако и за регресионе проблеме.

Историјски гледано овај метод је првобитно био развијен за решавање проблема препознавања образаца (енг. *pattern recoognition*) да би касније уследиле и примене за решавање проблема класификације и коначно уопштење за решавање проблема регресије [21].

Основна идеја метода потпорних вектора, која се заснива на статистичкој теорији учења, је да се у скупу коначног броја података уоче модели (релације) који важе за тај скуп. Идентификацијом и учењем ових модела алгоритам ће бити у стању да изврши предикцију (прогнозирање) над новим подацима.

Код класификационих проблема циљ је предвиђање (естимација) функције која утврђује класу припадности (при чему су излази бинарни $f(x) = y : \mathbb{R}^n \rightarrow \{-1,1\}$) [22]. Помоћу ове методе конструише се хиперраван која раздваја скуп примера (за учење) у две класе на тај начин што максимизује маргину између примера најближих хиперравни који припадају различитим класама.

Примери (тачке) који се налазе на граници маргине зову се вектори подршке. У општем случају, што је маргина већа то је подршка класификатора мања. Примерима који су погрешно класификовани (налазе се са погрешних страна хиперравни) додељују се тежине које одговарају њиховим удаљеностима од хиперравни. Рачунају се минималне вредности функције чији су аргументи додељене тежине, узимајући у обзир различите могуће хиперравни. Хиперраван са максималном вредношћу функције минимизује грешку прузроковану погрешно класификованим примерима и самим тим одређује маргину. У случају када није могуће наћи (најједноставније) линеарно раздвајање, примери се обично пресликавају („пројектују“) у вишедимензиони простор, где их је могуће линеарно одвојити и одредити оптималну хиперраван. Ово се постиже помоћу кернел техника (Кернелов трик - Kernel trick) [23].

За решавање регресионих проблема излази се дефинишу у виду континуалне променљиве ($f(x) = y : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$). Функција регресије потпорних вектора (енг. *Support Vector Regression – SVR*) представља модификацију методе потпорних вектора (SVM) и прилагођена је за решавање проблема регресије. То је уствари посебан тип SVR оптимизационих алгоритама за проналажење општих релација у скуповима података. Заснива се на „пресликавању“ скупа података из оригиналног у вишедимензиони карактеристични простор (енг. *feature space*) где је нелинеарне релације могуће представити једноставним линеарним функцијама [23, 24].

Проблем повећања комплексности алгоритма услед повећања димензионалности решава се увођењем специјалних кернел функција. Помоћу Кернел трика (енг. *Kernel trick*) тј. заменом кернел функције проблем пребацујемо у вишедимензиони карактеристични простор, а самим тим елиминишемо потребу за познавањем саме функције пресликавања из оригиналног у нови простор. На тај начин се омогућава пресликавање података из оригиналног у карактеристичан простор чија димензионалност може бити и бесконачна, при чему комплексност прорачуна остаје иста као у оригиналном простору.

Метода вектора подршке пружа боље предвиђање нових података (узетих из скупа за тестирање) у односу на друге методе. Осим тога, омогућава јединствено оптимално решење за проблем у тренирању и захтева постојање мање параметара за оптимизацију.

2.5.6. Неуронске мреже

До сада најприхватљивију дефиницију вештачких неуронских мрежа (eng. *Artificial Neural Network - ANN*) дао је Кевин Гарни (Kevin Gurney): „Неуронска мрежа је скуп једноставно повезаних елемената обраде тј. јединица или чворова чија функционалност наликује функционалности неурона код животиња. Способност обраде неуронске мреже зависи од тежина (јачина) веза између чворова, које настају током процеса адаптације или учења на скупу примера за учење“ [25].

Као инспирација за развој вештачких неуронских мрежа послужила је биолошка неуронска мрежа или, прецизније, начин на који се подаци обрађују у мозгу. Тако се може рећи да је један од главних циљева вештачке неуронске мреже да оствари имитацију људског мозга, тј. да га „претвори“ у вештачки облик.

Вештачке неуронске мреже, као поједностављени модел биолошких неуронских мрежа, састављене су од међусобно повезаних вештачких неурона (који представљају поједностављени облик биолошких неурона). Начин на који се поједини вештачки неурони повезују дефинише топологију или архитектуру мреже. Посматрајући њихову архитектуру, неуронске мреже се могу поделити на: мреже са директним простирањем сигнала (eng. *feedforward neural networks*) (једнослојне или вишеслојне) и рекурентне неуронске мреже (eng. *recurrent neural networks*) (са директним (eng. *feedforward*) и повратним (eng. *feedback*) простирањем сигнала) [25]. За избор одговарајуће архитектуре не постоји генерална препорука, већ у највећој мери зависи од динамике проблема који се решава.

Сваки неурон прима улазне информације (улазни атрибути), обрађује их и генерише излаз. Улаз може да буде скуп улазних атрибута или излаз из неког другог неурона. Излаз може бити решење проблема или може бити улаз за неки други неурон. Циљ мреже јесте израчунавање вредности излаза који ће се користити као решење задатог проблема. Дакле, може се рећи да неуронске мреже генерализују понашање комплексног и нелинеарног система мапирајући зависност између улазних и излазних величина [26].

Математички посматрано неуронске мреже се могу дефинисати на следећи начин: Неуронска мрежа је уређена тројка (N, V, ω) са два скупа N, V и функцијом ω , где је N скуп неурона, а V скуп уређених парова $\{(i, j) | i, j \in \mathbb{N}\}$ чији се елементи зову конекције између неурона i и неурона j . Функција $\omega: V \rightarrow \mathbb{R}$ дефинише тежине, где је $\omega(i, j)$ тежина конекције између неурона i и неурона j ($\omega(i, j)$). У зависности од тачке посматрања, она је или недефинисана или има вредност нула за конекције које не постоје у мрежи [27].

Током процеса обраде података кроз вештачки неурон, сваки улаз се множи са тежинским коефицијентом, а затим сумира како би се одредио ниво активационог сигнала у неурону. Излазни сигнал се након сумирања помоћу активационе функције обрађује да би се добио излазни сигнал из неурона. Тежински коефицијенти представљају кључне елементе неуронске мреже, јер њиховим подешавањем мрежа „учи“. Функција сумирања (сума производа улазних елемената у атрибут са одговарајућим тежинским коефицијентима) представља укупан „надражај“ који други неурони упућују конкретном неурону.

Функција активације или функција трансфера представља везу између функције сумирања и излаза, односно она узима вредност добијену функцијом сумирања па коришћењем одговарајуће функције (најчешће се користе одскочна, линеарна функција прага, сигмоидна, трансигмоидна [28]) израчунава излазну информацију из неурона. Та излазна информација је уствари реакција неурона која ће утицати на остале неуроне са којима је тај неурон повезан.

Једна од најважнијих особина неуронских мрежа је њихова способност да уче на ограниченом броју примера. Процес учења (обучавања) се заснива на томе да се мрежи задају улазни и излазни подаци, при чему мрежа тежи да добије излазну вредност која је приближна очекиваној вредности. Ради добијања жељеног излаза, током процеса обуке се кроз алгоритам обуке мењају тежински коефицијенти, све док мрежа не „научи“ да функционише на одговарајући начин. Начин на који се током процеса обучавају мреже, тј. подешавају тежински коефицијенти, зависи од алгоритма учења.

С обзиром на то да се вишеслојне неуронске мреже веома успешно примењују за решавање разноликих и тешких проблема, у наставку ће бити приказан најчешће коришћени алгоритам за њихово обучавање - алгоритам са простирањем грешке уназад.

У принципу, сви алгоритми се заснивају на идеји прилагођавања вредности тежинских коефицијената како би се функција грешке минимизирала. Метода простирања грешке уназад одређује вредност функције грешке коришћењем технике повратног простирања (eng. *backpropagation*). То је итеративни процес код кога се разлика између излаза из мреже и циљане вредности враћа назад у мрежу тако да тежински коефицијенти мреже буду постепено прилагођени за креирање излаза који су ближи циљаним вредностима. Најчешће се ради о два проласка кроз различите слојеве мреже: пролазак унапред и пролазак уназад.

При проласку унапред вектор (атрибута) улаза се поставља на улазне чворове мреже и њихов учинак, са случајно одабраним почетним вредностима тежинских коефицијената, се шири даље кроз мрежу. При проласку уназад, тежински фактори се подешавају у складу са правилом учења помоћу корекције грешке. Разлика између циљаног и тренутног одзива мреже представља сигнал грешке. Сигнал грешке се даље шири уназад кроз мрежу. Најчешће коришћена функција грешке је средње квадратна грешка.

Сматра се да је мрежа „обучена“ за решавање неког проблема када нови улазни примери (из скупа примера за учење) више не доводе до промене тежинских коефицијената, тј. након обучавања, са одређеном вероватноћом мрежа може да генерализује улазне податке за које није обучавана.

Помоћу неуронских мрежа веома успешно се решавају проблеми класификације и предикције, односно уопштено сви проблеми код којих постоји нека зависност између улазних и излазних варијабли, без обзира на велику сложеност те везе (нелинеарност). Дакле, неуронске мреже, као прорачунски алат, могу помоћу аналитичких и/или експериментално добијених података да моделирају понашање система, како једноставних, тако и оних сложених са већим бројем утицајних величина чији су ефекти како појединачних, тако и синергијских утицаја непознати и/или непотпуни и/или тешко предвидиви [29].

2.6. Евалуација модела

Изградња сваког модела за предвиђање (класификационог или регресионог) подразумева две кључне фазе: тренирање модела и његово тестирање. Квалитет неког модела се огледа у способности да исправно предвиди резултат за до тада непознате примере. Због тога је уобичајено да се у фази тренирања модела не користе сви доступни примери, већ само део примера (скуп примера за учење или тренинг скуп). Преостали примери (скуп примера за тестирање или тест скуп) се користе за проверу успешности модела у фази тестирања. Подаци за тренинг и тест скуп се бирају на случајан начин. Опште прихваћена пракса је да се расположиви скуп података подели на следећи начин: $2/3$ података за тренинг скуп, а $1/3$ за тест скуп, мада тај однос у многоме зависи и од врсте модела [30].

Поделом расположивог скупа на скупове за учење и тестирање омогућава се да се тестирање врши са примерима који су за модел нови јер нису били коришћени у процесу креирања модела. Недостатак оваквог приступа је што се приликом креирања модела велики број примера одбацује.

Савремени приступ се заснива на поновном узорковању (eng. *resampling*). Расположив скуп података се случајно дели на више подскупова при чему се део података користи за обучавање модела, док се остатак користи за његово тестирање.

Неки од најчешће коришћених алгоритама за поделу података су: метод тестног узорка (eng. *holdout method*), унакрсна валидација (eng. *cross-validation*) и бутстрап (eng. *bootstrap*) [31].

Метод тестног узорка је најједноставнији начин да се оригинални скуп насумично подели на два међусобно независна подскупа. Најчешће се или $2/3$ скупа података користи за обуку а $1/3$ за тестирање или по $1/2$ скупа података за обуку односно за тестирање. Тачност предвиђања зависи од ове поделе и повећава се са повећањем броја примера у тренинг скупу. Овај метод се често показује као пристрасна оцена квалитета.

Унакрсна валидација је од посебног значаја када комплетан расположив скуп има мали број примера. Код ове методе целокупан скуп примера се дели на k (најчешће $2 \leq k \leq 10$) међусобно дисјунктних подскупова приближно исте величине. Један од подскупова се користи за тестирање, док се преосталих $k - 1$ користе за учење модела. Поступак учења и оцењивања се понавља k пута, тако да се сваки подскуп бар једном користи као скуп за тестирање. Укупна тачност модела се добија као просечна вредност квалитета сваког скупа за тестирање. Предност ове методе је у томе што се сваки пример користи за тестирање, као и што се приликом конструкције модела у свакој итерацији користи већина расположивих примера. Међутим, очигледан проблем је ефикасност модела која директно зависи од броја подскупова.

Специјалан случај унакрсне валидације је када је кардиналност скупа за тестирање једнака јединици. То је метода изостављања једног примера (eng. *leave-one-out cross-validation*). Поступак учења и тестирања код ове модификоване методе одвија се у n (n је укупан број расположивих примера)

итерација при чему се модел креира коришћењем $n - 1$ примера, док се преостали пример користи за тестирање. Пошто је у овом случају заступљена максимална искоришћеност примера за учење, он даје скоро у потпуности поуздане резултате. Међутим, овај метод има велику рачунарску сложеност, што га чини скупим и неприменљивим.

Бутстрап (eng. *bootstrap*) метода се базира на избору случајних узорака из скупа свих узорака са могућношћу понављања, што омогућава мултиплицирање примера из почетног (расположивог) скупа. Наведена чињеница омогућава примену ове методе на проблемима са малим бројем доступних примера, односно узорака. Скуп примера за учење настаје тако што се из скупа од укупно n иницијално доступних примера, такође n пута изврши случајни избор примера при чему је могуће да се у току поступка избора претходно изабрани пример поново изабере. Због могућности понављања истог примера из расположивог скупа, готово је сигурно да ће се неки примери поновити у скупу за учење, али ће постојати и они који уопште нису заступљени у скупу за учење. Примери који ни у једном избору нису били одабрани у скупу за учење улазе у скуп за тестирање. Тачност модела се добија као просечна вредност квалитета у свакој итерацији.

Постоји неколико бутстрап метода. Најчешће се користи .632 бутстрап (eng. *.632 bootstrap*), где број 0.632 у називу означава очекивани просечан број међусобно различитих примера од укупног броја примера у скупу за учење, а добијен је применом закона вероватноће.

Наиме, пошто је $1/n$ вероватноћа да ће пример бити одабран, онда је вероватноћа да неће бити одабран ни у једном од n покушаја избора једнака $(1 - \frac{1}{n})^n$. За довољно велико n важи: $(1 - \frac{1}{n})^n \rightarrow e^{-1} \approx 0.368$, што значи да ће скуп за тестирање садржати 0.368 укупног броја примера, а скуп за учење $1 - 0.368 = 0.632$ укупног броја расположивих примера.

Пошто је ова метода због великог броја итерација рачунарски веома захтевна, она се примењује на проблемима са малим бројем расположивих примера. Основне одлике ове методе су: брза и једноставна процена без претпоставке о типу модела (ако је он непознат или комплексан), не ослања се на асимптотске резултате. Често се користи и за анализу стандардних процена у параметарским моделима, као и за њихово побољшање.

2.6.1. Евалуација модела класификације

Када је алгоритам обучен на примерима за учење, неопходно је проценити његов квалитет на основу примера из скупа за тестирање. Мера квалитета класификације описује успешност модела, тј. представља могућност да модел коректно предвиди класу новог примера. У литератури је описан велики број мера за оцену квалитета класификационих модела. У овом раду ће бити приказане само неке од најпознатијих и најчешће коришћених мера за класификационе проблеме са две класе. Међутим, то не умањује општост ових мера, будући да се проблеми са више класа могу приказати у облику низа проблема са две класе, где се једна класа узима за циљну, а скуп података се дели на позитивне и негативне примерке циљне класе.

Када се ради о бинарној класификацији, постоје четири могућа исхода предвиђања [32]:

- стварно позитивни (eng. *true positives* - *TP*) – број исправно класификованих позитивних примера
- стварно негативни (eng. *true negatives* - *TN*) – број исправно класификованих негативних примера
- лажно позитивни (eng. *false positives* - *FP*) – број неисправно класификованих позитивних примера
- лажно негативни (eng. *false negatives* - *FN*) – број неисправно класификованих негативних примера

- **Матрица конфузије** (забуне) (eng. *confusion matrix*) омогућава прегледан начин за визуелизацију грешака класификационог модела и уједно служи као основа за рачунање мера за оцену квалитета алгорита класификације.

		Предвиђена (предложена класа)	
		ДА	НЕ
Актуелна (стварна) класа	ДА	стварно позитивни	лажно негативни
	НЕ	лажно позитивни	стварно негативни

Слика 2. Матрица конфузије

Матрица приказује упоредни однос између броја предвиђених и правих класа. Елементи матрице који се налазе на главној дијагонали приказују коректна предвиђања класификационог модела.

- **Тачност** (eng. *accuracy*) је мера која представља однос укупног броја исправно класификованих примера и укупног броја класификованих примера. То је одговарајућа мера само за балансиране проблеме класификације

$$Tачност = \frac{TP + TN}{TP + FP + TN + FN} \quad (38)$$

- **Прецизност** (eng. *precision*) се још назива и позитивна вредност предвиђања. То је однос тачних позитивних предвиђања и укупног броја примера у којима је класификатор предвидео посматрану класу

$$Preciznost = \frac{TP}{TP + FP} \quad (39)$$

- **Одзив** (eng. *recall*) или тачност позитивних примера приказује однос коректно предвиђених примера и укупног броја коректних појављивања примера те класе

$$Odziv = \frac{TP}{TP + FN} \quad (40)$$

- **Ф-мера** (eng. *F-measure* или *F-score*) је комбинована мера добијена као хармонијска средина прецизности и одзива

$$F - \text{mera} = 2 \cdot \frac{\text{Preciznost} + \text{Odziv}}{\text{Preciznost} \cdot \text{Odziv}} = \frac{2TP}{2TP + FP + FN} \quad (41)$$

- **ROC крива** (eng. *Receiver Operating Characteristic curve* – *ROC-curve*) представља једну од графички оријентисаних мера класификационих модела. То је визуелни алат који садржи све информације које су садржане у матрици конфузије. На вертикалној оси се представљају вредности исправно класификованих позитивних примера (TP), а на хоризонталној – одговарајући број погрешно класификованих позитивних примера (FP).
- **Простор испод ROC криве** (eng. *Area under ROC curve* – *AUC*) се такође у многим апликацијама користи као мера квалитета класификације. Ова мера се назива и тачност мерења заснована на површини.

2.6.2. Евалуација модела регресије

Евалуација модела регресије има за циљ да обезбеди поуздану процену његових предиктивних перформанси, тј. квалитет апроксимације циљне функције. Мере за оцењивање квалитета регресионих модела се углавном заснивају, или на упоређивању вредности предиктивног модела и реалних вредности циљне функције (резидуали модела) на одређеном скупу података, или на оцењивању параметара модела. Оцене параметара модела се добијају проценом минимума квадрата растојања тачака добијених у неком експерименталном мерењу од тачака добијених одговарајућим математичким моделом. Осим тих показатеља за утврђивање усклађености оцењиваног модела са оригиналним подацима, може се користити и визуелна процена коришћењем графикона (eng. *residual plot*).

У литератури је описано више мера за оцену квалитета регресионих модела, али ће у овом раду бити описане само неке од њих које се најчешће користе [33].

Нека је:

$y_{exp}(i)$ – вредност добијена експерименталним путем (измерена вредност i -тог примера)

$y_{mod}(i)$ – вредност одређена коришћењем математичког модела (предиктивна вредност i -тог примера)

n – број примера за тестирање модела

$$\bar{y}_{exp} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_{exp}(i)$$

- **Средња апсолутна грешка** (eng. *Mean Absolute Error* – *MAE*)

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_{exp}(i) - y_{mod}(i)| \quad (42)$$

- **Резидуална сума квадрата** (eng. *Residual Sum of Squares - RSS*)

$$RSS = \sum_{i=1}^n (y_{exp}(i) - y_{mod}(i))^2 \quad (43)$$

- **Средње квадратна грешка** (eng. *Mean Square Error - MSE*):

$$MSE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_{exp}(i) - y_{mod}(i))^2 \quad (44)$$

За средње квадратно одступање се каже да често „кажњава“ велике резидуале. Наиме, модел са малим бројем великих резидуала и великим бројем малих резидуала може бити добар у односу на средње апсолутну грешку (MAE) али лош у односу на средње квадратну грешку (MSE). Велики резидуали су генерално непожељни, па је ова чињеница један од разлога популарности средње квадратне грешке, али се не сме занемарити ни аналитичка предност квадратне над апсолутном функцијом. Овај најчешће коришћени тип функције губитка за регресију назива се и квадратни губитак.

- **Корен средње квадратне грешке** (eng. *Root Mean Square Error - RMSE*)

$$RMSE = \sqrt{MSE} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_{exp}(i) - y_{mod}(i))^2} \quad (45)$$

Ефекат промењене скале услед квадрирања рачунањем средње квадратне грешке (MSE) чини интерпретацију грешака тежом. То се лако решава, без губљења квалитета мере, кореновањем те мере, што даје корен средње квадратне грешке (RMSE). Строга монотоност корене функције имплицира да су показатељи приказани помоћу RMSE исти као и показатељи MSE, тј. уколико модел минимизира једну од ових функција, такође минимизира и другу. Оне се само разликују у лакшој интерпретацији RMSE, што је чини популарнијом за представљање модела.

- **Релативна апсолутна грешка** (eng. *Relative Absolute Error - RAE*)

$$RAE = \frac{MAE}{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_{exp}(i) - \bar{y}_{exp}|} = \frac{\sum_{i=1}^n |y_{exp}(i) - y_{mod}(i)|}{\sum_{i=1}^n |y_{exp}(i) - \bar{y}_{exp}|} \quad (46)$$

Користи се за процену практичне корисности модела, тј. уз опис дистрибуције циљне функције даје процену да ли су резидуали модела довољно мали.

- **Коефицијент детерминације** (eng. *coefficient of determination - R²*)

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_{exp}(i) - y_{mod}(i))^2}{\sum_{i=1}^n (y_{exp}(i) - \bar{y}_{exp})^2} \quad (47)$$

У пракси се користи као индикатор квалитета регресионог модела, тј. скоро искључиво се користи као мера његове репрезентативности. Уколико се вредност коефицијента детерминације приближава јединици, то указује на скоро идеалан модел, док вредности блиске нули указују на бескористан модел.

- **Резидуална стандардна грешка** (eng. *Residual Standard Error - RSE*)

$$RSE = \sqrt{\frac{RSS}{n-2}} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (y_{exp}(i) - y_{mod}(i))^2}{n-2}} \quad (48)$$

Може се посматрати као мера недостатка „фита“ (eng. *lack of fit*) модела према експерименталним подацима, тј. говори колико предвиђања (вредности добијене помоћу модела) одступају од експериментално измерених података.

- **Средње релативно процентно одступање** (eng. *Mean Relative Percentage Deviation MRPD*)

$$MRPD = \frac{100}{n} \sum_{i=1}^n \frac{|y_{exp}(i) - y_{mod}(i)|}{y_{exp}(i)} \quad (49)$$

За евалуацију модела упоређивањем процењених и измерених вредности на овај начин се квантификује грешка предвиђања у процентима, што је чини лакшом за интерпретацију.

Осим наведених квантитативних модела, добри показатељи за утврђивање који је од понуђених модела са различитим бројем параметара бољи, су и Акаике-ов информациони критеријум и Бајесов информациони критеријум. Они представљају мере које комбинују погодност и сложеност модела.

- **Акаике-ов информациони критеријум** (eng. *Akaike's Information Criterion - AIC*) представља релативну меру квалитета примењеног модела [34]. Он се у многим научним областима често користи као кључ за избор између конкурентних модела. Међутим, овај критеријум не даје информацију о квалитету модела у апсолутном смислу. Уколико се упореде два лоша модела, АИС ће само дати информацију који је модел мање лош, али не и информацију да су оба посматрана модела лоша. Статистика овог модела се базира на функцији максималне веродостојности² (погодност модела) и броју параметара (сложеност модела) тестиране расподеле [34]:

$$AIC = -2 \ln(L) + 2p \quad (50)$$

где су:

L – максимална вредност функције веродостојности

p – број параметара модела.

² Ако је x реализовани узорак, онда се функција $L(\theta) = P(x|\theta)$ назива функција веродостојности (где је θ параметар који повећава функцију веродостојности)

- **Бајесов информациони критеријум** (eng. *Bayesian information criterion* – *BIC* или *Schwarz criterion*) – [35] је критеријум за избор модела у коначном скупу модела:

$$BIC = -2 \ln(L) + p \ln(n) \quad (51)$$

где су:

L – максимална вредност функције веродостојности

p – број параметара модела

n – обим узорака (број примера за тестирање модела)

Као и код *AIC*, функција максималне веродостојности приказује погодност модела (већа вредност функције \Rightarrow лошија погодност модела), а број параметара – сложеност модела.

Иако између *AIC* и *BIC* критеријума постоје теоријске разлике, у пракси се разликују само у коефицијенту који множи број непознатих параметара. Вредности оба критеријума се повећавају са повећањем броја параметара, па су приликом поређења једноставнији модели (са мањим бројем параметара) боље оцењени. Мање *AIC* и *BIC* вредности одређују бољи модел. Како оба критеријума имају своје предности али и недостатке, они дају најбоље резултате када се комбиновано користе.

Модел је бољи уколико су му ниже вредности статистике (сви показатељи осим R^2). Такође, као мера комплексности модела може се користити и број итерација за достизање конвергенције – мањи број итерација показује ефикаснији модел.

2.7. Алати за истраживање података

Развој и примена алгоритама истраживања података захтева коришћење моћних софтверских алата. С обзиром на то да је број доступних алата веома велики и наставља да расте, избор најпогоднијег алата постаје све тежи. За научне примене од посебне важности су алати у којима је интегрисано више разних метода како за припрему података, тако и за њихову анализу, што ове алате чини успешним у процесу откривања знања. Међу мноштвом софтверских алата за истраживање података (eng. *data mining*), постоје бесплатни (eng. *open source*) и комерцијални алати.

Не постоји идеалан алат који одговара свим проблемима истраживања података.

Према резултатима сајта [KDNuggets](http://www.kdnuggets.com)³ (водећи сајт за Business Analytics, Big Data, Data Mining and Data science) за 2016. годину, најпопуларнији међу алатима за истраживање података су: R, Python, Microsoft SQL Server, Microsoft Excel, Rapid Miner, KNIME, Weka, Oracle Data Miner, Matlab, итд.

³ <http://www.kdnuggets.com>

У нашем истраживању ограничили смо се на алате доступне у облику отвореног кода. Осим што се налазе у врху популарних алата за истраживање података, и што припадају групи бесплатних (eng. *open source*) алата, R и Weka у својим алгоритмима подржавају методе примењене у овом раду.

R је програмски језик и интегрисано програмско окружење за управљање подацима, али и за њихову анализу (нумеричку, статистичку) и графички приказ. Поред тога што обезбеђује широк избор статистичких тестова (линеарни и нелинеарни модели, класични статистички тестови, класификација, кластеризација), R омогућава корисницима додавање нових функционалности дефинисањем нових функција.

R се проширује помоћу пакета. Његова јака веза са академском заједницом активно доприноси да R прати трендове стварањем нових пакета. Број развијених пакета експоненцијално расте, и тренутно је већи од 1000. Сви пакети су доступни на CRAN⁴ (The Comprehensive R Archive Network) интернет страници. Алгоритми за потребе истраживања података као што су: регресија, класификација, кластеровање, асоцијативна правила, анализа временских серија и др., се налазе у тематски груписаним пакетима.

Велику снагу R-а чине и његове графичке могућности које обезбеђују графике доброг квалитета, укључујући и подршку за математичке симболе. R има и сопствени формат докумената сличан LaTeX-у. R је проглашен најпопуларнијим алатом у последње две године.

Weka⁵ (Waikato Environment for Knowledge Analysis) је радно окружење развијено у програмском језику Java. Поседује подршку за цео процес истраживања података, почев од припреме података, преко учења и оцењивања, до графичког приказа резултата анализе. Као програмско решење отвореног кода, Weka омогућава коришћење великог броја уграђених алгоритама, али се такође може и прилагодити потребама конкретног проблема [36].

Weka подржава мноштво алгоритама као подршку методама за истраживање података, од којих су најпознатије: регресија, класификација, кластеровање, асоцијативна правила. Већина метода омогућава подешавање параметара према конкретном проблему и подацима. Једноставан кориснички интерфејс пружа лак и ефикасан начин анализе података.

Још једна од предности овог алата је његова преносивост, па га је могуће покренути на готово свакој модерној платформи. Главни недостатак софтвера Weka представља документација у којој је, због константног повећавања броја расположивих алгоритама, уместо њиховог пратећег описа најчешће дата само њихова листа.

⁴ <https://cran.r-project.org>

⁵ <http://www.cs.waikato.ac.nz/ml/weka>

3. Процес хидродестилације и преглед досадашњих релевантних истраживања

Свака биљка из мноштва биљака које расту на Земљи (и чији је број између 300 000 и 500 000), садржи састојке који се обично не могу видети голим оком, већ су сакривени унутар корена, цветова, листова, плода, семена, коре, или у другим деловима биљке [41]. Те компоненте су познате као етарска уља. Етарска уља су испарљива ароматична једињења која биљкама дају карактеристичан мирис и арому. Та уља су веома концентрована што их чини изузетно моћним. Иако наука још нема потпун одговор на питање чему етарска уља служе у животном циклусу биљке, јасно је да она играју важну улогу у прилагођавању биљке околини и комуникацији са њом. Познато је, на пример, да неке биљке мирисом етарског уља привлаче инсекте ради опрашивања, да етарска уља штите неке биљке од инфекција, око неких биљака стварају засићену атмосферу која спречава прекомерно губљење влаге, штите биљку од биљоједа или делују попут хербицида.

Према ISO (International Standard Organisation) стандарду за етарска уља (ISO 9235:2013) и Европској фармакопеји (Concil of Europe 2004), етарско уље се дефинише као продукт добијен из биљних сировина хидродестилацијом, екстракцијом или пак погодним механичким поступком (за агруме).

Етарска уља, позната и као есенцијална уља, есенције, етерична уља (*aetheroleum* lat. (*oleum* = уље, *aetheroleum* (етеролеум) = етарско уље)) су природни производи сачињени од више испарљивих ароматичних једињења (компоненти) [42, 43]. Више стотина врста до сада откривених испарљивих ароматичних једињења (у неким уљима и до 800) која улазе у састав етарских уља, у великој мери одређују предности, арому и природу сваког етарског уља.

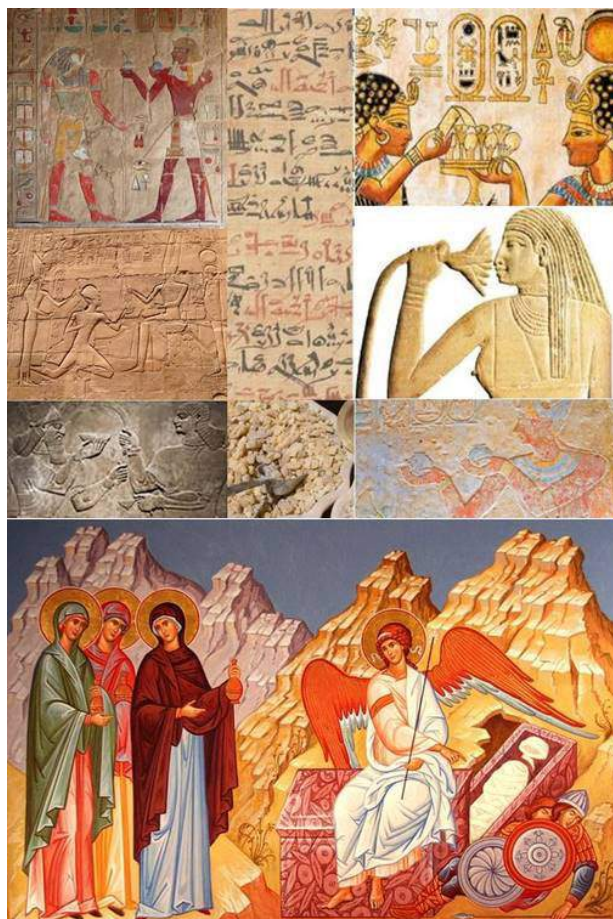
До сада је описано више од 300 компонената етарских уља [44].

Због јединственог хемијског састава, етарска уља се разликују од врсте до врсте, па чак и од биљке до биљке у оквиру исте врсте.

Пошто је квалитативни састав етарског уља специфична карактеристика одређене биљне врсте и генетски је условљен, може се рећи да он представља „отисак прста“ (eng. *finger print*) за дату врсту [45].

Етарска уља представљају најстарији облик лека који је познат човеку. Записи о њиховом коришћењу могу се пронаћи још у древним египатским хијероглифима и кинеским рукописима (eng. *manuscript*). У многим древним културама етарска уља су била вреднија од злата.

Реч „Етер“ потиче из грчког језика и означава простор у коме звезде лебде и богови обитавају и та чињеница показује колики је значај некада придаван овим супстанцама. Најчешће су се примењивале за лечење болести или у религијским обредима. Само у Библији се помазивање уљем помиње преко 150 пута [46].



Слика 3. Докази о употреби етарских уља од древних времена

Осим што се користе као зачини, парфеми, за верске обреде, у ароматерапији, етарска уља данас налазе све већу примену у фармацији, медицини, ветерини, прехрамбеној и кондиторској индустрији, у индустрији алкохолних и безалкохолних пића, средстава за хигијену, али и као хербициди и пестициди, у дуванској индустрији, индустрији боја и лакова, парфимеријској индустрији, индустрији козметике и хигијене.

На собној температури етарска уља су лако покретљиве безбојне или слабо обојене бистре течности, ређе имају вискозну или получврсту конзистенцију. Већ на ниским температурама поједини састојци етарских уља испаравају и зато ова уља имају специфичан пријатан или непријатан мирис. Пошто етарска уља представљају смеше различитих једињења, она фракционо кључају у интервалу од 150°C – 300°C.

Биљке које садрже етарска уља називају се ароматичне. Оне садрже најчешће мање од 1% уља [47]. Етарска уља су у биљкама заступљена у врло малим количинама. У неким биљкама, количина етарског уља износи свега 0.01%, што добијено уље чини веома скупим [48].

Етарска уља се одликују веома битном карактеристиком – нису растворљива или су пак веома слабо растворљива у води. Та чињеница је јако битна за избор процеса за њихово добијање.

3.1. Технолошки процеси

Технолошки поступак представља најважнији део и основу сваке производње. Под технолошким поступком подразумевамо начин и редослед радних операција које сачињавају тај процес. Од избора технолошког процеса у великој мери зависи квалитет производа али и трошкови производње неопходни за добијање тог производа.

Интересовање за проучавање и производњу етарских уља током последњих деценија расте. Њихова примена је значајно проширена, па ови производи биљног порекла, због своје супериорности у односу на синтетичке производе, добијају све већи значај у фармацији, козметици, исхрани итд.

3.1.1. Поступци добијања етарских уља

При избору поступка за добијање етарског уља, неопходно је да буду задовољена два основна циља: добар квалитет и што већи принос издвојеног уља. Велики број фактора утиче на избор оптималног поступка за добијање етарског уља: врста биљке, садржај уља у биљци, део биљке у коме је уље лоцирано (корен, кора, стабло, лист, плод или семе), хемијски састав и тржишна вредност уља, принос и квалитет етарског уља који обезбеђује одабрани (примењени) поступак, али и вредност остатка (биомасе) након завршеног издвајања етарског уља.

Данас су на располагању следеће технике добијања етарског уља: пресовање, екстракција коришћењем одговарајућих растварача, дестилација (водом, водом и воденом паром, воденом паром) и дестилација на сниженом притиску.

- Пресовање је механичка метода. Примењује се код агрума, код којих се етарско уље налази у кори. Метод се спроводи на два начина: или стругањем коре целог плода, или претходним истискивањем пулпе из плода, након чега се примењује притисак.
- Екстракција органским растварачима се користи за изоловање термолабилних супстанци из биљног материјала. Примењује се код етарских уља чије компоненте подлежу деградацији приликом дестилације воденом паром.
- Екстракција неутралним мастима или адсорбенсима, позната као анфлераж (eng. *enfleurage*), је метода која се често користи у индустрији парфема за изоловање етарских уља и мириса из биљака. Принцип је да се мирисне материје издвајају из масти (помоћу селективних растварача) у којој је биљни материјал био уроњен и остављен да одстоји. То је сложен и скуп поступак.
- Хидродестилација воденом паром је прикладна метода за издвајање испарљивих компоненти из биљног материјала (етарских уља) као и других релативно испарљивих једињења која се мешају или се врло слабо мешају са водом а на својим температурама кључања су нестабилна и подложна оксидацији. С обзиром на то да се хидродестилација воденом паром одвија на повишеној температури, ова метода може да доведе до

губитака најлакше испарљивих компоненти етарског уља које су носиоци пријатног мириса.

У зависности како се третира биљни материјал, постоје три начина за извођење хидродестилације:

- Обична дестилација или дестилација водом. Код овог поступка биљни материјал је све време потопљен у води која кључа. Карактерише га мали принос и слаб квалитет етарског уља.
- Дестилација водом и воденом паром је процес који се изводи уз истовремени контакт воде и водене паре са самлевеним биљним материјалом. Карактерише га већи принос и квалитет етарског уља, него код уља добијеног обичном дестилацијом.
- Дестилација воденом паром се најчешће користи у производњи етарских уља [49]. Користи се код биљних врста које су богате етарским уљем чије су компоненте термички стабилне и нерастворне у води. Код овог поступка водена пара се производи у парогенераторима и сува или засићена се пропушта кроз биљни материјал.

Већина етарских уља се данас производи хидродестилацијом.

Хидродестилација је један од најстаријих и најједноставнијих технолошких поступака за добијање етарских уља из ароматичног биља (биљних дрога). То је релативно једноставна и безбедна техника која не захтева велика инвестициона улагања у процесну опрему.

- Дестилација на сниженом притиску, или вакуум дестилација, омогућава да се снижавањем спољашњег притиска изнад течности снизи и њена тачка кључања, што омогућава да се дестилују супстанце које имају врло високе тачке кључања или које се разлажу при температурама потребним да се изврши дестилација при атмосферском притиску.

Пошто све расположиве технике за добијање етарских уља имају и своје предности и недостатке, неопходно је размотрити њихове карактеристике и одредити се за најбољу опцију.

3.2. Етарско уље клеке (*Juniperus communis* L.)

Род *Juniperus* L. припада породици *Cupressaceae* и обухвата 67 врста и 34 варијетета који су скоро искључиво распрострањени на северној хемисфери, са једном врстом која се простире на територији афричког континента [51].

Биљке из рода *Juniperus* у народу су познате као клека, боровица, смрча, смрека, вења. То је зимзелени јако разгранати грм или дрво са игличастим листовима, који се најчешће среће на светлим шумским брежуљцима, крчевинама, клисурама и неплодном каменитом тлу, на базном или киселом тлу. Расту споро и живе веома дуго (и до 800 година).



Слика 4. Клека (*Juniperus communis* L.)

Лековити делови биљке су бобичасте шишарке (бобице) из којих се добија етарско уље (1.5 – 2.5%, [52]). Плодови и уље клеке се користе као зачини, за израду алкохолних пића као што су клековача и џин, али и у производњи безалкохолних пића као што је водњика (изузетно здрав наш национални напитака који се прави од дивљег воћа).

Етарско уље плода клеке је најважнији биоактивни састојак, који има широку примену и високу комерцијалну вредност због значајног антибактеријског и антивирусног дејства. Користи се у медицини, ветерини, прехранбеној, козметичкој и фармацеутској индустрији [52, 53].

Осим етарског уља, као главног производа, прерадом бобица клеке могуће је добити и комерцијалне производе као што су: вино, алкохолни напитци, органско ђубриво, брикети. Дакле, прерада плода клеке, уз унапређење процеса хидродестилације, оптимизацију њених технолошких параметара и начина припреме плода клеке за хидродестилацију, оптимизацију утрошка енергије (одређивање оптималног времена трајања процеса) и комерцијално коришћење течног и чврстог остатка, представља пример безотпадне технологије [54].

На принос етарских уља неке биљне врсте могу утицати бројни фактори, као што су: време прикупљања биљног материјала, географско порекло, станиште, велики број еколошких фактора (тип земљишта, клима), начин и време припреме биљног материјала, употребљена техника добијања уља [52, 55, 56, 57].

За добијање уља, које је у бобицама клеке присутно обично у малим количинама, примењиване су различите технике: хидродестилација [52, 54, 55, 58], екстракција наткритичним угљеник (IV)-оксидом [57, 59, 60, 61] екстракција органским растварачима [57], истовремена дестилација и екстракција [58].

Најзаступљенија техника за добијање етарског уља из плодова клеке је хидродестилација. Хидродестилација клеке, не само да даје уље високог квалитета, већ је и релативно једноставна и безбедна у поређењу са осталим техникама екстракција, као што се не може занемарити ни последични утицај на заштиту животне средине применом ове технике [52].

У овом раду дали смо посебан осврт оптимизацији процеса хидродестилације етарског уља плода клеке (*Juniperus communis* L.), иако су обрађени и подаци који се односе на кинетику хидродестилације етарских уља из других биљних дрога.

3.3. Кинетика хидродестилације етарског уља – преглед досадашњих истраживања

Велики број радова који се односе на издвајање етарских уља из различитих биљних материјала (па самим тим и на издвајање етарског уља из плода клеке), бави се саставом, приносом и квалитетом етарских уља. Занимљиво је да нема много објављених радова о кинетици⁶ дестилације уља клеке, као ни о ефектима брзине хидродестилације на принос, састав и физичке особине уља клеке. То је вероватно последица чињенице да произвођачи уља клеке користе традиционалне технологије а оптимитација процеса се занемарује, или јој се придаје врло мали значај.

Имајући у виду да су сазнања о саставу уља клеке и његовим физичко-хемијским особинама важна јер одређују начин његове употребе, неопходно је истаћи и важност сазнања о приносу уља и кинетичком моделу екстракције за технолошку и економску анализу хидродестилације. Моделовањем кинетике хидродестилације етарских уља доприноси се, не само основном разумевању процеса, већ и његовој бољој контроли и већој ефикасности [52].

У литератури познате моделе за моделовање кинетике хидродестилације етарских уља можемо поделити на моделе засноване на нестационарној дифузији⁷ и на феноменолошке моделе.

За описивање кинетике хидродестилације етарског уља из различитих биљних материјала, истраживачи су углавном користили моделе засноване на другом Фиковом закону⁸. При томе се претпоставља да је етарско уље хомогено и истог састава за све биљне честице које се сматрају изотропним.

⁶ Кинетика је део динамике који истражује односе између кретања тела и сила које делују на њих

⁷ Дифузија је механизам којим се материја преноси кроз материју. Дифузија је спонтани транспорт материје или енергије под утицајем одговарајућег градијента из зоне више у зону ниже енергије или концентрације

⁸ Други Фиков закон дифузије представља процес нестационарне дифузије, којом се изражава промена концентрације материје која дифундује у одређеној тачки система са временом [62].

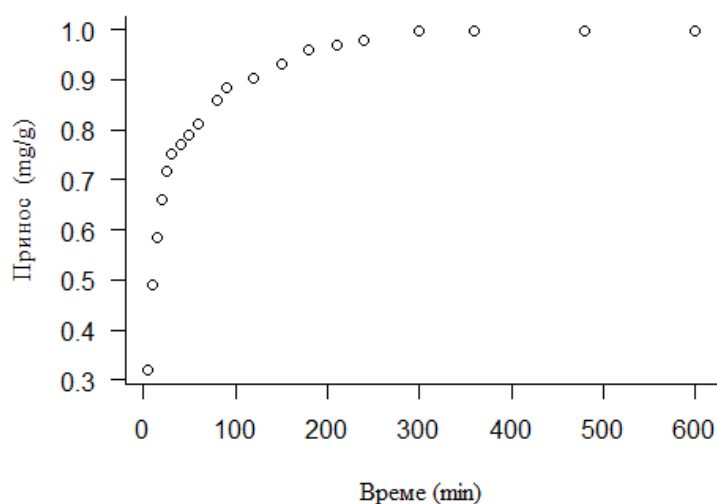
$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial c}{\partial x} \right) = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$$

где је D – коефицијент дифузије, c – концентрација, t – време, x – просторна координата

Моделовање кинетике издвајања етарских уља захтева најбоље слагање (фитовање⁹) података добијених из развијених модела са експерименталним подацима, што неизбежно доводи до проблема оцене параметара. Генерално, овај проблем се може формулисати као проблем проналажења најмање могуће грешке између експерименталних података и података добијених на основу једначине модела.

Типичан процес издвајања етарског уља из биљног материјала, коришћењем процеса хидродестилације, пролази кроз две главне фазе и то:

- Фаза брзе дестилације или испирање – одвија се на почетку процеса када се количина (принос) издвојеног уља брзо повећава
- Фаза споре дестилације или дифузија се одвија при крају процеса и у тој фази принос издвојеног етарског уља се споро повећава све до момента док се не достигне равнотежа



Слика 5. Промена приноса етарског уља присутног у биљном материјалу у току процеса хидродестилације

Између ове две фазе налази се период успоравања дестилације етарског уља.

Кинетика хидродестилације етарског уља из плода клеке типична је за хидродестилацију етарског уља из већине биљних материјала и потврђује механизам издвајања уља у две фазе. Механизам хидродестилације је уско повезан са анатомијом бобица клеке и њиховим уситњавањем. На основу овог механизма, кинетика хидродестилације етарског уља, не само из плода клеке, већ и из различитих делова разних других биљних врста, изведена при различитим оперативним условима (брзина хидродестилације, хидромодул), било на лабораторијском или индустријском нивоу, може бити успешно описана математичким моделима.

⁹ Фитовање неког модела подразумева процену вредности непознатих параметара тог модела како би се постигло најбоље слагање са стварним вредностима, тј. како би разлика између одређених и стварних вредности била минимална.

3.3.1. Модел Бенјусефа

Проучавајући кинетику хидродестилације етарског уља из семена коријандера, Бенјусеф (Benyoussef) и сар. [63] су користили систем парцијалних диференцијалних једначина које се решавају коришћењем методе Рунге-Кута (Runge-Kutta)¹⁰.

$$\frac{\partial X_f(t, r)}{\partial t} = -K_c \times X_f(t, r) \quad (52)$$

$$\frac{\partial X_l(t, r)}{\partial t} = -D_a \times \frac{\partial^2 X_l(t, r)}{\partial r^2} + \frac{2 \times D_a}{r} \times \frac{\partial X_l(t, r)}{\partial r} + K_c \times X_f(t, r) \quad (53)$$

где су:

K_c – псеудоконстанта реакције

D_a – коефицијент дифузије

t - време

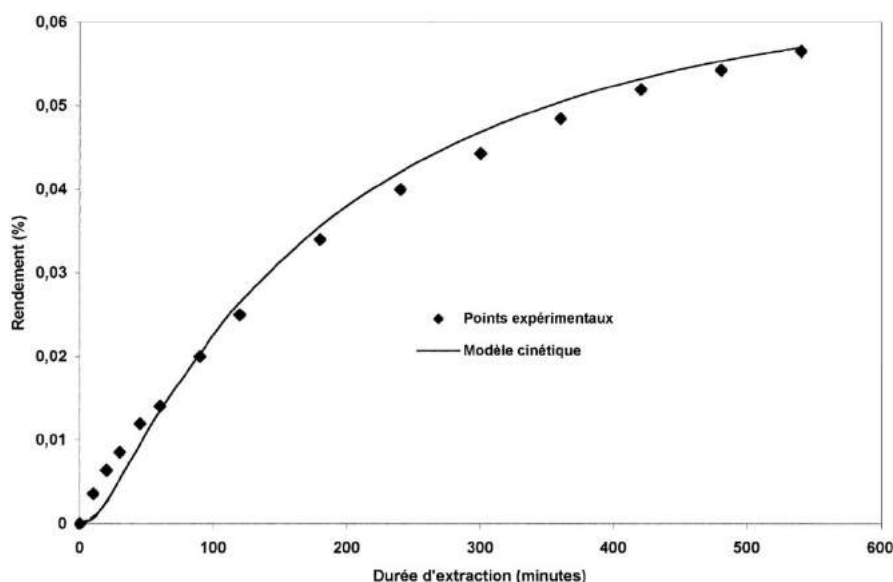
r – просторна променљива

X_l – концентрација слободног раствора (fr. *soluté libre*)

X_f – концентрација граничног слоја раствора (fr. *soluté lié*)

Овај модел је сложен, решава се нумеричким коришћењем методе Рунге-Кута, па као такав није погодан за рутинску инжењерску примену.

У моделу Бенјусефа постоје параметри који нису доступни па га није могуће проверити. Аутор у раду даје графички приказ свог модела (Слика 6) са кога се може видети колико модел одступа од експерименталних вредности.



Слика 6. Симулација екстракције етарског уља из семена коријандера хидродестилацијом помоћу модела Бенјусефа (Benyoussef) [63]

¹⁰ Метода за нумеричку интеграцију обичних диференцијалних једначина помоћу корака у средини интервала како би се умањиле грешке нижег реда.

3.3.2. Модел Касел-Варгас

Да би симулирали процес издвајања етарског уља процесом хидродестилације, Касел и Варгас (Cassel-Vargas) [64] су користили биљни материјал чије су честице плочастог облика (дебљина плоче је један од параметара који представља предуслов за проверу модела, а по правилу није расположив у радовима). Они су пошли од другог Фиковог (Fick) закона, чија математичка формулација може бити и:

$$\frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2} = \frac{1}{D} \frac{\partial C_A}{\partial t}, \quad \text{за } 0 \leq x \leq L \quad (54)$$

и решавајући Штурм-Лиувилев¹¹ (Sturm-Liouville) проблем за почетне и граничне услове $C_A = C_{A_0}$ за $t = 0$ и

$$C_A = 0 \text{ за } x = 0$$

$$C_A = 0 \text{ за } x = L$$

где је L - дебљина плоче а D - ефективни коефицијент дифузије, при чему се једначина за масу издвојеног етарског уља $m_A(t)$ може представити у облику:

$$m_A(t) = \frac{8m_{A_0}}{\pi^2} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1 - e^{-(2m+1)^2 \pi^2 \frac{Dt}{L^2}}}{(2m+1)^2} \quad (55)$$

па се принос може дефинисати са:

$$e(t) = \frac{m_A(t)}{m_A(\infty)} \quad (56)$$

или у облику једначине:

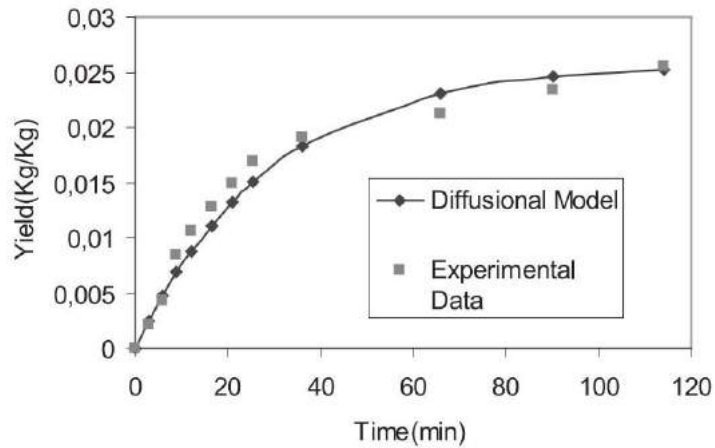
$$e(t) = \frac{\sum_{m=0}^{\infty} \frac{1 - e^{-(2m+1)^2 \pi^2 \frac{Dt}{L^2}}}{(2m+1)^2}}{\sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{(2m+1)^2}} \quad (57)$$

јер је

$$m_A(\infty) = \frac{8m_{A_0}}{\pi^2} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{(2m+1)^2} \quad (58)$$

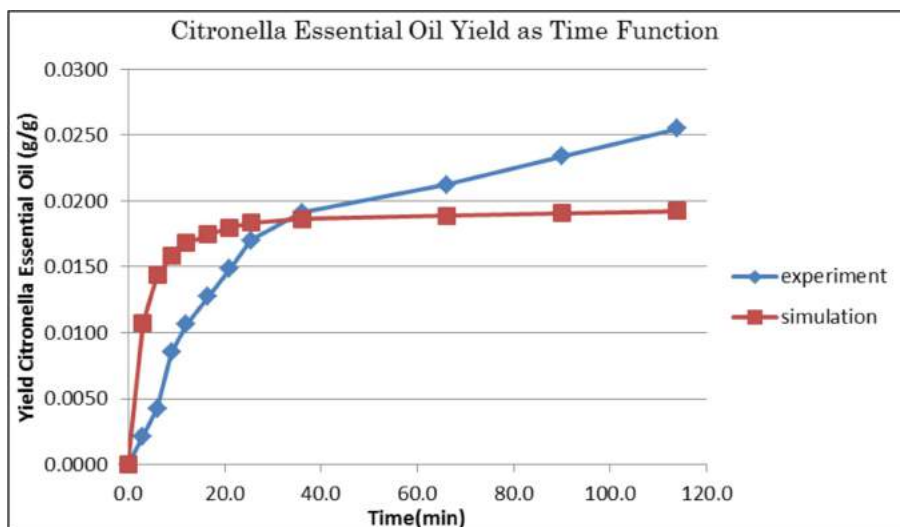
Овај модел су проверили описујући кинетику парне дестилације етарског уља из рузмарина (*Rosmarinus officinalis* L.), босиљка (*Ocimum basilicum* L.) и лаванде (*Lavandula dentata* L.).

¹¹ Налажење вредности параметра за које у датој једначини постоје нетривијална решења, која задовољавају задате граничне услове [65].



Слика 7. Крива приноса етарског уља цитронеле дестилацијом воденом паром: математички модел и експериментални подаци [64]

Фархана (Farhana) и сар. [66] у свом пројекту који представља наставак истраживања Касела и Варгаса, провером и поређењем са другим моделима кинетике пратећи процес хидродестилације матичњака долазе до закључка да нема савршеног слагања овог модела са експерименталним вредностима. За вредност ефективног коефицијента дифузије коју су предложили Касел и Варгас корен средње квадратне грешке (*RMSE*) износи 31.79% односно 22.6% након оптимизације, што је у поређењу са другим моделима вишеструко већа вредност



Слика 8. Принос етарског уља матичњака у функцији од времена [66]

3.3.3. Модел Буткежире

У циљу описа кинетике хидродестилације етарског уља рузмарина (*Rosmarinus officinalis* L.), користећи аналитичка решења парцијалне диференцијалне једначине другог Фиковог закона (за случајеве када су честице сферног облика), Буткежире (Boutekedjiret) и сар. [67] су за претпостављени модел извели једначину:

$$\frac{q}{q_{\infty}} = 1 - \frac{8}{\pi^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)^2} e^{-(2n+1)^2 \pi^2 \frac{D_{ekd} t}{L^2}} \quad (59)$$

где су:

q и q_{∞} - приноси етарског уља у било ком тренутку t и бесконачном времену ($t \rightarrow \infty$) респективно,

L - дебљина равне плоче,

D_{ekd} - ефективни коефицијент дифузије етарског уља.

Количник $\frac{D_{ekd}}{L^2}$ се рачуна минимизирањем суме квадрата одступања између експериментално добијених података и вредности одређених из модела.

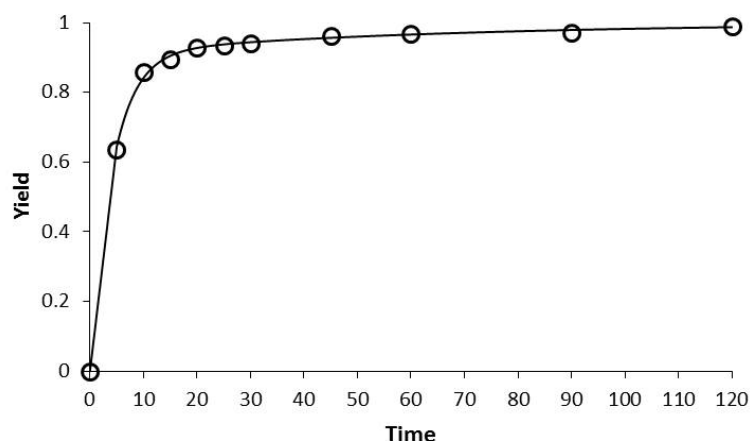
Ова једначина се може упростити за почетни период (минималне вредности $\frac{q}{q_{\infty}}$) при чему се добија:

$$\frac{q}{q_{\infty}} = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \frac{\sqrt{D_{ekd} t}}{L} = \frac{4}{L} \sqrt{\frac{D_{ekd} t}{\pi}} \quad (60)$$

Осим тога, у каснијем периоду, када је $\frac{q}{q_{\infty}}$ близу своје граничне вредности ($\frac{q}{q_{\infty}} = 1$), почетна једначина се своди на једначину за $n = 0$ па је:

$$\frac{q}{q_{\infty}} = 1 - \frac{8}{\pi^2} e^{-\frac{\pi^2 D_{ekd} t}{L^2}} \quad (61)$$

Коришћењем последње две упрошћене једначине уместо полазне једначине, релативно поуздано се могу израчунати приноси етарског уља, при чему релативна грешка не прелази 0.1% за $\frac{q}{q_{\infty}} \leq 0.5$ и $\frac{q}{q_{\infty}} \geq 0.5$, респективно.



Слика 9. Принос етарског уља рузмариног у функцији од времена

3.3.4. Модели кинетике псеудо првог реда и дифузиони модели

Кинетику псеудо првог реда користило је више истраживача за моделовање кинетике етарског уља из различитих биљних материјала: лишће тимијана (*Thymbra spicata* L.) [68], семена лимунове траве (*Cymbopogon spp*) [69], целера (*Apium graveolens* linn.) [70] и кумина (*Cuminum cuminum* L.) [71] парном дестилацијом, као и цветова лаванде (*Lavandula angustifolia* Mnch) хидродестилацијом [52, 72].

У овим моделима се претпоставља да се принос етарског уља повећава по логаритамском закону [63], што подразумева да екстракција етарског уља следи кинетику псеудо првог реда у односу на преостало етарско уље у биљном материјалу.

$$\frac{dq_t}{dt} = -kq_t \quad (62)$$

односно

$$\ln(q_t) = -kt + \ln(c) \quad (63)$$

где су:

q_t – садржај етарског уља у биљном материјалу у било ком тренутку t

k – константа брзине

$\ln(c)$ – интеграциона константа

Уколико у једначину (63) уврстимо почетне услове $q_t = q_0$ за $t = 0$, и уколико претпоставимо да нема губитка етарског уља у току хидродестилације, као и да се етарско уље не раствара у води, тада биланс масе етарског уља (q) можемо записати у облику: $q = q_0 - q_t$.

Комбинацијом једначине (63) са почетним и претпостављеним условима, добија се:

$$\ln \frac{q_0 - q}{q_0} = -kt \quad (64)$$

Уколико се, процесом хидродестилације, етарско уље у потпуности издвоји из биљног материјала, тада се добија максимални принос уља ($q = q_\infty \leq q_0$) када $t \rightarrow \infty$, а једначина добија облик:

$$\ln \frac{q_\infty - q}{q_\infty} = -kt \quad (65)$$

Дифузиони модел који се заснива на укупном билансу масе етарског уља у колони за парну дестилацију и брзини преноса масе етарског уља у парну фазу развили су Ромдан (Romdhane) и Тизауви (Tizaoui) [73]. Они су користили упрошћени модел заснован на линеарној погонској сили преноса масе. Резултујућа једначина овог модела је диференцијална једначина која повезује масе етарског уља у парној фази и у биљном материјалу, али овај модел захтева неке специфичне податке који су ретко расположиви, и по правилу се не објављују у анализираним радовима, те га је немогуће проверити.

Два најчешће коришћена модела којима се описује кинетика процеса издвајања етарског уља су: тропараметарски модел [74] и двопараметарски модел [75] и они припадају групи феноменолошких модела.

3.3.5. Модел Совова-Алексовски

У тропараметарском моделу Совова-Алексовски, који је развијен на примеру хидродестилације етарског уља из семена коријандера (*Corianderum sativum* L.), две различите константе описују процесе који се истовремено одвијају током хидродестилације, док трећи параметар описује део етарског уља који се издваја брзом хидродестилацијом.

Совова и Алексовски [74] су извели модел за хидродестилацију етарског уља из честица са хомогено распоређеним етарским уљем и из честица са делом етарског уља на површини. У првом случају етарско уље из неразорених ћелија дифундује полако према површини честица, а у другом случају етарско уље које се налази у ћелијама са разореним зидом се брзо екстрахује. Резултујућа једначина има две различите временске константе од којих већа по вредности одговара унутрашњој дифузији кроз биљне честице:

$$\frac{q}{q_{\infty}} = 1 - f e^{-\frac{t}{T_1}} - (1 - f) e^{-\frac{t}{T_2}} \quad (66)$$

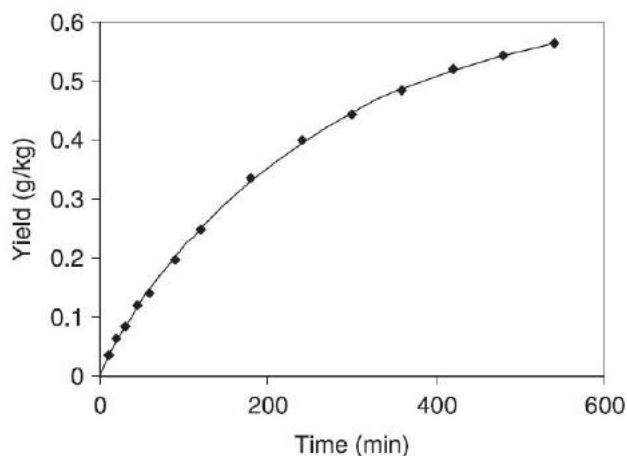
где су:

q - принос (масени удео издвојеног етарског уља) у времену t

q_{∞} - принос етарског уља у времену $t \rightarrow \infty$

f, T_1, T_2 - параметри модела који се могу израчунати „фитовањем“ једначине са експерименталним односима q/q_{∞} и минимизирањем суме квадрата одступања између експерименталних и израчунатих вредности односа.

Овај модел је модел који до сада најбоље описује кинетику хидродестилације етарског уља плода клеке, па се сходно томе најчешће и примењује.



Слика 10. Принос етарског уља из семена коријандера (■ - експериментални подаци; — - математички модел са параметрима $q_{\infty} = 0.64 \text{ mg/g}$; $f = 0.031$; $T_1 = 16.3 \text{ min}$; $T_2 = 259.9 \text{ min}$)

3.3.6. Модел Милојевића

Код модела Милојевића [75], кинетика процеса хидродестилације етарског уља је описана са два параметра који карактеришу фазе брзе хидродестилације (тзв. испирање) и споре хидродестилације (дифузија). Модел се заснива на претпоставци да се у почетној (брзој) фази етарско уље брзо издваја, док се у спорој фази одвија дифузија етарског уља из уситњених честица биљног материјала према њиховој спољној површини, и та фаза је знатно спорија.

Двопараметарски модел Милојевића [75], који описује кинетику издвајања етарског уља из уситњених плодова клеке (*Juniperus Communis* L.) хидродестилацијом, има основну кинетичку једначину облика:

$$\frac{q}{q_{\infty}} = 1 - (1 - b)e^{-kt} \quad (67)$$

где су:

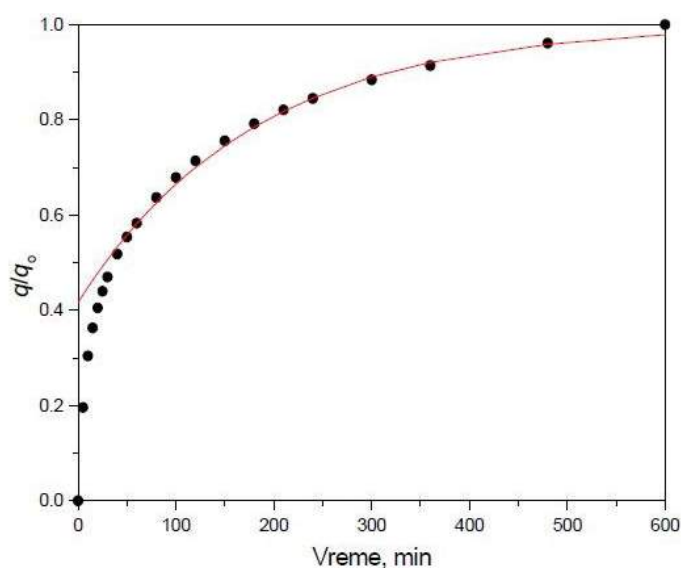
b - параметар који карактерише степен брзе хидродестилације (тзв. коефицијент брзе хидродестилације)

k - параметар који карактерише степен споре хидродестилације (тзв. коефицијент споре хидродестилације).

Параметри кинетичког модела b и k се рачунају из експерименталних података методом линеарне регресије, коришћењем линеаризованог облика једначине:

$$\ln\left(1 - \frac{q}{q_{\infty}}\right) = \ln(1 - b) - kt \quad (68)$$

Уочава се веома добро слагање развијеног модела са експерименталним подацима у фази „споре“ хидродестилације, као и одступање у фази „брзе“ хидродестилације. Овај модел се подудара са тропараметарским феноменолошким моделом Савова и Алексовски [74] у фази „споре“ хидродестилације, за разлику од једнопараметарских модела заснованих на нестационарној дифузији и кинетици првог реда, који нису погодни за описивање кинетике хидродестилације етарског уља плода клеке [52].



Слика 11. Промена приноса етарског уља, рачунатог као количина уља по јединици масе уља присутног у плоду клеке, у току хидродестилације клеке (биљни материјал:вода= 1: 3; експериментални подаци – •; пуна линија – једначина двопараметарског модела) [52]

Пошто су у објављеним радовима феноменолошки модели најзаступљенији, резултати добијени новом методом, која се у овом раду предлаже, биће упоређиван са резултатима тих модела.

3.3.7. Емпиријски модели

За моделовање кинетике екстракције етарског уља из биљног материјала могу се користити и емпиријски¹² модели.

То су модели који су по правилу једноставнији од модела заснованих на физичким законитостима. Они се са релативно великом прецизношћу могу користити за инжењерске потребе, када је потребно да се предвиди понашање истог или сличног система у опсегу вредности параметара за које је извршена анализа и развој модела. Њихова улога у моделовању кинетике екстракције етарских уља из биљног материјала је занемарљива.

Емпиријски модели (модели „црне кутије“) су базирани на функционалном пресликавању улазних у излазне величине, без експлицитног описивања процеса. Овој групи модела припадају емпиријске релације засноване на регресионим анализама, трансфер функције и неуронске мреже.

Емпиријски модели, при трансформацији улазних података у резултате модела, не узимају у обзир физичке законе који утичу на њих.

Пошто су емпиријски модели засновани само на подацима и користе се за предвиђање понашања система, неопходно је да садрже функцију која се прилагођава („фит“) подацима. Код података који су линеарно зависни, добијање параметара линеарне једначине је веома једноставно (и рачунају се нпр. методом најмањих квадрата), док је за податке који нису линеарно зависни додатни задатак да се претпостави ваљан облик функције зависности који зависи од параметара који ће се добити фитовањем.

¹² Емпирија (наука о искуству) представља знање засновано на научним чињеницама прикупљеним искуственим посматрањем

4. Експериментални подаци

База експерименталних података је подељена у два дела. Први део базе чине подаци добијени експериментима у којима је примењена техника хидродестилације етарског уља из самлевених, зрелих, неферментисаних плодова клеке. Коришћени експериментални подаци су узети из дипломских радова и докторских дисертација [52, 76, 77, 78, 79, 80]. У другој групи података се налазе само експериментални подаци о кинетици хидродестилације етарског уља из различитих биљних материјала, преузети из објављених научних радова [54, 64, 68, 69, 70, 71, 72, 73, 75, 81, 82, 83, 84, 85, 86, 87, 88, 89, 90, 91, 92, 93, 94, 95, 96, 97, 98, 99, 100, 101, 102, 103, 104, 105, 106].

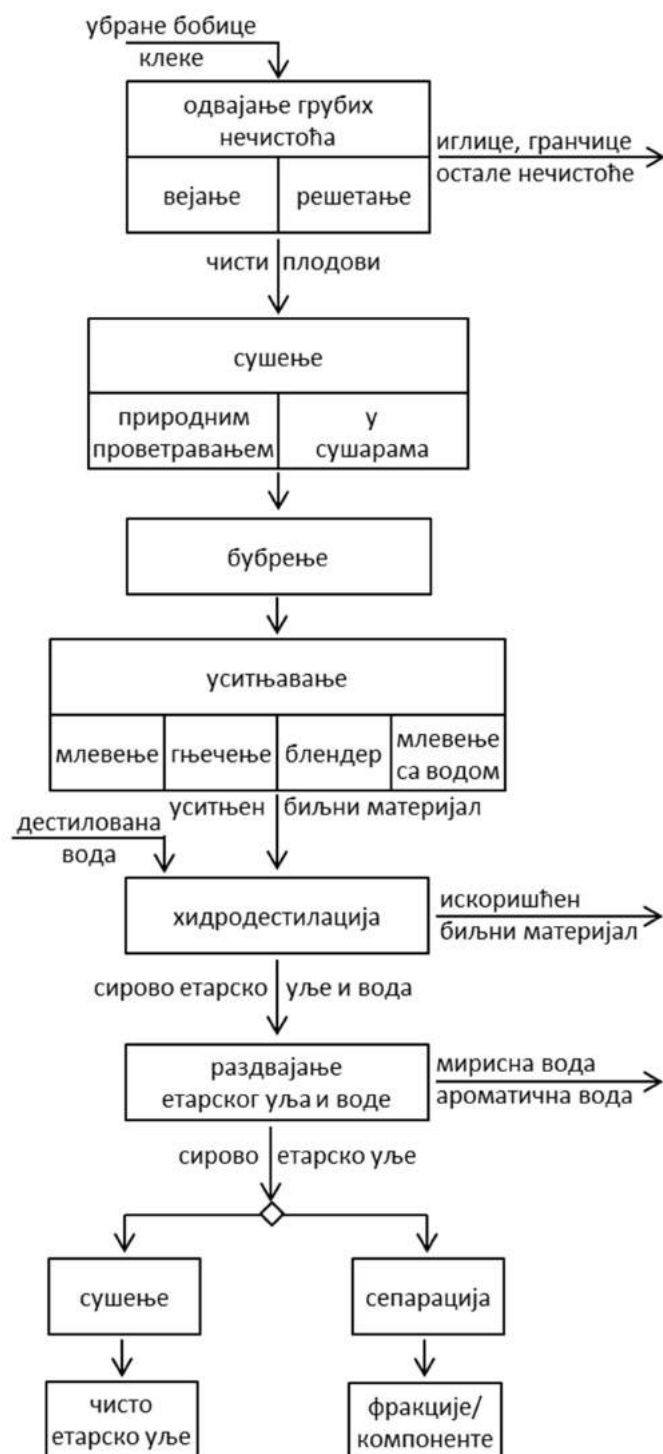
4.1. Експериментални подаци за плодове клеке

Плодови клеке су убрани на подручју севера Косова и Метохије (Копаоник и Рогозна) у периоду од 2005 -2014 год. на надморској висини између 600 и 1600 m , на осунчаном и неосунчаном терену. Коришћени су очишћени суви плодови који су, након сушења природним проветравањем, стајали ускладиштени у вишеслојним папирним кесама на собној температури у мрачној просторији.

Биљни материјал је припреман за хидродестилацију тако што су плодови клеке или млевени, или гњечени, или млевени са водом, или млевени у блендеру. Неки експерименти су рађени са плодовима који су били подвргнути бубрењу у трајању од 24, 48 или 72 часа. Време припремања (ситњења) биљног материјала је било од 1 до 5 минута. Код сувог млевења, одмерена млевена маса је стављана у балоне где је уз додатак дестиловане воде био постигнут одговарајући хидромодул (однос клека – вода), док је код млевења са водом одговарајући хидромодул постигнут још у поступку бубрења (намакање плодова клеке у дестилованој води).

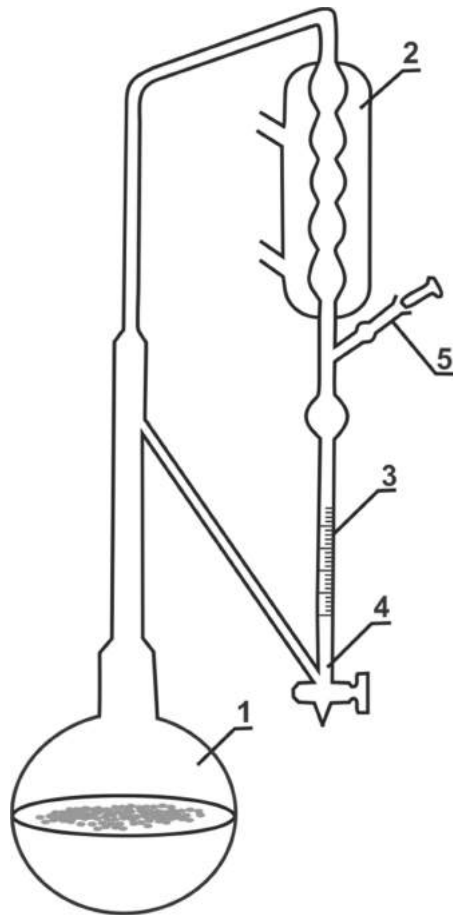
Хидромодули који су овде заступљени су 1:3, 1:4 или 1:5. Брзина хидродестилације је у распону од 3–9 ml/min . (Брзина се постиже променом интензитета загревања: већи интензитет ↔ већа брзина хидродестилације).

На слици 12 је дат шематски приказ процеса припреме и прераде плода клеке до етарског уља као финалног производа.



Слика 12. Шема процеса припреме и прераде плода клеке

Сви процеси хидродестилације плода клеке су изведени стандардним поступком на лабораторијској апаратури типа Клевенџер (Clevenger).



Слика 13. Clevenger - Апаратура за хидродестилацију

- 1) балон за дестилацију са наставком,
- 2) кондензатор (хладњак),
- 3) градуисана цев за мерење запремине етарског уља,
- 4) славина са наставком и
- 5) одваздушење са брушеним запушачем

Процес хидродестилације тече тако што се кроз кондензатор пусти да протиче вода за хлађење а балон са припремљеним биљним материјалом (са водом) се загрева. Кондензоване капи етарског уља се, као лакше од воде, задржавају у градуисаној цеви за мерење запремине етарског уља. У одабраним временским интервалима, који су на почетку процеса веома чести а како се процес приводи крају све ређи, читава се запремина издвојеног етарског уља. Оно се налази на површини испарене воде која преко повратне цеви рециркулише.

У табели 1 су приказани подаци о маси издвојеног етарског уља клеке у току процеса хидродестилације, сакупљени из 80 експеримената. Мерење масе издвојеног етарског уља вршено је у истим временским интервалима. Маса издвојеног етарског уља је приказана за количну од 1000g клеке. Експерименти су извођени у трајању 120 – 600 min.

Табела 1. Експериментално добијени подаци за принос етарског уља клеке у току хидродестилације

Узорак	Маса етарског уља (g) у времену (min)																	Реф.
	5	10	15	20	25	30	40	50	60	90	120	180	240	300	360	480	600	
1	3.0	4.6	5.6	6.2	6.7	7.2	7.9	8.5	8.9	10.1	10.9	12.1	12.9	13.5	14.0	14.7	15.3	
2	3.9	10.0	12.0	13.4	13.9	15.9	17.0	18.4	18.9	20.6	21.4	22.8	23.4	23.9	24.2			
3	5.0	9.7	12.0	13.1	14.2	14.7	16.1	17.0	17.8	18.9	19.7	20.6	21.1	21.7	22.0			
4	2.8	5.3	8.1	9.2	10.3	11.1	12.5	13.6	14.2	15.6	16.7	17.5	18.4	18.9	19.2			
5	5.0	7.0	8.3	9.2	10.6	11.1	12.0	12.2	12.8	13.9	14.5	16.1	17.2	17.8	18.1			
6	5.3	8.3	10.0	11.1	11.7	12.5	13.6	14.5	15.0	16.4	17.2	18.9	20.0	20.6	20.9			
7	6.4	9.2	10.6	11.4	12.2	12.8	13.6	14.2	14.7	15.9	16.7	17.2	17.8	18.4	18.6			
8	4.3	8.5	11.2	12.9	14.0	14.4	16.0	17.0	18.0	19.5	21.4	22.9	23.6	24.0	24.2			
9	5.6	10.4	13.4	15.2	16.4	17.4	19.4	20.2	21.0	22.2	23.6	24.7	25.3	25.9	26.2			
10	4.3	8.5	11.2	12.9	14.0	14.4	16.0	17.0	18.0	19.5	21.4	22.9	23.6	24.0	24.0			
11	4.3	8.7	10.5	11.7	12.6	13.4	14.4	15.2	16.0	17.6	18.6							
12	8.8	10.8	11.9	13.2	14.8	16.5	17.2	18.6	19.2	20.8	21.6							
13	11.5	14.3	16.4	17.6	18.6	19.6	20.8	21.2	21.5	22.2	22.1							
14	9.7	12.0	13.6	14.8	15.6	16.6	18.2	18.8	19.0	20.0	20.3							
15	3.3	5.3	7.0	8.0	8.7	9.3	10.0	10.7	11.0	11.3	12.0	12.7	12.7					
16	5.7	8.7	10.3	11.7	12.7	13.3	13.7	14.0	14.3	15.7	16.0	17.0	17.3	17.7	17.7	17.7	17.7	
17	7.0	9.7	11.3	12.0	12.3	12.7	13.3	14.0	14.7	15.3	15.7							
18	8.7	13.0	14.3	15.3	16.7	17.7	19.0	20.0	20.7	22.0	23.3	24.7	25.3	25.8	26.3	27.0	27.0	
19	8.0	11.3	13.3	14.7	16.0	16.7	17.3	18.0	18.7	20.0	21.0	21.7	22.0	22.3	22.3			
20	9.7	13.0	14.7	15.7	16.7	17.7	18.7	19.7	20.3	21.0	21.7	22.3	23.0	23.3	23.3			
21	5.7	8.3	11.0	12.3	13.3	14.0	15.0	16.0	16.7	18.0	19.3	20.0	20.3	21.0	21.3			
22	6.0	10.3	13.0	14.0	15.0	15.7	16.7	17.3	18.0	19.3	20.0	20.7	21.3	21.7	21.7			
23	5.3	8.7	11.0	12.0	13.0	13.7	14.7	15.3	16.3	17.7	18.7	20.0	20.7	21.3	21.3			
24	5.7	8.7	11.0	12.3	13.0	13.7	15.0	15.7	16.3	17.7	18.7	20.0	21.0	21.3	21.7			
25	7.7	12.3	14.0	15.0	16.0	16.7	18.0	19.3	20.0	21.0	21.7	22.3	23.0	23.3	23.7			
26	5.3	9.0	12.0	13.0	14.0	15.0	15.7	16.3	17.3	19.0	20.0	21.0	21.3	21.7	22.0			
27	10.3	13.0	14.7	15.7	16.7	17.7	18.7	19.3	20.0	21.3	22.0	23.0	23.7	24.0	24.3			
28	10.3	14.7	16.0	17.7	18.7	19.7	21.3	22.3	23.0	24.7	25.3	26.0	26.7	27.3				
29	7.7	10.3	12.3	13.3	14.3	15.3	16.7	17.7	18.7	19.7	20.7	21.7	22.7	23.3	23.7			
30	5.3	8.0	9.7	10.7	11.7	12.3	13.3	14.0	14.7	15.7	16.7	17.3	18.0	18.7	19.3			
31	5.3	7.0	8.0	9.0	9.7	10.3	11.3	12.0	12.7	13.7	14.3	15.3	15.7	16.3	16.7			
32	5.7	7.7	9.0	9.7	10.3	10.7	11.7	12.0	12.3	13.0	14.0	15.0	15.3					
33	6.3	8.0	9.7	10.7	11.3	12.0	12.7	13.7	14.3	15.7	16.7	17.7	18.0					
34	3.0	4.0	5.0	6.0	6.3	7.0	8.0	9.0	9.7	10.7	11.7	12.7	13.3					
35	5.7	7.7	9.0	10.0	11.0	11.7	12.7	13.7	14.3	15.3	16.7	17.7	18.0					
36	4.0	6.0	7.0	8.0	8.7	9.3	10.0	11.3	11.7	12.7	13.3	14.3	15.0	15.7	16.3	16.7		
37	5.3	7.3	8.7	9.3	10.0	10.7	11.7	12.7	13.3	14.3	15.3	16.7	17.3	18.0	18.3	19.0		
38	4.7	6.7	8.3	9.7	10.7	11.7	13.0	14.0	15.0	17.3	19.0	20.7	21.7					

39	9.3	12.3	14.3	15.7	16.7	17.7	18.7	19.7	20.7	21.7	23.0	24.3	24.7					
40	8.3	12.3	14.7	16.7	17.3	17.7	19.0	19.7	20.3	22.0	22.7	23.3	23.7					
41	6.0	9.0	10.0	11.0	12.0	13.0	14.0	15.0	16.0	19.0	20.0	22.0	23.0	24.0	24.0			
42	5.0	10.0	13.0	14.0	15.0	15.0	17.0	17.0	18.0	20.0	21.0	22.0	22.0	23.0	23.0			
43	6.0	8.0	10.0	11.0	13.0	13.0	14.0	15.0	15.0	17.0	17.0	19.0	21.0	21.0	22.0			
44	8.0	11.0	13.0	14.0	15.0	15.0	16.0	17.0	18.0	19.0	20.0	21.0	21.0	22.0	22.0			
45	5.0	12.0	14.0	16.0	17.0	19.0	20.0	22.0	23.0	25.0	26.0	27.0	28.0	29.0	29.0			
46	5.0	8.0	10.0	13.0	15.0	16.0	20.0	21.0	22.0	24.0	25.0	26.0	27.0	27.0	27.0			
47	3.0	6.0	10.0	11.0	12.0	13.0	15.0	16.0	17.0	19.0	20.0	21.0	22.0	23.0	23.0			
48	5.0	7.0	8.0	10.0	11.0	11.0	12.0	14.0	14.0	16.0	17.0	19.0	19.0	20.0	21.0			
49	6.0	12.0	14.0	16.0	17.0	18.0	19.0	20.0	21.0	23.0	24.0	25.0	25.0	26.0	26.0			
50	6.0	10.0	12.0	13.0	14.0	15.0	16.0	17.0	18.0	20.0	21.0	23.0	24.0	25.0	25.0			
51	7.0	12.0	15.0	16.0	17.0	19.0	20.0	21.0	21.0	22.0	23.0	24.0	26.0					
52	8.0	13.0	15.0	17.0	18.0	19.0	20.0	20.0	21.0	23.0	23.0	25.0	26.0					
53	7.0	10.0	12.0	13.0	15.0	15.0	17.0	17.0	18.0	20.0	21.0	22.0	22.0					
54	6.0	11.0	12.0	14.0	15.0	16.0	17.0	18.0	19.0	22.0	22.0	22.0	23.0					
55	6.0	9.0	12.0	12.0	13.0	14.0	17.0	18.0	18.0	20.0	20.0	22.0	22.0					
56	5.0	13.0	15.0	18.0	18.0	19.0	20.0	21.0	21.0	23.0	23.0	24.0	25.0					
57	9.0	14.0	16.0	17.0	18.0	19.0	20.0	21.0	21.0	22.0	23.0	24.0	25.0					
58	10.0	15.0	17.0	18.0	19.0	20.0	21.0	21.0	22.0	22.0	23.0	24.0	24.0					
59	8.0	13.0	14.0	15.0	17.0	17.0	18.0	19.0	20.0	21.0	22.0	23.0	24.0					
60	8.0	13.0	15.0	16.0	17.0	18.0	19.0	19.0	20.0	21.0	23.0	24.0	24.0					
61	10.0	14.0	17.0	18.0	19.0	20.0	21.0	21.0	22.0	23.0	24.0	25.0	25.0					
62	10.0	14.0	16.0	18.0	18.0	19.0	21.0	21.0	22.0	23.0	23.0	25.0	25.0					
63	9.0	14.0	16.0	17.0	18.0	19.0	20.0	20.0	21.0	22.0	23.0	24.0	25.0					
64	8.0	13.0	15.0	16.0	17.0	18.0	19.0	20.0	20.0	21.0	22.0	23.0	24.0					
65	9.0	14.0	16.0	17.0	18.0	19.0	20.0	20.0	21.0	22.0	23.0	24.0	24.0					
66	8.0	10.0	12.0	13.0	14.0	14.0	16.0	17.0	17.0	19.0	20.0	21.0	21.0					
67	7.0	11.0	12.0	13.0	14.0	15.0	16.0	17.0	18.0	19.0	20.0	21.0	22.0					
68	7.0	12.0	13.0	15.0	16.0	16.0	17.0	18.0	19.0	21.0	22.0	23.0	24.0					
69	7.0	11.0	13.0	14.0	15.0	16.0	17.0	17.0	18.0	20.0	21.0	22.0	23.0					
70	8.0	11.0	14.0	15.0	16.0	17.0	18.0	19.0	20.0	22.0	23.0	24.0	25.0					
71	7.0	11.0	13.0	14.0	15.0	16.0	17.0	18.0	19.0	21.0	22.0	23.0	24.0					
72	4.0	7.0	10.0	11.0	12.0	14.0	15.0	16.0	16.0	18.0	19.0	21.0	21.0					
73	6.0	8.0	9.0	11.0	13.0	14.0	15.0	16.0	17.0	18.0	20.0	21.0	21.0					
74	12.0	15.0	17.0	17.0	18.0	18.0	19.0	20.0	20.0	21.0	22.0	23.0	23.0					
75	11.0	14.0	16.0	17.0	17.0	18.0	19.0	20.0	20.0	21.0	21.0	22.0	23.0					
76	2.0	8.0	14.0	17.0	18.0	19.0	20.0	21.0	22.0	23.0	23.0	24.0	25.0					
77	2.0	8.0	14.0	17.0	18.0	19.0	20.0	21.0	21.0	22.0	23.0	24.0	24.0					
78	4.0	14.0	18.0	20.0	20.0	21.0	22.0	22.0	23.0	23.0	24.0	25.0	25.0					
79	4.0	14.0	18.0	19.0	20.0	21.0	21.0	22.0	23.0	23.0	24.0	25.0	25.0					
80	5.0	10.0	16.0	18.0	20.0	20.0	21.0	22.0	22.0	23.0	23.0	24.0	24.0					

[76]

[77]

[79]

Подаци о приносу етарског уља клеке у функцији од времена (Табела 1) мерени су у малим, равномерним временским интервалима. Може се уочити да је око 70% укупне количине етарског уља које се издваја у процесу хидродестилације сваког узорка сакупљено у првој петини укупно утрошеног времена за процес хидродестилације (Табела 2).

Табела 2. Упоредни приказ укупне количине идвојеног етарског уља из бобица клеке у току процеса хидродестилације и количине етарског уља издвојеног у првој петини укупног времена хидродестилације

узорак	укупно време хидродестилације [min]	укупна количина издвојеног етарског уља [g]	20% укупног времена хидродестилације [min]	количина етарског уља издвојена у првих 20% времена хидродестилације [g]	% етарског уља издвојеног у првих 20% укупног времена хидродестилације
1	600	15.3	120	10.9	71.24%
2	360	24.2	72	18.9	78.10%
3	360	22.0	72	17.8	80.91%
4	360	19.2	72	14.2	73.96%
5	360	18.1	72	12.8	70.72%
6	360	20.9	72	15.0	71.77%
7	360	18.6	72	14.7	79.03%
8	360	24.2	72	18.0	74.38%
9	360	26.2	72	21.0	80.15%
10	360	24.0	72	18.0	75.00%
11	120	18.6	24	12.8	67.74%
12	120	21.6	24	14.8	68.52%
13	120	22.2	24	18.6	83.78%
14	120	20.3	24	15.6	76.85%
15	240	12.7	48	10.7	84.25%
16	600	17.7	120	16.0	90.40%
17	120	15.7	24	12.3	78.34%
18	600	27.0	120	23.3	86.30%
19	360	22.3	72	18.7	83.86%
20	360	23.3	72	20.3	87.12%
21	360	21.3	72	16.7	78.40%
22	360	21.7	72	18.0	82.95%
23	360	21.3	72	16.3	76.53%
24	360	21.7	72	16.3	75.12%
25	360	23.7	72	20.0	84.39%
26	360	22.0	72	17.3	78.64%
27	360	24.3	72	20.0	82.30%
28	300	27.3	60	23.0	84.25%
29	360	23.7	72	18.7	78.90%
30	360	19.3	72	14.7	76.17%
31	360	16.7	72	12.7	76.05%
32	240	15.3	48	12.0	78.43%
33	240	18.0	48	13.7	76.11%
34	240	13.3	48	9.0	67.67%
35	240	18.0	48	13.7	76.11%
36	480	16.7	96	12.7	76.05%
37	480	19.0	96	14.3	75.26%
38	240	21.7	48	14.0	64.52%
39	240	24.7	48	19.7	79.76%
40	240	23.7	48	19.7	83.12%
41	360	24.0	72	17.0	70.83%
42	360	23.0	72	18.0	78.26%
43	360	22.0	72	15.3	69.55%
44	360	22.0	72	18.0	81.82%
45	360	29.0	72	23.0	79.31%

46	360	27.0	72	22.0	81.48%
47	360	23.0	72	17.0	73.91%
48	360	21.0	72	17.5	83.33%
49	360	26.0	72	21.0	80.77%
50	360	25.0	72	18.0	72.00%
51	240	26.0	48	21.0	80.77%
52	240	26.0	48	20.0	76.92%
53	240	22.0	48	17.0	77.27%
54	240	23.0	48	18.0	78.26%
55	240	22.0	48	18.0	81.82%
56	240	25.0	48	21.0	84.00%
57	240	25.0	48	21.0	84.00%
58	240	24.0	48	21.0	87.50%
59	240	24.0	48	19.0	79.17%
60	240	24.0	48	19.0	79.17%
61	240	25.0	48	21.0	84.00%
62	240	25.0	48	21.0	84.00%
63	240	25.0	48	20.0	80.00%
64	240	24.0	48	20.0	83.33%
65	240	24.0	48	20.0	83.33%
66	240	21.0	48	17.0	80.95%
67	240	22.0	48	17.0	77.27%
68	240	24.0	48	18.0	75.00%
69	240	23.0	48	17.0	73.91%
70	240	25.0	48	19.0	76.00%
71	240	24.0	48	18.0	75.00%
72	240	21.0	48	16.0	76.19%
73	240	21.0	48	16.0	76.19%
74	240	23.0	48	20.0	86.96%
75	240	23.0	48	20.0	86.96%
76	240	25.0	48	21.0	84.00%
77	240	24.0	48	21.0	87.50%
78	240	25.0	48	22.0	88.00%
79	240	25.0	48	22.0	88.00%
80	240	24.0	48	22.0	91.67%
просечно	299	22.3	60	17.7	79.14%



Слика 14. Процент етарског уља издвојеног у првих 20% укупног времена хидродестилације

Осим података о приносу етарског уља плода клекe (Табела 1), прикупљени су и подаци (атрибути) о географском пореклу, надморској висини, изложености сунцу, времену брања, начину припреме, времену бубрења, хидромодулу,

брзини хидродестилације, густини и приносу етарског уља. (Табела 3), који ће бити искоришћени за откривање зависности које постоје између карактеристика узорака.

Табела 3. Карактеристике узорака

Узорак	Гео-графско порекло	Време брања	Надморска висина (mm)	Изложеност сунцу	Начин припреме	Време трајања бубрења (h)	Време припреме (min)	Хидро-модул	Брзина хидродестилације	густина етарског уља	Принос (%)	Реф.
1	К	2005	850	О	М	0	2	3	8.30	0.97	1.48	[52]
2	Р	2011	950	О	М	0	5	3	7.50	0.83	2.01	
3	Р	2011	950	О	Г	0	5	3	7.50	0.94	2.07	
4	Р	2011	950	Н	М	0	5	3	7.50	0.97	1.86	
5	Р	2011	950	Н	Г	0	5	3	7.50	0.86	1.56	
6	К	2011	600	О	Г	0	5	3	7.50	0.93	1.94	
7	К	2011	600	Н	Г	0	5	3	7.50	0.93	1.73	
8	Р	2010	950	О/Н	М	0	5	3	3.00	0.80	1.94	
9	К	2010	950	О/Н	М	0	5	3	6.00	0.86	2.25	
10	К	2010	600	О/Н	М	0	5	3	9.00	0.87	2.09	
11	К	2010	600	О/Н	М	0	5	3	3.00	0.86	1.60	
12	Р	2010	950	О/Н	М	0	5	3	6.00	0.88	1.90	
13	Р	2010	1000	О/Н	М	0	5	3	9.00	0.86	1.91	
14	К	2010	600	О/Н	М	0	5	3	9.00	0.87	1.77	
15	Р	2011	850	Н	М	0	3	3	8.00	0.86	1.09	[80]
16	Р	2011	850	Н	М	0	3	3	8.00	0.86	1.52	
17	Р	2011	850	Н	Г	0	3	3	8.00	0.86	1.35	
18	К	2011	850	О	М	0	3	3	8.00	0.87	2.35	
19	К	2011	850	Н	М	0	3	3	6.00	0.87	1.94	
20	К	2011	850	О	М	0	3	4	8.00	0.87	2.03	
21	К	2011	850	Н	М	0	3	3	3.00	0.87	1.85	
22	К	2011	850	Н	М	0	3	4	6.00	0.87	1.89	
23	К	2011	850	Н	М	0	3	4	3.00	0.87	1.85	
24	К	2011	850	Н	М	0	3	5	3.00	0.87	1.89	
25	К	2011	850	О	М	0	3	5	8.00	0.87	2.06	
26	К	2011	850	Н	М	0	3	5	6.00	0.87	1.91	
27	К	2011	850	О	М	0	3	3	8.00	0.87	2.11	
28	К	2011	600	null	М	0	3	4	8.00	0.87	2.38	
29	Р	2011	800	О	М	0	3	4	8.00	0.87	2.06	
30	ШП	2012	1600	null	М	0	3	4	8.00	0.87	1.68	
31	МГ	2011	1300	null	М	0	3	4	8.00	0.87	1.45	
32	К	2013	850	Н	М	0	1	4	8.00	0.88	1.35	[78]
33	К	2013	850	О	МВ	48	3	4	8.00	0.88	1.58	
34	К	2013	850	Н	М	0	5	4	8.00	0.88	1.17	
35	К	2013	850	О	МВ	48	5	4	8.00	0.88	1.58	
36	К	2013	850	Н	М	0	3	4	8.00	0.88	1.47	
37	К	2013	850	Н	МВ	48	3	4	8.00	0.88	1.67	
38	К	2014	850	О	М	0	3	4	8.00	0.88	1.91	
39	К	2014	850	О	МВ	48	3	4	8.00	0.88	2.17	
40	К	2014	1000	О	МВ	24	1.5	4	8.20	0.81	1.92	[76]
41	Р	2010	850	О	Г	0	3	3	7.10	0.86	2.06	
42	К	2010	850	О	Г	0	3	3	7.10	0.86	1.98	
43	Р	2010	850	Н	Г	0	3	3	7.10	0.86	1.89	
44	К	2010	850	Н	Г	0	3	3	7.10	0.86	1.89	
45	Р	2010	850	О	Б	0	5	3	7.10	0.86	2.49	
46	К	2010	850	О	Б	0	5	3	7.10	0.86	2.32	
47	Р	2010	850	Н	Б	0	5	3	7.10	0.86	1.98	
48	К	2010	850	Н	Б	0	5	3	7.10	0.86	1.81	
49	Р	2010	850	О	Г	0	5	3	7.10	0.86	2.24	
50	К	2010	850	О	Г	0	5	3	7.10	0.86	2.15	
51	К	2014	950	О/Н	М	0	1	4	7.87	0.86	2.24	
52	К	2014	950	О/Н	М	0	1	4	8.45	0.86	2.24	
53	К	2014	950	О/Н	М	0	2	4	8.22	0.86	1.89	
54	К	2014	950	О/Н	М	0	2	4	8.33	0.86	1.98	

55	К	2014	950	О/Н	М	0	3	4	8.28	0.86	1.89	[77]												
56	К	2014	950	О/Н	М	24	2	4	7.98	0.86	2.15		[77]											
57	К	2014	950	О/Н	М	48	1	4	7.58	0.86	2.15			[77]										
58	К	2014	950	О/Н	М	48	1	4	7.19	0.86	2.06				[77]									
59	К	2014	950	О/Н	М	48	2	4	8.24	0.86	2.06					[77]								
60	К	2014	950	О/Н	М	48	2	4	8.13	0.86	2.06						[77]							
61	К	2014	950	О/Н	М	24	1	4	8.04	0.86	2.15							[77]						
62	К	2014	950	О/Н	М	24	1	4	8.47	0.86	2.15								[77]					
63	К	2014	950	О/Н	М	72	2	4	8.20	0.86	2.15									[77]				
64	К	2014	950	О/Н	М	72	2	4	8.20	0.86	2.06										[77]			
65	К	2014	950	О/Н	М	72	1	4	8.22	0.86	2.06											[77]		
66	К	2014	950	О/Н	М	24	3	4	7.98	0.86	1.81												[77]	
67	К	2014	950	О/Н	М	24	3	4	8.29	0.86	1.89													[77]
68	К	2014	950	О/Н	М	48	3	4	8.20	0.86	2.06													
69	К	2014	950	О/Н	М	48	3	4	8.20	0.86	1.98	[77]												
70	К	2014	950	О/Н	М	72	3	4	7.98	0.86	2.15		[77]											
71	К	2014	950	О/Н	М	72	3	4	8.24	0.86	2.06			[77]										
72	К	2014	950	О/Н	Г	0	5	4	8.26	0.86	1.81				[79]									
73	К	2014	950	О/Н	Г	0	5	4	8.18	0.86	1.81					[79]								
74	К	2014	950	О/Н	М	24	1	4	8.78	0.86	1.98						[79]							
75	К	2014	950	О/Н	М	0	1	4	8.78	0.86	1.98							[79]						
76	К	2014	950	О/Н	М	0	1	4	8.93	0.86	2.15								[79]					
77	К	2014	950	О/Н	М	0	1	4	8.93	0.86	2.06									[79]				
78	К	2014	950	О/Н	М	24	1	4	8.93	0.86	2.15										[79]			
79	К	2014	950	О/Н	М	24	1	4	8.93	0.86	2.15											[79]		
80	К	2014	950	О/Н	М	0	1	4	8.93	0.86	2.06												[79]	

Ознаке скраћеница:

- Копаоник - К
- Мокра Гора – МГ
- Шар планина - ШП
- Рогозна - Р
- Осунчана - О
- Неосунчана - Н
- Млевење - М
- Гњечење - Г
- Блендер - Б
- Млевење са водом - МВ

4.2. Експериментални подаци за различите биљне материјале

У табели 4 се налазе подаци сакупљени из 80 експеримената (други скуп узорака) у којима је праћена кинетика хидродестилације етарског уља из биљног материјала: целер, кумин, лаванда, цитронела, матичњак, тимијан, нана, анис, морач, рузмарин, дивљи невен, жалфија, горка поморанца, еукалиптус, калифорнијска јела, смрча, бели бор, дуглазија, босиљак, коморач, агар дрво, оригано, пачули, восковац, коријандер, тршља, ким, ловорвишња, бибер мајчина душица, ђумбир, першун.

За сваки узорак је приказана маса издвојеног етарског уља у различитим временским интервалима. Други параметри који карактеришу процес хидродестилације као што су: начин припреме биљног материјала, време припреме, брзина хидродестилације, апаратура на којој је процес хидродестилације извођен је доступни су само за мањи број узорака, а разликују се у зависности од конкретног биљног материјала.

Табела 4. Експериментално добијени подаци за принос етарског уља из различитих биљних материјала у току процеса хидродестилације

Узорак															Референце	
1	<i>t (min)</i>	30	60	90	120											[70] целер
	<i>q (g)</i>	1.01	1.20	1.30	1.32											
2	<i>t (min)</i>	30	60	90	120											[71] кумин
	<i>q (g)</i>	1.39	1.50	1.56	1.62											
3	<i>t (min)</i>	15	30	45	60	75	90	105							[72] лаванда	
	<i>q (g)</i>	1.40	1.74	1.84	1.89	1.90	1.91	1.92								
4	<i>t (min)</i>	15	30	45	60	75	90	105							[64] цитронела	
	<i>q (g)</i>	1.60	1.75	1.95	2.11	2.15	2.18	2.19								
5	<i>t (min)</i>	15	30	45	60	75	90	120							[81] лимунова трава	
	<i>q (g)</i>	1.17	1.40	1.51	1.56	1.58	1.59	1.61								
6	<i>t (min)</i>	3	6	9	12	16.5	21	25.5	36	66	90	114			[69] лимунова трава	
	<i>q (g)</i>	0.21	0.43	0.85	1.06	1.28	1.49	1.70	1.91	2.13	2.34	2.55				
7	<i>t (min)</i>	5	10	15	20	25	30	45							[68] тимијан	
	<i>q (g)</i>	0.08	0.16	0.24	0.32	0.36	0.36	0.36								
8	<i>t (min)</i>	5	10	15	20	30	45							[82] коријандер		
	<i>q (g)</i>	0.12	0.16	0.18	0.20	0.28	0.28									
9	<i>t (min)</i>	30	60	90	120	150	180	300							[82] коријандер	
	<i>q (g)</i>	0.70	1.50	1.90	2.25	2.55	2.85	3.10								
10	<i>t (min)</i>	30	60	90	120	150	300							[82] коријандер		
	<i>q (g)</i>	0.70	1.80	2.70	3.15	3.50	3.85									
11	<i>t (min)</i>	30	60	90	120	150	180	300							[82] коријандер	
	<i>q (g)</i>	1.64	2.99	4.73	5.15	5.40	5.54	5.73								
12	<i>t (min)</i>	30	60	90	120	150							[82] коријандер			
	<i>q (g)</i>	1.17	1.27	1.33	1.33	1.33										
13	<i>t (min)</i>	30	60	90	120	150							[82] коријандер			
	<i>q (g)</i>	0.85	0.93	1.00	1.00	1.00										
14	<i>t (min)</i>	30	60	90	120	150							[82] коријандер			
	<i>q (g)</i>	0.67	0.87	0.93	1.00	1.00										
15	<i>t (min)</i>	30	45	60	75	90	105							[82] коријандер		
	<i>q (g)</i>	1.40	1.43	1.53	1.57	1.60	1.60									
16	<i>t (min)</i>	30	45	60	75	90	105							[82] коријандер		
	<i>q (g)</i>	0.67	0.70	0.87	0.90	0.90	0.90									
17	<i>t (min)</i>	30	45	60	75	90	105							[82] коријандер		
	<i>q (g)</i>	0.53	0.67	0.73	0.80	0.80	0.80									
18	<i>t (min)</i>	30	60	90	120	180							[82] коријандер			
	<i>q (g)</i>	0.55	0.77	0.86	0.87	0.89										
19	<i>t (min)</i>	10	20	30	45	60	90	120	180	240	300	360	420	480	540	[82] коријандер
	<i>q (g)</i>	0.00	0.01	0.01	0.01	0.01	0.02	0.03	0.03	0.04	0.04	0.05	0.05	0.05	0.06	

20	<i>t (min)</i>	7.674	20.93	28.6	38.37	48.84	59.3	69.77	80.23	90.7	101.21	111.61	130.8	143	[73] анис							
	<i>q (g)</i>	0.21	0.58	0.79	1.00	1.08	1.25	1.33	1.42	1.52	1.61	1.67	1.82	1.88								
21	<i>t (min)</i>	7.5	15	30	40	50	60	80	110	145						[83] жалфија						
	<i>q (g)</i>	0.42	0.88	1.17	1.38	1.50	1.63	1.83	2.06	2.10												
22	<i>t (min)</i>	5	15	25	35	45	60	70	80	90	100	110	120	130			[84] еукалиптус					
	<i>q (g)</i>	0.13	0.46	0.69	0.95	1.23	1.38	1.54	1.62	1.69	1.77	1.85	1.91	2.00								
23	<i>t (min)</i>	10	20	30	40	50	60	70	80	90	100	110						[85] лаванда				
	<i>q (g)</i>	0.05	0.30	0.50	0.70	0.75	0.80	0.85	0.90	0.95	0.97	1.00										
24	<i>t (min)</i>	5	10	15	20	25	30	35	40	45	50	55	60						[86] рузмарин			
	<i>q (g)</i>	0.08	0.12	0.40	0.50	0.60	0.70	0.80	0.85	0.90	0.95	0.93	0.96									
25	<i>t (min)</i>	5	10	15	20	25	30	35	40	45	50									[87] калифорнијска јела смрча дуглазија		
	<i>q (g)</i>	0.01	0.10	0.25	0.45	0.70	0.80	0.90	0.93	0.95	0.99											
26	<i>t (min)</i>	30	60	90	120	150	180	210	240	270	300	330	360	390	420	450					480	[75] клека
	<i>q (g)</i>	0.86	1.46	1.72	1.89	2.07	2.19	2.28	2.33	2.39	2.41	2.43	2.45	2.47	2.49	2.53					2.56	
27	<i>t (min)</i>	5	10	15	30	45	60	90	120	150	180	210	240				[54] клека					
	<i>q (g)</i>	1.17	2.34	3.51	4.35	4.80	5.25	5.40	5.45	5.65	5.71	5.73	5.73									
28	<i>t (min)</i>	5	10	15	30	45	60	90	120	150	180	210	240									
	<i>q (g)</i>	1.40	2.65	3.92	4.95	5.34	5.70	5.80	5.90	5.95	6.10	6.13	6.15									
29	<i>t (min)</i>	15	30	45	60	70	85	105	120	135	150											
	<i>q (g)</i>	0.60	1.35	2.00	2.30	2.60	2.85	3.00	3.20	3.50	3.50											
30	<i>t (min)</i>	15	30	45	60	75	90	105	120													
	<i>q (g)</i>	2.20	3.30	4.50	5.00	6.10	6.65	7.05	7.30													
31	<i>t (min)</i>	15	30	45	60	75	90	105	120													
	<i>q (g)</i>	1.20	2.25	3.40	4.50	5.70	6.20	6.80	7.15													
32	<i>t (min)</i>	15	30	45	60	75	90	105	120													
	<i>q (g)</i>	2.95	4.40	5.35	6.90	7.65	8.25	8.60	8.90													
33	<i>t (min)</i>	15	30	45	60	75	90	105	120													
	<i>q (g)</i>	4.70	6.20	7.70	8.60	9.20	9.45	9.80	10.00													
34	<i>t (min)</i>	15	30	45	60	75	90	105	120													
	<i>q (g)</i>	1.20	2.30	3.45	5.80	6.90	7.50	8.10	8.70													
35	<i>t (min)</i>	1	2	3	6	9	12	15	19	24	29	35	41	48	55	61	71	81	[54] клека			
	<i>q (g)</i>	0.12	0.26	0.38	0.62	0.80	0.96	1.10	1.20	1.32	1.40	1.50	1.56	1.60	1.62	1.64	1.66	1.68				
36	<i>t (min)</i>	2	5	8	13	22	37	62	82	95												
	<i>q (g)</i>	0.20	0.40	0.60	0.80	1.00	1.18	1.36	1.46	1.52												
37	<i>t (min)</i>	13	21	25	29	34	40	48	53													
	<i>q (g)</i>	0.20	0.26	0.28	0.40	0.46	0.50	0.54	0.56													
38	<i>t (min)</i>	1	2	3	5	8	15	22	35	45												
	<i>q (g)</i>	0.27	0.60	0.83	1.10	1.21	1.32	1.43	1.48	1.51												
39	<i>t (min)</i>	6.09	10	13.3	20	25	30	35	40	50	60	80	100	120	140	160	190	220		280	340	
	<i>q (g)</i>	0.68	1.04	1.28	1.52	1.64	1.74	1.84	1.94	2.02	2.10	2.16	2.28	2.36	2.42	2.46	2.48	2.50		2.58	2.62	
40	<i>t (min)</i>	4.25	7.25	9.5	12.3	20	25	30	35	40	50	60	80	100	120	140	170	230	290	350		
	<i>q (g)</i>	0.52	0.88	1.12	1.24	1.52	1.68	1.76	1.84	1.92	2.00	2.06	2.14	2.20	2.28	2.32	2.34	2.42	2.44	2.46		

41	<i>t (min)</i>	2	4	6	8	10	12	14	16	18	20	22	24	26	[88] лаванда															
	<i>q (g)</i>	0.10	0.25	0.40	0.55	0.65	0.75	0.95	1.00	1.10	1.10	1.15	1.20	1.20																
42	<i>t (min)</i>	8	16	24	32	40	48	56	64	72	80	[89] агар дрво																		
	<i>q (g)</i>	0.40	1.10	1.95	2.80	3.45	3.90	4.35	4.45	4.50	4.60																			
43	<i>t (min)</i>	8	16	24	32	40	48	56	64	72	80	[90] оригано																		
	<i>q (g)</i>	0.60	1.35	2.30	3.15	3.80	4.35	4.70	5.05	5.10	5.20																			
44	<i>t (min)</i>	8	16	24	32	40	48	56	64	72	80	[91] лаванда																		
	<i>q (g)</i>	0.70	1.70	2.90	3.95	4.80	5.45	5.95	6.30	6.50	6.60																			
45	<i>t (min)</i>	0.7	2.1	3.6	8.6	12.2	17.3	25.2	30.2	87.2	147.8	206.9	[92] першун																	
	<i>q (g)</i>	0.30	3.25	5.20	6.20	8.00	9.35	9.65	10.20	10.30	10.35	10.35																		
46	<i>t (min)</i>	20	40	60	80	100	120	140	160	180	200	220	240	[93] ђумбир																
	<i>q (g)</i>	0.30	1.00	2.30	3.50	4.60	5.90	6.60	6.90	7.00	7.20	7.30	7.30																	
47	<i>t (min)</i>	20	40	60	80	100	120	140	160	180	200	220	240	[94] бибер																
	<i>q (g)</i>	0.30	0.70	1.50	2.30	3.10	3.90	4.35	4.60	4.70	4.90	5.00	5.05																	
48	<i>t (min)</i>	5	10	15	20	30	45	60	90	120	150	180	210	240	270	[95] горка поморанца														
	<i>q (g)</i>	0.07	0.11	0.18	0.23	0.30	0.46	0.64	0.86	1.27	1.61	1.82	2.00	2.17	2.17															
49	<i>t (min)</i>	60	90	120	150	180	210	240	270	300	[96] нана																			
	<i>q (g)</i>	0.02	0.04	0.04	0.05	0.05	0.05	0.06	0.06	0.06																				
50	<i>t (min)</i>	60	90	120	150	180	210	240	270	300	[97] пачули																			
	<i>q (g)</i>	0.02	0.04	0.05	0.05	0.05	0.05	0.06	0.06	0.06																				
51	<i>t (min)</i>	7	12	17	22	27	32	37	[98] босиљак																					
	<i>q (g)</i>	0.04	0.05	0.06	0.07	0.08	0.09	0.09																						
52	<i>t (min)</i>	7	12	17	22	27	32	37	42	47	[99] мајчина душица																			
	<i>q (g)</i>	0.05	0.06	0.07	0.08	0.09	0.10	0.10	0.11	0.11																				
53	<i>t (min)</i>	7	12	17	22	27	32	37	[100] морач																					
	<i>q (g)</i>	0.06	0.07	0.09	0.10	0.11	0.11	0.11																						
54	<i>t (min)</i>	15	30	45	60	75	90	105	120	135	150	165	180	[101] цитронела																
	<i>q (g)</i>	1.30	2.03	2.38	2.65	2.85	3.06	3.35	3.52	3.61	3.68	3.68	3.68																	
55	<i>t (min)</i>	20	25	30	35	40	45	50	60	70	80	90	[99] мајчина душица																	
	<i>q (g)</i>	0.15	0.30	0.53	0.68	0.75	0.83	0.90	0.90	0.90	0.90	0.90																		
56	<i>t (min)</i>	87	117	147	177	207	237	267	297	327	357	387	417	430	[100] морач															
	<i>q (g)</i>	1.27	1.78	2.05	2.22	2.34	2.42	2.48	2.54	2.58	2.61	2.61	2.61	2.61																
57	<i>t (min)</i>	22	24	26	28	30	33	36	42	50	60	[101] цитронела																		
	<i>q (g)</i>	0.10	0.17	0.23	0.29	0.35	0.41	0.46	0.48	0.48	0.48																			
58	<i>t (min)</i>	2	5	7	10	15	20	30	45	60	[100] морач																			
	<i>q (g)</i>	0.20	0.55	0.66	0.76	0.86	0.92	0.95	0.98	1.00																				
59	<i>t (min)</i>	5.6	6.2	6.5	6.6	6.9	7.1	7.4	7.8	8.1	8.5	9.3	9.5	10.0	10.5	10.9	11.4	12.1	12.9	14.0	15.3	16.0	16.7	17.4	19.6	22.1	23.5	24.7	25.5	[101] цитронела
	<i>q (g)</i>	0.06	0.40	1.20	3.20	4.78	6.00	7.30	8.10	9.24	10.90	11.70	12.90	14.00	14.80	16.00	16.80	17.30	18.00	18.50	19.30	20.20	20.40	20.90	21.20	21.60	22.10	22.40	22.40	
60	<i>t (min)</i>	3	6	9	12	16.5	21	25.5	36	66	90	114	[101] цитронела																	
	<i>q (g)</i>	0.21	0.43	0.85	1.06	1.28	1.49	1.70	1.91	2.13	2.34	2.55																		

61	<i>t (min)</i>	8	16	24	32	40	48	56	64	[89] агар дрво					
	<i>q (g)</i>	0.55	1.30	2.15	2.95	3.60	4.07	4.40	4.58						
62	<i>t (min)</i>	8	16	24	32	40	48	56	64						
	<i>q (g)</i>	1.00	1.95	3.05	3.91	4.70	5.25	5.72	6.10						
63	<i>t (min)</i>	8	16	24	32	40	48	56	64						
	<i>q (g)</i>	0.65	1.48	2.45	3.25	3.95	4.42	4.80	5.10						
64	<i>t (min)</i>	5	10	15	20	30	40	60	90		100	110	120	150	[102] ловорвишња
	<i>q (g)</i>	0.12	0.21	0.26	0.31	0.35	0.37	0.39	0.41		0.42	0.43	0.43		
65	<i>t (min)</i>	15	30	53	75	120	180	240	400		[103] ким				
	<i>q (g)</i>	1.60	3.20	4.30	5.10	5.60	6.00	6.50	7.10						
66	<i>t (min)</i>	15	30	150											
	<i>q (g)</i>	6.20	8.00	8.20											
67	<i>t (min)</i>	17	31	45	60	100	130								
	<i>q (g)</i>	5.50	6.30	6.60	6.70	6.90	7.00								
68	<i>t (min)</i>	23	45	90											
	<i>q (g)</i>	6.40	7.00	7.30											
69	<i>t (min)</i>	15	30	50	64										
	<i>q (g)</i>	6.00	6.50	7.00	7.10										
70	<i>t (min)</i>	5	10	20	40	80	100								
	<i>q (g)</i>	2.00	4.20	4.50	5.10	5.60	5.80								
71	<i>t (min)</i>	15	30	60	90	120	150	180	210	240	[104] коријандер				
	<i>q (g)</i>	0.14	0.26	0.45	0.56	0.65	0.76	0.81	0.89	0.94					
72	<i>t (min)</i>	15	30	60	90	120	150	180	210	240					
	<i>q (g)</i>	0.38	0.58	0.84	0.98	1.06	1.18	1.28	1.33	1.41					
73	<i>t (min)</i>	15	30	60	90	120	150	180	210	240					
	<i>q (g)</i>	0.34	0.56	0.83	0.98	1.11	1.21	1.29	1.36	1.44					
74	<i>t (min)</i>	5	15	30	45	60	90	120	180	240					
	<i>q (g)</i>	0.16	0.55	0.68	0.72	0.78	0.84	0.92	1.00	1.00					
75	<i>t (min)</i>	30	60	90	120	150	180								
	<i>q (g)</i>	0.10	0.18	0.20	0.26	0.29	0.31								
76	<i>t (min)</i>	30	60	90	120	150	180								
	<i>q (g)</i>	0.16	0.24	0.33	0.39	0.42	0.44								
77	<i>t (min)</i>	30	60	90	120	150	180								
	<i>q (g)</i>	0.36	0.53	0.67	0.79	0.91	0.99								
78	<i>t (min)</i>	30	60	90	120	150	180								
	<i>q (g)</i>	0.57	0.91	1.08	1.25	1.35	1.42								
79	<i>t (min)</i>	87	117	147	178	208	238	268	298	328	358	388	418	[97] пачули	
	<i>q (g)</i>	1.26	1.77	2.04	2.21	2.34	2.41	2.48	2.54	2.57	2.61	2.61			
80	<i>t (min)</i>	15	30	45	60	75	90	105	120	135	150	[101] рузмарин			
	<i>q (g)</i>	0.67	0.80	0.86	0.89	0.92	0.95	0.97	0.98	1.00	1.00				

5. Моделовање података

Многе појаве у природи имају тенденцију експоненцијалног раста. Посматрајући експерименте у којима је праћена кинетика хидродестилације етарског уља, може се уочити да количина издвојеног етарског уља током времена прати експоненцијални раст. Наиме, издвајање етарског уља на почетку процеса хидродестилације се одвија интензивно, док издвајање на крају процеса тече јако споро (екстензивно). Дакле, у почетној „брзој“ фази хидродестилације може се уочити велика промена у количини издвојеног етарског уља, док је на самом крају хидродестилације, током више сати посматрања (спора фаза), та промена веома мала.

У наставку рада биће презентована једначина плинотно-логаритамског модела. Она по свим статистичким показатељима са најмањим бројем итерација даје најбоље слагање са експерименталним подацима.

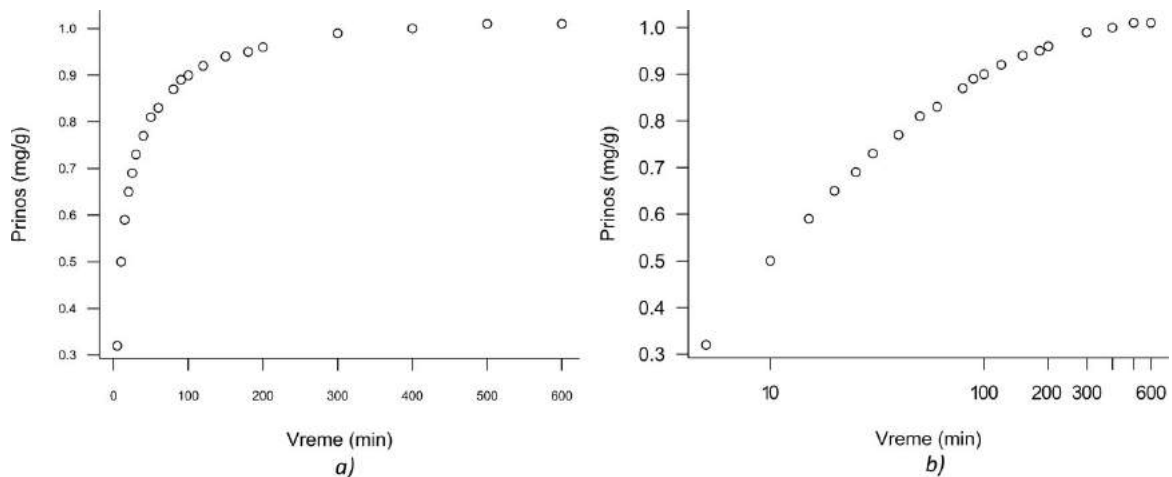
5.1. Моделовање кинетике процеса хидродестилације

Анализирањем података до којих се дошло експерименталним путем, може се уочити велика разлика између величина на апсциси (X оса – временска оса) као и да су тачке које описују процес „брзе“ хидродестилације „нагомилане“ на почетку скале. График који описује процес кинетике хидродестилације се веома нагло мења у почетним временским интервалима (за мале вредности x). Да би се овај проблем превазишао, неопходно је на неки погодан начин, повећати део графика за мале вредности апсцисе, водећи рачуна да димензије графика не постану превелике (ако би се он само линеарно повећао). Начин да се то постигне јесте да се за апсцису, уместо линеарне, користи логаритамска скала чије су вредности пропорционалне логаритму вредности на линеарној X оси.

На линеарној скали промена између две вредности се посматра на основу њихове разлике, док се на логаритамској скали промена између две вредности опажа на основу њиховог односа (количника). Дакле, логаритамска скала сажима (компресује) удаљеност између било која два броја, у складу са њиховим повећањем. Она омогућава „развучено“ представљање малих вредности, уз истовремено сажето представљање великих вредности, без губитака података.

Како би крива приноса постала прегледнија, уместо линеарне скале (Слика 15а), за временску осу је искоришћена логаритамска скала (Слика 15б).

Ова чињеница је посебно значајна за брзо читавање вредности са почетног дела криве приноса етарског уља током хидродестилације, првенствено због тога што је за праћење кинетике овог процеса разлика у приносима на почетку процеса хидродестилације далеко значајнија него разлика у приносима при крају процеса хидродестилације.



Слика 15. Промена приноса етарског уља током процеса хидродестилације клеке током времена, при чему је време приказано на а) линеарној и б) логаритамској скали (биљни материјал: вода 1: 3 w/w; брзина хидродестилације $8 \text{ cm}^3/\text{min}$) (слика је креирана на основу података [52]).

Приказујући експериментално добијене податке на графику са логаритамском скалом, веома се јасно уочава да се зависност између количине издвојеног етарског уља и протеклог времена може представити помоћу квадратне једначине (парабола):

$$\frac{q}{q_{\infty}} = a \cdot (\log(t))^2 + b \cdot \log(t) + c \quad (69)$$

где су:

q - принос етарског уља у било ком временском тренутку t

q_{∞} - принос етарског уља у бесконачном времену $t = \infty$

t - време.

Због потребе да се овај математички модел упореди са постојећим математичким моделима који користе линеарну X осу, увођењем смене $x = \log(t)$ и не нарушавајући математичке законитости, једначина модела се може записати у облику:

$$\frac{q}{q_{\infty}} = a \cdot x^2 + b \cdot x + c \quad (70)$$

Овако добијени модел је веома једноставан и проналажење његових параметара представља рутински посао.

5.2. Вредности добијене на основу модела

Предложени полиномно-логаритамски модел омогућава да се коришћењем података из почетног дела процеса претпостави даљи ток процеса хидродестилације. Ти познати експериментални подаци служе за одређивање

непознатих параметара математичког модела (фитовање). Пошто не постоји једнозначни одговор којим поступком се дефинишу „најбољи“ параметри математичког модела, неопходно је минимизирати функцију грешке. Метода најмањих квадрата се најчешће користи за одређивање оптималних вредности параметара модела тако да се функција грешке минимизира. Још један проблем који се често јавља код нелинеарних модела, као што је полиномно-логаритамски модел, јесте да функција грешке има више локалних минимума. У том случају проналажење оптималних параметара захтева још и примену методе глобалне оптимизације.

За минимизацију функције грешке приликом одређивања оптималних вредности параметара полиномно-логаритамског модела коришћен је Левенберг-Маркварт-ов алгоритам (Levenberg 1944, Marquardt 1963) који је уграђен у пакет `nls.lm` програмског језика R.

За сваки узорак у програмском пакету R су уписани експериментални подаци и дефинисана је једначина модела (69). На основу улазних величина софтвер је одредио параметре a , b и c , према наведеном алгоритму, као и број итерација потребних за њихово одређивање и одступања (грешке) експерименталних (улазних) вредности од одређених употребом добијене једначине. На слици 16 је приказан програмски код за одређивање параметара модела изабраног узорка, а на слици 17 графикон генерисан на основу задатих експерименталних података и функције модела за одређене вредности параметара модела.

```
> x=c(5,10,15,20,25,30,40,50,60,90,120,180,240)
> y=c(0.496,0.614,0.689,0.732,0.759,0.789,0.833,0.864,0.877,0.908,0.934,0.978,0.996)
> plot(x,y,main = " Узорак 75 ", xlab = "Време (min)", ylab = "Принос (mg/g)", las=1, bty="l",font.lab=6)
> Model3=nlsLM(y~a*(log10(x))^2+b*log10(x)+c,start = list(a=0,b=0,c=0))
> Model3
Nonlinear regression model
model: y ~ a * (log10(x))^2 + b * log10(x) + c
data: parent.frame()
      a          b          c
-0.09194  0.58127  0.13140
residual sum-of-squares: 0.0003962

Number of iterations to convergence: 2
Achieved convergence tolerance: 1.49e-08
> curve(-0.09194*(log10(x))^2+0.58127*log10(x)+0.13140, add =TRUE,lty=1)
> legend("bottomright",g_range[1],c("Модел 3"), cex=0.8,lty=c(1), lwd=1, bty="n")
> summary(Model3)

Formula: y ~ a * (log10(x))^2 + b * log10(x) + c

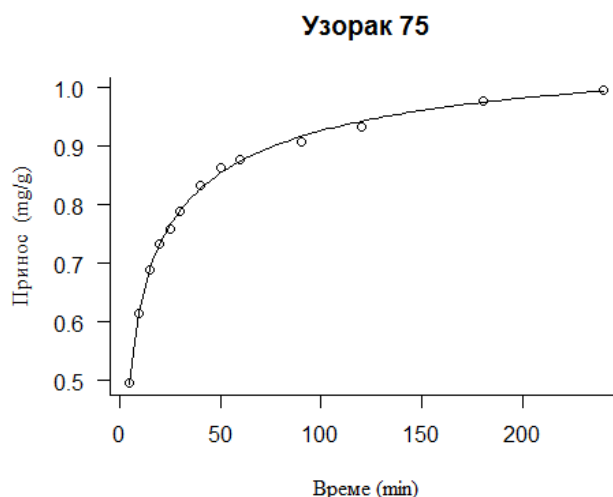
Parameters:
      Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
a -0.091940    0.007094  -12.960 1.41e-07 ***
b  0.581265    0.022656   25.656 1.86e-10 ***
c  0.131399    0.017144    7.665 1.71e-05 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 0.006295 on 10 degrees of freedom

Number of iterations to convergence: 2
Achieved convergence tolerance: 1.49e-08

> AIC(Model3)
[1] -90.28725
> BIC(Model3)
[1] -88.02746
```

Слика 16. Програмски код за одређивање вредности параметара и статистичких показатеља једног узорка



Слика 17. Графички приказ експерименталних података (кружић) и функције модела (линија) једног узорка (резултат програмског кода са слике 16)

У табели 5 дате су вредности параметара модела (a , b и c) и вредности статистичких показатеља одступања за сваки обрађени узорак током процеса хидродестилације етарског уља из бобица клеке.

Табела 5. Графички приказ експерименталних података (кружић) и функције модела (линија) једног узорка (резултат програмског кода са слике 16)

Узорак број	a	b	c	RSS	RSE	AIC	BIC	MRPD	Реф
1	0.026	0.301	-0.029	0.0008	0.007	-137.5	-133.5	0.75	[52]
2	-0.151	0.935	-0.404	0.0032	0.015	-96.1	-92.5	1.71	
3	-0.151	0.896	-0.314	0.0007	0.007	-123.6	-120.0	0.94	
4	-0.115	0.856	-0.428	0.0029	0.014	-98.3	-94.8	2.81	
5	-0.014	0.439	-0.027	0.0038	0.016	-93.2	-89.6	1.94	
6	-0.033	0.509	-0.082	0.0008	0.007	-120.7	-117.1	0.89	
7	-0.081	0.614	-0.047	0.0005	0.006	-129.0	-125.4	0.62	
8	-0.095	0.764	-0.312	0.0027	0.013	-99.3	-95.7	1.52	
9	-0.152	0.922	-0.361	0.0010	0.008	-116.5	-112.9	0.92	
10	-0.090	0.747	-0.302	0.0022	0.012	-102.7	-99.1	1.45	
11	-0.136	0.915	-0.331	0.0017	0.013	-71.0	-68.8	1.54	
12	-0.010	0.483	0.041	0.0103	0.032	-47.9	-45.6	3.62	
13	-0.195	0.914	-0.050	0.0035	0.019	-61.9	-59.6	1.86	
14	-0.118	0.730	-0.001	0.0061	0.025	-54.7	-52.4	2.41	
15	-0.181	1.014	-0.380	0.0037	0.017	-80.7	-77.6	2.01	
16	-0.145	0.832	-0.188	0.0033	0.014	-109.5	-105.5	1.30	[80]
17	-0.131	0.759	-0.013	0.0016	0.013	-64.8	-62.8	1.31	
18	-0.077	0.603	-0.065	0.0016	0.010	-123.8	-119.8	0.99	
19	-0.130	0.777	-0.131	0.0013	0.009	-112.8	-109.2	1.06	
20	-0.118	0.708	-0.032	0.0013	0.009	-112.3	-108.7	0.86	
21	-0.111	0.770	-0.238	0.0029	0.014	-98.2	-94.7	1.33	
22	-0.162	0.908	-0.268	0.0010	0.008	-116.8	-113.2	0.98	
23	-0.083	0.682	-0.185	0.0010	0.008	-117.3	-113.8	0.78	
24	-0.073	0.641	-0.153	0.0011	0.008	-116.3	-112.7	0.85	
25	-0.134	0.793	-0.161	0.0024	0.013	-101.8	-98.2	1.15	
26	-0.132	0.843	-0.285	0.0023	0.012	-102.1	-98.6	1.32	
27	-0.072	0.554	0.059	0.0011	0.009	-115.4	-111.9	0.80	
28	-0.108	0.698	-0.067	0.0020	0.012	-97.6	-94.3	1.32	
29	-0.063	0.582	-0.070	0.0019	0.011	-105.9	-102.3	1.44	
30	-0.077	0.634	-0.136	0.0012	0.009	-114.6	-111.0	0.89	
31	-0.039	0.511	-0.044	0.0029	0.014	-97.9	-94.3	1.89	

32	-0.047	0.519	0.033	0.0016	0.011	-94.0	-90.9	0.97	[78]
33	-0.022	0.476	0.011	0.0027	0.014	-85.7	-82.6	1.49	
34	0.050	0.340	-0.071	0.0073	0.024	-69.8	-66.7	3.66	
35	-0.027	0.516	-0.053	0.0032	0.016	-83.0	-79.9	1.78	
36	-0.032	0.504	-0.112	0.0025	0.012	-108.2	-104.4	1.70	
37	-0.014	0.426	-0.025	0.0021	0.011	-111.4	-107.7	1.37	
38	0.057	0.316	-0.053	0.0031	0.015	-83.5	-80.4	1.99	
39	-0.064	0.581	-0.008	0.0011	0.009	-99.4	-96.3	1.03	
40	-0.149	0.848	-0.170	0.0010	0.010	-78.1	-75.8	1.09	[76]
41	0.033	0.318	0.002	0.0051	0.018	-88.0	-84.4	2.45	
42	-0.128	0.820	-0.266	0.0019	0.011	-106.1	-102.6	1.48	
43	-0.013	0.438	-0.026	0.0045	0.017	-90.1	-86.6	1.93	
44	-0.082	0.620	-0.048	0.0008	0.007	-122.0	-118.5	0.59	
45	-0.150	0.933	-0.403	0.0023	0.012	-102.0	-98.4	1.63	
46	-0.163	1.030	-0.541	0.0205	0.037	-62.9	-59.3	6.72	
47	-0.115	0.859	-0.432	0.0038	0.016	-93.1	-89.5	3.02	
48	-0.014	0.482	-0.129	0.0039	0.016	-92.9	-89.4	2.41	
49	-0.151	0.899	-0.315	0.0007	0.007	-124.4	-120.8	0.90	
50	-0.034	0.516	-0.087	0.0007	0.007	-123.5	-120.0	0.79	
51	-0.160	0.905	-0.272	0.0017	0.013	-71.6	-69.3	1.43	
52	-0.119	0.756	-0.135	0.0012	0.011	-69.0	-67.0	1.31	[77]
53	-0.084	0.684	-0.133	0.0015	0.012	-73.0	-70.7	1.34	
54	-0.131	0.863	-0.286	0.0072	0.027	-52.6	-50.4	2.32	
55	-0.100	0.771	-0.250	0.0063	0.025	-54.4	-52.1	3.17	
56	-0.260	1.240	-0.503	0.0068	0.026	-53.3	-51.0	3.67	
57	-0.128	0.774	-0.147	0.0011	0.011	-76.5	-74.3	5.81	
58	-0.174	0.859	-0.078	0.0015	0.012	-73.4	-71.1	1.18	
59	-0.106	0.716	-0.119	0.0012	0.011	-75.5	-73.2	1.50	
60	-0.116	0.744	-0.125	0.0019	0.014	-69.6	-67.4	1.92	
61	-0.146	0.802	-0.097	0.0009	0.009	-80.3	-78.1	1.05	
62	-0.122	0.723	-0.034	0.0010	0.010	-77.8	-75.5	0.79	
63	-0.129	0.762	-0.101	0.0021	0.015	-68.4	-66.1	1.66	
64	-0.120	0.738	-0.097	0.0019	0.014	-69.9	-67.6	1.66	[79]
65	-0.166	0.868	-0.142	0.0028	0.017	-64.9	-62.7	1.89	
66	-0.051	0.550	-0.010	0.0013	0.012	-74.5	-72.2	1.25	
67	-0.065	0.600	-0.056	0.0011	0.011	-76.6	-74.4	1.22	
68	-0.077	0.648	-0.108	0.0023	0.015	-67.4	-65.2	1.79	
69	-0.061	0.586	-0.055	0.0007	0.008	-82.7	-80.4	1.09	
70	-0.042	0.538	-0.033	0.0007	0.008	-83.6	-81.4	1.07	
71	-0.070	0.643	-0.129	0.0006	0.008	-84.0	-81.7	0.80	
72	-0.042	0.538	-0.033	0.0018	0.013	-71.0	-68.7	2.11	
73	-0.056	0.633	-0.187	0.0076	0.028	-51.9	-49.6	4.22	
74	-0.055	0.436	0.262	0.0011	0.011	-76.6	-74.4	0.98	
75	-0.093	0.584	0.130	0.0005	0.007	-86.5	-84.3	0.68	
76	-0.360	1.630	-0.876	0.0088	0.030	-50.0	-47.7	3.92	
77	-0.365	1.647	-0.883	0.0094	0.031	-49.2	-46.9	4.06	
78	-0.381	1.608	-0.722	0.0224	0.047	-37.8	-35.6	7.90	
79	-0.370	1.571	-0.699	0.0180	0.042	-40.7	-38.4	6.68	
80	-0.371	1.600	-0.738	0.0096	0.031	-48.8	-46.6	3.47	
Просечно				0.0033	0.015	-87.1	-84.2	1.90	

Провера модела је урађена и за друге биљне материјале (Табела 4), за које је мерење издвојеног етарског уља у току процеса хидродестилације вршено у различитим (дужим или краћим) неравномерним временским интервалима.

Оптималне вредности параметара полиномно-логаритамског модела и његови квантитативни показатељи за сваки обрађени узорак, добијени помоћу програмског пакета R, дати су у табели 6.

Табела 6. Преглед параметара и кванитативних показатеља полиномно-логаритамског модела за узорке који се односе на хидродестилацију етарског уља из различитих биљних материјала

Узорак број	<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>	RSS	RSE	AIC	BIC	MRPD	Реф
1	-0.345	1.628	-0.887	0.0002	0.013	-21.14	-23.60	0.710	[70]
2	0.055	0.040	0.679	0.0000	0.004	-30.58	-33.03	0.187	
3	-0.454	1.764	-0.715	0.0001	0.005	-49.13	-49.34	0.379	[71]
4	-0.019	0.414	0.261	0.0023	0.024	-28.20	-28.42	1.636	
5	-0.314	1.322	-0.392	0.0001	0.005	-51.24	-51.46	0.326	[72]
6	-0.036	0.695	-0.284	0.0118	0.038	-36.04	-34.44	11.023	[64]
7	-0.442	1.977	-0.990	0.0328	0.091	-9.68	-9.89	11.095	[81]
8	0.277	0.003	0.285	0.0163	0.074	-10.42	-11.25	4.740	
9	-0.147	1.386	-1.511	0.0040	0.032	-24.41	-24.62	2.884	[69]
10	-0.518	2.910	-3.008	0.0062	0.046	-16.18	-17.01	5.618	
11	-0.655	3.354	-3.272	0.0144	0.060	-15.43	-15.65	5.260	[68]
12	-0.261	1.129	-0.221	0.0002	0.009	-29.54	-31.10	0.444	
13	-0.256	1.165	-0.314	0.0006	0.017	-22.88	-24.44	0.916	
14	-0.420	2.016	-1.390	0.0005	0.016	-23.77	-25.33	0.859	
15	-0.009	0.295	0.454	0.0008	0.016	-28.71	-29.54	1.111	
16	-0.523	2.382	-1.656	0.0090	0.055	-13.96	-14.79	3.676	
17	-1.055	4.331	-3.435	0.0009	0.018	-27.51	-28.34	1.002	
18	-0.686	3.045	-2.377	0.0002	0.009	-29.27	-30.83	0.476	[82]
19	0.300	-0.566	0.329	0.0032	0.017	-69.70	-67.14	3.162	[73]
20	0.223	0.016	-0.082	0.0015	0.012	-73.16	-70.90	1.723	
21	0.021	0.575	-0.313	0.0038	0.025	-36.49	-35.70	2.883	[83]
22	0.284	-0.122	-0.001	0.0055	0.023	-56.07	-53.81	4.628	
23	-0.181	1.493	-1.284	0.0077	0.031	-40.64	-39.05	7.387	[83]
24	0.289	0.243	-0.283	0.0308	0.059	-29.53	-27.59	16.653	
25	0.629	-0.397	-0.067	0.0460	0.081	-17.44	-16.23	62.101	[84]
26	-0.259	1.628	-1.510	0.0013	0.010	-97.00	-93.91	0.935	
27	-0.281	1.346	-0.613	0.0042	0.022	-53.53	-51.59	2.443	[85]
28	-0.308	1.407	-0.619	0.0050	0.024	-51.40	-49.46	2.766	[86]
29	0.037	0.727	-0.743	0.0031	0.021	-44.47	-43.26	2.763	[87]
30	0.372	-0.400	0.250	0.0034	0.026	-31.39	-31.07	2.714	
31	0.610	-1.014	0.505	0.0048	0.031	-28.67	-28.36	3.802	
32	0.257	-0.053	0.026	0.0050	0.032	-28.32	-28.00	3.249	
33	-0.074	0.858	-0.450	0.0025	0.022	-33.96	-33.64	1.879	[75]
34	0.685	-1.210	0.592	0.0156	0.056	-19.24	-18.92	8.748	
35	0.028	0.492	0.021	0.0213	0.039	-57.37	-54.04	9.361	[54]
36	0.044	0.433	-0.022	0.0027	0.021	-39.39	-38.60	4.464	
37	0.768	-1.014	0.506	0.0208	0.065	-16.91	-16.59	7.427	[88]
38	-0.260	0.928	0.170	0.0031	0.023	-38.26	-37.47	2.529	
39	-0.160	0.951	-0.387	0.0010	0.008	-124.83	-121.06	0.785	[89]
40	-0.174	0.968	-0.335	0.0009	0.008	-127.13	-123.35	1.036	
41	0.420	0.178	-0.031	0.0175	0.042	-41.08	-38.82	6.638	[90]
42	0.238	0.350	-0.461	0.0229	0.057	-24.43	-23.22	11.416	[91]
43	0.291	0.158	-0.296	0.0141	0.045	-29.24	-28.03	8.138	
44	0.295	0.150	-0.299	0.0118	0.041	-31.09	-29.88	7.612	[92]
45	-0.176	0.795	0.124	0.0296	0.061	-25.88	-24.29	20.147	
46	0.283	-0.006	-0.494	0.0563	0.079	-22.29	-20.36	24.907	[93]
47	0.389	-0.428	-0.097	0.0433	0.069	-25.44	-23.50	18.896	
48	0.501	-1.010	0.535	0.0188	0.041	-44.85	-42.30	22.982	[94]
49	-0.713	3.939	-4.381	0.0010	0.013	-48.30	-47.51	1.234	
50	-1.194	5.966	-6.455	0.0011	0.013	-47.73	-46.94	1.204	[95]
51	0.428	-0.237	0.330	0.0006	0.012	-38.18	-38.40	1.014	
52	0.318	-0.062	0.233	0.0017	0.017	-43.74	-42.95	1.614	[96]
53	-0.015	0.765	-0.158	0.0004	0.010	-40.95	-41.17	0.755	
54	-0.004	0.649	-0.407	0.0047	0.023	-52.01	-50.07	2.021	[97]
55	-2.975	11.019	-9.182	0.0118	0.038	-35.98	-34.39	6.169	[98]
56	-1.089	5.706	-6.471	0.0005	0.007	-86.97	-84.71	0.783	[99]
57	-7.144	24.117	-19.315	0.0059	0.029	-37.91	-36.70	3.674	[100]
58	-0.343	1.257	-0.153	0.0007	0.010	-52.20	-51.41	1.146	[101]
59	-2.748	7.512	-4.152	0.0251	0.032	-109.03	-103.70	117.447	[101]
60	-0.036	0.695	-0.284	0.0118	0.038	-36.04	-34.44	11.023	[101]

61	0.546	-0.441	0.057	0.0058	0.034	-27.13	-26.81	5.476	
62	0.534	-0.486	0.157	0.0019	0.019	-36.22	-35.90	2.803	[89]
63	0.529	-0.422	0.063	0.0033	0.026	-31.55	-31.23	4.243	
64	-0.254	1.235	-0.476	0.0036	0.020	-55.29	-53.35	2.407	[102]
65	-0.180	1.210	-0.946	0.0015	0.017	-37.86	-37.54	1.376	
66	-0.697	2.579	-1.314	0.0000	NaN	-196.14	-199.74	0.018	
67	-0.264	1.115	-0.183	0.0002	0.008	-36.77	-37.61	0.602	[103]
68	-0.245	1.020	-0.057	0.0000	NaN	-202.37	-205.98	0.015	
69	0.008	0.231	0.561	0.0001	0.011	-21.97	-24.43	0.507	
70	-0.351	1.396	-0.416	0.0142	0.069	-11.23	-12.07	6.259	
71	0.299	-0.357	0.155	0.0008	0.011	-50.77	-49.98	1.185	
72	0.140	0.101	-0.041	0.0009	0.012	-49.08	-48.29	1.122	[104]
73	0.125	0.187	-0.156	0.0001	0.005	-66.97	-66.18	0.449	
74	-0.149	0.948	-0.412	0.0066	0.033	-31.43	-30.64	4.462	[105]
75	0.318	-0.315	0.101	0.0048	0.040	-17.71	-18.55	3.488	
76	0.192	0.148	-0.285	0.0037	0.035	-19.27	-20.10	3.195	[106]
77	0.544	-1.206	0.959	0.0001	0.007	-39.18	-40.01	0.459	
78	-0.014	0.831	-0.795	0.0003	0.011	-33.61	-34.44	0.785	
79	-1.078	5.661	-6.429	0.0005	0.008	-78.14	-76.20	0.842	[97]
80	-0.104	0.681	0.015	0.0002	0.006	-71.10	-69.89	0.464	[101]
Просечно				0.008	0.029	-44.626	-44.057	6.435	

5.3. Поређење добијених резултата са познатим у литератури

У циљу верификације ефикасности новог полиномно-логаритамског модела, за сваки узорак у раду одређени су параметри модела, вредности квантитативних показатеља и нацртан дијаграм издвајања етарског уља у времену како за предложени модел, тако и за два у литератури најзаступљенија модела: модел Совова и Алексовски [74] и модел Милојевића и сар. [75].

Модел 1 – модел Совова-Алексовски

$$\frac{q}{q_{\infty}} = 1 - f e^{-\frac{t}{T_1}} - (1 - f) e^{-\frac{t}{T_2}}$$

Модел 2 – модел Милојевића

$$\frac{q}{q_{\infty}} = 1 - (1 - b) e^{-\frac{t}{T}}$$

Модел 3 – полиномно логаритамски модел

$$\frac{q}{q_{\infty}} = a \cdot (\log(t))^2 + b \cdot \log(t) + c$$

Поређење математичких модела (Модел 1, Модел 2 и Модел 3) извршено је коришћењем експериментално добијених података за принос етарског уља из бобица клеке (80 узорака) и експериментално добијених података за принос етарског уља из различитих биљних материјала (80 узорака).

За одређивање оптималних вредности сва три модела коришћена је Левенберг-Маркварт (Levenberg-Marquardt) оптимизација имплементирана у програмском окружењу R.

Да би се помоћу наведеног софтвера одредили непознати параметри за наведене математичке моделе, неопходно је најпре за сваки узорак дефинисати одговарајуће податке о времену и приносу етарског уља, добијене

експерименталним путем. Затим се као улазне величине уносе једначине одговарајућих модела са пратећим скупом параметара и њиховим почетним вредностима. Као резултат, кроз коначан број итерација добијају се процењене вредности параметара сваког задатог модела, али и различити статистички показатељи помоћу којих се оцењује квалит модела.

Процедура за решавање проблема нелинеарне регресије захтева унос почетних вредности параметара модела. Избор почетних вредности параметара је од кључног значаја за успех тог итеративног процеса. Код Модела 2 и Модела 3 почетни параметри су исти за сваки проверавани узорак. Код Модела 1 у 15-ак случајева је било неопходно посебно прилагођавање почетних вредности параметара како би се омогућило да алгоритам процене достигне конвергенцију.

У наставку је дат програмски код за одређивање вредности параметара и статистичких показатеља модела једног узорака (клека, узорак 1), као и цртање дијаграма издвајања етарског уља у времену за сва три модела.

Програмски код за анализу података једног узорака у окружењу R

```
>t=c(5,10,15,20,25,30,40,50,60,90,120,180,240)
>y=c(0.496,0.614,0.689,0.732,0.759,0.789,0.833,0.864,0.877,0.908,0.934,0.978,0.996)
>plot(t,y,main = " узорак 1 ", xlab = "Време (min)", ylab = "Принос (mg/g)",
las=1, bty="l",font.lab=6);
>Model1=nlsLM(y~1-f*exp(-t*T1)-(1-f)*exp(-t*T2),start = list(f=0.1,T1=0,T2=0));
>Model2=nlsLM(y~1-(1-b)*exp(-k*t),start = list(b=0,k=0));
>Model3=nlsLM(y~a*(log10(t))^2+b*log10(t)+c,start = list(a=0,b=0,c=0));
>Model1
Nonlinear regression model
  model: y ~ 1 - f * exp(-t * T1) - (1 - f) * exp(-t * T2)
  data: parent.frame()
      f      T1      T2
0.62255 0.25514 0.01806
residual sum-of-squares: 0.002353

Number of iterations to convergence: 15
Achieved convergence tolerance: 1.49e-08
>curve(1-(0.62255)*exp(-t*(0.25514))-(1-(0.62255))*exp(-t*(0.01806)),add
=TRUE,lty=2);
>summary(Model1)
Formula: y ~ 1 - f * exp(-t * T1) - (1 - f) * exp(-t * T2)
Parameters:
  Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
f  0.622546   0.022593   27.55 9.19e-11 ***
T1 0.255141   0.024043   10.61 9.20e-07 ***
T2 0.018057   0.001682   10.73 8.26e-07 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 0.01534 on 10 degrees of freedom

Number of iterations to convergence: 15
Achieved convergence tolerance: 1.49e-08
>Model2
Nonlinear regression model
  model: y ~ 1 - (1 - b) * exp(-k * t)
```

```

data: parent.frame()
      b      k
0.48398 0.02751
residual sum-of-squares: 0.01091

Number of iterations to convergence: 12
Achieved convergence tolerance: 1.49e-08
>curve(1 - (1 - 0.48398) * exp(-0.02751 * t), add =TRUE, lty=3);
>summary(Model2)
Formula: y ~ 1 - (1 - b) * exp(-k * t)

Parameters:
  Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
b  0.48398    0.03107  15.575 7.66e-09 ***
k  0.02751    0.00291   9.454 1.29e-06 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 0.03149 on 11 degrees of freedom

Number of iterations to convergence: 12
Achieved convergence tolerance: 1.49e-08
>Model3
Nonlinear regression model
model: y ~ a * (log10(t))^2 + b * log10(t) + c
data: parent.frame()
      a      b      c
-0.09194 0.58127 0.13140
residual sum-of-squares: 0.0003962

Number of iterations to convergence: 2
Achieved convergence tolerance: 1.49e-08

>curve(-0.09194*(log10(t))^2+0.58127*log10(t)+0.13140, add =TRUE, lty=1)
>summary(Model3)
Formula: y ~ a * (log10(t))^2 + b * log10(t) + c

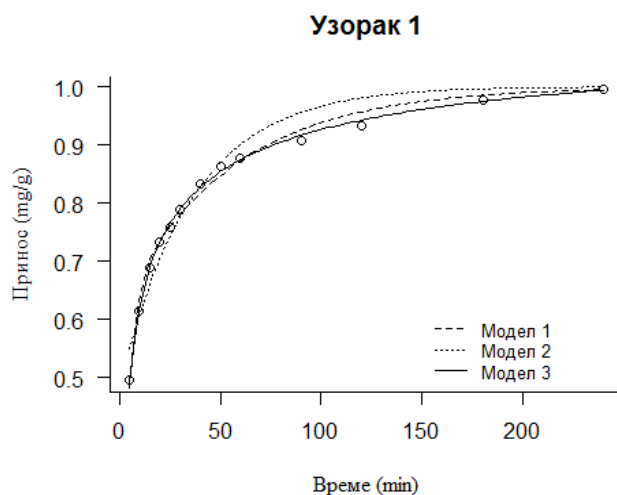
Parameters:
  Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
a -0.091940  0.007094 -12.960 1.41e-07 ***
b  0.581265  0.022656  25.656 1.86e-10 ***
c  0.131399  0.017144   7.665 1.71e-05 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 0.006295 on 10 degrees of freedom

Number of iterations to convergence: 2
Achieved convergence tolerance: 1.49e-08
>legend("bottomright",g_range[3],c("Модел 1","Модел 2","Модел 3"),
cex=0.8,lty=c(2,3,1),lwd=1, bty="n")
>AIC(Model1, Model2, Model3)
      df      AIC
Model1  4 -67.12706
Model2  3 -49.18981
Model3  4 -90.28725

>BIC(Model1, Model2, Model3)
      df      BIC
Model1  4 -64.86726
Model2  3 -47.49496
Model3  4 -88.02746

```



Слика 18. Поређење модела са експерименталним подацима (Узорак 1: биљни материјал:вода 1: 3 w/w, експериментални подаци су приказани са кружићима (°), Модел 1 са цртицама (---), Модел 2 са тачкицама (...) и Модел 3 са пуном линијом (—))

Један од показатеља квалитета модела јесте и број итерација неопходних да се добију вредности параметара модела. Добијање вредности параметара код узорака који описују кинетику хидродестилације етарског уља из бобица клекe просечно за Модел 1 износи тринаест, за Модел 2 – једанаест, а за Модел 3 – две итерације. Код узорака који описују кинетику хидродестилације етарског уља из различитих биљних материјала, просечан број итерација за Модел 1 износи педесет четири, за Модел 2 – осам, а за Модел 3 – две итерације. Ово представља још један од показатеља предности предложеног модела, јер се уз помоћ софтвера, параметри овог модела за сваки узорак успешно одређују у само две итерације.

Приликом одређивања како параметара модела, тако и квантитативних показатеља због недоступности података за q_{∞} је узимана последња измерена вредност количине издвојеног етарског уља (као и у [75]).

У наредним табелама су приказане упоредне вредности одређених квантитативних показатеља: резидуална сума квадрата (RSS), резидуална стандардна грешка (RSE), Акаикеов информациони критеријум (AIC), Бајесов информациони критеријум (BIC) и средње релативно процентно одступање ($MRPD$) за сва три поређена модела.

Како би резултати поређења били боље видљиви, дат је графички приказ поређења квантитативних показатеља комплетних скупова анализираних података за сва три поређена модела.

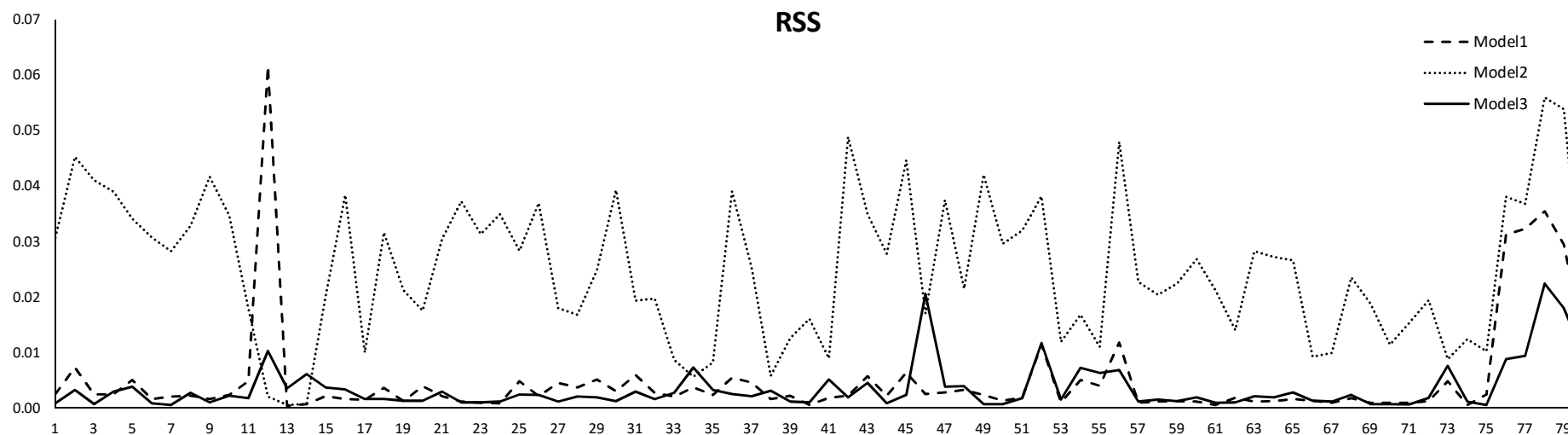
5.3.1. Поређење резултата за клеку

Табела 7. Квантитативни показатељи оцене модела проверених на клеки

Узорак број	Модел 1					Модел 2					Модел 3					Реф.
	RSS	RSE	AIC	BIC	MRPD	RSS	RSE	AIC	BIC	MRPD	RSS	RSE	AIC	BIC	MRPD	
1	0.0025	0.012	-114.8	-110.8	1.77	0.0307	0.041	-66.8	-63.8	7.33	0.0008	0.007	-137.5	-133.5	0.75	[52]
2	0.0073	0.022	-81.5	-77.9	3.50	0.0452	0.053	-50.7	-48.0	9.41	0.0032	0.015	-96.1	-92.5	1.71	
3	0.0024	0.013	-101.5	-98.0	1.86	0.0410	0.051	-52.4	-49.8	7.48	0.0007	0.007	-123.6	-120.0	0.94	
4	0.0025	0.013	-100.7	-97.2	2.14	0.0389	0.049	-53.4	-50.7	9.10	0.0029	0.014	-98.3	-94.8	2.81	
5	0.0050	0.018	-88.2	-84.6	2.40	0.0341	0.046	-55.8	-53.1	6.36	0.0038	0.016	-93.2	-89.6	1.94	
6	0.0016	0.010	-108.3	-104.8	1.10	0.0307	0.044	-57.7	-55.0	6.47	0.0008	0.007	-120.7	-117.1	0.89	
7	0.0020	0.012	-104.5	-101.0	1.38	0.0282	0.042	-59.2	-56.5	5.08	0.0005	0.006	-129.0	-125.4	0.62	
8	0.0022	0.012	-102.8	-99.2	2.13	0.0328	0.045	-56.5	-53.8	7.78	0.0027	0.013	-99.3	-95.7	1.52	
9	0.0016	0.010	-108.8	-105.2	1.38	0.0416	0.051	-52.2	-49.5	7.23	0.0010	0.008	-116.5	-112.9	0.92	
10	0.0023	0.012	-102.7	-99.1	2.09	0.0347	0.047	-55.5	-52.8	8.15	0.0022	0.012	-102.7	-99.1	1.45	
11	0.0048	0.022	-57.8	-55.6	3.00	0.0179	0.040	-42.7	-41.0	6.31	0.0017	0.013	-71.0	-68.8	1.54	
12	0.0616	0.078	-24.7	-22.4	8.49	0.0020	0.013	-71.3	-69.6	0.99	0.0103	0.032	-47.9	-45.6	3.62	
13	0.0004	0.006	-90.0	-87.8	0.44	0.0005	0.007	-89.8	-88.2	0.57	0.0035	0.019	-61.9	-59.6	1.86	
14	0.0007	0.008	-83.7	-81.4	0.68	0.0007	0.008	-84.6	-82.9	0.84	0.0061	0.025	-54.7	-52.4	2.41	
15	0.0021	0.013	-89.9	-86.8	1.10	0.0202	0.038	-55.4	-53.1	4.40	0.0037	0.017	-80.7	-77.6	2.01	
16	0.0016	0.010	-123.4	-119.5	0.89	0.0383	0.046	-62.4	-59.4	5.33	0.0033	0.014	-109.5	-105.5	1.30	
17	0.0014	0.013	-66.5	-64.6	1.24	0.0100	0.032	-45.1	-43.6	3.45	0.0016	0.013	-64.8	-62.8	1.31	
18	0.0036	0.014	-107.9	-103.9	1.83	0.0316	0.042	-66.3	-63.3	5.15	0.0016	0.010	-123.8	-119.8	0.99	
19	0.0012	0.009	-114.1	-110.5	1.09	0.0212	0.036	-64.3	-61.6	4.17	0.0013	0.009	-112.8	-109.2	1.06	
20	0.0039	0.016	-92.9	-89.3	1.71	0.0175	0.033	-67.8	-65.1	3.48	0.0013	0.009	-112.3	-108.7	0.86	
21	0.0021	0.012	-103.6	-100.0	1.21	0.0305	0.044	-57.8	-55.1	6.26	0.0029	0.014	-98.2	-94.7	1.33	
22	0.0011	0.009	-115.1	-111.5	1.10	0.0372	0.048	-54.2	-51.5	6.19	0.0010	0.008	-116.8	-113.2	0.98	
23	0.0009	0.008	-119.3	-115.8	0.88	0.0313	0.044	-57.3	-54.6	6.37	0.0010	0.008	-117.3	-113.8	0.78	
24	0.0008	0.007	-121.5	-118.0	0.86	0.0349	0.047	-55.3	-52.7	6.74	0.0011	0.008	-116.3	-112.7	0.85	
25	0.0048	0.018	-89.0	-85.4	1.68	0.0283	0.042	-59.1	-56.4	5.12	0.0024	0.013	-101.8	-98.2	1.15	
26	0.0021	0.012	-103.8	-100.3	1.34	0.0369	0.048	-54.3	-51.7	6.75	0.0023	0.012	-102.1	-98.6	1.32	
27	0.0045	0.017	-90.2	-86.6	1.93	0.0180	0.034	-67.3	-64.6	3.59	0.0011	0.009	-115.4	-111.9	0.80	
28	0.0037	0.016	-87.1	-83.8	1.63	0.0168	0.033	-63.4	-60.9	3.87	0.0020	0.012	-97.6	-94.3	1.32	
29	0.0051	0.018	-87.9	-84.4	2.32	0.0248	0.039	-61.5	-58.8	5.05	0.0019	0.011	-105.9	-102.3	1.44	
30	0.0030	0.014	-97.3	-93.8	1.73	0.0392	0.050	-53.2	-50.6	7.00	0.0012	0.009	-114.6	-111.0	0.89	
31	0.0059	0.020	-85.4	-81.9	2.60	0.0193	0.035	-66.0	-63.4	4.49	0.0029	0.014	-97.9	-94.3	1.89	
32	0.0027	0.014	-85.7	-82.6	1.45	0.0197	0.038	-55.8	-53.5	4.45	0.0016	0.011	-94.0	-90.9	0.97	
33	0.0020	0.013	-90.0	-86.9	1.34	0.0086	0.025	-69.1	-66.8	2.97	0.0027	0.014	-85.7	-82.6	1.49	
34	0.0037	0.017	-80.5	-77.4	2.24	0.0056	0.020	-75.9	-73.6	3.04	0.0073	0.024	-69.8	-66.7	3.66	
35	0.0023	0.013	-88.4	-85.3	1.54	0.0082	0.024	-69.9	-67.6	3.00	0.0032	0.016	-83.0	-79.9	1.78	
36	0.0054	0.018	-93.3	-89.5	2.88	0.0390	0.048	-57.6	-54.8	7.00	0.0025	0.012	-108.2	-104.4	1.70	
37	0.0046	0.017	-96.5	-92.7	2.22	0.0253	0.039	-65.9	-63.0	5.43	0.0021	0.011	-111.4	-107.7	1.37	
38	0.0016	0.011	-93.9	-90.8	1.37	0.0058	0.020	-75.4	-73.1	3.65	0.0031	0.015	-83.5	-80.4	1.99	
39	0.0022	0.013	-88.9	-85.8	1.39	0.0126	0.030	-62.9	-60.6	3.27	0.0011	0.009	-99.4	-96.3	1.03	

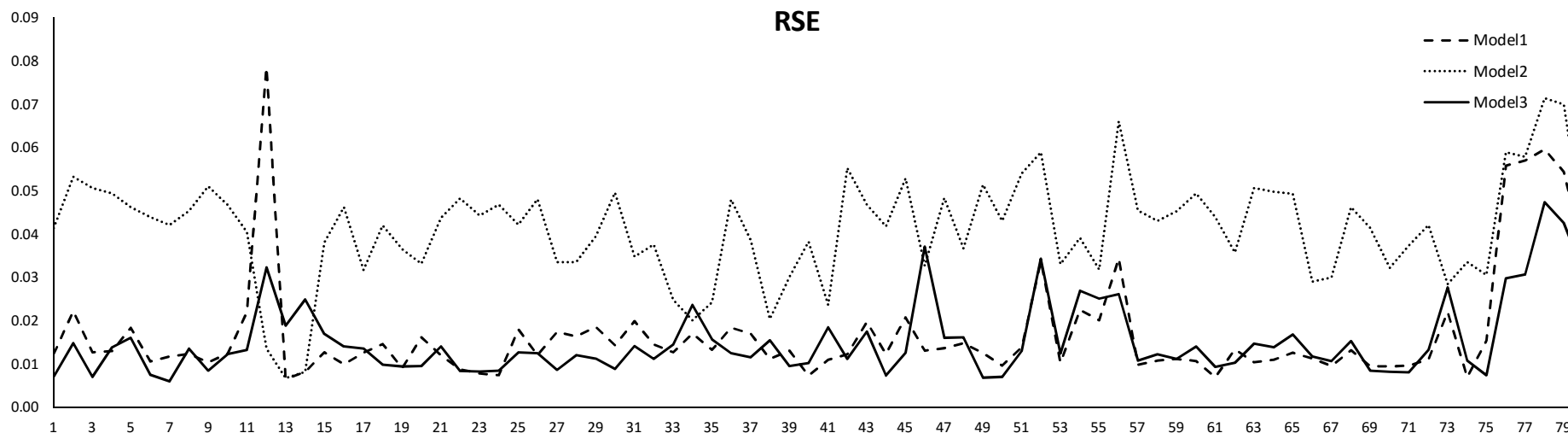
40	0.0005	0.007	-86.9	-84.6	0.83	0.0160	0.038	-44.2	-42.5	4.69	0.0010	0.010	-78.1	-75.8	1.09	[76]
41	0.0018	0.011	-106.8	-103.2	1.40	0.0089	0.024	-80.0	-77.3	3.34	0.0051	0.018	-88.0	-84.4	2.45	
42	0.0022	0.012	-103.1	-99.5	1.86	0.0488	0.055	-49.3	-46.7	7.97	0.0019	0.011	-106.1	-102.6	1.48	
43	0.0057	0.020	-85.8	-82.3	2.43	0.0349	0.047	-55.3	-52.7	6.43	0.0045	0.017	-90.1	-86.6	1.93	
44	0.0022	0.012	-102.9	-99.3	1.29	0.0278	0.042	-59.4	-56.8	4.84	0.0008	0.007	-122.0	-118.5	0.59	
45	0.0064	0.021	-83.8	-80.3	3.43	0.0446	0.053	-50.9	-48.3	9.25	0.0023	0.012	-102.0	-98.4	1.63	
46	0.0025	0.013	-100.6	-97.0	8.99	0.0170	0.033	-68.3	-65.6	3.90	0.0205	0.037	-62.9	-59.3	6.72	
47	0.0028	0.014	-98.8	-95.3	2.16	0.0374	0.048	-54.1	-51.4	8.91	0.0038	0.016	-93.1	-89.5	3.02	
48	0.0032	0.015	-96.2	-92.6	2.02	0.0215	0.037	-64.1	-61.4	5.74	0.0039	0.016	-92.9	-89.4	2.41	
49	0.0023	0.012	-102.3	-98.8	1.84	0.0420	0.051	-52.0	-49.3	7.39	0.0007	0.007	-124.4	-120.8	0.90	
50	0.0013	0.009	-111.9	-108.3	1.00	0.0296	0.043	-58.3	-55.7	6.31	0.0007	0.007	-123.5	-120.0	0.79	
51	0.0019	0.014	-69.9	-67.6	1.69	0.0320	0.054	-35.2	-33.5	7.33	0.0017	0.013	-71.6	-69.3	1.43	
52	0.0114	0.034	-46.7	-44.4	1.97	0.0381	0.059	-32.9	-31.2	6.65	0.0012	0.011	-69.0	-67.0	1.31	
53	0.0010	0.010	-77.8	-75.5	1.02	0.0119	0.033	-48.0	-46.3	4.36	0.0015	0.012	-73.0	-70.7	1.34	
54	0.0050	0.022	-57.3	-55.0	2.79	0.0168	0.039	-43.6	-41.9	5.90	0.0072	0.027	-52.6	-50.4	2.32	
55	0.0040	0.020	-60.3	-58.0	2.15	0.0110	0.032	-49.0	-47.4	4.37	0.0063	0.025	-54.4	-52.1	3.17	
56	0.0118	0.034	-46.2	-43.9	5.31	0.0479	0.066	-30.0	-28.3	10.20	0.0068	0.026	-53.3	-51.0	3.67	
57	0.0009	0.010	-79.2	-76.9	5.88	0.0227	0.045	-39.7	-38.0	6.99	0.0011	0.011	-76.5	-74.3	5.81	
58	0.0011	0.011	-76.5	-74.3	1.12	0.0204	0.043	-41.1	-39.4	4.82	0.0015	0.012	-73.4	-71.1	1.18	
59	0.0012	0.011	-75.5	-73.2	1.58	0.0224	0.045	-39.8	-38.1	6.20	0.0012	0.011	-75.5	-73.2	1.50	
60	0.0011	0.011	-76.7	-74.5	1.43	0.0268	0.049	-37.5	-35.8	6.71	0.0019	0.014	-69.6	-67.4	1.92	
61	0.0005	0.007	-88.3	-86.0	0.74	0.0211	0.044	-40.6	-38.9	5.35	0.0009	0.009	-80.3	-78.1	1.05	
62	0.0018	0.013	-70.8	-68.5	1.13	0.0140	0.036	-45.9	-44.2	3.97	0.0010	0.010	-77.8	-75.5	0.79	
63	0.0011	0.010	-77.5	-75.3	1.25	0.0282	0.051	-36.8	-35.1	6.47	0.0021	0.015	-68.4	-66.1	1.66	
64	0.0012	0.011	-76.0	-73.7	1.46	0.0272	0.050	-37.3	-35.6	6.27	0.0019	0.014	-69.9	-67.6	1.66	
65	0.0016	0.013	-72.5	-70.2	1.35	0.0266	0.049	-37.6	-35.9	6.05	0.0028	0.017	-64.9	-62.7	1.89	
66	0.0013	0.011	-75.3	-73.0	1.27	0.0092	0.029	-51.5	-49.8	3.53	0.0013	0.012	-74.5	-72.2	1.25	
67	0.0009	0.009	-79.9	-77.7	1.06	0.0099	0.030	-50.5	-48.8	4.16	0.0011	0.011	-76.6	-74.4	1.22	
68	0.0017	0.013	-71.2	-68.9	1.56	0.0235	0.046	-39.2	-37.5	6.38	0.0023	0.015	-67.4	-65.2	1.79	
69	0.0009	0.009	-79.9	-77.7	0.80	0.0188	0.041	-42.1	-40.5	5.71	0.0007	0.008	-82.7	-80.4	1.09	
70	0.0009	0.009	-80.1	-77.8	1.14	0.0114	0.032	-48.7	-47.0	4.14	0.0007	0.008	-83.6	-81.4	1.07	
71	0.0009	0.009	-79.7	-77.5	0.67	0.0153	0.037	-44.8	-43.1	4.99	0.0006	0.008	-84.0	-81.7	0.80	
72	0.0012	0.011	-75.9	-73.6	1.15	0.0194	0.042	-41.7	-40.0	6.67	0.0018	0.013	-71.0	-68.7	2.11	
73	0.0048	0.022	-57.9	-55.7	3.66	0.0088	0.028	-51.9	-50.2	4.47	0.0076	0.028	-51.9	-49.6	4.22	
74	0.0005	0.007	-88.4	-86.1	0.72	0.0124	0.034	-47.6	-45.9	3.37	0.0011	0.011	-76.6	-74.4	0.98	
75	0.0024	0.015	-67.1	-64.9	1.43	0.0102	0.031	-50.0	-48.3	3.06	0.0005	0.007	-86.5	-84.3	0.68	
76	0.0312	0.056	-33.5	-31.3	15.09	0.0380	0.059	-33.0	-31.3	9.93	0.0088	0.030	-50.0	-47.7	3.92	
77	0.0323	0.057	-33.1	-30.8	14.89	0.0368	0.058	-33.4	-31.7	9.08	0.0094	0.031	-49.2	-46.9	4.06	
78	0.0354	0.059	-31.9	-29.6	11.55	0.0559	0.071	-27.9	-26.2	11.16	0.0224	0.047	-37.8	-35.6	7.90	
79	0.0294	0.054	-34.3	-32.0	9.80	0.0538	0.070	-28.5	-26.8	10.65	0.0180	0.042	-40.7	-38.4	6.68	
80	0.0124	0.035	-45.5	-43.2	5.49	0.0177	0.040	-42.9	-41.2	4.86	0.0096	0.031	-48.8	-46.6	3.47	
Просечно	0.0050	0.017	-84.3	-81.4	2.50	0.0250	0.041	-53.2	-51.0	5.70	0.0033	0.015	-87.1	-84.2	1.90	

Из табеле квантитативних показатеља оцена модела проверених на клеки може се уочити да Модел 3 даје најбоље резултате. Код више од 50% узорака сви квантитативни показатељи Модела 3 имају ниже вредности у односу на квантитативне показатеље Модела 1 и Модела 2. То показују и најниже просечне вредности свих показатеља Модела 3. У осталим случајевима грешке у односу на најбољи модел су веома мале ($RSS \pm 0.0009$; $RSE \pm 0.0022$; $AIC \pm 4.3$; $BIC \pm 4.3$; $MRPD \pm 0.29$).



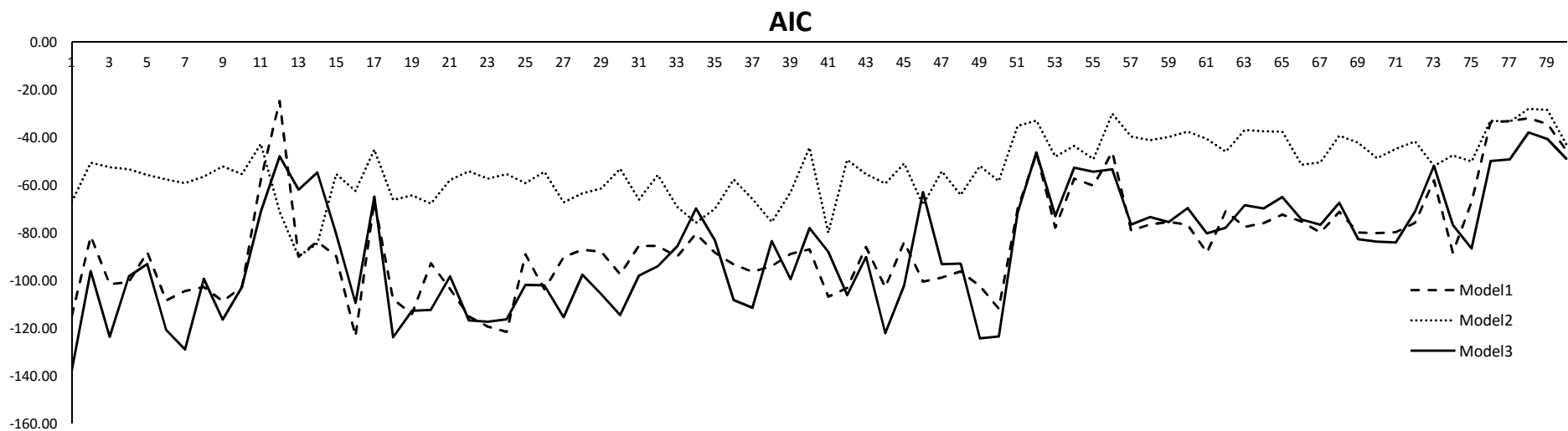
Слика 19. Графички приказ резидуалних сума квадрата (RSS) проверених на клеки Модел 1 ---, Модел 2 ... и Модел 3 __ (X оса: редни број узорка, а Y оса: вредности RSS)

Поређењем графичких приказа резидуалних сума квадрата за сва три модела, може се закључити да Модел 3 у највећем броју случајева даје или најбоље резултате или пак резултате који су најближи вредностима најбољег модела у одговарајућем узорку.



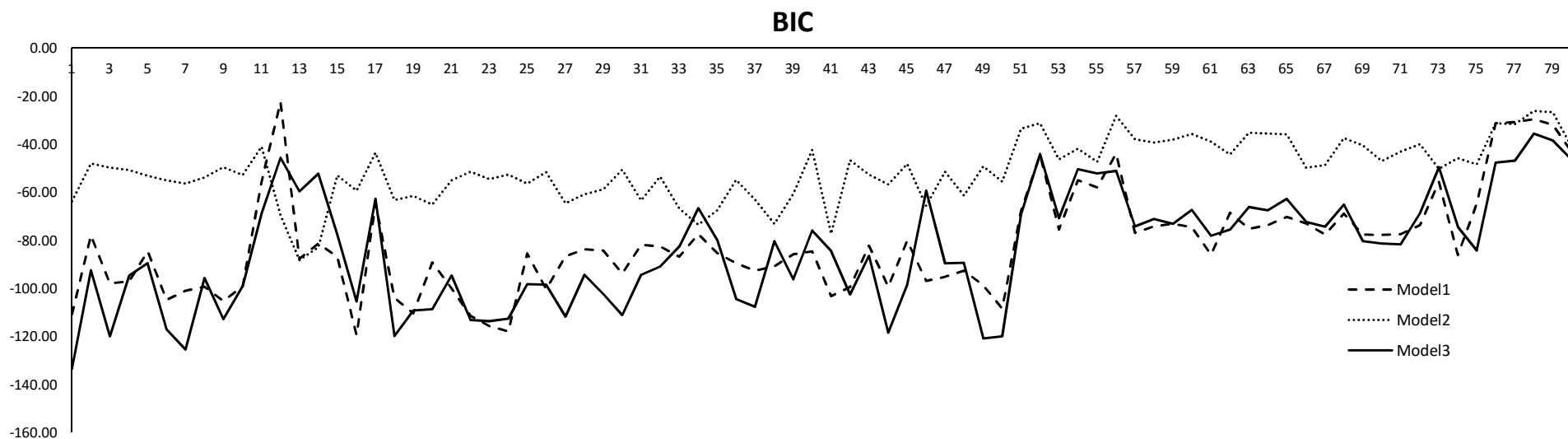
Слика 20. Графички приказ резидуалних стандардних грешака (RSE) проверених на клеки
 Модел 1 ---, Модел 2 ... и Модел 3 __ (X оса: редни број узорка, а Y оса: вредности RSE)

Са слике 20 се може видети да су у већини случајева код Модела 3 резидуалне стандардне грешке најниже и налазе се у границама од 0.0006 до 0.0224. Код преосталог мањег броја узорака Модел 3 даје резултате које незнатно одступају од резултата најбољег модела у одговарајућем узорку.



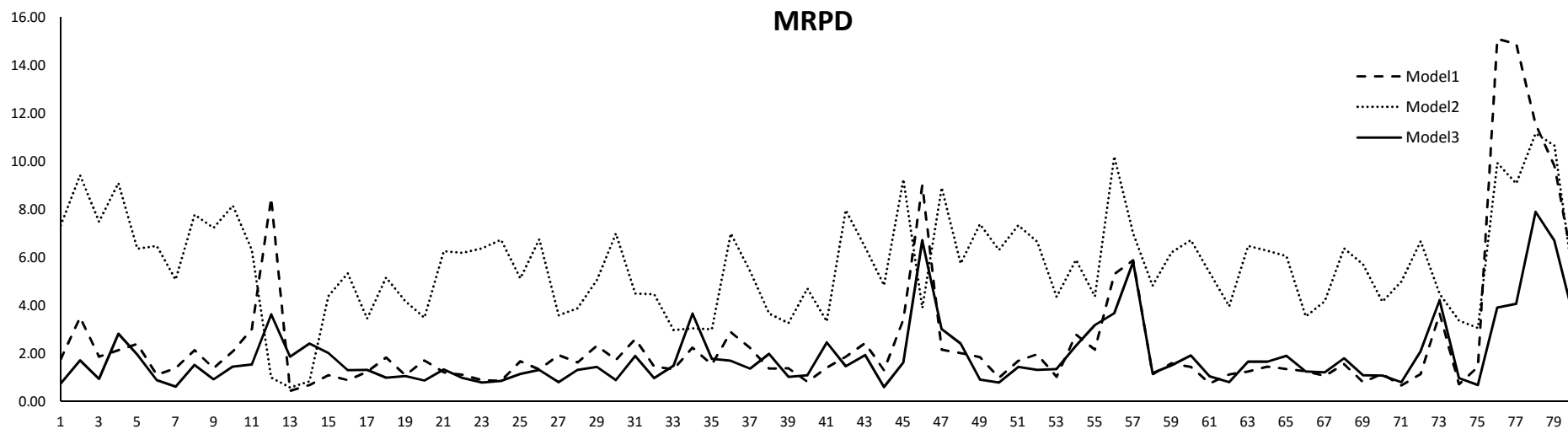
Слика 21. Графички приказ Акаикеовог информационог критеријума (AIC) провереног на клеки
 Модел 1 ---, Модел 2 ... и Модел 3 __ (X оса: редни број узорка, а Y оса: вредности AIC)

Графички приказ Акаикеовог информационог критеријума даје најниже вредности за Модел 3 што је показатељ да је, у поређењу са друга два модела, Модел 3 најбољи.



Слика 22. Графички приказ Бајесовог информационог критеријума (BIC) провереног на клеки Модел 1 ---, Модел 2 ... и Модел 3 __ (X оса: редни број узорка, а Y оса: вредности BIC)

Слично Акаикеовом информационом критеријуму, најниже вредности Бајесовог информационог критеријума, при поређењу више модела, указују на најбољи од њих. У овом случају, Модел 3 показује најбоље резултате.



Слика 23. Графички приказ средње релативног процентног одступања (MRPD) провереног на клеки Модел 1 ---, Модел 2 ... и Модел 3 __ (X оса: редни број узорка, а Y оса: вредности MRPD)

Са слике 23 се може уочити да се вредности за средње релативно процентно одступање крећу у интервалу од 0.44 до 15.09 (посматрајући сва три модела). За Модел 3 те вредности се налазе у интервалу од 0.59 до 7.9. У поређењу са друга два модела, посматрајућу вредности на комплетном скупу узорака, Модел 3 има најниже вредности, што је показатељ да је то најбољи модел.

5.3.2. Поређење резултата за остале биљне материјале

За разлику од експериментално добијених података за принос етарског уља из бобица клеке (Табела 1), који су мерени у правилним малим временским интервалима током целог процеса хидродестилације, подаци који се односе на принос етарског уља из различитих биљних материјала (Табела 4) добијени су мерењима у дужим или краћим временским интервалима, а за неке експерименте број мерења је веома мали. Тако на пример код узорака 66 и 68 који се односе на екстракцију етарског уља из кима[103], постоје само 3 мерења, а код узорака 1 и 2 који прате кинетику издвајања етарског уља целера [70] само 4 мерења. Такође, временски интервали у којима је мерена количина издвојеног етарског уља су врло различити и крећу се од 1 минута па до 30 минута у почетној фази хидродестилације која је најинтересантнија за одређивање потенцијално укупне количине етарског уља у биљном материјалу. Због свега наведеног, резултати описани помоћу квантитативних показатеља (Табела 8) дају нешто лошије резултате.

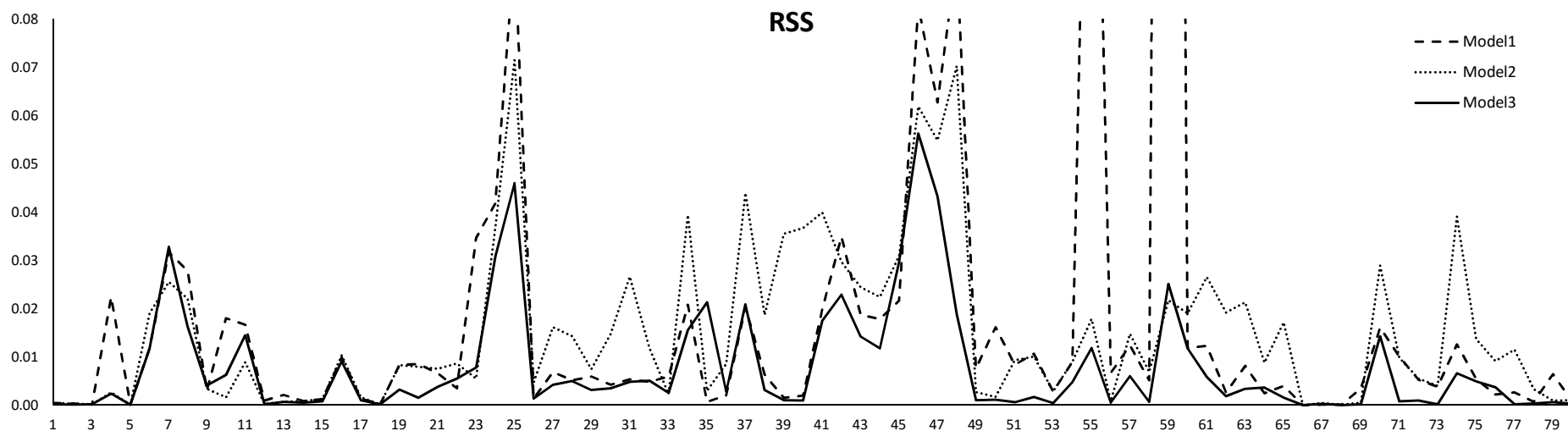
Табела 8. Квантитативни показатељи оцене модела проверених на различитим биљним материјалима

Узорак број	Модел 1					Модел 2					Модел 3					Реф.
	RSS	RSE	AIC	BIC	MRPD	RSS	RSE	AIC	BIC	MRPD	RSS	RSE	AIC	BIC	MRPD	
1	0.0004	0.019	-18.00	-20.45	1.105	0.0004	0.013	-20.00	-21.84	1.105	0.0002	0.013	-21.14	-23.60	0.710	[70]
2	0.0003	0.017	-18.62	-21.08	0.723	0.0003	0.012	-20.62	-22.47	0.723	0.0000	0.004	-30.58	-33.03	0.187	
3	0.0000	0.002	-62.56	-62.78	0.152	0.0001	0.004	-52.15	-52.31	0.351	0.0001	0.005	-49.13	-49.34	0.379	[71]
4	0.0224	0.075	-12.35	-12.56	4.838	0.0026	0.023	-29.52	-29.68	2.017	0.0023	0.024	-28.20	-28.42	1.636	
5	0.0000	0.003	-55.84	-56.05	0.256	0.0000	0.003	-57.32	-57.48	0.258	0.0001	0.005	-51.24	-51.46	0.326	[72]
6	0.0118	0.038	-35.99	-34.40	10.358	0.0190	0.046	-32.74	-31.55	9.581	0.0118	0.038	-36.04	-34.44	11.023	[64]
7	0.0317	0.089	-9.92	-10.14	11.600	0.0255	0.071	-13.44	-13.60	9.667	0.0328	0.091	-9.68	-9.89	11.095	[81]
8	0.0278	0.096	-7.22	-8.05	9.514	0.0221	0.074	-10.61	-11.23	6.511	0.0163	0.074	-10.42	-11.25	4.740	
9	0.0029	0.027	-26.59	-26.81	3.895	0.0034	0.026	-27.61	-27.78	2.558	0.0040	0.032	-24.41	-24.62	2.884	[69]
10	0.0179	0.077	-9.85	-10.68	13.865	0.0015	0.020	-26.54	-27.17	2.878	0.0062	0.046	-16.18	-17.01	5.618	
11	0.0167	0.065	-14.42	-14.64	7.549	0.0088	0.042	-20.86	-21.03	4.577	0.0144	0.060	-15.43	-15.65	5.260	[68]
12	0.0009	0.021	-21.00	-22.56	0.811	0.0002	0.008	-30.30	-31.47	0.507	0.0002	0.009	-29.54	-31.10	0.444	
13	0.0021	0.032	-16.75	-18.31	1.357	0.0007	0.015	-24.33	-25.50	0.977	0.0006	0.017	-22.88	-24.44	0.916	
14	0.0008	0.020	-21.41	-22.97	1.017	0.0008	0.017	-23.41	-24.58	1.017	0.0005	0.016	-23.77	-25.33	0.859	
15	0.0012	0.020	-25.91	-26.75	1.298	0.0012	0.018	-27.91	-28.54	1.297	0.0008	0.016	-28.71	-29.54	1.111	
16	0.0099	0.057	-13.42	-14.26	3.870	0.0103	0.051	-15.20	-15.82	4.009	0.0090	0.055	-13.96	-14.79	3.676	[82]
17	0.0014	0.021	-25.34	-26.18	1.278	0.0016	0.020	-26.31	-26.93	1.466	0.0009	0.018	-27.51	-28.34	1.002	
18	0.0001	0.008	-31.13	-32.69	0.382	0.0001	0.006	-33.33	-34.50	0.407	0.0002	0.009	-29.27	-30.83	0.476	
19	0.0083	0.027	-56.37	-53.82	5.408	0.0082	0.026	-58.44	-56.52	6.061	0.0032	0.017	-69.70	-67.14	3.162	[73]
20	0.0085	0.029	-50.39	-48.13	4.134	0.0079	0.027	-53.38	-51.69	2.711	0.0015	0.012	-73.16	-70.90	1.723	
21	0.0066	0.033	-31.42	-30.63	4.589	0.0075	0.033	-32.32	-31.73	4.945	0.0038	0.025	-36.49	-35.70	2.883	
22	0.0034	0.019	-62.24	-59.98	4.214	0.0086	0.028	-52.28	-50.58	5.885	0.0055	0.023	-56.07	-53.81	4.628	[83]
23	0.0346	0.066	-24.15	-22.56	30.469	0.0055	0.025	-46.41	-45.21	4.103	0.0077	0.031	-40.64	-39.05	7.387	
24	0.0417	0.068	-25.88	-23.94	20.330	0.0368	0.061	-29.40	-27.95	20.182	0.0308	0.059	-29.53	-27.59	16.653	
25	0.0947	0.116	-10.21	-9.00	144.965	0.0715	0.095	-15.03	-14.13	137.469	0.0460	0.081	-17.44	-16.23	62.101	[84]
26	0.0013	0.010	-96.88	-93.79	1.035	0.0047	0.018	-78.75	-76.43	2.018	0.0013	0.010	-97.00	-93.91	0.935	[85]
27	0.0068	0.028	-47.61	-45.68	3.771	0.0161	0.040	-39.32	-37.86	4.692	0.0042	0.022	-53.53	-51.59	2.443	
28	0.0051	0.024	-51.08	-49.14	3.147	0.0143	0.038	-40.77	-39.32	4.001	0.0050	0.024	-51.40	-49.46	2.766	
29	0.0059	0.029	-38.00	-36.79	4.769	0.0074	0.030	-37.69	-36.78	2.869	0.0031	0.021	-44.47	-43.26	2.763	[86]
30	0.0042	0.029	-29.65	-29.33	3.435	0.0147	0.050	-21.69	-21.45	6.166	0.0034	0.026	-31.39	-31.07	2.714	[87]
31	0.0053	0.033	-27.81	-27.49	4.452	0.0266	0.067	-16.94	-16.70	12.109	0.0048	0.031	-28.67	-28.36	3.802	
32	0.0048	0.031	-28.63	-28.31	3.322	0.0118	0.044	-23.45	-23.21	5.137	0.0050	0.032	-28.32	-28.00	3.249	
33	0.0059	0.034	-26.97	-26.65	3.259	0.0023	0.019	-36.64	-36.40	1.927	0.0025	0.022	-33.96	-33.64	1.879	[75]
34	0.0207	0.064	-16.94	-16.62	11.218	0.0394	0.081	-13.81	-13.57	17.161	0.0156	0.056	-19.24	-18.92	8.748	
35	0.0007	0.007	-116.05	-112.72	1.629	0.0029	0.014	-93.12	-90.62	4.217	0.0213	0.039	-57.37	-54.04	9.361	
36	0.0020	0.018	-42.09	-41.30	2.054	0.0085	0.035	-31.14	-30.55	7.084	0.0027	0.021	-39.39	-38.60	4.464	
37	0.0203	0.064	-17.11	-16.79	7.183	0.0439	0.086	-12.93	-12.70	11.322	0.0208	0.065	-16.91	-16.59	7.427	
38	0.0063	0.032	-31.81	-31.02	5.506	0.0187	0.052	-24.06	-23.46	6.958	0.0031	0.023	-38.26	-37.47	2.529	[54]
39	0.0015	0.010	-117.73	-113.95	1.212	0.0355	0.046	-59.48	-56.64	6.286	0.0010	0.008	-124.83	-121.06	0.785	

40	0.0019	0.011	-113.26	-109.48	1.471	0.0366	0.046	-58.85	-56.02	6.672	0.0009	0.008	-127.13	-123.35	1.036	
41	0.0199	0.045	-39.41	-37.15	10.148	0.0399	0.060	-32.34	-30.64	13.718	0.0175	0.042	-41.08	-38.82	6.638	[88]
42	0.0349	0.071	-20.22	-19.00	18.804	0.0296	0.061	-23.85	-22.94	15.783	0.0229	0.057	-24.43	-23.22	11.416	
43	0.0187	0.052	-26.46	-25.25	11.513	0.0244	0.055	-25.78	-24.87	12.389	0.0141	0.045	-29.24	-28.03	8.138	[89]
44	0.0178	0.050	-26.91	-25.70	12.228	0.0224	0.053	-26.64	-25.73	12.219	0.0118	0.041	-31.09	-29.88	7.612	
45	0.0216	0.052	-29.35	-27.75	31.762	0.0309	0.059	-27.41	-26.21	32.977	0.0296	0.061	-25.88	-24.29	20.147	[90]
46	0.0827	0.096	-17.68	-15.74	38.562	0.0619	0.079	-23.16	-21.70	34.758	0.0563	0.079	-22.29	-20.36	24.907	
47	0.0627	0.083	-20.99	-19.05	26.707	0.0548	0.074	-24.61	-23.15	27.514	0.0433	0.069	-25.44	-23.50	18.896	[91]
48	0.0925	0.092	-22.54	-19.98	26.879	0.0702	0.077	-28.40	-26.48	34.815	0.0188	0.041	-44.85	-42.30	22.982	[92]
49	0.0076	0.036	-30.13	-29.35	3.840	0.0027	0.020	-41.43	-40.84	1.903	0.0010	0.013	-48.30	-47.51	1.234	
50	0.0161	0.052	-23.38	-22.59	5.409	0.0016	0.015	-46.05	-45.46	1.478	0.0011	0.013	-47.73	-46.94	1.204	[93]
51	0.0083	0.046	-19.29	-19.50	4.609	0.0093	0.043	-20.53	-20.69	4.701	0.0006	0.012	-38.18	-38.40	1.014	
52	0.0107	0.042	-27.11	-26.32	4.684	0.0101	0.038	-29.62	-29.03	4.465	0.0017	0.017	-43.74	-42.95	1.614	[94]
53	0.0027	0.026	-27.04	-27.25	2.419	0.0028	0.024	-28.82	-28.99	2.313	0.0004	0.010	-40.95	-41.17	0.755	
54	0.0090	0.032	-44.33	-42.40	2.911	0.0090	0.030	-46.33	-44.88	2.911	0.0047	0.023	-52.01	-50.07	2.021	[95]
55	0.1842	0.152	-5.77	-4.18	27.254	0.0178	0.044	-33.46	-32.27	7.051	0.0118	0.038	-35.98	-34.39	6.169	[96]
56	0.0066	0.026	-53.64	-51.38	2.131	0.0009	0.009	-82.28	-80.59	0.888	0.0005	0.007	-86.97	-84.71	0.783	[97]
57	0.0123	0.042	-30.65	-29.44	5.434	0.0147	0.043	-30.82	-29.91	6.124	0.0059	0.029	-37.91	-36.70	3.674	[98]
58	0.0051	0.029	-33.76	-32.97	4.643	0.0069	0.031	-33.07	-32.48	4.390	0.0007	0.010	-52.20	-51.41	1.146	[99]
59	0.5984	0.155	-20.22	-14.89	519.213	0.0217	0.029	-115.13	-111.13	112.930	0.0251	0.032	-109.03	-103.70	117.447	[100]
60	0.0118	0.038	-35.99	-34.40	10.358	0.0190	0.046	-32.74	-31.55	9.581	0.0118	0.038	-36.04	-34.44	11.023	[101]
61	0.0123	0.049	-21.15	-20.83	10.982	0.0265	0.066	-16.98	-16.74	14.167	0.0058	0.034	-27.13	-26.81	5.476	
62	0.0026	0.023	-33.46	-33.14	3.958	0.0192	0.056	-19.58	-19.34	9.816	0.0019	0.019	-36.22	-35.90	2.803	[89]
63	0.0081	0.040	-24.46	-24.15	8.697	0.0213	0.060	-18.74	-18.50	12.229	0.0033	0.026	-31.55	-31.23	4.243	
64	0.0024	0.016	-59.92	-57.98	1.570	0.0087	0.030	-46.65	-45.19	3.047	0.0036	0.020	-55.29	-53.35	2.407	[102]
65	0.0039	0.028	-30.28	-29.96	3.914	0.0171	0.053	-20.48	-20.24	8.256	0.0015	0.017	-37.86	-37.54	1.376	
66	0.0000	NaN	-29.40	-33.01	0.042	0.0000	0.000	-122.48	-125.18	0.019	0.0000	NaN	-196.14	-199.74	0.018	
67	0.0001	0.005	-43.81	-44.65	0.262	0.0004	0.010	-34.60	-35.22	0.742	0.0002	0.008	-36.77	-37.61	0.602	
68	0.0000	NaN	-19.72	-23.33	0.177	0.0000	0.004	-21.72	-24.43	0.177	0.0000	NaN	-202.37	-205.98	0.015	[103]
69	0.0035	0.059	-8.84	-11.29	2.356	0.0004	0.015	-19.04	-20.89	1.030	0.0001	0.011	-21.97	-24.43	0.507	
70	0.0160	0.073	-10.53	-11.36	7.223	0.0289	0.085	-8.98	-9.61	8.937	0.0142	0.069	-11.23	-12.07	6.259	
71	0.0101	0.041	-27.64	-26.85	2.955	0.0098	0.037	-29.89	-29.30	3.553	0.0008	0.011	-50.77	-49.98	1.185	
72	0.0053	0.030	-33.48	-32.69	2.397	0.0055	0.028	-35.11	-34.52	2.983	0.0009	0.012	-49.08	-48.29	1.122	[104]
73	0.0038	0.025	-36.48	-35.69	2.109	0.0040	0.024	-38.03	-37.44	2.686	0.0001	0.005	-66.97	-66.18	0.449	
74	0.0125	0.046	-25.65	-24.86	8.410	0.0391	0.075	-17.42	-16.82	13.149	0.0066	0.033	-31.43	-30.64	4.462	[105]
75	0.0054	0.042	-17.05	-17.88	3.379	0.0136	0.058	-13.50	-14.12	5.097	0.0048	0.040	-17.71	-18.55	3.488	
76	0.0022	0.027	-22.50	-23.33	2.723	0.0091	0.048	-15.89	-16.52	5.490	0.0037	0.035	-19.27	-20.10	3.195	
77	0.0026	0.029	-21.52	-22.35	3.252	0.0114	0.053	-14.55	-15.18	5.710	0.0001	0.007	-39.18	-40.01	0.459	[106]
78	0.0006	0.014	-30.00	-30.83	1.226	0.0033	0.029	-22.05	-22.68	2.266	0.0003	0.011	-33.61	-34.44	0.785	
79	0.0064	0.027	-48.45	-46.51	2.234	0.0009	0.009	-73.93	-72.48	0.957	0.0005	0.008	-78.14	-76.20	0.842	[97]
80	0.0007	0.010	-59.22	-58.01	0.719	0.0010	0.011	-57.65	-56.74	0.976	0.0002	0.006	-71.10	-69.89	0.464	[101]
Просечно	0.0220	0.0418	-31.6370	-32.5602	13.3648	0.0150	0.0384	-34.5979	-33.1499	9.6759	0.0078	0.0287	-44.6264	-44.0571	6.4345	

Из табеле квантитативних показатеља оцена модела може се уочити да Модел 3 даје најбоље резултате, што показују и најниже просечне вредности свих квантитативних показатеља овог модела. Код више од 65% узорака сви квантитативни показатељи Модела 3 имају ниже вредности у односу на квантитативне показатеље Модела 1 и Модела 2.

Напомена: У графичим приказима квантитативних показатеља изостављени су резултати за узорке 25 и 59 јер у сва три модела дају екстремно велике вредности.



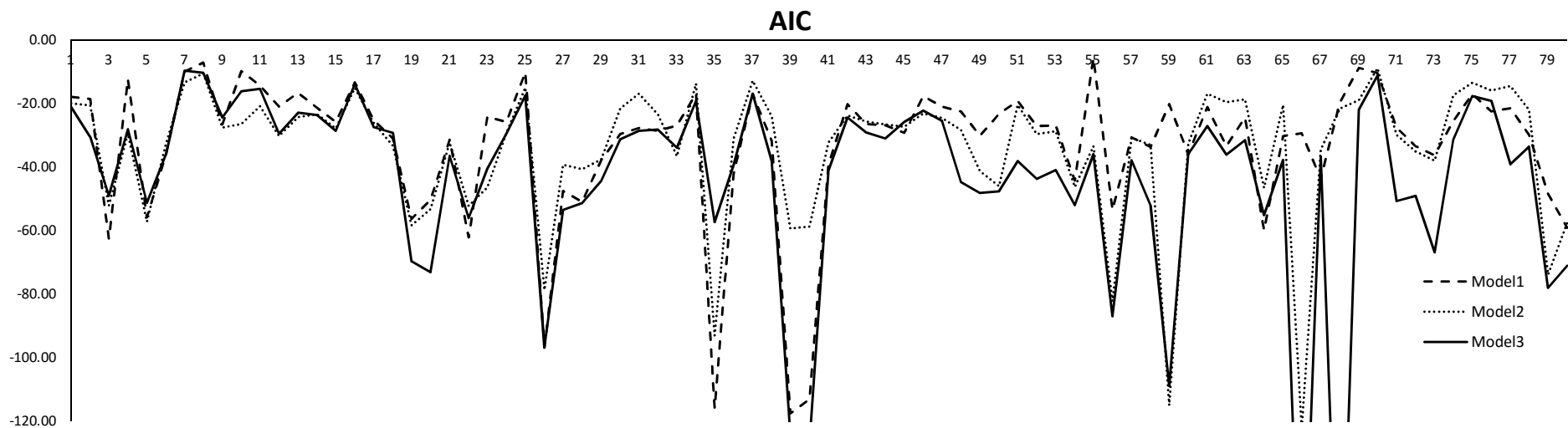
Слика 24. Графички приказ резидуалних сума квадрата (RSS) проверених на разним биљним материјалима Модел 1 ---, Модел 2 ... и Модел 3 ___ (X оса: редни број узорка, а Y оса: вредности RSS)

Графички приказ резидуалних сума квадрата показује да Модел 3 у највећем броју случајева даје или најбоље резултате или резултате који су најближи вредностима најбољег модела у одговарајућем узорку.



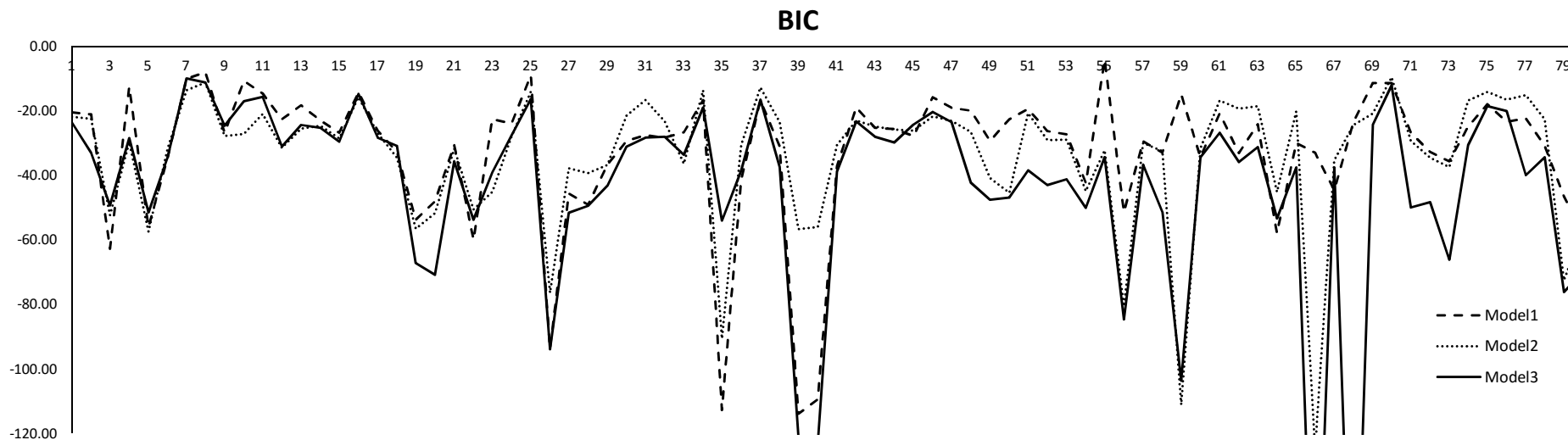
Слика 25. Графички приказ резидуалних стандардних грешака (RSE) проверених на разним биљним материјалима Модел 1 ---, Модел 2 ... и Модел 3 __ (X оса: редни број узорка, а Y оса: вредности RSE)

Резидуалне стандардне грешке приказане на слици 25 су најмање код Модела 3 у највећем броју случајева.



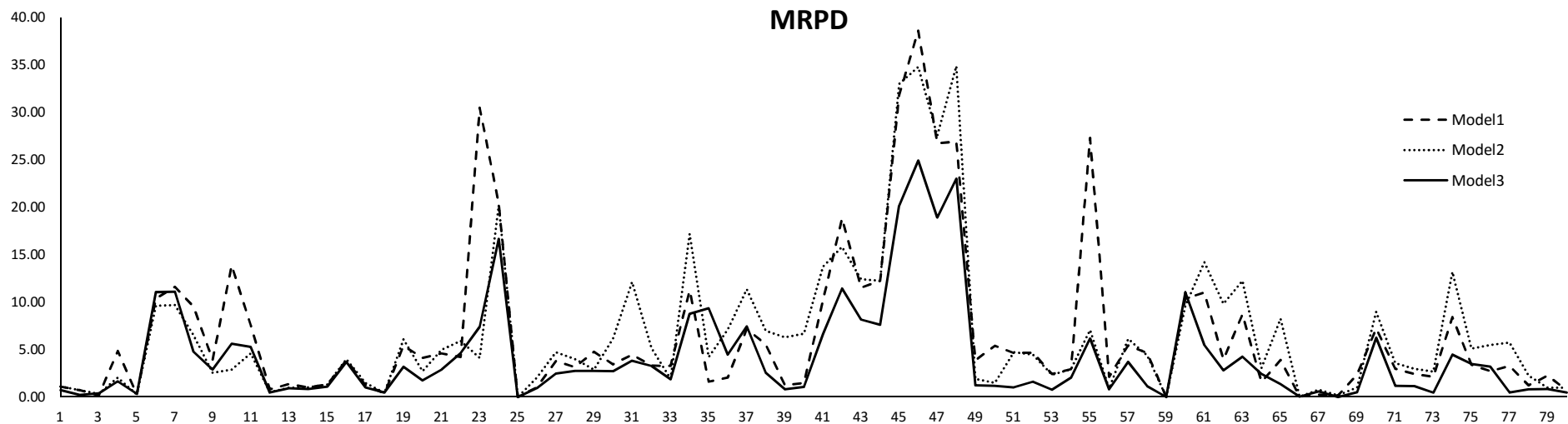
Слика 26. Графички приказ Акаикеовог информационог критеријума (AIC) провереног на разним биљним материјалима
 Модел 1 ---, Модел 2 ... и Модел 3 __ (X оса: редни број узорка, а Y оса: вредности AIC)

Са графичког приказа Акаикеовог информационог критеријума уочава се да Модел 3 остварује најниже вредности. Неке од екстремно ниских вредности излазе изван опсега вредности приказаних графиком.



Слика 27. Графички приказ Бајесовог информационог критеријума (BIC) провереног на разним биљним материјалима
 Модел 1 ---, Модел 2 ... и Модел 3 __ (X оса: редни број узорка, а Y оса: вредности BIC)

Бајесов информациони критеријума, примењен на моделима 1, 2 и 3 показује да Модел 3 даје најниже вредности, тј. најбоље резултате.



Слика 28. Графички приказ средње релативног процентног одступања (MRPD) провереног на разним биљним материјалима Модел 1 ---, Модел 2 ... и Модел 3 __ (X оса: редни број узорка, а Y оса: вредности MRPD)

Графикон средњег релативног процентног одступања показује предност Модела 3 над друга два модела с обзиром да он даје најниже вредности.

Посматрањем добијених резултата (Табела 7, Табела 8) може се закључити да су сви квантитативни показатељи у већини разматраних узорака најмањи за Модел 3, што показују и најмање просечне вредности свих квантитативних показатеља за овај модел (мање вредности квантитативних показатеља указују на бољи модел).

6. Процена потенцијално укупне количине издвојеног етарског уља

Параметар који је присутан у свим до сад познатим моделима кинетике хидродестилације етарског уља јесте q_{∞} - принос етарског уља у бесконачном времену, тј. укупна процењена количина етарског уља које се налази у биљном материјалу. У радовима који се односе на кинетику хидродестилације етарског уља не наводи се могућност нумеричког одређивања параметра q_{∞} . Параметар q_{∞} се одређује тако што се процес хидродестилације „пусти да тече“ више сати (код неких биљних материјала десет и више сати) како би се мерењем укупне количине издвојеног етарског уља након тог времена дошло до жељеног податка.

Одређивање потенцијално укупне количине издвојеног етарског уља је веома скуп и захтеван процес који би требало изводити за сваки биљни материјал са сличним карактеристикама. Наиме, за једну биљну врсту није могуће установити вредност параметра q_{∞} као константу. То управо произилази из чињенице да на принос етарског уља неке биљне врсте утиче велики број фактора као што су: време прикупљања биљног материјала, географско порекло, станиште, велики број еколошких фактора (тип земљишта, клима) итд. [52, 55, 56, 57].

6.1. Модел

Математички посматрано, наведени модели Модел 1 (66) и Модел 2 (67) имају три, односно два непозната параметра, уколико се претпостави да је параметар q_{∞} раније одређен експериментално. Међутим, уколико параметар q_{∞} не би био познат, онда наведени модели постају, респективно, четворопараметарски, односно тропараметарски.

Модел 1 - модел Совова-Алексовски

$$q = q_{\infty} \left(1 - f e^{-\frac{t}{T_1}} - (1 - f) e^{-\frac{t}{T_2}} \right) \quad (71)$$

где су: f, T_1, T_2 и q_{∞} параметри модела

Модел 2 - модел Милојевића

$$q = q_{\infty} (1 - (1 - b) e^{-kt}) \quad (72)$$

где су: k, b и q_{∞} параметри модела

За разлику од њих Модел 3 (69) је у оба случаја тропараметарски, што ће бити показано надаље.

Модел 3 - полиномно логаритамски модел

$$q = q_{\infty}(a \cdot (\log t)^2 + b \cdot \log t + c) \quad (73)$$

Односно, ако се узме да је $a_1 = a \cdot q_{\infty}$, $b_1 = b \cdot q_{\infty}$ и $c_1 = c \cdot q_{\infty}$, онда Модел 3 постаје

$$q = a_1 \cdot (\log t)^2 + b_1 \cdot \log t + c_1 \quad (74)$$

Из једначина (73) и (74) се може видети да је параметар q_{∞} постао саставни део параметара a_1 , b_1 и c_1 . То значи да познавање вредности параметра q_{∞} није предуслов за одређивање параметара модела (a_1, b_1, c_1). Вредности параметара a_1, b_1 и c_1 се могу одредити нелинеарном регресијом за сваки узорак на основу првих неколико експерименталних мерења.

На основу овако одређених параметара a_1, b_1 и c_1 , непозната вредност q_{∞} се одређује када се у једначини (74) променљива t замени конкретном вредношћу, а то је максимално време за које је експерименталним путем одређена вредност параметра q_{∞} . За узорке из табеле 1 (биљни материјал - клека) за t је узето максимално време коришћено у експериментима за процес хидродестилације етарског уља из бобица клеке ($t = 600 \text{ min}$), док је за друге биљне материјале (Табела 4) као максимално време узимана вредност из обрађених експеримената.

6.2. Резултати процењене вредности за q_{∞} и поређење одређених вредности са експериментално добијеним резултатима

У табелама 9 и 10 дате су вредности параметара модела (a_1, b_1 и c_1) и процењене вредности потенцијално укупне количине етарског уља за сваки обрађени узорак током процеса хидродестилације.

Оцена прецизности предвиђених вредности потенцијално укупне количине етарског уља (q_{∞}) у биљном материјалу је израчуната на основу поређења тих вредности са експерименталним резултатима

Параметри модела и процењене вредности укупне количине етарског уља добијени су само на основу неколико мерених вредности у почетној фази сваког експеримента. Параметри и процењене вредности за узорке који се односе на етарско уље издвојено из бобица клеке, одређени су на основу вредности мерења количине етарског уља у првих 25 минута процеса хидродестилације, а за узорке који се односе на етарско уље издвојено из различитих биљних материјала, на основу вредности из прва четири мерења.

Релативно мале разлике и мале релативне грешке које се могу уочити за велики број узорака указују на то да нумерички израчунате вредности дају задовољавајућа поклапања са експерименталним вредностима. На то указују и мале просечне вредности како разлике, тако и релативне грешке.

Такође је могуће визуелно уочити добро поклапање процењених и експерименталних података за вредности потенцијално укупне количине етарског уља и за резултате провераване на клеки и за резултате провераване на различитим биљним материјалима (Слика 29, Слика 31).

За експерименталну вредност променљиве q_{∞} код свих узорака је узета последња измерена вредност количине етарског уља у тренутку t_p завршетка процеса хидродестилације и надаље у раду ће бити означена са (q_{∞}^E) .

У овом раду вредност параметра q_{∞} је процењена на основу мерења количине издвојеног етарског уља у првих 25 минута процеса хидродестилације. Та вредност је нумерички израчуната за константно време трајање процеса хидродестилације од $t_{\infty} = 600 \text{ min}$ и у складу са тим је обележена са $q_{\infty}(t_{\infty})$. Такође вредност параметра q_{∞} је нумерички израчуната и за време које одговара тренутку када је извршено последње мерење количине издвојеног етарског уља за сваки експеримент, што је обележено са $q_{\infty}(t_p)$.

Табела 9. Преглед параметара модела и поређење процењених са експериментално добијеним вредностима потенцијално укупне количине етарског уља за узорке који се односе на хидродестилацију етарског уља из клекe.

Узорак број	a_1	b_1	c_1	$q_{\infty}(t_{\infty})$	t_p	$q_{\infty}(t_p)$	q_{∞}^E	Разлика		Релативна грешка		Реф.
								$q_{\infty}(t_{\infty}) q_{\infty}^E$	$q_{\infty}(t_p) q_{\infty}^E$	$q_{\infty}(t_{\infty}) q_{\infty}^E$	$q_{\infty}(t_p) q_{\infty}^E$	
1	0.440	4.250	-0.050	15.15	600	15.15	15.3	0.15	0.15	0.97%	0.97%	[52]
2	-2.420	17.620	-5.420	24.85	360	23.81	24.2	-0.65	0.39	2.63%	1.65%	
3	-1.820	14.290	-2.350	23.30	360	22.29	22.0	-1.30	-0.29	5.59%	1.29%	
4	-2.990	19.180	-10.650	19.56	360	18.84	19.2	-0.36	0.36	1.83%	1.90%	
5	0.064	7.818	-0.970	21.24	360	19.43	18.1	-3.14	-1.33	14.78%	6.85%	
6	-0.630	9.770	-0.610	21.67	360	20.25	20.9	-0.77	0.65	3.55%	3.22%	
7	-0.910	9.830	0.230	20.52	360	19.41	18.6	-1.92	-0.81	9.34%	4.18%	
8	-3.680	21.430	-8.970	22.16	360	21.76	24.2	2.04	2.44	9.19%	11.19%	
9	-4.120	24.490	-9.760	26.48	360	25.92	26.2	-0.28	0.28	1.05%	1.08%	
10	-3.680	21.430	-8.970	22.16	360	21.76	24.4	2.24	2.64	10.09%	12.11%	
11	-2.990	17.280	-5.670	19.26	120	17.33	18.6	-0.66	1.27	3.42%	7.31%	
12	2.920	1.150	6.600	32.33	120	21.61	21.6	-10.73	-0.01	33.19%	0.07%	
13	-1.380	14.030	1.720	30.05	120	24.93	22.2	-7.85	-2.73	26.11%	10.93%	
14	-1.910	14.270	-0.560	24.34	120	20.85	20.3	-4.04	-0.55	16.61%	2.65%	
15	-1.070	10.850	-4.350	17.53	240	15.41	12.7	-4.83	-2.71	27.57%	17.60%	
16	-3.040	17.260	-5.600	18.89	600	18.89	17.7	-1.19	-1.19	6.29%	6.29%	
17	-2.700	13.860	-1.390	16.28	120	15.76	15.7	-0.58	-0.06	3.54%	0.35%	
18	-2.070	15.650	-1.100	26.40	600	26.40	27.0	0.60	0.60	2.27%	2.27%	
19	-0.100	11.300	0.140	30.76	360	28.37	22.3	-8.46	-6.07	27.51%	21.40%	
20	-0.930	12.060	1.750	28.08	360	26.50	23.3	-4.78	-3.20	17.01%	12.08%	
21	-3.430	20.130	-8.130	21.32	360	20.91	21.3	-0.02	0.39	0.10%	1.84%	
22	-1.460	13.280	-0.740	24.89	360	23.67	21.7	-3.19	-1.97	12.80%	8.31%	
23	-2.240	15.710	-4.600	21.76	360	20.92	21.3	-0.46	0.38	2.10%	1.81%	
24	-2.930	17.640	-5.850	20.54	360	20.10	21.7	1.16	1.60	5.63%	7.98%	
25	-2.680	15.900	-0.990	22.50	360	22.14	23.7	1.20	1.56	5.34%	7.04%	
26	-2.510	17.940	-6.060	24.41	360	23.40	22.0	-2.41	-1.40	9.86%	5.97%	
27	0.720	7.600	4.660	31.33	360	28.79	24.3	-7.03	-4.49	22.44%	15.60%	
28	-3.090	19.500	-2.490	27.83	300	26.85	27.3	-0.53	0.45	1.92%	1.66%	
29	-1.920	14.630	-2.350	23.48	360	22.50	23.7	0.22	1.20	0.96%	5.32%	
30	-0.440	10.120	-1.670	23.05	360	21.32	19.3	-3.75	-2.02	16.27%	9.49%	
31	-1.350	10.880	-2.890	16.92	360	16.10	16.7	-0.22	0.60	1.28%	3.72%	
32	-1.890	10.970	-1.360	14.53	240	14.04	15.3	0.77	1.26	5.31%	8.95%	
33	-1.660	12.140	-2.390	18.52	240	17.10	18.0	-0.52	0.90	2.83%	5.26%	
34	0.240	5.870	-2.200	15.96	240	13.13	13.3	-2.66	0.17	16.67%	1.28%	
35	1.780	3.970	1.890	26.66	240	21.42	18.0	-8.66	-3.42	32.48%	15.98%	
36	-1.150	10.470	-3.680	16.53	480	16.13	16.7	0.17	0.57	1.02%	3.56%	
37	0.100	6.570	0.700	19.72	480	19.03	19	-0.72	-0.03	3.67%	0.18%	
38	1.350	7.210	-2.030	28.42	240	22.78	21.7	-6.72	-1.08	23.65%	4.74%	

39	-1.040	13.740	-0.430	29.71	240	26.38	24.7	-5.01	-1.68	16.88%	6.38%	
40	-4.490	23.650	-6.800	24.25	240	24.05	23.7	-0.55	-0.35	2.26%	1.47%	
41	0.120	9.530	-1.400	26.00	360	23.75	24.3	-1.70	0.55	6.55%	2.33%	
42	-2.810	21.120	-7.980	29.01	360	27.65	23.3	-5.71	-4.35	19.67%	15.72%	
43	-0.360	12.270	-4.030	27.28	360	24.98	21.7	-5.58	-3.28	20.45%	13.14%	
44	-1.770	13.400	-0.630	22.94	360	22.06	22.3	-0.64	0.24	2.77%	1.10%	
45	-2.870	21.070	-6.490	29.89	360	28.62	29	-0.89	0.38	2.99%	1.34%	
46	-6.730	38.670	-25.940	29.55	360	28.93	27.3	-2.25	-1.63	7.61%	5.65%	
47	-4.140	24.300	-13.540	22.02	360	21.52	23	0.98	1.48	4.47%	6.85%	
48	-2.450	16.680	-7.910	19.52	360	18.72	20.7	1.18	1.98	6.04%	10.58%	
49	-3.250	20.140	-4.910	25.96	360	25.34	26.3	0.34	0.96	1.32%	3.80%	
50	-1.640	14.380	-2.700	24.59	360	23.34	25	0.41	1.66	1.66%	7.10%	
51	-3.780	22.300	-6.210	26.57	240	25.45	25.7	-0.87	0.25	3.27%	0.97%	
52	-3.640	21.080	-4.470	26.00	240	25.08	25.7	-0.30	0.62	1.15%	2.46%	
53	-0.100	11.040	-0.660	29.24	240	25.05	22.3	-6.94	-2.75	23.73%	10.98%	
54	-2.630	17.110	-3.970	23.27	240	21.86	22.7	-0.57	0.84	2.43%	3.86%	
55	-2.490	16.390	-4.590	21.73	240	20.31	22	0.27	1.69	1.26%	8.30%	
56	-3.951	23.362	-6.712	27.70	240	26.51	25	-2.70	-1.51	9.75%	5.71%	
57	-7.950	31.800	-6.720	26.00	240	23.93	25	-1.00	1.07	3.85%	4.47%	
58	-2.770	17.420	0.270	27.29	240	26.04	24.3	-2.99	-1.74	10.94%	6.68%	
59	-2.240	15.620	-0.980	25.13	240	23.51	24.4	-0.73	0.89	2.89%	3.79%	
60	0.270	9.010	3.730	30.85	240	26.71	24.4	-6.45	-2.31	20.89%	8.63%	
61	-3.460	21.160	-3.400	28.68	240	27.36	25.4	-3.28	-1.96	11.44%	7.17%	
62	-2.510	16.220	0.660	26.35	240	25.05	25.1	-1.25	0.05	4.74%	0.21%	
63	-0.090	10.176	3.900	31.48	240	27.61	25.1	-6.38	-2.51	20.26%	9.09%	
64	-4.000	22.940	-5.750	27.11	240	26.19	24.4	-2.71	-1.79	9.99%	6.84%	
65	-4.290	24.530	-6.320	28.72	240	27.76	24.1	-4.62	-3.66	16.08%	13.19%	
66	-0.700	10.490	0.630	24.37	240	21.63	21.4	-2.97	-0.23	12.19%	1.08%	
67	-0.780	10.490	0.890	24.01	240	21.44	21.8	-2.21	0.36	9.21%	1.68%	
68	-3.310	18.190	-3.260	21.73	240	21.28	24.1	2.37	2.82	10.92%	13.23%	
69	-2.770	16.870	-3.140	22.35	240	21.32	23.1	0.75	1.78	3.36%	8.34%	
70	-1.810	15.610	-2.370	27.03	240	24.53	25.1	-1.93	0.57	7.13%	2.32%	
71	-1.040	13.900	-2.220	28.37	240	24.97	24.1	-4.27	-0.87	15.05%	3.50%	
72	-4.050	22.910	-11.720	20.67	240	19.87	21.4	0.73	1.53	3.54%	7.72%	
73	-5.650	30.200	-18.500	21.79	240	21.37	21.4	-0.39	0.03	1.80%	0.13%	
74	-2.110	13.550	3.860	25.22	240	24.16	23.4	-1.82	-0.76	7.21%	3.14%	
75	-2.580	14.580	2.060	22.65	240	22.15	22.8	0.15	0.65	0.65%	2.95%	
76	-6.540	36.500	-23.510	27.42	240	26.32	24.8	-2.62	-1.52	9.54%	5.76%	
77	-5.880	34.880	-19.520	32.00	240	30.19	24.4	-7.60	-5.79	23.75%	19.18%	
78	-13.318	57.000	-29.642	25.92	240	30.58	25.4	-0.52	-5.18	2.01%	16.93%	
79	-11.576	52.047	-26.731	28.52	240	31.57	25.4	-3.12	-6.17	10.94%	19.55%	
80	-11.530	52.180	-30.120	25.85	240	28.76	24.1	-1.75	-4.66	6.78%	16.20%	
Просечно								-2.06	-0.62	9.33%	6.55%	

[76]

[77]

[79]

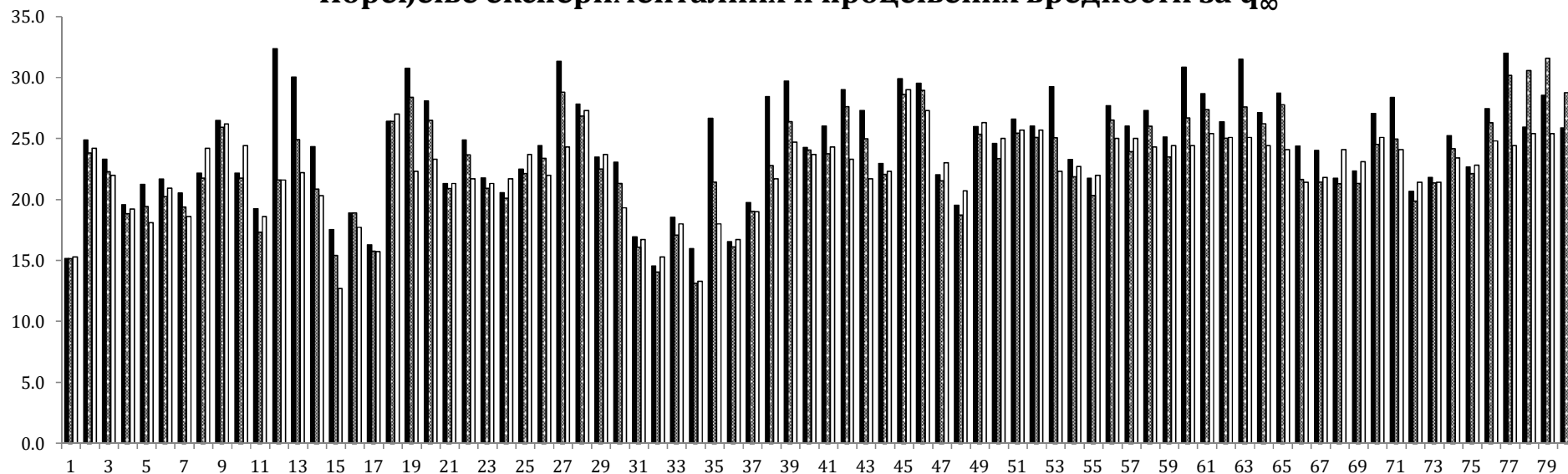
Процењене вредности потенцијално укупне количине издвојеног етарског уља дају веома добро слагање са експериментално одређеним вредностима не само у случају када се за време узме вредност од 600 минута, већ и када се време поклапа са дужином трајања процеса хидродестилације.

У више од 65% узорака при израчунавању $q_{\infty}(t_{\infty})$ добијена грешка је мања од 10%, а при израчунавању $q_{\infty}(t_p)$ у више од 77% случајева добија се грешка мања од 10%.

Нешто боље слагање се постиже када се процењује потенцијално укупна количина етарског уља до тренутка до ког је процес хидродестилације извођен ($q_{\infty}(t_p)$). У том случају просечна релативна грешка износи 6.55%.

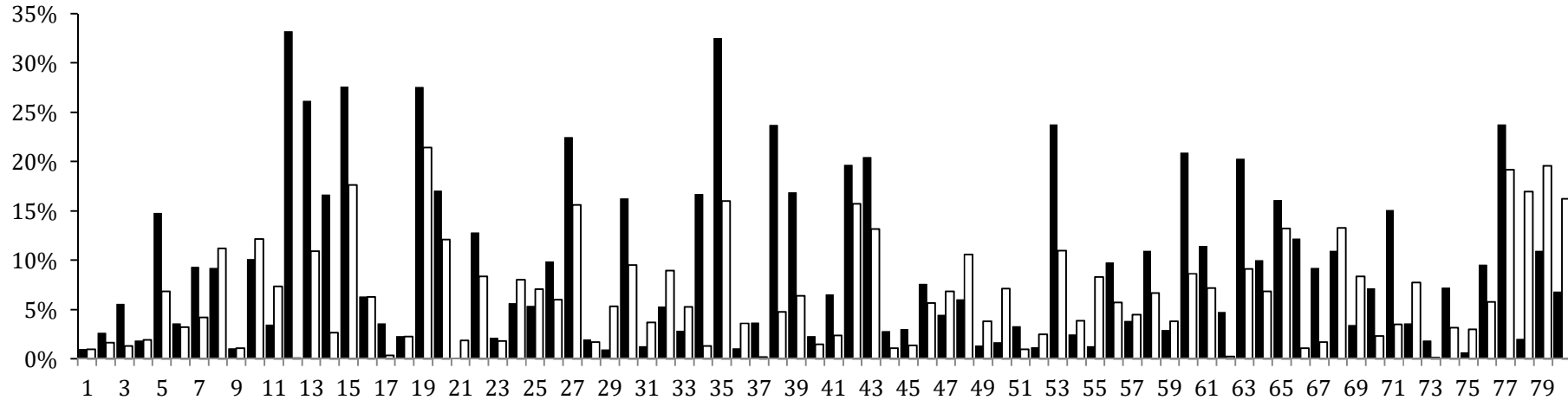
Уколико се вредност параметра q_{∞} одређује у 600-том минути ($q_{\infty}(t_{\infty})$) (иако је експериментална вредност измерена знатно пре - у неким узорцима већ у 120-ом минути) у просеку се прави грешка од 9.33% што показује одлично слагање имајући у виду да се за процену параметра q_{∞} користе само мерења из првих 25 минута извођења процеса хидродестилације.

Поређење експерименталних и процењених вредности за q_∞



Слика 29. Графички приказ експерименталних (црни стубићи ($q_\infty(t_\infty)$), шрафирани стубићи ($q_\infty(t_p)$)) и процењених вредности (бели стубићи) параметра q_∞ проверених на клеки (X оса: редни број експеримента, а Y оса: вредности параметара q_∞)

Релативна грешка



Слика 30. Процент релативне грешке параметара q_∞ (црни стубићи ($q_\infty(t_\infty)$), бели стубићи ($q_\infty(t_p)$)) проверених на клеки (X оса: редни број експеримента, а Y оса: % релативне грешке)

Због веома малог броја података о количини издвојеног етарског уља у почетном делу процеса хидродестилације за узорке који се односе на хидродестилацију етарског уља из различитих биљних материјала, процена параметра q_∞ је урађена на основу прва четири мерења у сваком експерименту.

Мали број измерених вредности (код неких узорака чак само 3 или 4 укупно) у дугим временским размацама за узорке из различитих биљних материјала, има за последицу нешто лошије резултате процењених вредности потенцијално укупне количине етарског уља. У свим експериментима за t_∞ је узимано време последњег измереног узорка.

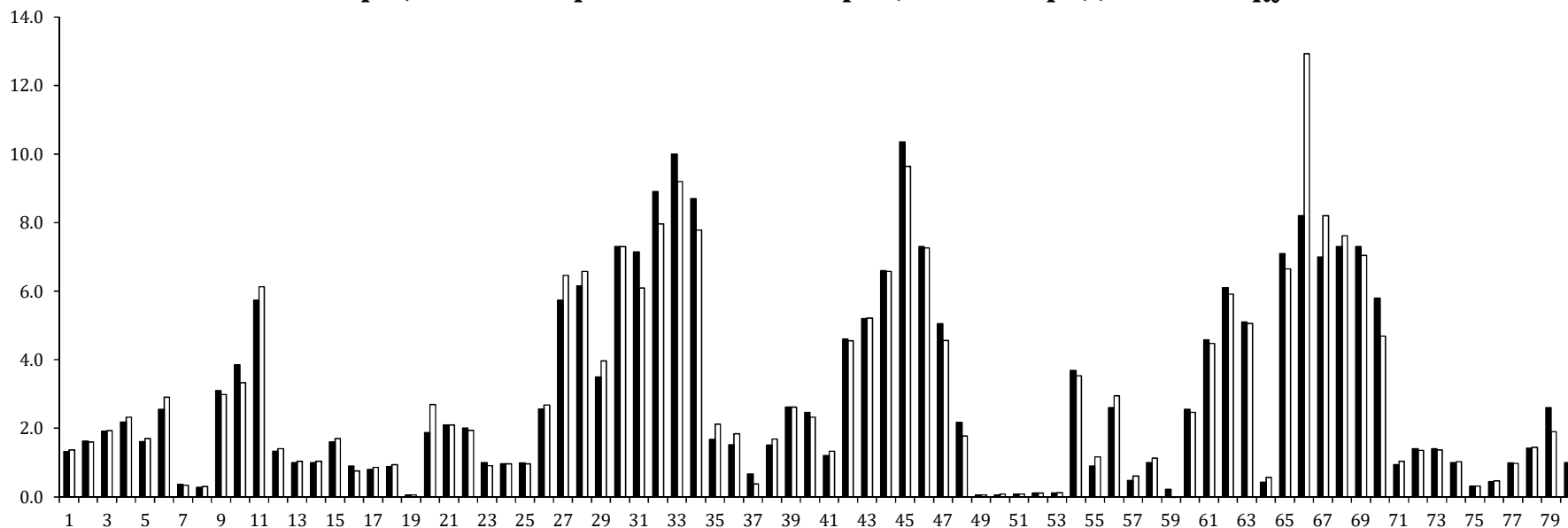
Табела 10. Преглед параметара модела и поређење процењених са експериментално добијеним вредностима потенцијално укупне количине етарског уља за узорке који се односе на хидродестилацију етарског уља из различитих биљних материјала.

Узорак број	a_1	b_1	c_1	Процењена вредност за q_{∞} [g]	Време трајања Хидродестилације [min]	Експеримант. Вредност за q_{∞} [g]	Разлика [g]	Релативна грешка	Реф.
1	-0.133	1.063	-0.271	1.36	120	1.32	0.05	3.48%	[70]
2	-0.047	0.521	0.723	1.60	120	1.62	-0.02	1.17%	
3	-0.589	2.410	-0.536	1.93	105	1.92	0.01	0.57%	
4	0.668	-1.274	2.175	2.33	105	2.19	0.14	6.30%	[71]
5	-0.292	1.539	-0.236	1.70	120	1.61	0.09	5.65%	[72]
6	-0.179	2.430	-1.337	2.90	114	2.55	0.35	13.88%	[64]
7	0.000	0.266	-0.106	0.33	45	0.36	-0.03	7.22%	[81]
8	0.122	-0.103	0.134	0.30	45	0.28	0.02	6.07%	
9	-0.470	4.150	-4.410	2.99	300	3.10	-0.10	3.35%	[69]
10	-1.400	7.870	-7.580	3.32	300	3.85	0.05	1.36%	
11	0.000	4.485	-4.984	6.13	300	5.73	0.40	6.99%	
12	0.000	0.332	0.679	1.40	150	1.33	0.07	5.41%	
13	0.000	0.266	0.457	1.04	150	1.00	0.04	3.60%	[68]
14	-0.339	1.769	-1.202	1.04	150	1.00	0.04	4.00%	
15	1.046	-3.105	3.704	1.70	105	1.60	0.10	6.37%	
16	0.000	0.170	0.418	0.76	105	0.90	-0.14	15.22%	
17	-0.523	2.432	-1.921	0.86	105	0.80	0.06	7.25%	[82]
18	-0.461	2.213	-1.709	0.94	180	0.89	0.05	5.28%	
19	0.019	-0.041	0.027	0.06	540	0.06	0.00	3.51%	
20	1.900	-4.100	2.700	2.69	143	1.88	0.09	5.00%	[73]
21	-0.187	1.871	-1.074	2.10	145	2.10	0.00	0.10%	
22	0.640	-0.522	0.184	1.94	130	2.00	-0.06	3.10%	
23	0.000	0.831	-0.781	0.92	110	1.00	-0.09	8.50%	[83]
24	0.778	-1.112	0.474	0.96	60	0.96	0.00	0.42%	
25	1.244	-2.132	0.988	0.96	50	0.99	-0.03	3.33%	
26	-0.541	3.756	-3.506	2.68	480	2.56	0.11	4.34%	[84]
27	-1.149	6.711	-3.008	6.46	240	5.73	0.73	12.69%	[85]
28	-1.591	8.026	-3.511	6.58	240	6.15	0.43	7.02%	
29	1.257	-0.845	-0.146	3.97	150	3.50	0.47	13.43%	[86]
30	3.312	-5.133	3.656	7.30	120	7.30	0.00	0.01%	[87]
31	3.189	-4.972	2.637	6.09	120	7.15	-1.07	14.91%	
32	1.212	1.602	-0.610	7.96	120	8.90	-0.94	10.57%	
33	0.000	4.980	-1.160	9.19	120	10.00	-0.80	8.00%	
34	6.030	-12.340	7.380	7.79	120	8.70	-0.92	10.57%	[75]
35	0.347	0.393	0.110	2.12	81	1.68	0.44	26.37%	
36	0.301	0.295	0.076	1.84	95	1.52	0.32	20.72%	
37	0.000	0.288	-0.121	0.38	53	0.67	-0.11	16.42%	
38	-0.289	1.343	0.257	1.69	45	1.51	0.18	11.66%	

39	-0.434	2.550	-1.058	2.62	340	2.62	0.00	0.19%	[54]
40	-0.444	2.353	-0.789	2.32	350	2.46	-0.14	5.57%	
41	0.741	-0.171	0.084	1.33	26	1.20	0.13	10.50%	[88]
42	2.620	-3.200	1.150	4.55	80	4.60	-0.04	0.91%	
43	3.040	-3.920	1.660	5.21	80	5.20	0.02	0.35%	[89]
44	3.660	-4.390	1.680	6.58	80	6.60	-0.02	0.30%	
45	-1.390	6.750	1.470	9.65	207	10.35	-0.69	6.67%	[90]
46	5.300	-13.060	8.320	7.26	240	7.30	-0.04	0.58%	[91]
47	3.370	-8.450	5.590	4.57	240	5.05	-0.49	9.64%	
48	0.606	-0.911	0.411	1.78	270	2.17	-0.39	17.88%	[92]
49	-0.051	0.271	-0.299	0.06	300	0.06	0.00	0.00%	[93]
50	0.028	-0.022	-0.029	0.09	300	0.06	0.03	53.45%	
51	0.042	-0.034	0.040	0.09	37	0.09	0.00	3.23%	
52	0.051	-0.050	0.052	0.11	47	0.11	0.00	0.00%	[94]
53	0.020	0.038	0.009	0.12	37	0.11	0.00	3.51%	
54	-0.458	3.641	-2.348	3.53	180	3.68	-0.15	4.02%	[95]
55	0.000	1.548	-1.864	1.16	90	0.90	0.26	29.00%	[96]
56	-2.722	14.872	-17.336	2.95	430	2.61	0.34	13.14%	[97]
57	-1.742	6.596	-5.615	0.61	60	0.48	0.13	26.04%	[98]
58	-0.233	1.113	-0.114	1.13	60	1.00	0.13	12.80%	[99]
59	-1.857	3.880	-1.811	-0.02	25	0.22	-0.01	4.02%	[100]
60	0.401	0.416	-0.091	2.46	114	2.55	-0.09	3.49%	[101]
61	4.940	-16.790	18.690	4.48	64	4.58	-0.43	9.39%	
62	5.910	-20.740	24.090	5.91	64	6.10	-0.49	8.02%	[89]
63	5.400	-18.830	21.460	5.07	64	5.10	0.18	2.90%	
64	0.015	0.257	-0.067	0.56	150	0.43	0.13	30.93%	[102]
65	-1.577	9.499	-7.391	6.65	400	7.10	-0.45	6.35%	
66	0.000	5.980	-0.083	12.93	150	8.20	0.47	57.68%	
67	0.000	3.066	1.727	8.21	130	7.00	1.21	17.27%	[103]
68	0.000	2.058	3.597	7.62	90	7.30	0.32	4.38%	
69	0.000	1.661	4.047	7.05	64	7.30	-0.25	3.47%	
70	-5.242	16.214	-6.772	4.69	100	5.80	-0.05	0.86%	
71	0.386	-0.626	0.342	1.04	240	0.94	0.10	10.64%	
72	0.166	0.225	-0.114	1.36	240	1.41	-0.05	3.55%	[104]
73	0.138	0.365	-0.280	1.37	240	1.41	-0.04	2.84%	
74	-0.253	1.300	-0.629	1.03	240	1.00	0.03	3.20%	[105]
75	0.000	0.266	-0.293	0.31	180	0.31	0.00	0.97%	
76	0.257	-0.571	0.443	0.46	180	0.44	0.02	5.00%	[106]
77	0.483	-1.007	0.794	0.98	180	0.99	-0.01	1.11%	
78	0.000	1.130	-1.098	1.45	180	1.42	0.03	2.04%	
79	-5.444	25.781	-28.264	1.91	418	2.61	-0.35	13.45%	[97]
80	-0.096	0.685	-0.004	1.03	150	1.00	0.03	4.00%	[101]
просечно							0.03	10.92%	

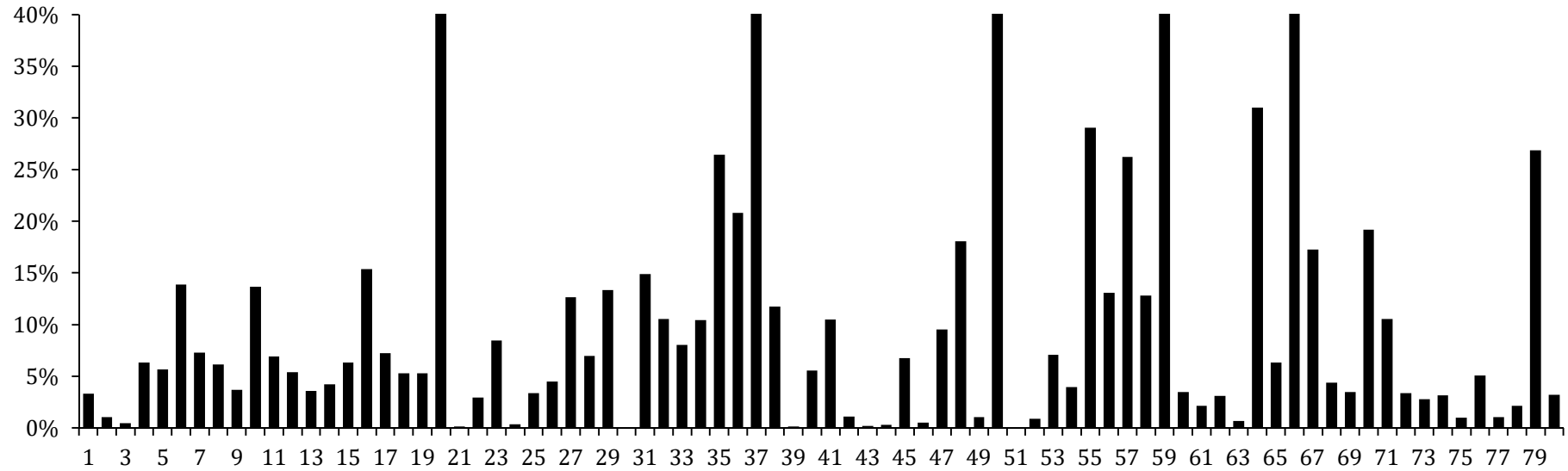
Просечна вредност релативне грешке начињене приликом израчунавања потенцијално укупне количине етарског уља је 10.92%. У више од 66% узорака релативна грешка је мања од 10%. Узрок великих вредности релативних грешака код једног броја узорака је веома мали број доступних експерименталних података.

Поређење експерименталних и процењених вредности за q_{∞}



Слика 31. Графички приказ експерименталних (црни стубићи) и процењених вредности (бели стубићи) параметра q_{∞} проверених на различитим биљним материјалима (X оса: редни број експеримента, а Y оса: вредности параметара q_{∞})

Релативна грешка %



Слика 32. Релативне грешке параметара q_{∞} проверених на различитим биљним материјалима
(X оса: редни број експеримента, а Y оса: % релативне грешке)

6.3. Коришћење процењених вредности параметра q_{∞}

Као што је већ раније наведено, експерименталне вредности које сачињавају криву зависности релативне количине издвојеног уља (q/q_{∞}) од времена за сваки узорак, добијене су када се за q_{∞} узме заправо последње измерена вредност $q_{\infty}^E = q(t_p)$. Дакле, на апсциси експерименталне криве се налази вредност израза q/q_{∞}^E .

У Моделу 3 могуће је израчунати вредност q у било ком тренутку, па тако и у тренуцима $t = t_p$ и $t = 600 \text{ min}$. Слично експериментално добијеним вредностима зависности q/q_{∞}^E од времена, могуће је добити и израчунате вредности зависности $q/q_{\infty}(t_p)$, где је $q_{\infty}(t_p)$ израчуната вредност количине издвојеног уља у тренутку $t = t_p$. Параметри модела: a_1 , b_1 и c_1 су овог пута одређени на основу експериментално добијених вредности у првих 25 минута процеса хидродестилације без обзира на дужину мерења сваког појединачног узорака чије је трајање мерења наведено у табели 11.

Табела 11. Трајање мерења за узорке из групе 1

број узорака	трајање мерења [min]
3	600
2	480
31	360
1	300
38	240
5	120

У табели 12 је показан упоредни приказ квантитативних показатеља оцена Модела 3 када се у изразу (q/q_{∞}) за q_{∞} користи израчуната вредност $q_{\infty}(t_p)$ у односу на експериментално добијене податке када се у изразу (q/q_{∞}) за q_{∞} користи експериментална вредност q_{∞}^E . Звездицом (*) су означени редни бројеви узорака где је извршено мерење до "оптималног" крајњег времена од 600 минута. Квантитативни показатељи су добијени поређењем једнаког броја експерименталних и израчунатих вредности за сваки узорак.

Табела 12. Квантитативни показатељи оцене Модела 3, када се за вредност параметра q_∞ користи нумерички израчуната вредност за време $t_\infty = t_p$

Узорак број	RSS	RSE	AIC	BIC	MRPD	Реф.
1*	0.0005	0.0056	-145.84	-141.86	0.731	[52]
2	0.0005	0.0056	-145.84	-141.86	18.536	
3	0.0007	0.0067	-124.43	-120.87	0.925	
4	0.0033	0.0149	-95.57	-92.00	2.779	
5	0.0029	0.0138	-98.42	-94.85	1.901	
6	0.0009	0.0078	-118.76	-115.20	0.926	
7	0.0003	0.0044	-139.60	-136.04	0.425	
8	0.0032	0.0146	-96.30	-92.74	1.516	
9	0.0010	0.0083	-116.60	-113.04	0.915	
10	0.0027	0.0135	-99.08	-95.52	1.404	
11	0.0015	0.0123	-72.89	-70.63	1.553	
12	0.0046	0.0214	-58.48	-56.22	3.626	
13	0.0018	0.0133	-70.81	-68.55	1.865	
14	0.0037	0.0192	-61.28	-59.02	2.373	
15	0.0017	0.0115	-92.75	-89.66	1.964	[80]
16*	0.0028	0.0129	-112.40	-108.42	1.309	
17	0.0015	0.0127	-66.14	-64.20	1.217	
18*	0.0017	0.0100	-122.80	-118.81	1.010	
19	0.0006	0.0065	-125.42	-121.86	0.982	
20	0.0009	0.0076	-119.87	-116.31	0.844	
21	0.0023	0.0124	-102.34	-98.77	1.387	
22	0.0008	0.0073	-121.10	-117.54	0.901	
23	0.0008	0.0075	-120.30	-116.74	0.764	
24	0.0009	0.0077	-119.52	-115.95	0.841	
25	0.0020	0.0115	-105.07	-101.50	1.175	
26	0.0018	0.0109	-107.00	-103.44	1.320	
27	0.0005	0.0058	-129.48	-125.91	0.821	
28	0.0019	0.0116	-98.66	-95.33	1.366	
29	0.0020	0.0115	-105.05	-101.49	1.391	
30	0.0006	0.0064	-126.04	-122.48	0.894	
31	0.0028	0.0137	-98.67	-95.11	1.890	
32	0.0016	0.0110	-94.25	-91.16	0.946	
33	0.0022	0.0129	-89.14	-86.05	1.477	
34	0.0045	0.0187	-77.34	-74.25	3.621	
35	0.0013	0.0101	-97.02	-93.93	1.787	
36	0.0025	0.0124	-108.05	-104.27	1.625	
37	0.0017	0.0102	-115.73	-111.95	1.334	
38	0.0016	0.0110	-94.13	-91.04	2.020	
39	0.0007	0.0072	-107.86	-104.77	0.951	
40	0.0021	0.0146	-68.39	-66.14	1.402	
41	0.0047	0.0177	-89.51	-85.95	2.452	[76]
42	0.0013	0.0092	-113.01	-109.45	1.485	
43	0.0025	0.0130	-100.61	-97.05	1.897	
44	0.0004	0.0052	-133.52	-129.96	0.491	
45	0.0025	0.0130	-100.59	-97.03	1.697	
46	0.0192	0.0358	-64.09	-60.53	6.731	

47	0.0039	0.0162	-92.63	-89.07	2.917	
48	0.0043	0.0169	-91.08	-87.52	2.417	
49	0.0007	0.0068	-123.71	-120.14	0.901	
50	0.0007	0.0069	-123.11	-119.55	0.796	
51	0.0017	0.0129	-71.71	-69.45	1.426	
52	0.0011	0.0111	-69.49	-67.55	1.309	
53	0.0008	0.0090	-80.99	-78.73	1.336	
54	0.0065	0.0255	-53.93	-51.67	2.357	
55	0.0065	0.0255	-53.94	-51.68	3.198	
56	0.0053	0.0229	-56.66	-54.41	3.669	
57	0.0013	0.0113	-75.04	-72.78	1.201	[77]
58	0.0012	0.0109	-76.03	-73.77	1.191	
59	0.0013	0.0112	-75.35	-73.09	1.273	
60	0.0015	0.0121	-73.28	-71.02	1.919	
61	0.0007	0.0083	-83.12	-80.86	1.014	
62	0.0008	0.0088	-81.54	-79.28	0.818	
63	0.0014	0.0117	-74.25	-71.99	1.669	
64	0.0014	0.0119	-73.81	-71.55	1.503	
65	0.0019	0.0138	-69.90	-67.64	1.795	
66	0.0011	0.0105	-76.98	-74.72	1.259	
67	0.0010	0.0100	-78.24	-75.98	1.261	[79]
68	0.0023	0.0151	-67.51	-65.25	1.760	
69	0.0008	0.0089	-81.17	-78.91	0.957	
70	0.0005	0.0073	-86.31	-84.05	0.987	
71	0.0003	0.0054	-94.11	-91.85	0.675	
72	0.0018	0.0135	-70.51	-68.25	2.078	
73	0.0078	0.0278	-51.63	-49.37	3.993	
74	0.0008	0.0087	-81.83	-79.58	0.968	
75	0.0004	0.0065	-89.59	-87.33	0.560	
76	0.0071	0.0266	-52.80	-50.54	3.790	
77	0.0052	0.0227	-56.92	-54.66	3.757	
78	0.0223	0.0472	-37.90	-35.64	7.798	
79	0.0146	0.0382	-43.38	-41.12	6.598	
80	0.0088	0.0297	-49.92	-47.66	3.443	
Просечно	0.0027	0.0133	-91.10	-88.15	2.025	

У циљу бољег сагледавања разлике између квантитативних показатеља у Моделу 3 када се за q_{∞} (једначина 69) користе вредности добијене: 1) експерименталним мерењем (q_{∞}^E) и вредности добијене нумеричким израчунавањем 2) $q_{\infty}(t_p)$ и 3) $q_{\infty}(t_{\infty})$, у табели 13 је дат преглед просечних вредности квантитативних показатеља овог модела. У сва три случаја израчунате вредности су упоређиване са експериментално добијеним вредностима где је вредност за q_{∞} заправо q_{∞}^E . Како су у подацима постојала само три узорка где је извршено мерење у тренуцима $t = t_{\infty} = 600min$ то је за трећи случај ($q_{\infty}(t_{\infty})$), извршено усредњавање квантитативних показатеља за само та три узорка.

Табела 13. Преглед просечних вредности квантитативних показатеља полиномно-логаритамског модела са параметром q_∞ за узорке који се односе на хидродестилацију етарског уља из бобица клеке.

Модел 3	RSS	RSE	AIC	BIC	MRPD
1) Експериментално q_∞^E	0.0033	0.015	-87.1	-84.2	1.90
2) Нумерички израчунато $q_\infty(t_p)$	0.0030	0.0141	-86.99	-85.80	1.817
3) Нумерички израчунато $q_\infty(t_\infty)$	0.0017	0.0095	-127.03	-123.03	1.017

Очигледно је да постоје разлике међу квантитативним показатељима, али су оне веома мале. То је добар показатељ да се уместо експериментално добијене вредности параметра q_∞ може користити нумерички израчуната вредност тог параметра $q_\infty(t_p)$ или још тачније $q_\infty(t_\infty)$, које се због већих трошкова мерења ретко може измерити.

6.4. Модел процеса хидродестилације без параметра q_∞

Предност модификованог Модела 3 (74) је не само могућност да се одреди потенцијално укупна количина етарског уља (q_∞) коришћењем вредности измерених у почетном делу процеса хидродестилације, већ и могућност да се и без познавања q_∞ претпостави колики ће бити принос етарског уља у било ком тренутку t .

Наиме, у овом раду се (коришћењем једначине 74) по први пут количина издвојеног етарског уља одређује без увођења вредности параметра q_∞ који је у свим до сада у литератури познатим моделима био неопходан.

У табели 14 је описана кинетика издвајања етарског уља без примене параметра q_∞ (коришћењем једначине 74), па се и резултати разликују од раније приказаних резултата у табелама 6 и 8.

Табела 14. Преглед параметара и квантитативних показатеља полиномно-логаритамског модела без параметра q_{∞} за узорке који се односе на хидродестилацију етарског уља из бобица клеке.

Узорак	a_1	b_1	c_1	RSS	RSE	AIC	BIC	MRPD	RMSE	Peф.
1	0.400	4.600	-0.440	0.0010	0.0084	-109.7	-106.4	0.723	0.76%	[52]
2	-3.670	22.690	-9.800	0.0165	0.0371	-51.6	-48.8	2.044	3.32%	
3	-3.300	19.690	-6.910	0.0038	0.0178	-73.7	-70.9	1.073	1.59%	
4	-2.150	16.220	-8.040	0.0121	0.0318	-56.2	-53.4	3.172	2.84%	
5	-0.320	8.150	-0.620	0.0099	0.0287	-59.3	-56.5	1.977	2.57%	
6	-0.660	10.590	-1.680	0.0026	0.0146	-79.6	-76.8	0.824	1.31%	
7	-1.490	11.400	-0.810	0.0014	0.0108	-88.6	-85.7	0.572	0.97%	
8	-2.360	18.660	-7.640	0.0114	0.0084	-109.7	-106.4	1.470	2.76%	
9	-4.050	24.360	-9.620	0.0044	0.0193	-71.3	-68.5	0.881	1.72%	
10	-2.430	18.850	-7.770	0.0133	0.0333	-54.8	-52.0	1.546	2.98%	
11	-2.220	16.190	-5.660	0.0041	0.0228	-47.5	-45.9	1.687	1.94%	
12	0.940	7.450	2.640	0.0298	0.0610	-25.8	-24.2	3.127	5.20%	
13	-3.920	19.230	-0.480	0.0139	0.0416	-34.2	-32.6	1.863	3.55%	
14	-1.690	13.010	1.020	0.0162	0.0450	-32.5	-30.9	2.188	3.84%	
15	-2.330	13.010	-4.940	0.0053	0.0231	-56.5	-54.2	2.346	2.03%	
16	-2.580	14.770	-3.340	0.0097	0.0263	-70.8	-67.4	1.384	2.39%	
17	-2.040	11.860	-0.170	0.0038	0.0219	-48.4	-46.8	1.322	1.86%	
18	-2.080	16.260	-1.730	0.0115	0.0286	-67.9	-64.6	1.087	2.60%	
19	-2.940	17.520	-3.020	0.0061	0.0226	-66.4	-63.6	1.144	2.02%	
20	-2.770	16.550	-0.750	0.0064	0.0231	-65.9	-63.0	0.947	2.06%	
21	-2.370	16.400	-5.040	0.0103	0.0293	-58.7	-55.8	1.571	2.62%	
22	-3.520	19.800	-5.900	0.0047	0.0198	-70.4	-67.6	0.983	1.77%	
23	-1.830	14.730	-4.080	0.0040	0.0183	-72.8	-70.0	0.828	1.64%	
24	-1.630	14.020	-3.390	0.0028	0.0152	-78.5	-75.6	0.869	1.35%	
25	-3.120	18.670	-3.720	0.0089	0.0273	-60.8	-58.0	1.272	2.44%	
26	-2.920	18.560	-6.280	0.0103	0.0293	-58.7	-55.9	1.456	2.62%	
27	-1.760	13.520	1.410	0.0043	0.0190	-71.6	-68.8	0.915	1.70%	
28	-2.880	18.870	-1.670	0.0127	0.0339	-50.4	-47.8	1.429	3.01%	
29	-1.450	13.670	-1.610	0.0119	0.0315	-56.5	-53.7	1.688	2.82%	
30	-1.500	12.380	-2.730	0.0028	0.0152	-78.3	-75.5	0.884	1.36%	
31	-0.620	8.420	-0.670	0.0073	0.0247	-63.9	-61.0	2.031	2.20%	
32	-0.800	8.190	0.380	0.0025	0.0159	-66.2	-63.9	0.833	1.40%	
33	-0.350	8.470	0.250	0.0068	0.0261	-53.3	-51.1	1.570	2.29%	
34	0.770	4.250	-0.760	0.0115	0.0340	-46.5	-44.2	5.802	5.18%	
35	-0.410	9.070	-0.780	0.0090	0.0300	-49.7	-47.4	1.993	2.63%	
36	-0.520	8.350	-1.820	0.0062	0.0219	-72.2	-69.1	1.772	1.97%	
37	-0.270	8.100	-0.480	0.0061	0.0216	-72.6	-69.6	1.480	1.95%	
38	1.370	6.430	-0.850	0.0106	0.0325	-47.6	-45.4	2.100	2.85%	
39	-1.630	14.530	-0.340	0.0052	0.0229	-56.7	-54.5	1.082	2.01%	
40	-3.560	20.200	-4.110	0.0068	0.0261	-53.3	-51.0	1.023	2.29%	
41	0.840	7.550	0.140	0.0319	0.0516	-41.7	-38.9	2.552	4.61%	
42	-3.330	20.310	-7.120	0.0266	0.0471	-44.5	-41.6	2.595	4.21%	
43	-0.290	9.540	-0.680	0.0296	0.0497	-42.8	-40.0	2.677	4.44%	
44	-1.800	13.510	-0.610	0.0094	0.0279	-60.1	-57.3	1.305	2.50%	
45	-4.250	26.730	-11.370	0.0222	0.0430	-47.2	-44.3	1.993	3.85%	
46	-4.160	27.030	-13.930	0.1893	0.1256	-15.0	-12.2	8.236	11.23%	
47	-2.620	19.800	-10.170	0.0258	0.0463	-44.9	-42.1	4.042	4.14%	
48	0.060	8.690	-1.550	0.0267	0.0472	-44.4	-41.6	3.309	4.22%	
49	-4.040	23.780	-8.330	0.0133	0.0332	-54.9	-52.1	1.565	2.97%	
50	-0.840	13.080	-2.540	0.0079	0.0257	-62.7	-59.8	1.321	2.29%	
51	-4.020	23.000	-6.910	0.0323	0.0568	-33.1	-30.8	2.316	4.98%	
52	-3.180	19.960	-4.020	0.0232	0.0481	-37.4	-35.1	2.053	4.22%	
53	-1.830	15.160	-3.070	0.0213	0.0462	-38.5	-36.2	2.546	4.05%	

54	-3.000	19.550	-6.240	0.0414	0.0643	-29.9	-27.6	2.519	5.64%	
55	-2.000	16.340	-4.970	0.0597	0.0773	-25.1	-22.8	4.556	6.77%	
56	-6.540	30.920	-12.420	0.0575	0.0758	-25.6	-23.3	3.808	6.65%	
57	-3.440	19.550	-2.550	0.0128	0.0358	-45.1	-42.8	1.562	3.14%	
58	-4.470	21.720	-2.630	0.0150	0.0387	-43.1	-40.8	1.561	3.39%	
59	-2.330	16.320	-1.850	0.0174	0.0417	-41.2	-38.9	1.969	3.65%	
60	-2.830	18.000	-2.680	0.0244	0.0494	-36.7	-34.5	2.279	4.33%	
61	-3.840	20.720	-2.540	0.0107	0.0327	-47.5	-45.2	1.212	2.87%	
62	-3.260	19.010	-1.700	0.0174	0.0417	-41.1	-38.9	1.385	3.66%	
63	-3.170	18.670	-1.970	0.0163	0.0404	-42.0	-39.7	1.807	3.54%	
64	-3.440	19.550	-3.550	0.0128	0.0358	-45.1	-42.8	1.676	3.14%	[77]
65	-3.700	20.090	-2.830	0.0117	0.0342	-46.3	-44.0	1.466	3.00%	
66	-0.860	11.070	0.230	0.0216	0.0464	-38.3	-36.1	2.399	4.07%	
67	-1.390	13.130	-1.360	0.0086	0.0294	-50.2	-48.0	1.418	2.58%	
68	-1.760	15.190	-2.250	0.0226	0.0476	-37.7	-35.5	2.594	4.17%	
69	-1.710	14.560	-2.060	0.0110	0.0332	-47.0	-44.8	1.571	2.91%	
70	-1.590	15.230	-2.100	0.0090	0.0300	-49.7	-47.4	1.431	2.63%	
71	-1.450	14.600	-2.390	0.0060	0.0245	-54.9	-52.7	1.173	2.15%	
72	-2.120	17.110	-7.330	0.0226	0.0475	-37.7	-35.5	3.455	4.16%	
73	-0.970	12.970	-3.520	0.0560	0.0748	-25.9	-23.7	4.979	6.56%	
74	-1.550	11.260	5.170	0.0124	0.0352	-45.6	-43.3	1.460	3.08%	
75	-2.380	14.200	2.300	0.0111	0.0333	-47.0	-44.7	1.245	2.92%	
76	-9.230	41.660	-22.790	0.0711	0.0843	-22.8	-20.6	4.593	7.39%	
77	-9.430	41.830	-22.750	0.0790	0.0889	-21.5	-19.2	4.630	7.80%	
78	-9.750	40.830	-18.090	0.1455	0.1206	-13.5	-11.3	7.035	10.58%	
79	-9.270	39.420	-17.330	0.1367	0.1169	-14.3	-12.1	7.165	10.25%	
80	-9.120	39.160	-18.190	0.0797	0.0893	-21.3	-19.1	4.077	7.83%	
Просечно				0.0222	0.0392	-50.9	-48.4	2.181	3.51%	

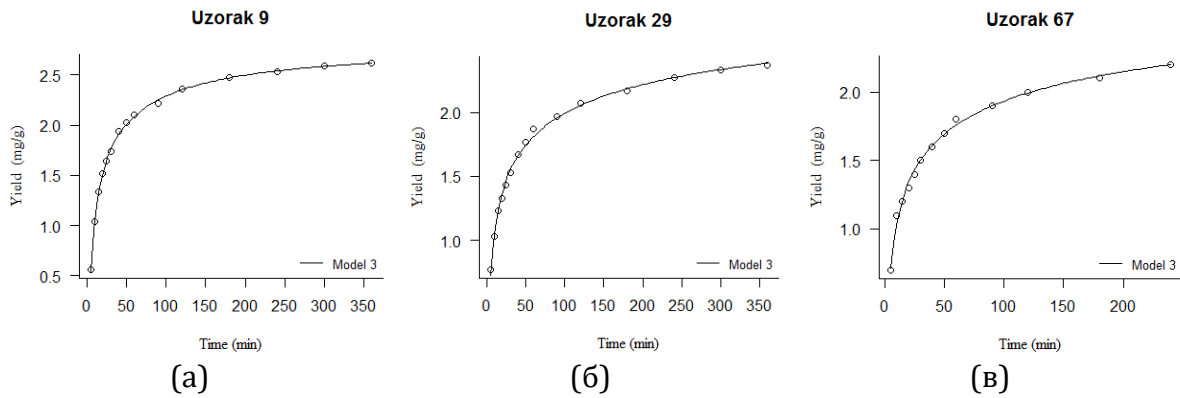
У параметрима a_1 , b_1 и c_1 је садржана вредност параметра q_∞ јер је: $a_1 = a \cdot q_\infty$, $b_1 = b \cdot q_\infty$ и $c_1 = c \cdot q_\infty$.

Рачунање параметара a_1 , b_1 и c_1 у табели 14 је рађено на основу података из првих 20% укупног времена хидродестилације јер се, како је показано у табели 2, у том процесу издвоји $\approx 80\%$ етарског уља из биљног материјала

Користећи једначину (74) за моделовање приноса етарског уља (q) у вемени (t) добија се веома добро слагање модела са експериментално добијеним подацима. Сви статистички показатељи имају мале вредности што говори о квалитету модела. За узорке који се односе на хидродестилацију етарског уља из бобица клеке границе квантитативних показатеља су: $0.001 < RSS < 0.1893$; $0.0084 < RSE < 0.1256$; $-109.7 < AIC < -13.5$; $-106.4 < BIC < -11.3$; $0.572 < MRPD < 8.236$; $0.7\% < RSE < 11\%$.

Вредност статистичких показатеља из табеле 14 није могуће упоредити са вредностима статистичких показатеља других модела јер се у свим моделима из литературе који описују кинетику хидродестилације етарског уља користи параметар q_∞ .

Добро поклапање модела са експерименталним подацима визуелно се може уочити и на свим узорцима. На следећој слици се налазе дијаграми за три случајно одабрана узорка из базе.



Слика 33. Графички приказ експерименталних података (кружић) и функције модела (линија) узорка (а-узорак 9, б –узорак 29 и в-узорак 67)

Без обзира на то да ли се вредност параметра q_{∞} добија мерењем издвојене количине етарског уља након веома дугог процеса хидродестилације или нумеричким израчунавањем коришћењем неколико познатих почетних експерименталних резултата, у оба случаја се прави нека грешка. То је или грешка мерења или грешка израчунавања (и фитовања). Да би се избегла могућност прављења такве грешке, која се коришћењем параметра q_{∞} „уноси“ и у модел, веома је практично искористити могућност моделовања приноса етарског уља у било ком временском тренутку коришћењем предложеног Модела 3 (једначина 74).

6.5. Процена економске исплативости

Оптимизација потрошње енергије и одређивање оптималног времена хидродестилације проверена је на експериментима који прате процес издвајања етарског уља из бобица клеке (Табела 1 и Табела 3) (за експерименте рађене на другим биљним материјалима нема довољно података за проверу).

Експерименти су извођени на следећи начин: биљна дрога – очишћени, уситњени (млевењем, гњечењем) и припремљени (са одговарајућим периодом бубрења) зрели плодови клеке у одговарајућем хидромодулу (однос маса биљне дроге и воде) је убачен у балон за дестиловање лабораторијске апаратуре за хидродестилацију типа Клевенцер (Слика 13). Загревање је вршено електричним грејачем сталним интензитетом. Интензитет загревања је директно сразмеран запреминском протоку кохобационе¹³ воде.

Све време процеса хидродестилације вода из водоводне мреже протиче кроз кондензатор што омогућава кондензовање испареног етарског уља које се издваја из биљног материјала.

Уколико се усвоји да је почетна температура водене суспензије припремљене биљне дроге (у овом случају самлевени плодови клеке) иста као температура воде из водоводне мреже (15°C), трошкови загревања водене суспензије са почетних 15°C до 100°C рачунају се помоћу формуле [108]

¹³ Кохобациона (кондензована) вода – вода која пролази кроз етарско уље и преко повратне цеви рециркулише.

$$Z = C_{vp} \cdot \frac{100}{q} \cdot \frac{(m_d + m_v)}{r} \cdot C_p \cdot (100^\circ\text{C} - t_u) \quad (75)$$

где су:

C_{vp} – комерцијална цена водене паре

q – принос

r – латентна топлота испаравања¹⁴

m_d, m_v – удео биљне дроге и воде у хидромодулу респективно

C_p – топлотни капацитет¹⁵

t_u – температура воде из водоводне мреже ($t_u = 15^\circ\text{C}$)

Време утрошено на почетно загревање суспензије рачуна се из формуле:

$$\frac{100}{q} \cdot (m_d + m_v) \cdot C_p \cdot (100^\circ\text{C} - t_u) = \dot{m} \cdot r \cdot \tau \quad (76)$$

где су:

q – принос

r – латентна топлота испаравања

m_d, m_v – удео биљне дроге и воде у хидромодулу респективно

C_p – топлотни капацитет

t_u – температура воде из водоводне мреже ($t_u = 15^\circ\text{C}$)

\dot{m} – масена брзина хидродестилације¹⁶

τ – време

Проток воде кроз кондензатор се рачуна из формуле:

$$\dot{m}_{H_2O} (t_i - t_u) \cdot C_p = \dot{m} \cdot r \quad (77)$$

где су:

r – латентна топлота испаравања

C_p – топлотни капацитет

t_u – температура воде за хлађење на улазу у кондензатор. То је температура воде из водоводне мреже ($t_u = 15^\circ\text{C}$)

t_i – температура воде на излазу из кондензатора (узима се вредност бар 20°C мања од температуре кондензације ($60^\circ\text{C} < t_i < 75^\circ\text{C}$) ($t_i = 75^\circ\text{C}$).

\dot{m} – масена брзина хидродестилације

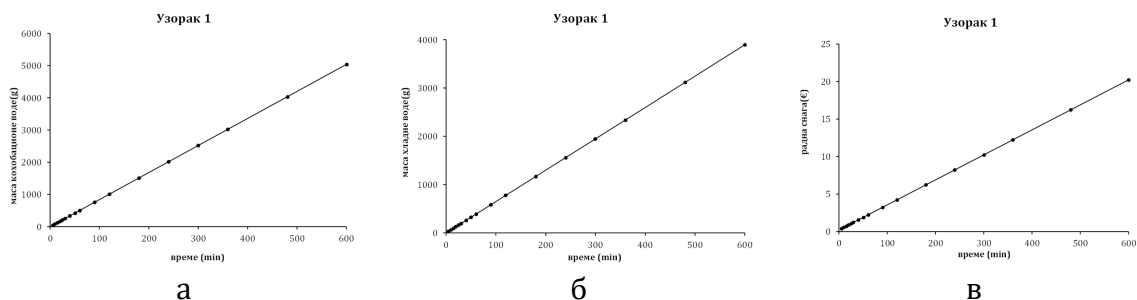
\dot{m}_{H_2O} – масени проток воде

Потрошња енергије за загревање (количина кохобационе воде Слика 34.а), воде за хлађење (Слика 34.б) и трошкови радне снаге (Слика 34.в) линеарно расту током процеса хидродестилације

¹⁴ Латентна топлота испаравања – количина енергије коју јединица масе неке материје прими или преда околина да би испарила. Латентна топлота испаравања за воду је: $r = 2257 \text{ KJ/kg}$

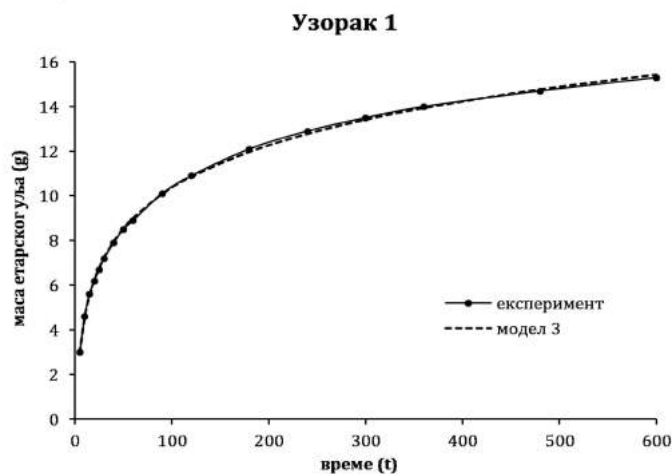
¹⁵ Топлотни капацитет (специфична топлота) – представља енергију потребну за загревање јединице масе за јединицу температуре. Топлотни капацитет за воду је: $C_p = 4.186 \text{ KJ/kgK}$

¹⁶ $\dot{m} = \dot{v} \cdot \rho$ (\dot{v} – запреминска брзина; ρ – густина)

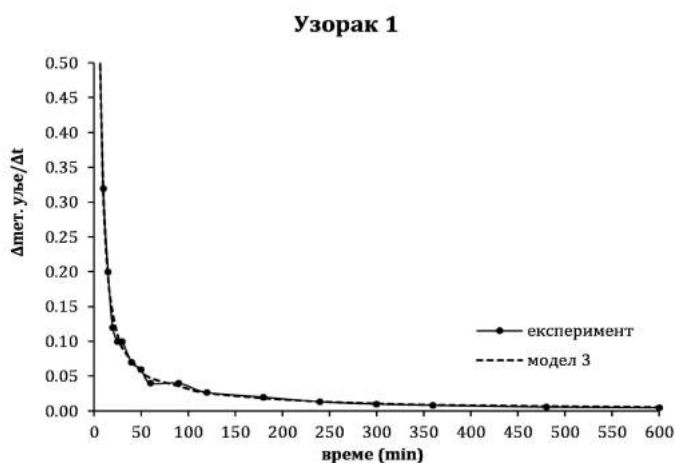


Слика 34. Трошкови по kg етарског уља током процеса хидродестилације (а) енергија за загревање; б) вода за хлађење; в) радна снага)

Уколико се уместо масе издвојеног етарског уља током времена (Слика 35) посматра диференцијална промена масе издвојеног етарског уља током времена (Слика 36) може се уочити да се у почетном делу процеса хидродестилације (тзв. „брза“ фаза) издвоји највећи део етарског уља (Табела 2), док је након 60 минута у тзв. „спорој“ фази хидродестилације количина издвојеног етарског уља далеко мања.

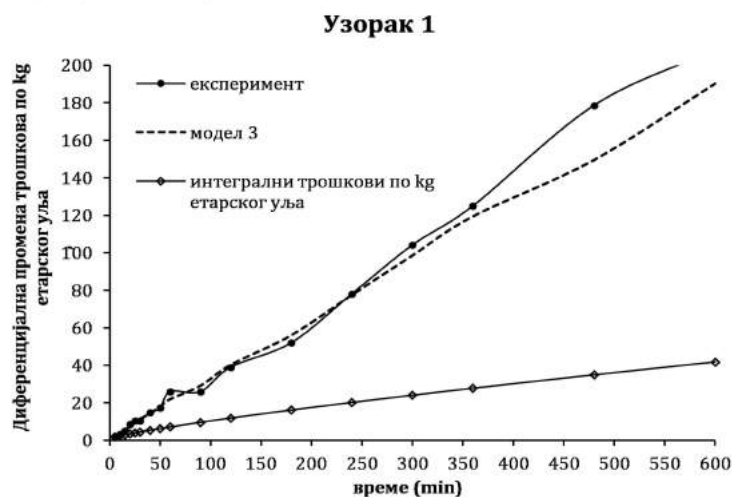


Слика 35. Маса издвојеног етарског уља током времена.



Слика 36. Диференцијална промена масе издвојеног етарског уља током времена.

Пошто су трошкови неопходни за извођење процеса хидродестилације константни и линеарно се повећавају током времена, намеће се закључак да се у периоду „споре“ хидродестилације много енергије троши за издвајање мале количине етарског уља. То се потврђује и посматрањем диференцијалне промене трошкова по маси издвојеног етарског уља током процеса хидродестилације (Слика 37).



Слика 37. Диференцијална промена трошкова и интегрални трошкови по kg издвојеног етарског уља током времена.

Оптимално решење захтева не само тренутни увид у све факторе од утицаја већ и последице одабраног решења на даљи ток процеса хидродестилације.

Дакле, како би се одредило оптимално време до кога има смисла изводити процес хидродестилације, односно након кога се непотребно и неоправдано умањује до тада остварена зарада јер су трошкови далеко већи од прихода који се остварује преко вредности издвојеног етарског уља, неопходно је анализирати диференцијалне трошкове по јединици етарског уља током хидродестилације.

Оптимално време за прекид процеса хидродестилације се одређује када крива која прати трошкове достигне вредност која је једнака разлици вредности издвојеног етарског уља и почетних трошкова (биљни материјал за хидродестилацију и почетна енергија за загревање).

Добро поклапање Модела 3 са експерименталним подацима (Слика 35 и Слика 36), омогућава да се за одређивање оптималног времена уместо експерименталних података користи једначина Модела 3.

Коришћењем процењених вредности параметара модела и параметара процеса, итеративним методом се једноставно одређује временски тренутак када диференцијална промена трошкова по маси етарског уља достиже оптималну вредност (разлика: вредност издвојеног етарског уља - почетни трошкови).

Да би се јасније уочила уштеда, анализа се врши на основу интергралних трошкова (трошкови по маси издвојеног етарског уља). Коришћењем једначина 75, 76 и 77 рачунају се интегрални трошкови за предложену и оптималну дужину трајања процеса хидродестилације. Остварена уштеда приказује као проценат уштеде интегралних трошкова.

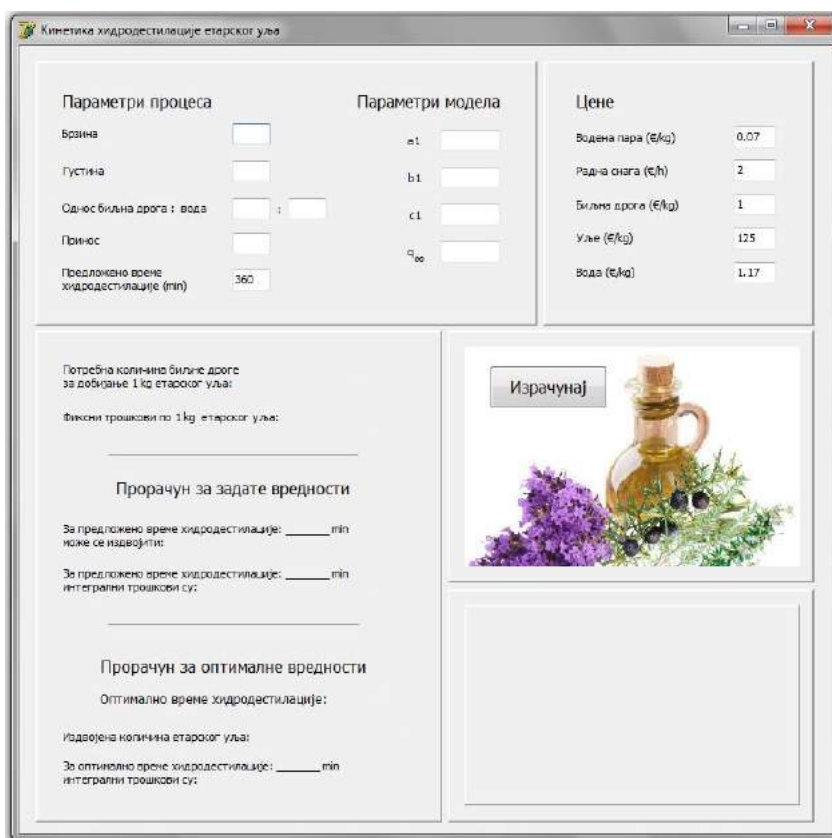
У наставку је дат псеудо – код за оптимизацију процеса хидродестилације

Konstante:	$C_p = 4.187$	//toplotni kapacitet
	$R = 2257$	//latentna toplota isparavanja
	$t_u = 15$	//temperatura vode na ulazu u kondenzator
	$t_i = 75$	//temperatura vode na izlazu iz kondenzatora
Ulaz:	C_{VPare}	//cena vodene pare (inicijalno: 0,07 €/kg)
	C_{Hvode}	//cena hladne vode (inicijalno: 1,17 €/m ³)
	C_{Rada}	//cena radne snage (inicijalno: 2 €/h)
	C_{kgUlja}	//cena etarskog ulja (inicijalno: 125 €/kg)
	C_{Droge}	//cena biljne droge (inicijalno: 1 €/kg)
	t_p	//predloženo vreme hidrodestilacije (inicijalno: 360 min)
	v	//brzina hidrodestilacije
	ρ	//gustina etarskog ulja
	q	//prinos etarskog ulja
	m_d, m_v	//odnos biljna droga - voda u hidromodulu
	a_1, b_1, c_1, q_∞	//parametri modela
1.	$Z = C_{VPare} \cdot \frac{100}{q} \cdot \frac{(m_d+m_v)}{r} \cdot C_p \cdot (100 - t_u)$	//početni troškovi zagrevanja po kg etarskog ulja
2.	$R = \frac{C_{Rada}}{60} \cdot \frac{100}{q} \cdot \frac{(m_d+m_v)}{r \cdot v \cdot \rho} \cdot C_p \cdot (100 - t_u)$	//troškovi rad. snage za poč. vreme zagrevanja
3.	$S = C_{Droge} \cdot \frac{100}{q}$	//troškovi za biljnu drogu po kg etarskog ulja
4.	$F = Z + R + S$	//fiksni troškovi po kg etarskog ulja
5.	$ZT_{kg} = C_{kgUlja} - F$	//max. zarada sa tekućim troškovima po kg
6.	$HV = \frac{v \cdot \rho \cdot r}{C_p \cdot (t_i - t_u)}$	//hladna voda koja protiče kroz kondenzator
7.	$\Delta VPara = v$	
8.	$\Delta Rad = C_{Rada}/60$	
9.	$\Delta HVoda = HV$	
10.	$D[1] = a_1 \cdot \log^2(1) + b_1 \cdot \log(1) + c_1$	//jednačina modela 3
11.	$\Delta D[1] = D[1]$	
12.	$i = 1$	
13.	Ponavljati	
14.	$i = i + 1$	
15.	$D[i] = a_1 \cdot \log^2(i) + b_1 \cdot \log(i) + c_1$	//kol. Izdvojenog etarskog ulja u trenutku i
16.	$\Delta D[i] = D[i] - D[i - 1]$	
17.	$DifT[i] = (C_{VPare} \cdot \Delta VPara + \Delta Rad + C_{Hvode} \cdot \Delta HVoda) / \Delta D[i]$	//dif. troškovi u trenutku i
18.	sve dok ne bude ispunjen uslov $DifT[i] > ZT_{kg}$	
19.	$t_0 = i$	//optimalno vreme ¹⁷
20.	$IT = \left(v \cdot C_{VPare} + \frac{C_{Rada}}{60} + \frac{C_{Hvode} \cdot HV}{1000} \right)$	//Integralni troškovi
21.	$IT_{Opt} = t_0 \cdot IT / D[t_0]$	// Integralni troškovi za optimalno vreme po masi etarskog ulja
22.	$IT_{Zad} = t_p \cdot IT / D[t_p]$	// Integralni troškovi za predloženo vreme po masi etarskog ulja
23.	Rezultati: $F, D[t_p], IT_{Zad}, t_0, D[t_0], IT_{Opt}$	

¹⁷ Време када диференцијални трошкови по маси етарског уља достигну максималну зарату са текућим трошковима

6.5.1. Софтверско решење

За реализацију овог проблема у Делфију (Delphi) је креиран је програм „Кинетика хидродестилације етарског уља“.



Слика 38. Софтверско решење „Кинетика хидродестилације етарског уља“

Као улазне величине уносе се параметри процеса (\dot{v} – запреминска брзина хидродестилације, ρ – густина етарског уља, m_a , m_v – удео биљне дроге и воде у хидромодулу респективно), планирано време хидродестилације и параметри Модела 3 (параметри a , b и c , q_∞ – потенцијално укупна количина етарског уља).

Такође је предвиђена и могућност измена цена за водену пару, радну снагу, етарско уље, воду и биљну дрогу и унос количине биљне дроге за коју се прорачун врши.

По уносу улазних величина кликом на дугме „Израчунај“ рачуна се: потребна количина биљне дроге за издвајање једног килограма етарског уља (за задате параметре), фиксни трошкови по килограму етарског уља, фиксни трошкови за унету количину биљне дроге, максимална количина етарског уља које се може издвојити и интегрални трошкови за предложено време хидродестилације. Затим се предлаже оптимално време хидродестилације и рачунају фиксни трошкови, интегрални трошкови и количина етарског уља које се при задатим условима може издвојити за оптимално време. На крају се, такође израчунава постигнута уштеда трошкова и проценат издвојеног етарског уља за оптимално

време, као и време скраћења процеса хидродестилације у односу на предложено.

Кинетика хидродестилације етарског уља

Параметри процеса		Параметри модела		Цене	
Брзина	8.3	a1	0.401	Водена пара (€/kg)	0.07
Густина	0.97	b1	4.601	Радна снага (€/h)	2
Однос биљна дрога : вода	1 : 3	c1	-0.437	Биљна дрога (€/kg)	1
Принос	1.48	q_{∞}	15.44	Уље (€/kg)	110
Предложено време хидродестилације (min)	600			Вода (€/kg)	1.17

Потребна количина биљне дроге за добијање 1 kg етарског уља:	67.568 kg
Фиксни трошкови по 1 kg етарског уља:	70.726 €

Прорачун за задате вредности


За предложено време хидродестилације (600 min)	1.000 kg
Максимална количина уља која се може издвојити је:	
За предложено време хидродестилације (600 min) интегрални трошкови су:	27.161 €

Прорачун за оптималне вредности

Оптимално време хидродестилације: 156 min

Издвојена количина етарског уља:	0.750 kg
За оптимално време хидродестилације (156 min) интегрални трошкови су:	9.414 €

Израчунај



Избором оптималног времена:

- постиже се уштеда од: 65.340% трошкова
- издваја се: 75.014% етарског уља
- време хидродестилације се скраћује за: 444 min

Слика 39. Пример оптимизације помоћу програма „Кинетика хидродестилације етарског уља“

7. Откривање веза између атрибута узорака клеке применом алгоритама истраживања података

Често се међу подацима налазе и разне скривене зависности или узрочно-последични односи који експертима из одговарајућих области могу бити веома интересантни и корисни. Откривање скривених веза, предвидивих секвенци и тачних класификација је један од основних циљева истраживања података. Из огромне количине оперативних података и веза које се не могу одмах сагледати, дефинишу се одговарајуће релације, обрасци или форме понашања, што у крајњем случају даје потребне информације из расположивих података.

Постоји више алгоритама истраживања података који омогућавају идентификовање образаца у великом броју података. Помоћу њих се на основу карактеристика објеката (атрибута који га описују) могу одредити функције које омогућавају да се подаци из анализираног скупа групишу у једну од неколико дефинисаних класа. Добро класификовани подаци се даље користе у анализама експерта.

7.1. Класификациони модели

У бази експерименталних података се, осим масе издвојеног етарског уља добијеног процесом хидродестилације плодова клеке (Табела 1), налазе и сакупљени подаци (атрибути) о географском пореклу, надморској висини, изложености сунцу, времену брања, начину припреме, времену бубрења, хидромодулу, брзини хидродестилације, приносу и густини издвојеног етарског уља (Табела 3).

Идеја је да се изврши идентификација сваког узорка, како би се из његових карактеристика (атрибута) указало на њихову евентуалну зависност и самим тим извукла и нека правила која би била корисна при каснијем одабиру параметара кинетике процеса хидродестилације за нове узорке.

Класификација је рађена према:

- хидромодулу
- начину припреме клеке за хидродестилацију
- дужини трајања припреме
- дужини трајања бубрења плодова клеке у току припреме за процес хидродестилације
- експозицији¹⁸ (положају) терена са кога је сакупљана клека
- надморској висини са које је сакупљана клека

¹⁸ Експозиција терена – изложеност терена сунчевим зрацима

Сваки од узорака је описан са 14 атрибута. Успешан класификациони алгоритам би на основу тих атрибута у највећем броју случајева требало да тачно класификује узорак у једну од одговарајућих класа.

За решавање ових класификационих проблема су коришћени следећи класификациони алгоритми, применом софтверског пакета WEKA:

- Стабла одлучивања (Decision tree J48)
- Алгоритам k најближих суседа (IBK)
- Метода вектора подршке (SMO)
- Неуронска мрежа (Multilayer Perception - MLP)
- Наивни Бајесов класификатор (Naïve Bayes - NB)

Класификациони проблеми су оцењивани коришћењем методе тестног узорка и методе унакрсне валидације (10-струка унакрсна валидација).

За методу тестног узорка комплетан скуп узорака је, коришћењем RESAMPLE филтера (који је имплементиран у софтверском пакету WEKA) подељен на два међусобно независна подскупа: тренинг скуп који се састоји од 2/3 укупног броја узорака који се користи за учење и тест скуп који садржи 1/3 укупног броја узорака који се користи за тачност предвиђања.

Провера квалитета класификације рађена је са свим потенцијално релевантним расположивим атрибутима о експериментима, али и са редукованим скупом атрибута. Редукција атрибута је урађена коришћењем вредности информационог добитка одговарајућег атрибута у односу на класу. Информациони добитак је рачунат помоћу "Info Gain Attribute Eval" методе која је уграђена у пакет WEKA.

7.2. Оцењивање резултата класификације

У циљу приказивања успешности класификације и поређења различитих алгоритама класификације, рачунати су: капа статистика (Kapra statistic - Капа), средња апсолутна грешка (Mean Absolute Error - MAE), корен средње квадратне грешке (Root Mean Squared Error - RMSE), тачност (удео добро предвиђених инстанци неке класе у укупном броју инстанци - Accuracy), прецизност (Precision), Ф-мера (F-Measure) и површина испод ROC- криве (AUC).

Добар показатељ предиктивних перформанси класификатора је површина испод ROC- криве (Area Under Roc Curve - AUC). Идеални класификатор има AUC чија је вредност једнака јединици. То је случај када су прецизност и специфичност максималне. Груби водич за оцену класификатора је следећа табела [107]

Табела 15. AUC оцена класификатора

AUC вредност	Оцена класификатора
0,9-1	одличан
0,8-0,9	добар
0,7-0,8	фер (поштен)
0,6-0,7	слаб
0,5-0,6	лош

Капа статистика је мера перформанси класификатора која узима у обзир да ће у одређеном броју случајева класификатор сасвим случајно донети исправну одлуку. То је мера слагања заснована на разлици између стварног слагања у матрици конфузије и шансе слагања која је указана помоћу суме колона и редова те матрице. Вредности капа статистике су у распону [-1,+1] и уобичајена интерпретација капа класификатора је приказана у следећој табели [107]:

Табела 16. Капа оцена класификатора

Капа	Оцена класификатора
<0	Нема слагања
0,01 - 0,2	Слабо слагање
0,21 - 0,4	Солидно слагање
0,41 - 0,6	Средње слагање
0,61 - 0,8	Значајно слагање
0,81 - 0,99	Скоро савршено слагање

Атрибути који прате све класификације припадају скупу:

- страна {O, N, ON}
- начин припреме {M, G, MV, B}
- време припреме {1, 1.5, 2, 3, 5 }
- бубрење {0, 24, 48, 72}
- хидромодул {3, 4, 5}
- надморска висина {600, 800, 850, 950, 1000, 1300, 1600}
- брзина
- 5 мин
- 10 мин
- 15 мин
- 20 мин
- 25 мин

Страна описује експозицију (положај) терена на коме су убране бобице клеке. Клека може бити убрана на осунчаној (O), неосунчаној страни(N) или може бити помешана клека и са осунчане и са неосунчане стране(ON).

Начин припреме подразумева поступак уситњавања бобица клеке (мљењем (M), гњечњем (G), мљењем са водом (MV) или уситњавањем у блендеру (B)).

Време припреме је време колико је (у минутима) трајао процес уситњавања.

Бубрење представља време (у сатима) колико дуго су бобице клеке стајале потопљене у води.

Хидромодул је однос количина воде и клеке (нпр. 3 означава да је у апаратуру за хидродестилацију убачено 3 мере воде и једна мера клеке).

Надморска висина је надморска висина терена на ком је убрана клека.

Брзина хидродестилације је запреминска брзина која је директно сразмерна интензитету загревања.

Ознаке 5 мин, 10 мин, 15 мин, 20 мин, 25 мин представљају измерене количине издвојеног етарског уља за 5, 10, 15, 20 и 25 минута процеса хидродестилације.

На основу структурираних података о сваком узорку направљен је покушај да се сваком од њих придружи једна од могућих унапред познатих класа. У наставку су приказане различите класификације узорака.

Класификација према хидромодулу

У табелама 17 и 18 приказани су резултати тестирања класификатора према хидромодулу. На основу расположивих атрибута проверена је могућност класификовања узорака у једну од могуће три класе (3, 4 и 5) које описују одговарајући хидромодул.

Табела 17. Резултати тестирања класификатора за класификацију према хидромодулу са свим расположивим атрибутима

		Kappa	MAE	RMSE	accuracy	precision	recall	F-Measure	AUC
J48	training	0.840	0.074	0.192	0.923	0.893	0.923	0.905	0.952
	test	0.487	0.184	0.378	0.750	0.794	0.750	0.720	0.735
	cross-val.	0.616	0.214	0.333	0.813	0.782	0.813	0.793	0.707
Ibk	training	1.000	0.024	0.026	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
	test	0.593	0.159	0.368	0.786	0.852	0.786	0.788	0.809
	cross-val.	0.551	0.170	0.390	0.763	0.783	0.763	0.773	0.789
SVM	training	0.764	0.248	0.316	0.885	0.851	0.885	0.867	0.896
	test	0.418	0.325	0.421	0.714	0.724	0.714	0.687	0.636
	cross-val.	0.568	0.281	0.364	0.775	0.771	0.775	0.764	0.798
MLP	training	0.886	0.046	0.139	0.942	0.944	0.942	0.943	0.996
	test	0.430	0.182	0.364	0.714	0.794	0.714	0.686	0.944
	cross-val.	0.621	0.150	0.319	0.800	0.808	0.800	0.802	0.909
NB	training	0.673	0.122	0.298	0.827	0.836	0.827	0.828	0.918
	test	0.426	0.211	0.421	0.679	0.733	0.679	0.705	0.833
	cross-val.	0.471	0.210	0.413	0.713	0.745	0.713	0.724	0.799

После израчунатог информационог добитка, број атрибута је редукован и класификација је рађена на основу вредности следећих атрибута: време припреме, брзина, бубрење, начин припреме, надморска висина, страна, 20 мин. и 25 мин.

Табела 18. Резултати тестирања класификатора за класификацију према хидромодулу са редукованим бројем атрибута

		Kappa	MAE	RMSE	accuracy	precision	recall	F-Measure	AUC
J48	trening	0.755	0.115	0.240	0.885	0.865	0.885	0.866	0.906
	test	0.409	0.220	0.392	0.714	0.778	0.714	0.675	0.696
	cross-val.	0.616	0.214	0.333	0.813	0.782	0.813	0.793	0.707
Ibk	trening	0.963	0.036	0.084	0.981	0.982	0.981	0.981	0.999
	test	0.602	0.159	0.347	0.786	0.812	0.786	0.796	0.836
	cross-val.	0.573	0.162	0.375	0.775	0.786	0.775	0.780	0.806
SVM	trening	0.805	0.244	0.309	0.904	0.869	0.904	0.886	0.918
	test	0.418	0.325	0.421	0.714	0.724	0.714	0.687	0.636
	cross-val.	0.590	0.278	0.360	0.788	0.779	0.788	0.776	0.809
MLP	trening	0.886	0.046	0.141	0.942	0.944	0.942	0.943	0.995
	test	0.430	0.185	0.369	0.714	0.794	0.714	0.686	0.942
	cross-val.	0.609	0.146	0.319	0.800	0.783	0.800	0.791	0.905
NB	trening	0.742	0.109	0.264	0.865	0.880	0.865	0.869	0.947
	test	0.512	0.175	0.360	0.750	0.770	0.750	0.741	0.882
	cross-val.	0.530	0.179	0.355	0.750	0.765	0.750	0.753	0.859

Посматрајући табеле класификације може се уочити да су резултати класификације у којима су коришћени сви расположиви атрибути веома слични резултатима класификације у којима је коришћен редуковани број атрибута.

Најлошији резултати класификације добијају се коришћењем алгорита k најближих суседа и наивног Бајесовог класификатора, мада и ти алгоритми имају релативно добар резултат класификације.

Код класификације према хидромодулу, тачност свих класификатора је изнад 70%. Мере као што су прецизност и одзив су релативно високе и уједначене. Капа статистика је нешто нижа код скупа за тестирање него код унакрсне валидације (али и за те вредности показује да се ради о солидном слагању). AUC вредности су за све класификаторе изнад 0.7, што уопштено даје „фер“ резултате. Код неуронских мрежа висока вредност AUC (>0.9) указује на одличне резултате. Такође MAE не прелази 0.3 односно RMSE 0.42. Све наведена оцене доводе до закључка да се класификација према хидромодулу по свим оценама класификатора може сматрати успешном.

Класификација према начину припреме биљне дроге

Наредне две табеле садрже резултате тестирања класификатора према начину припреме бобица клеке за хидродестилацију. На основу атрибута који описују: страну са које је клека убрана, време припреме, хидромодул, време бубрења, брзину, надморску висину и количину издвојеног етарског уља у првих 25 минута процеса хидродестилације (мерено на сваких 5 минута), проверено је да ли је могуће сваки од узорака сврстати у једну од класа које описују начин припреме (млевање, гњечење, млевање са водом или уситњавање у блендеру).

Табела 19. Резултати тестирања класификатора за класификацију према начину припреме биљне дроге са свим расположивим атрибутима

		Kappa	MAE	RMSE	accuracy	precision	recall	F-Measure	AUC
J48	trening	0.729	0.080	0.200	0.885	0.896	0.885	0.860	0.950
	test	0.650	0.083	0.217	0.893	0.899	0.893	0.885	0.923
	cross-val.	0.453	0.132	0.306	0.763	0.727	0.763	0.740	0.829
Ibk	trening	1.000	0.027	0.031	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
	test	0.746	0.077	0.225	0.893	0.949	0.893	0.913	0.939
	cross-val.	0.781	0.067	0.219	0.900	0.907	0.900	0.903	0.895
SVM	trening	0.961	0.252	0.314	0.981	0.983	0.981	0.981	0.989
	test	0.796	0.256	0.321	0.929	0.929	0.929	0.929	0.905
	cross-val.	0.791	0.258	0.324	0.913	0.911	0.913	0.910	0.880
MLP	trening	1.000	0.016	0.053	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
	test	0.796	0.060	0.191	0.929	0.929	0.929	0.929	0.952
	cross-val.	0.734	0.072	0.220	0.875	0.892	0.875	0.879	0.936
NB	trening	0.791	0.070	0.224	0.885	0.926	0.885	0.892	0.993
	test	0.309	0.151	0.348	0.714	0.802	0.714	0.755	0.736
	cross-val.	0.519	0.127	0.309	0.763	0.826	0.763	0.775	0.893

После израчунатог информационог добитка број атрибута је редукован и класификација је рађена на основу вредности следећих атрибута: време припреме, брзина, бубрење, хидромодул, страна, надморска висина.

Табела 20. Резултати тестирања класификатора за класификацију према начину припреме биљне дроге са редукованим бројем атрибута

		Kappa	MAE	RMSE	accuracy	precision	recall	F-Measure	AUC
J48	trening	0.699	0.092	0.215	0.865	0.883	0.865	0.844	0.943
	test	0.644	0.080	0.193	0.893	0.854	0.893	0.871	0.941
	cross-val.	0.494	0.125	0.276	0.813	0.758	0.813	0.780	0.837
Ibk	trening	0.959	0.032	0.075	0.981	0.981	0.981	0.980	0.999
	test	0.796	0.054	0.186	0.929	0.929	0.929	0.929	0.860
	cross-val.	0.824	0.064	0.203	0.925	0.925	0.925	0.924	0.899
SVM	trening	0.961	0.252	0.314	0.981	0.983	0.981	0.981	0.989
	test	0.796	0.256	0.321	0.929	0.929	0.929	0.929	0.905
	cross-val.	0.791	0.258	0.324	0.913	0.911	0.913	0.910	0.880
MLP	trening	0.961	0.020	0.072	0.981	0.983	0.981	0.981	0.999
	test	0.796	0.053	0.184	0.929	0.929	0.929	0.929	0.958
	cross-val.	0.774	0.063	0.209	0.900	0.906	0.900	0.901	0.950
NB	trening	0.782	0.091	0.213	0.885	0.916	0.885	0.892	0.982
	test	0.480	0.134	0.281	0.786	0.877	0.786	0.828	0.901
	cross-val.	0.633	0.117	0.251	0.813	0.857	0.813	0.823	0.947

Код класификације према начину припреме бобица клеке, тачност свих класификатора је скоро 90%, осим наивног Бајесовог класификатора (NB) и стабла одлучивања (J48) чија је тачност преко 70%. Мере прецизност и одзив су уједначене и високе, што резултује и високим вредностим Ф-мере. Капа статистика за алгоритам k најближих суседа, методу вектора подршке и неуронске мреже показује да се ради о значајном слагању, а за наивни Бајесов класификатор показује средње слагање. АУС мера има нешто ниже вредности када се користи унакрсна валидација и за све класификаторе осим наивног

Бајесовог класификатора има вредност већу од 0.9 те се класификатори оцењују одличном оценом. Вредност MAE ни код једног класификатора није већа од 0.25, а вредност RMSE није већа од 0.35.

Упоредјујући све наведене оцене може се закључити да се класификација према начину припреме биљне дроге може радити успешно било са свим атрибутима или са редукованим скупом атрибута.

Класификација према дужини трајања припреме

У табелама 21 и 22 приказани су резултати тестирања класификатора према дужини трајања процеса припреме биљне дроге. За експерименте који су обрађени у овом раду дужина трајања процеса припреме је била 1, 1.5, 2, 3 и 5 минута.

На основу других расположивих атрибута (страна, начин припреме, бубрење, хидромодул, брзина, надморска висина и количине издвојеног етарског уља у првих 25 минута процеса хидродестилације (мерено на сваких 5 минута) проверена је могућност да се узорци сврстају у једну од класа које одговарају дужини трајања процеса припреме.

Табела 21. Резултати тестирања класификатора за класификацију према дужини трајања процесa припреме биљне дроге са свим расположивим атрибутима

		Kappa	MAE	RMSE	accuracy	precision	recall	F-Measure	AUC
J48	trening	0.696	0.108	0.232	0.769	0.777	0.769	0.758	0.935
	test	0.540	0.169	0.327	0.643	0.733	0.643	0.635	0.861
	cross-val.	0.614	0.125	0.287	0.713	0.676	0.713	0.673	0.830
Ibk	trening	1.000	0.029	0.039	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
	test	0.549	0.136	0.329	0.643	0.872	0.643	0.678	0.799
	cross-val.	0.640	0.106	0.292	0.725	0.729	0.725	0.719	0.817
SVM	trening	0.773	0.227	0.317	0.827	0.829	0.827	0.822	0.938
	test	0.457	0.236	0.331	0.571	0.656	0.571	0.542	0.826
	cross-val.	0.682	0.234	0.328	0.763	0.704	0.763	0.726	0.852
MLP	trening	0.949	0.030	0.096	0.962	0.963	0.962	0.961	0.980
	test	0.624	0.105	0.251	0.714	0.829	0.714	0.739	0.941
	cross-val.	0.783	0.073	0.223	0.838	0.829	0.838	0.832	0.909
NB	trening	0.569	0.122	0.299	0.654	0.727	0.654	0.651	0.892
	test	0.366	0.156	0.349	0.500	0.593	0.500	0.505	0.819
	cross-val.	0.342	0.176	0.361	0.488	0.479	0.488	0.469	0.770

После израчунатог информационог добитка број атрибута је редукован и класификација је рађена на основу вредности следећих атрибута: брзина, начин припреме, 20 мин, 25 мин, 30 мин, хидромодул и надморска висина.

Табела 22. Резултати тестирања класификатора за класификацију према дужини трајања процеса припреме биљне дроге са редукованим бројем атрибута

		Kappa	MAE	RMSE	accuracy	precision	recall	F-Measure	AUC
J48	trening	0.772	0.087	0.208	0.827	0.820	0.827	0.816	0.953
	test	0.538	0.146	0.315	0.643	0.704	0.643	0.627	0.808
	cross-val.	0.587	0.129	0.294	0.688	0.693	0.688	0.676	0.831
Ibk	trening	1.000	0.028	0.038	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
	test	0.581	0.124	0.312	0.679	0.866	0.679	0.717	0.810
	cross-val.	0.593	0.117	0.311	0.688	0.700	0.688	0.687	0.797
SVM	trening	0.749	0.227	0.318	0.808	0.819	0.808	0.809	0.934
	test	0.515	0.234	0.328	0.607	0.734	0.607	0.585	0.896
	cross-val.	0.606	0.235	0.331	0.700	0.672	0.700	0.666	0.812
MLP	trening	0.871	0.062	0.163	0.904	0.917	0.904	0.892	0.979
	test	0.753	0.092	0.226	0.821	0.838	0.821	0.821	0.914
	cross-val.	0.632	0.109	0.261	0.725	0.661	0.725	0.689	0.877
NB	trening	0.528	0.131	0.300	0.615	0.747	0.615	0.623	0.909
	test	0.432	0.154	0.329	0.536	0.628	0.536	0.505	0.852
	cross-val.	0.389	0.169	0.336	0.525	0.542	0.525	0.512	0.798

Код класификације према дужини трајања припреме биљне дроге за процес хидродестилације тачност се креће између 0.488 (код методе наивног Бајесовог класификатора) и 0.83 (код неуронских мрежа). Прецизност и одзив су уједначени али у најбољем случају не прелазе 0.83. Капа статистиком сви класификатори показују солидно или средње слагање. AUC у највећем броју случајева класификаторе оцењује као фер или добре. Вредности MAE су између 0.07 и 0.24 а RMSE између 0.49 и 0.84.

Како оцене свих класификатора нису значајне, може се закључити да се класификација према дужини трајања припреме биљне дроге за процес хидродестилације може извршити са натполовичним успехом.

Класификација према дужини трајања бубрења

У табелама 23 и 24 приказани су резултати тестирања класификатора за класификацију према дужини трајања бубрења биљног материјала током процеса припреме за хидродестилацију.

Сви узорци обрађени у овом раду су у току процеса припреме за процес хидродестилације били подвргнути бубрењу у трајању од 24, 48 и 72 сата или су коришћени без бубрења.

Тестирана је могућност да се у одговарајуће четири класе разврстају подаци на основу атрибута који описују начин припреме, брзину, хидромодул, време припреме, страну, надморску висину и количину издвојеног уља у првих 5, 10, 15, 20 и 25 минута процеса хидродестилације.

Табела 23. Резултати тестирања класификатора за класификацију према дужини трајања бубрења са свим расположивим атрибутима

		Kappa	MAE	RMSE	accuracy	precision	recall	F-Measure	AUC
J48	trening	0.853	0.068	0.184	0.923	0.929	0.923	0.919	0.943
	test	0.540	0.119	0.289	0.821	0.815	0.821	0.815	0.804
	cross-val.	0.452	0.143	0.337	0.750	0.740	0.750	0.742	0.815
Ibk	trening	1.000	0.021	0.026	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
	test	0.594	0.108	0.289	0.821	0.851	0.821	0.818	0.920
	cross-val.	0.634	0.109	0.299	0.813	0.841	0.813	0.817	0.880
SVM	trening	0.789	0.261	0.329	0.885	0.860	0.885	0.870	0.949
	test	0.343	0.289	0.369	0.714	0.743	0.714	0.710	0.701
	cross-val.	0.205	0.306	0.391	0.675	0.606	0.675	0.637	0.569
MLP	trening	1.000	0.017	0.057	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
	test	0.656	0.078	0.254	0.857	0.862	0.857	0.847	0.982
	cross-val.	0.390	0.134	0.290	0.713	0.726	0.713	0.713	0.934
NB	trening	0.631	0.107	0.299	0.769	0.832	0.769	0.778	0.955
	test	0.344	0.179	0.380	0.643	0.785	0.643	0.669	0.890
	cross-val.	0.328	0.196	0.409	0.613	0.716	0.613	0.647	0.837

После израчунаог информационог добитка број атрибута је редукован и класификација је рађена на основу вредности следећих атрибута: хидромодул, време припреме, надморска висина, начин припреме, 10 мин, 20 мин, страна и брзина

Табела 24. Резултати тестирања класификатора за класификацију према дужини трајања бубрења са редукованим бројем атрибута

		Kappa	MAE	RMSE	accuracy	precision	recall	F-Measure	AUC
J48	trening	0.690	0.098	0.221	0.846	0.832	0.846	0.813	0.970
	test	0.273	0.142	0.282	0.786	0.672	0.786	0.720	0.852
	cross-val.	0.432	0.145	0.332	0.738	0.727	0.738	0.730	0.833
Ibk	trening	1.000	0.027	0.031	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
	test	0.170	0.159	0.366	0.714	0.683	0.714	0.698	0.668
	cross-val.	0.631	0.108	0.299	0.813	0.842	0.813	0.825	0.897
SVM	trening	0.720	0.272	0.346	0.846	0.832	0.846	0.832	0.925
	test	0.181	0.313	0.399	0.571	0.786	0.571	0.662	0.814
	cross-val.	0.239	0.306	0.391	0.700	0.618	0.700	0.652	0.570
MLP	trening	0.853	0.059	0.148	0.923	0.919	0.923	0.920	0.996
	test	0.368	0.130	0.288	0.750	0.786	0.750	0.767	0.964
	cross-val.	0.487	0.117	0.264	0.763	0.743	0.763	0.752	0.949
NB	trening	0.561	0.147	0.295	0.731	0.825	0.731	0.757	0.934
	test	0.403	0.191	0.351	0.679	0.850	0.679	0.724	0.927
	cross-val.	0.335	0.188	0.367	0.613	0.738	0.613	0.658	0.866

Код класификације према дужини трајања бубрења, слични резултати се постижу било да се користе сви расположиви атрибути, било да се класификација врши на основу редукованог броја атрибута.

Најлошију тачност (изнад 0.6) постиже наивни Бајесов класификатор док сви остали класификатори имају тачност већу од 0.7. Прецизност и одзив су релативно уједначени. Вредност Φ - мере је између 0.6 и 0.8.

Посматрајући Капа статистику, сви класификатори имају средње или солидно слагање. Најлошије резултате, посматрајући AUC меру, има алгоритам вектора подршке - фер оцена, најбоље резултате имају неуронске мреже – оцена одличан, док се сви остали класификатори оцењују као добри. За грешке се може уочити да је $0.07 < MAE < 0.3$ а $0.25 < RMSE < 0.4$. Посматрањем свих оцена може се закључити да се класификација према дужини трајања процена бубрења може користити као релативно успешна.

Класификација према експозицији терена

У табелама 25 и 26 приказани су резултати тестирања различитих класификатора за класификацију према положају терена на коме је убрана биљна дрога. На основу расположивих атрибута тестирана је могућност класификације узорака у једну од три класе које описују експозицију терена у односу на сунце.

Табела 25. Резултати тестирања класификатора за класификацију према експозицији терена на ком је убрана биљна дрога са свим расположивим атрибутима

		Kappa	MAE	RMSE	accuracy	precision	recall	F-Measure	AUC
J48	trening	0.709	0.183	0.302	0.816	0.830	0.816	0.805	0.896
	test	0.525	0.245	0.401	0.714	0.693	0.714	0.699	0.782
	cross-val.	0.537	0.200	0.392	0.714	0.692	0.714	0.695	0.845
Ibk	trening	1.000	0.026	0.027	1.000	1.000	1.000	1.000	0.990
	test	0.550	0.205	0.425	0.714	0.752	0.714	0.714	0.817
	cross-val.	0.606	0.176	0.398	0.753	0.739	0.753	0.745	0.807
SVM	trening	0.838	0.245	0.311	0.898	0.898	0.898	0.896	0.932
	test	0.489	0.310	0.402	0.679	0.687	0.679	0.658	0.841
	cross-val.	0.602	0.283	0.367	0.753	0.733	0.753	0.740	0.840
MLP	trening	0.968	0.022	0.083	0.980	0.981	0.980	0.979	0.986
	test	0.613	0.160	0.375	0.750	0.829	0.750	0.760	0.930
	cross-val.	0.568	0.197	0.402	0.727	0.725	0.727	0.725	0.856
NB	trening	0.649	0.165	0.343	0.776	0.801	0.776	0.775	0.927
	test	0.495	0.224	0.424	0.679	0.720	0.679	0.691	0.879
	cross-val.	0.572	0.196	0.389	0.727	0.744	0.727	0.727	0.880

После израчунатог информационог добитка број атрибута је редукован и класификација је рађена на основу вредности следећих атрибута: хидромодул, време припреме, брзина, 5 мин, 10 мин, 15 мин, 20 мин и 25 мин

Табела 26. Резултати тестирања класификатора за класификацију према експозицији терена на ком је убрана биљна дрога са редукованим бројем атрибута

		Kappa	MAE	RMSE	accuracy	precision	recall	F-Measure	AUC
J48	trening	0.770	0.156	0.279	0.857	0.862	0.857	0.854	0.900
	test	0.313	0.306	0.464	0.607	0.591	0.607	0.560	0.683
	cross-val.	0.613	0.188	0.362	0.753	0.756	0.753	0.753	0.852
Ibk	trening	1.000	0.026	0.027	1.000	1.000	1.000	1.000	0.989
	test	0.427	0.250	0.474	0.643	0.671	0.643	0.641	0.746
	cross-val.	0.552	0.201	0.428	0.714	0.723	0.714	0.718	0.790
SVM	trening	0.451	0.304	0.391	0.653	0.676	0.653	0.654	0.803
	test	0.252	0.365	0.466	0.500	0.630	0.500	0.513	0.738
	cross-val.	0.434	0.329	0.425	0.649	0.628	0.649	0.634	0.720
MLP	trening	0.935	0.055	0.130	0.959	0.960	0.959	0.959	0.992
	test	0.494	0.214	0.417	0.679	0.745	0.679	0.689	0.851
	cross-val.	0.527	0.223	0.394	0.701	0.700	0.701	0.700	0.838
NB	trening	0.496	0.217	0.409	0.673	0.684	0.673	0.669	0.869
	test	0.192	0.304	0.489	0.500	0.548	0.500	0.516	0.793
	cross-val.	0.421	0.250	0.440	0.636	0.615	0.636	0.617	0.815

Из табела се може видети да класификација рађена на основу вредности свих расположивих атрибута даје боље резултате од класификације рађене на основу вредности редукованог броја атрибута.

Тачност свих класификатора је око 0.7. Прецизност и одзив су уједначени (око 0.7). Капа статистика показује средње слагање. Класификатори се могу оценити као добри ако се посматра AUC мера. MAE се налази у границама од 0.16 до 0.31 а RMSE у границама од 0.36 до 0.42.

Из свих оцена класификатора може се закључити да се класификација узорака према положају терена може извршити са натполовичним успехом.

Класификација према надморској висини

У табелама 27 и 28 приказани су резултати тестирања класификатора за класификацију узорака према надморској висини на којој је убран биљни материјал. Дефинисано је 7 класа (600, 800, 850, 950, 1000, 1300 и 1600mm) у које је могуће разврстати све узорке.

Табела 27. Резултати тестирања класификатора за класификацију према надморској висини на којој је убрана биљна дрога са свим расположивим атрибутима

		Kappa	MAE	RMSE	accuracy	precision	recall	F-Measure	AUC
J48	trening	0.838	0.049	0.153	0.904	0.862	0.904	0.877	0.964
	test	0.754	0.060	0.199	0.857	0.898	0.857	0.874	0.886
	cross-val.	0.617	0.094	0.229	0.775	0.723	0.775	0.743	0.792
Ibk	trening	1.000	0.023	0.035	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
	test	0.873	0.045	0.140	0.929	0.929	0.929	0.929	0.955
	cross-val.	0.632	0.080	0.244	0.775	0.754	0.775	0.764	0.842
SVM	trening	0.841	0.205	0.303	0.904	0.857	0.904	0.876	0.961
	test	0.937	0.205	0.303	0.964	0.967	0.964	0.964	0.974
	cross-val.	0.614	0.213	0.315	0.775	0.706	0.775	0.738	0.805
MLP	trening	1.000	0.015	0.041	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
	test	0.936	0.026	0.101	0.964	0.967	0.964	0.964	0.996
	cross-val.	0.657	0.070	0.229	0.788	0.790	0.788	0.789	0.902
NB	trening	0.730	0.050	0.196	0.827	0.845	0.827	0.833	0.939
	test	0.452	0.093	0.263	0.679	0.711	0.679	0.689	0.857
	cross-val.	0.371	0.123	0.318	0.600	0.627	0.600	0.606	0.746

После израчунатог информационог добитка број атрибута је редукован и класификација је рађена на основу вредности следећих атрибута: хидромодул, време припреме, брзина, страна, бубрење, начин припреме, 20 мин и 25 мин

Табела 28. Резултати тестирања класификатора за класификацију према надморској висини на којој је убрана биљна дрога са редукованим бројем атрибута

		Kappa	MAE	RMSE	accuracy	precision	recall	F-Measure	AUC
J48	trening	0.607	0.109	0.229	0.769	0.636	0.769	0.696	0.864
	test	0.800	0.082	0.181	0.893	0.832	0.893	0.860	0.881
	cross-val.	0.575	0.098	0.238	0.750	0.691	0.750	0.716	0.786
Ibk	trening	1.000	0.029	0.042	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
	test	0.873	0.047	0.140	0.929	0.967	0.929	0.940	0.947
	cross-val.	0.692	0.071	0.223	0.813	0.790	0.813	0.801	0.866
SVM	trening	0.707	0.208	0.307	0.827	0.724	0.827	0.766	0.897
	test	0.799	0.206	0.304	0.893	0.829	0.893	0.860	0.901
	cross-val.	0.635	0.213	0.315	0.788	0.720	0.788	0.751	0.811
MLP	trening	1.000	0.023	0.061	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
	test	0.813	0.046	0.150	0.893	0.931	0.893	0.908	0.966
	cross-val.	0.657	0.068	0.216	0.788	0.788	0.788	0.788	0.916
NB	trening	0.728	0.069	0.203	0.827	0.815	0.827	0.817	0.925
	test	0.742	0.081	0.206	0.857	0.829	0.857	0.840	0.911
	cross-val.	0.533	0.095	0.255	0.725	0.662	0.725	0.690	0.789

Резултати класификације над комплетним скупом атрибута и резултати класификације над редукованим скупом атрибута су слични.

Провера тачности коришћењем скупа података за тестирање даје боље резултате од провере унакрсном валидацијом.

Најлошији резултати се постижу коришћењем наивног Бајесовог класификатора. Сви остали класификатори имају тачност већу од 0.77. Прецизност и одзив су уједначени и веома високи. Капа статистика показује

значајно слагање. AUC вредности показују да су класификатори добри. MAE не прелази 0.21 а RMSE 0.3.

Посматрајући све наведене показатеље може се закључити да класификација узорака према надморској висини може у већини случајева бити успешна.

7.3. Уочене зависности

Након извршене класификације уочена је зависност између појединих атрибута који се односе не само на сам процес хидродестилације, већ и на припрему и порекло биљног материјала. Из уочених зависности које без коришћења техника истраживања података нису лако уочљиве генеришу се и закључци.

Узорци су описани помоћу више атрибута. Један (излазни) атрибут својим вредностима означава класу којој узорак припада.

Из претходних табела у којима су приказани резултати класификације, може се уочити да се са веома великом поузданошћу могу извршити поједине класификације. Из табеле 27 се уочава да је број коректно класификованих узорака према надморској висини скоро у свим посматраним алгоритмима изузетно велики (провером помоћу тест скупа изнад 77% а провером помоћу унакрсне валидације изнад 90%). Такође нпр. из табеле 25 се уочава да је број коректно класификованих узорака према експозицији терена преко 70%.

Осим резултата класификације приказаних у претходним табелама помоћу различитих оцена класификатора, коришћењем програмског пакета Weka се генеришу и резултати којима је изражена прецизна зависност појединих атрибута.

Тако на пример:

- уколико је надморска висина на којој је убран биљни материјал 850 *m* и количина издвојеног етарског уља у првих 15 минута процеса хидродестилације већа од 1.3 *ml*, може се скоро са сигурношћу тврдити да је биљни материјал убран са осунчане стране
- уколико је надморска висина 950 *m*, а за 10 минута процеса хидродестилације се издвоји мање од 0.7 *ml* етарског уља, може се закључити да је биљни материјал убран са неосунчане стране.
- уколико је однос вода:биљни материјал једнак 4:1, надморска висина на којој је убран биљни материјал 950 *m* и уколико се у првих 20 минута процеса хидродестилације издвоји више од 1.17 *ml* етарског уља са великом сигурношћу се може тврдити да је уситњавање биљног материјала у току процеса припреме вршено млевењем.
- уколико је у првих 20 минута процеса хидродестилације издвојено мање од 1.6 *ml* а више од 0.92 *ml* етарског уља, а за 30 минута издвојено више од 1.34 *ml* етарског уља скоро са сигурношћу се може тврдити да је биљни материјал убран на надморској висини од 850 *m*.
- уколико је брзина хидродестилације већа од 7.53 *ml/min* и време припреме биљног материјала 5 минута готово сигурно се може рећи да је узорак припремљен тако да је однос вода:биљни материјал 3:1.

Закључак

Развој метода и техника које су „способне да решавају проблеме“ прилагођавајући се природи проблема који треба да реше, постаје суштински захтев савременог технолошког развоја.

За моделовање физичких процеса могу се успешно применити технике истраживања података. У раду је приказана примена техника истраживања података за моделовање кинетике хидродестилације етарских уља, као и њихов практичан значај.

Коришћењем поступка нелинеарне регресионе анализе, на основу добро претпостављеног облика једначине, реализован је математички модел који верно описује кинетику процеса хидродестилације етарског уља. Предложени полиномно-логаритамски модел је једноставнији од оних у доступној литератури и доста тачно „симулира“ измерене вредности, што се може закључити на основу броја итерација потребних софтверу у коме се одређује вредност коефицијената модела за сваки засебан узорак. Анализом статистичких показатеља одступања добијених вредности применом овог модела у односу на мерене вредности и њиховим упоређивањем са одговарајућим показатељима друга два у литератури најзаступљенија модела, може се закључити да је предложени модел супериорнији јер даје боље слагање са експериментално добијеним подацима.

Потенцијално укупна количина етарског уља која се може издвојити из биљног материјала је вредност која се за једну биљну врсту не може утврдити у виду константе, јер на принос етарског уља утиче велики број фактора. Зато је од практичног интереса проналажење поступка за нумеричко одређивање приноса за сваки узорак биљног материјала (са сличним карактеристикама) чиме би се постигла уштеда и у ресурсима и у времену. Како би се експериментално одредила ова величина, потребно је у великом интервалу времена изводити процес хидродестилације који је том приликом прилично скуп. У доступној литератури аутори радова у својим истраживањима у циљу поједностављења узимају за укупну количину последњу измерену вредност издвојене количине без обзира на дужину трајања процеса.

Модификацијом предложеног полиномно-логаритамског модела кинетике процеса хидродестилације омогућено је по први пут нумеричко одређивање потенцијално укупне количине издвојеног етарског уља са великом тачношћу, што је показано упоређивањем вредности добијених на основу модела и вредности добијених мерењима у процесима који су доста дуго трајали.

Познавање математичког модела који описује кинетику процеса хидродестилације представља одличну основу за одређивање оптималног времена трајања тог процеса. У почетку процеса хидродестилације етарско уље се издваја веома брзо, док се при крају процеса уље издваја споро и количина извојеног уља у тој фази је веома мала. Оптимално време процеса указује када процес постаје неисплатив и одређивање оптималног времена је од пресудног

значаја за постизање максималне добити. У раду је развијен и оригинални софтвер који омогућује процену тренутка до када је исплативо издвајање уља на основу вредности мерења издвојене количине уља у почетној фази процеса хидродестилације. Коришћењем математичког модела се на основу мерених вредности у релативно кратком временском интервалу трајања процеса утврђује зависност количине издвојеног уља у времену, као и потенцијално укупна количина етарског уља која се може издвојити из посматраног узорка. Исто тако се може израчунати и зависност трошкова самог процеса издвајања у току времена. На основу одређеног алгорита се одређује када процес треба зауставити, односно, када трошкови процеса постају знатно већи од прираштаја издвојеног уља. И овај резултат има велики практични допринос, јер се може употребити у индустрији.

Узорци који учествују у процесу издвајања уља имају одређена својства која на први поглед нису повезана. Анализом вредности тих својстава (надморска висина узорка, страна планине са које је узорак убран, начин припреме узорка, итд.), експериментално добијених података о променама вредности величина у току процеса и упоређивањем тих података са групама вредности особина коју узорци имају, откривене су одређене скривене зависности. Тако се нека својства узорака могу одредити на основу познавања вредности других својстава за исти узорак са прилично великом сигурношћу.

Овај рад садржи низ оригиналних научних доприноса који се односе на примену метода истраживања података, анализу технолошких процеса као и на препознавање карактеристика узорака. Доказана је могућност употребе техника истраживања података на процес кинетике хидродестилације етарских уља из биљног материјала.

Даљи ток истраживања би могао бити усмерен на: одређивање модела других процеса, коришћење техника истраживања података за предвиђање других величина од интереса у технолошким процесима као и на препознавање скривених законитости на другим узорцима.

Резултати овог рада отварају могућности даљег истраживања у области развоја модела за праћење процеса и откривања законитости у подацима

Литература

- [1] Fayyad U., Shapiro G. P. and Smyth P., (1996). From Data Mining to Knowledge Discovery in Databases, *AI Magazine*, Vol. 17, Issue 3, ISSN 0738-4602, pp. 37-54.
- [2] Aggarwal C. C., (2015). *Data Mining: The Textbook*, Springer Cham Heidelberg New York Dordrecht London.
- [3] Kohavi R., John G. H., (1997). Wrappers for feature subset selection. *Artificial Intelligence*, 97(1-2), 273–324.
- [4] Станојевић Љ., Вељовић А., (2008). Развој методологије пројектовања пословне интелигенције, Монографија, Мегатренд универзитет примењених наука, Београд.
- [5] Сукновић М., Делибашић Б., (2010). Пословна интелигенција и системи за подршку одлучивању, COBISS.SR-ID 172016396, ФОН, Београд.
- [6] Xin Y., Xiao G. S., (2009). *Linear Regression Analysis - Theory and Computing*, World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd.
- [7] Чобановић К., Николић-Ђорић Е., Мутавџић Б., (1999). Теоријски и практични аспекти модела нелинеарне регресије, Зборник извода радова, Југословенски конгрес прехранбеног, фармацеутског и хемијског инжењерства са међународним учешћем, Универзитет у Новом Саду, Технолошки факултет, Нови Сад.
- [8] *Engineering Statistics Handbook*, 4.1.4.2 Nonlinear Least Squares Regression, <http://www.itl.nist.gov/div898/handbook/pmd/section1/pmd142.htm>, 1-3.
- [9] Marquardt D. W., (1963). An algorithm for least-squares estimation of nonlinear parameters, *Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics* 11 431-441.
- [10] Breiman L., Friedman J. H., Olshen R. A., Stone C. J., (1984). *Classification and Regression Trees*, Boca Raton, London, New York, Washington, D. C.: Chapman & Hall/CRC.
- [11] Quinlan J. R., (1986). "Induction of Decision Trees", *Readings in Machine Learning*, 1:81-106.
- [12] Quinlan J. R., (1993). *C4. 5: Programs for machine learning*, Morgan Kaufmann, San Francisco, CA.
- [13] Quinlan R. J., (1992). "Learning with Continuous Classes", In 5th Australian Joint Conference on Artificial Intelligence, pp. 343-348, Singapore.
- [14] Shannon, C. E. (1948). A mathematical theory of communication, *Bell System Technical Journal*, 379–423 and 623–656.
- [15] Apte C, Weiss S., (1997). Data Mining with Decision Trees and Decision Rules. *Future Generation Computer Systems*, Vol. 13, 197-210.
- [16] Hastie T., Tibshirani R., Friedman J., (2008). *The Elements of Statistical Learning*. – Springer.

- [17] Новаковић Ј. Ђ., (2013). Решавање класификационих проблема машинског учења, Реинжењеринг пословних процеса, Факултет техничких наука у Чачку Универзитет у Крагујевцу.
- [18] Wang Y., Witten I. H., (1996). Induction of model trees for predicting continuous classes, In Poster papers of the 9th European Conference on Machine Learning.
- [19] Han J., Kamber M., (2006). Data Mining: Concepts and Techniques, Morgan Kaufmann Publishers.
- [20] Tan P. N. et al., (2007). Introduction to data mining. Pearson Education India.
- [21] Vapnik, V., Kotz, S., (2006). Estimation of dependences based on empirical data. Springer Science & Business Media.
- [22] Busuttill S. Abela J., Pace G. J., (2004). Support Vector Machines" Department of Computer Science and AI, University of Malta, Msida MSD 06.
- [23] Fletcher T., (2009). Support Vector Machines Explained, <http://www.tristanfletcher.co.uk/SVM%20Explained.pdf>
- [24] Bishop C., (2006). Pattern Recognition and Machine Learning, Springer-Verlag, New York.
- [25] Gurney K., (2004). An introduction to neural networks, Taylor & Francis e-Library, ROUTLEDGE.
- [26] Cubenko G., (1989). Approximation by superposition of sigmoidal function. Mathematics of control, Signals and Systems 2, pp. 303-314.
- [27] Kriesel D., (2011). A Brief Introduction to Neural Networks (ZETA2-EN), dkriesel.com.
- [28] Haykin, S., Haykin, S., (2009). Neural networks and learning machines. New York: Prentice Hall/Pearson.
- [29] Миљковић З., Александрић Д., (2009). Вештачке неуронске мреже - збирка решених задатака са изводима из теорије, Универзитет у Београду, Машински факултет.
- [30] Dobbin K. K. and Simon R. M., (2011). Optimally splitting cases for training and testing high dimensional classifiers, BMC Medical Genomics, 4:31.
- [31] Borovicka T., Marcel J. Jr., Pavel K., and Marcel J., (2012). Selecting Representative Data Sets. In: Advances in Data Mining Knowledge Discovery and Applications. InTech.
- [32] Guillet F., Hamilton H. J., (2007). Quality measures in data mining, Studies in Computational Intelligence, Springer-Verlag Berlin, Heidelberg.
- [33] Cichosz, P., (2015). Data Mining Algorithms: Explained Using R., John Wiley & Sons.
- [34] Akaike H., (1974). A new look at the statistical model identification, IEEE Trans. on Autom. Control 19(6), 716 - 723.
- [35] Schwarz G., (1978). Estimating the dimension of a model, The Annals of Statistics, Vol. 6, No. 2, pp. 461-464.
- [36] Witten I. E., Mark F. H., (2011). Data Mining: Practical Machine Learning Tools and Techniques 3rd Edition, Morgan Kaufmann.

- [37] Миловановић Г., Станимировић П., (2002). Символичка имплементација нелинеарне оптимизације, Ниш.
- [38] Eykhoff, P., (1974). System identification: Parameter and State Estimation. London: John Wiley & Sons.
- [39] Kurtanjek Ž., Magdić D., (2005). Matematičko modeliranje procesa. PBF Zagreb – PTF Osijek.
- [40] Ledder G., (2013). Mathematics for the Life Sciences, Calculus, Modeling, Probability, and Dynamical Systems Springer Science+Business Media, LLC.
- [41] Ранђеловић В., Матејић Ј., Митић З., (2012). Практикум из систематике и екологије лековитих биљака. Графичко издавачко предузеће Пунта и Биолошко друштво “Др Сава Петровић”, Ниш.
- [42] Sangwan N. S., Farooqi, A. H. A., Shabih F., Sangwan R.W., (2001). Regulation of essential oil production in plants. Plant Growth Regul., 34, 3–21.
- [43] Baser K. H. C. & Demirci F., (2007). Chemistry of essential oils, p.43-86. In: Berger R.G. (Ed.), Flavors and Fragrances: chemistry, bioprospecting and sustainability. Springer, Heidelberg.
- [44] Kohlert C., van Rensen I, März R, Schindler G, Graefe E U, Veit M, (2000). Bioavailability and pharmacokinetics of natural volatile terpenes in animals and humans, Planta medica 66 (6), 495-505.
- [45] Ковачевић Н., (2004). Основи фармакогнозије, треће издање, Институт за фармакогнозију, Фармацеутски факултет, Универзитет у Београду, Српска школска књига, Београд.
- [46] History of Essential Oils - <http://www.essanteorganics.com>
- [47] Бугарин Д., (2010). Антиоксидантни, антимикробни и антимулагени потенцијал врсте *Myrtus Communis* L., докторска дисертација, Универзитет у Новом Саду, Природно-математички факултет.
- [48] Петровић С. С., (2014). Утицај различитих техника екстракције и дестилације на хемијски састав етарског уља и екстраката из биљних врста рода *Thymus* L, докторска дисертација, Универзитет у Нишу Технолошки Факултет у Лесковцу.
- [49] Van de Braak S. A. A. J., Leijten, G. C. J. J., (1999). Essential Oils and Oleoresins: A Survey in the Netherlands and other Major Markets in the European Union. CBI, Centre for the Promotion of Imports from Developing Countries, Rotterdam, p. 116.
- [50] Diaz M. S., Brignole, E. A., (2009). Modeling and optimization of supercritical fluid processes, J. Supercrit. Fluids. 47, 611–618.
- [51] Лесјак М., (2011). Биопотенцијал и хемијска карактеризација екстраката и етарских уља врста рода *Juniperus* L., докторска дисертација, Природно-математички факултет Департман за хемију, биохемију и заштиту животне средине, Нови Сад.
- [52] Милојевић С., (2011). Кинетика хидродестилације, карактеризација и фракционисање етарског уља плода клеке (*Juniperis communis* L.), докторска дисертација, Универзитет у Београду, Технолошко-металуршки факултет, Београд.

- [53] Glišić S., Milojević S. Ž., Dimitrijević S. I., Orlović A. M., Skala D. U., (2007). Antimicrobial activity of the essential oil and adifferent fractions of *Juniperus communis* L. and a comparison with some commercial antibiotics, J. Serb. Chem. Soc 72(4), 311-320.
- [54] Павићевић В. П., (2016). Безотпадна технологија прераде плода клеке (*Juniperus communis* L.), докторска дисертација, Универзитет у Београду, Технолошко-металуршки факултет.
- [55] Butkienė R., Nivinskienė O., Mockutė D., (2004). Chemical composition of unripe and ripe berry essential oils of *Juniperus communis* L. growing in Vilnius district, Chemija 15, 57–63.
- [56] Tasić S. R., Menković N. R., Ristić M. S., Kovačević N. N., Samardžić Z. J., (1993). Comparative studies of juniper berry oil from different regions of the central Balkan, Acta Horticulture 334, 574–577.
- [57] Damjanović B., Skala D., Petrović-Djakov D., Baras J., (2003). A comparison between the oil, hexane extract and supercritical carbon dioxide extract of *Juniperus communis* L., J. Essent. Oil Res. 15, 91–93.
- [58] Chatzopoulou P. S., Katsiotis S. T., (1995). Procedures influencing the yield and the quality of the essential oil from *Juniperus communis* L. berries, Pharm. Acta Helv. 70, 247–253.
- [59] Barjaktarević B., Sovilj M., Knez Ž., (2005). Chemical composition of *Juniperus communis* L. fruits supercritical CO₂ extracts: dependence on pressure and extraction time, J. Agric. Food. Chem. 53, 2630–2636.
- [60] Damjanović B., Skala D., Baras J., Petrović-Djakov D., (2006). Isolation of essential oil and supercritical carbon dioxide extract of *Juniperus communis* L. fruits from Montenegro, Flavour Fragr. J. 21, 875–880.
- [61] Marongiu B., Porcedda S., Piras A., Sanna G., Murreddu M., Loddo R., (2006). Extraction of *Juniperus communis* L. ssp. *nana* Willd. essential oil by supercritical carbon dioxide, Flavour Fragr. J. 21, 148–154.
- [62] Лепојевић Ж., (2000). Практикум хемије и технологије фармацеутских производа, Технолошки факултет Нови Сад.
- [63] Benyoussef E. H., Hasni S., Belabbes R., Bessiere J. M., (2002). Modélisation du transfert de matière lors de l'extraction de l'huile essentielle des fruits de coriandre, Chem. Eng. J. 85, 1–5.
- [64] Cassel E., Vargas R. M. F., (2006). Experiments and Modeling of the Cymbopogon winterianus Essential oil Extraction by Steam Distillation, J. Mex. Chem. Soc. 50, 126-129.
- [65] Јовановић Б., (1984). Нумеричка анализа, Природно математички факултет Универзитета у Београду.
- [66] Farhana N. A., Lutfi N. A., Atan F. M., Rahman N. A., Salleh S. F., Wahab N. A., (2016). Study On Mathematical Model In Simulating Cymbopogon Winterianus Essential Oil Extraction By Steam Distillation, Journal of Applied Science & Process Engineering, 3 (1). pp. 1-16.

- [67] Boutekedjiret C., Bentahar F., Belabbes R., Bessiere J., (2005). Comparative study of the kinetics extraction of rosemary essential oil by steam distillation and hydrodistillation, *Récent. Prog. Génie Procédés* 92.
- [68] Hancı S. S., Sahin S., Yılmaz L., (2003). Isolation of volatile oil from thyme (*Thymbra spicata*) by steam distillation, *Nahrung/Food* 47, 252–255.
- [69] Koul V. K., Gandotra B. M., Koul S., Ghosh S., Tikoo C. L., Gupta A. K., (2004). Steam distillation of lemon grass (*Cymbopogon spp.*), *Ind. J. Chem. Technol.* 11, 135-139.
- [70] Sowbhagya H. B., Sampathu S. R., Krishnamurthy N.,(2007). Evaluation of size reduction on the yield and quality of celery seed oil, *Journal of Food Engineering* 80, 1255–1260.
- [71] Sowbhagya H. B., Sathiendra Rao B. V., Krishnamurthy N., (2008). Evaluation of size reduction and expansion on yield and quality of cumin (*Cuminum cuminum*) seed oil. *Journal of Food Engineering*, 84, 595-600.
- [72] Morin P., Gunther C., Peyron L., Richard H., (1985). Etude des phénomènes physico-chimiques intervenant lors du procédé d'hydrodistillation, *Bulletin de la Société chimique de France* 5, 921-930.
- [73] Romdhane M., Tizaoui C., (2005). The kinetic modelling of a steam distillation unit for the extraction of aniseed (*Pimpinella anisum*) essential oil, *J. Chem. Technol. Biotechnol.* 80, 759–766.
- [74] Sovova H., Aleksovski S., (2006). Mathematical model for hidrodistillation of essential oils, *Flavour Fragr. J.* 21, 881-889.
- [75] Milojević S. Ž., Stojanović T. D., Palić R., Lazić M. L., Veljković V. B., (2008). Kinetics of distillation of essential oil from comminuted ripe juniper (*Juniperus communis* L.) berries, *Biochem. Eng. J.* 39, 547–553.
- [76] Глишић С., (2003). Фракционо раздвајање етарског уља клеке, дипл. рад, Универзитет у Београду, Технолошко-металуршки факултет, Београд.
- [77] Симић М., (2011). Карактеризација етарског уља плода клеке добијеног хидродестилацијом микроталасним загревањем, дипл. рад, Универзитет у Београду, Технолошко–металуршки факултет, Београд.
- [78] Симић С., (2011). Карактеризација етарског уља плода клеке добијеног хидродестилацијом стандардним електричним загревањем, дипл. рад, Универзитет у Београду, Технолошко–металуршки факултет, Београд.
- [79] Марковић М., (2011). Утицај станишта биљке и уситњавање плода на принос, састав и кинетику хидродестилације уља клеке, дипл. рад, Универзитет у Приштини, Факултет техничких наука, Косовска Митровица.
- [80] Радовић М., (2012). Испитивање кинетике хидродестилације плода клеке (*Juniperus communis* L.), дипл. рад, Универзитет у Београду, Технолошко–металуршки факултет, Београд.
- [81] Silou T., Malanda M., Loubaki L., (2004). Optimisation de l'extraction de l'huile essentielle de *Cymbopogon citratus* grace a un plan factoriel complet 23, *J. Food Eng.* 65, 219–223.

- [82] Benyoussef E. H., Hasni S., Belabbes R., Bessiere J.M., (2002). Modélisation du transfert de matière lors de l'extraction de l'huile essentielle des fruits de coriandre, Chem. Eng. J. 85, 1-5.
- [83] Veličković D., Ristić M., Stojiljković D., Šmelcerović A., (2001). Kinetics of obtaining the essential oil by different technological procedures from flowers, leaves and stems of sage (*Salvia officinalis* L.), Lek. sirov. 21, 67-72.
- [84] Babu G. D. K., Singh B., (2009). Simulation of *Eucalyptus cinerea* oil distillation: A study on optimization of 1,8-cineole production, Biochem. Eng. J. 44, 226-231.
- [85] Stanojević Lj., Stanković M., Cakić M., Nikolić V., Nikolić Lj., Ilić D., Radulović N., (2011). The effect of hydrodistillation techniques on yield, kinetics, composition and antimicrobial activity of essential oils from flowers of *Lavandula officinalis* L., Hem. Ind. 65, 455-463.
- [86] Bousbia N., Vian M. A., Ferhat M. A., Petitcolas E., Meklati B. Y., Chemat F., (2009). Comparison of two isolation methods for essential oil from rosemary leaves: Hydrodistillation and microwave hydrodiffusion and gravity, Food Chem. 114, 355-362.
- [87] Miletić P., Grujić R., Marjanović-Balaban Ž., (2009). The application of microwaves in essential oil hydrodistillation processes, Chem. Ind. Chem. Eng. Q. 15, 37-39.
- [88] Cassel E., Vargas R. M. F., Martinez N., Lorenzo D., Dellacassa E., (2009). Steam distillation modeling for essential oil extraction process, Industrial crops and products 29 (1), 171-176.
- [89] Pornpunyapat J., Chetpattananondh P. and Tongurai C., (2011). Mathematical modeling for extraction of essential oil from *Aquilaria crassna* by hydrodistillation and quality of agarwood oil, A Journal of the Bangladesh Pharmacological Society (BDPS) Bangladesh J Pharmacol, 6: 18-24.
- [90] Gavahian M., Farahnaky A., Majzoobi M., Javidnia K., Saharkhiz M. J., Mesbahi G., (2011). Ohmic-assisted hydrodistillation of essential oils from *Zataria multiflora* Boiss (Shirazi thyme), Int. J. Food Sci. Technol. 46, 2619-2627.
- [91] Masango P., (2005). Cleaner production of essential oils by steam distillation, J Clean Prod. 13, 833-839.
- [92] Stanković M. Z., Nikolić N. C., Stanojević Lj. P., Cakić M. D., (2004). The effect of hydrodistillation technique on the yield and composition of essential oil from the seed of *Petroselinum crispum* (Mill.) Nym.ex.A.W.Hill., Hem. Ind. 58, 409-412.
- [93] Hasmita I., Adisalamun, Alam P. N., Mahlinda, Supardan D. M., (2015). Effect of Drying and Hydrodistillation Time on the Amount of Ginger Essential Oil, International Journal on Advanced Science, Engineering and Information Technology, Vol.5, No. 5, ISSN: 2088-5334.
- [94] Megawati M., Handayani P. A., Sediawan W. B., (2013). Extraction of *P. cubeba* Essential Oil by Microwave Assisted Hydrodistillation: Modeling and Process Optimization, American Journal of Oil and Chemical Technologies,; Vol. 1, Issue 10, December 2326-6570.

- [95] Ellouze I., (2014). Manef Abderrabba, Kinetics of extraction of *Citrus aurantium* essential oil by hydrodistillation: influence on the yield and the chemical composition, J. Mater. Environ. Sci. 5 (3), 841-848, ISSN : 2028-2508 CODEN: JMESCN.
- [96] Viana M. A., Fernandezb X., Visinonic F., Chemata F., (2008). Microwave hydrodiffusion and gravity, a new technique for extraction of essential oils, Journal of Chromatography A, 1190, 14–17.
- [97] Kusuma H. S., Mahfud M., (2016). Microwave-assisted Hydrodistillation for Extraction of Essential Oil from Patchouli (*Pogostemon cablin*) Leaves, Periodica Polytechnica Chemical Engineering, OnlineFirst, paper 8676.
- [98] Chenni M., El Abed D., Rakotomanomana Nj., Fernandez X. and Chemat F., (2016). Comparative Study of Essential Oils Extracted from Egyptian Basil Leaves (*Ocimum basilicum* L.) Using Hydro-Distillation and Solvent-Free Microwave Extraction, Molecules, 21, 113.
- [99] Bertouche S., Sahraoui N., Boutekedjiret C., (2016). Extraction of Thyme (*Thymus pallecens* de Noé) Essential Oil by Steam-Distillation, Steam-Diffusion and Hydro-Distillation Processes: Optimization of Operating Conditions and Antioxidant Activity. Available from: https://www.researchgate.net/publication/261645104_Extraction_of_Thyme_Thymus_pallecens_de_Noé_Essential_Oil_by_Steam-Distillation_Steam-Diffusion_and_Hydro-Distillation_Processes_Optimization_of_Operating_Conditions_and_Antioxidant_Activity.
- [100] Kapás Á., András C. D., Dobre T. Gh., Vass E., Székely G., Stroescu M., Lányi S., Ábrahám B., (2011). The kinetic of essential oil separation from fennel by microwave assisted hydrodistillation (MWHd), U.P.B. Sci. Bull., Series B, Vol. 73, Iss. 4, ISSN 1454-2331.
- [101] Ammar A. Haj, Meniai A. H., Zagrouba F., (2014). Experimental Study and Modeling of Essential Oil Extraction from Plants by Hydrodistillation, Chem. Eng. Technol., 37, No. 00, 1–9.
- [102] Stanisavljević I. T., Lazić M. L., Veljković V. B., Stojičević S. S., Veličković D. T., Ristić M. S., (2009). Kinetics of Hydrodistillation and Chemical Composition of Essential Oil from Cherry Laurel (*Prunus laurocerasus* L. var. *serbica* Pančić), Planta Medica, DOI: 10.1055/s-0029-1234798.
- [103] András C. D., Salamon R. V., Barabás I., Volf I., Szép A., (2015). Influence of extraction methods on caraway (*Carum carvi* L.) essential oil yield and carvone/limonene ratio, Environmental engineering and management journal.
- [104] Zeković Z., Bušić A., Komesb D., Vladić J., Adamović D., Pavlić B., (2015). Coriander seeds processing: Sequential extraction of non-polar and polar fractions using supercritical carbon dioxide extraction and ultrasound-assisted extraction, Food and bioproducts processing 95, 218–227.
- [105] Mebrouk K., Saibi S., Nacer-Bey N., Benyoussef E.H., (2012). Modelling of Water Distillation Kinetic of *Pistacia lentiscus* L. Essential Oil, Journal of essential oil-bearing plants JEOP.
- [106] Bensebia O., Allia K., (2015). Drying and Extraction Kinetics of Rosemary Leaves: Experiments and Modeling, Journal of Essential Oil Bearing Plants, 18:1, 99-111.

- [107] Misir R., Mitra M., (2015). A Study on Benchmarking Parameters for Intelligent Systems, *International Journal of Computer Sciences and Engineering* Vol.-3(1), PP(10-17).
- [108] Pavićević V., Milojević S., Radosavljević D., Veljković V, Ristić M., (2013). Energy consumption optimization of essential oil hydrodistillation from juniper berries, *Proceedings of VI International Conference on Sustainable Energy and Environmental Protection (SEEP)*, Maribor, Slovenia, 601–607.
- [109] Radosavljević D., Ilić S., Milojević S., Bojović Ž., Marković M, (2017). Modeling the kinetics of essential oil hydrodistillation from juniper berries (*Juniperus communis* L.) using non-linear regression, *Chemical Industry* pp 48-48; doi:10.2298/HEMIND160715048R.
- [110] Bates D. M., Watts D. G., (1988). *Nonlinear Regression Analysis and Its Applications*, Wiley, New York.
- [111] Benšić M., Šuvak N., (2013). *Primijenjena statistika*, Sveučilište J. J. Strossmayera u Osijeku Odjel za matematiku, Osijek.
- [112] Cerpa M. G., Mato R B., Cocero M. J., (2008). Modeling steam distillation of essential oils: application to lavandin super oil, *AIChE J.* 54, 909–917.
- [113] Chang W., (2013). *R Graphics Cookbook*, O'Reilly, Sebastopol, CA.
- [114] Draper N. R., Wiley H. S., (1998). *Applied Regression Analysis*, Third Edition, New York.
- [115] Elzhov T., Mullen K, Spiess A., Bolker B., (2015). R Interface to the Levenberg-Marquardt Nonlinear Least-Squares Algorithm Found in MINPACK, Plus Support for Bounds, R Packag version 1, 1-9.
- [116] Gildemeister E., (1913). *The Volatile Oils Vol1*, John Wiley And Sons, (<http://chestofbooks.com/health/aromatherapy/The-Volatile-Oils-Vol1/index.html>)
- [117] Graybill F., Iyer H., (1994). *Regression Analysis: Concepts and Applications*, Duxbury Press, Belmont, CA, 1994.
- [118] Kabacoff R. I., (2011). *R in Action - Data Analysis and Graphics with R*, Second Edition, Manning Publications Co., Shelter Island.
- [119] Kaul V. K., Gandotra B. M., Koul S., Ghosh S., Tikoo C. L., Gupta A. K., (2004). Steam distillation of lemon grass (*Cymbopogon spp.*), *Ind. J. Chem. Technol.* 11, 135–139.
- [120] Lourakis M. I. A., (2005). A Brief Description of the Levenberg-Marquardt Algorithm Implemented by Levmar, *Foundation of Research and Technology*, Vol. 4, pp. 1-6.
- [121] McPherson G., (2001). *Applying and Interpreting Statistics: A Comprehensive Guide*, Springer Science+Business Media, New York.
- [122] Milojević S., Glišić S., Skala D., (2010). The batch fractionation of *Juniperus communis* L. essential oil: experimental study, mathematical simulation and process economy, *Chem. Ind. Chem. Eng. Q.* 16(2), 183-191.
- [123] Milojević S., Radosavljević D., Pavićević V., Pejanović S., Veljković V., (2013). Modeling the kinetics of essential oil hydrodistillation from plant materials, *Hem. Ind.*, Vol 67, 843–859.

- [124] MIT Open Course Ware, Data Mining course, (2003). dostupno u elektronskoj formi na adresi: <http://ocw.mit.edu/OcwWeb/Sloan-School-of-Management/15-062Data-MiningSpring2003/CourseHome/>
- [125] More J., (1978). The Levenberg-Marquardt algorithm: implementation and theory,"in Lecture Notes in Mathematics 630: Numerical Analysis, G.A. Watson (Ed.), Springer-Verlag: Berlin, 105-116.
- [126] Motulsky H. J., Ransnas L. A., (1987). Fitting curves to data using nonlinear regression: a practice and nonmathematical review, FASEB J., 365-374.
- [127] Pavićević V., Marković M., Milojević S., Ristić M., Povrenović D. and Veljković V., (2016). Microwave-assisted hydrodistillation of juniper berry essential oil: kinetic modeling and chemical composition, Journal of chemical technology and biotechnology, vol. 91 br. 4, str. 883-891.
- [128] Ritz C., Streibig J. C., (2008). Nonlinear Regression with R, Springer Science & Business Media, New York.
- [129] Schlosser Š., (2011). Distillation – from Bronze Age till today, 38th International Conference of Slovak Society of Chemical Engineering, Tatranské Matliare, Slovakia May 23 – 27.
- [130] Seber G. A. F., Wild C. J., (1989). Nonlinear Regression, Wiley, New York.
- [131] Skala D., Žižović I., Petrović S., (1999). Etarska ulja – destilacija, ekstrakcija, izbor tehnologije i kvalitet, Hem. Ind. 53, 123-139.
- [132] Smith G., (2013). Econometric Principles and Data Analysis, Centre for Financial and Management Studies SOAS, University of London, London.
- [133] Smyth G. K., (2002). Nonlinear regression, Volume 3, pp 1405–1411 in Encyclopedia of Environmetrics, John Wiley & Sons, Chichester.
- [134] Sowbhagya H. B., Rao B. V. S. and Krishnamurthy N., (2008). Evaluation of size reduction and expansion on yield and quality of cumin (*Cuminum cyminum*) seed oil. J. Food Engg. 84: 595-600.
- [135] Stanković M., Veljković V., Lazić M., (1994). Bioaktivni proizvodi iz ploda kleke (*Juniperus communis* L.), Univerzitet u Nišu, Tehnološki fakultet, Leskovac.
- [136] Stewart D., (2005). The chemistry of essential oils - made simple, Care Publications, Marble Hill, Mo.
- [137] Teetor P., (2011). R Cookbook, O'Reilly, Sebastopol, CA.
- [138] Zhao Y., Cen Y., (2014). Data Mining Applications with R, Academic Press is Elsevier Inc.
- [139] Вапник В. Н., (1979). Восстановление зависимостей по эмпирическим данным. М.: Наука.
- [140] Девеџић В. и сар., (2004). Технологије интелигентних система, Факултет организационих наука, Београд.

Прилог 1.

Изјава о ауторству

Потписани-а Драгана Радосављевић

број индекса 4/14

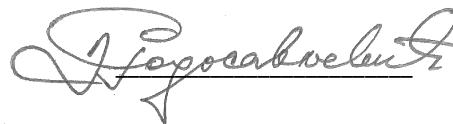
Изјављујем

да је докторска дисертација под насловом

**КОРИШЋЕЊЕ МЕТОДА ИСТРАЖИВАЊА ПОДАТАКА ЗА ОДРЕЂИВАЊЕ
МАТЕМАТИЧКОГ МОДЕЛА КИНЕТИКЕ ТЕХНОЛОШКИХ ПРОЦЕСА И
ПРЕПОЗНАВАЊЕ КАРАКТЕРИСТИКА УЗОРАКА**

- резултат сопственог истраживачког рада,
- да предложена дисертација у целини ни у деловима није била предложена за добијање било које дипломе према студијским програмима других високошколских установа,
- да су резултати коректно наведени и
- да нисам кршио/ла ауторска права и користио интелектуалну својину других лица.

Потпис докторанда



У Косовској Митровици, 02. 11. 2017. год

Прилог 2.

Изјава о истоветности штампане и електронске верзије докторског рада

Име и презиме аутора Драгана Радосављевић

Број индекса 4/14

Студијски програм Електротехничко и рачунарско инжењерство

Наслов рада КОРИШЋЕЊЕ МЕТОДА ИСТРАЖИВАЊА ПОДАТАКА ЗА
ОДРЕЂИВАЊЕ МАТЕМАТИЧКОГ МОДЕЛА КИНЕТИКЕ ТЕХНОЛОШКИХ
ПРОЦЕСА И ПРЕПОЗНАВАЊЕ КАРАКТЕРИСТИКА УЗОРАКА

Ментор Синиша Илић

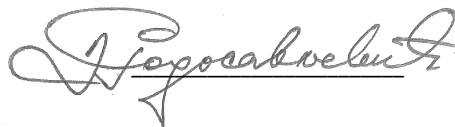
Потписани/а Драгана Радосављевић

Изјављујем да је штампана верзија мог докторског рада истоветна електронској верзији коју сам предао/ла за објављивање на порталу Дигиталног репозиторијума Универзитета у Приштини, са привременим седиштем у Косовској Митровици.

Дозвољавам да се објаве моји лични подаци везани за добијање академског звања доктора наука, као што су име и презиме, година и место рођења и датум одбране рада.

Ови лични подаци могу се објавити на мрежним страницама дигиталне библиотеке, у електронском каталогу и у публикацијама Универзитета у Приштини, са привременим седиштем у Косовској Митровици.

Потпис докторанда



У Косовској Митровици, 02. 11. 2017. год.

Прилог 3.

Изјава о коришћењу

Овлашћујем Универзитетску библиотеку да у Дигитални репозиторијум Универзитета у Приштини, са привременим седиштем у Косовској Митровици унесе моју докторску дисертацију под насловом:

**КОРИШЋЕЊЕ МЕТОДА ИСТРАЖИВАЊА ПОДАТАКА ЗА ОДРЕЂИВАЊЕ
МАТЕМАТИЧКОГ МОДЕЛА КИНЕТИКЕ ТЕХНОЛОШКИХ ПРОЦЕСА И
ПРЕПОЗНАВАЊЕ КАРАКТЕРИСТИКА УЗОРАКА**

која је моје ауторско дело.

Дисертацију са свим прилозима предао/ла сам у електронском формату погодном за трајно архивирање.

Моју докторску дисертацију похрањену у Дигитални репозиторијум Универзитета у Приштини са привременим седиштем у Косовској Митровици могу да користе сви који поштују одредбе садржане у одабраном типу лиценце Креативне заједнице (Creative Commons) за коју сам се одлучио/ла.

1. Ауторство

2. Ауторство - некомерцијално

3. Ауторство – некомерцијално – без прераде

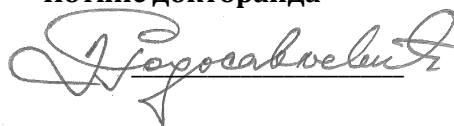
4. Ауторство – некомерцијално – делити под истим условима

5. Ауторство – без прераде

6. Ауторство – делити под истим условима

(Молимо да заокружите само једну од шест понуђених лиценци, кратак опис лиценци дат је на полеђини листа).

Потпис докторанда



У Косовској Митровици, 02. 11. 2017. год.

1. Ауторство - Дозвољавате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце, чак и у комерцијалне сврхе. Ово је најслободнија од свих лиценци.

2. Ауторство – некомерцијално. Дозвољавате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце. Ова лиценца не дозвољава комерцијалну употребу дела.

3. Ауторство - некомерцијално – без прераде. Дозвољавате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, без промена, преобликовања или употребе дела у свом делу, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце. Ова лиценца не дозвољава комерцијалну употребу дела. У односу на све остале лиценце, овом лиценцом се ограничава највећи обим права коришћења дела.

4. Ауторство - некомерцијално – делити под истим условима. Дозвољавате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце и ако се прерада дистрибуира под истом или сличном лиценцом. Ова лиценца не дозвољава комерцијалну употребу дела и прерада.

5. Ауторство – без прераде. Дозвољавате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, без промена, преобликовања или употребе дела у свом делу, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце. Ова лиценца дозвољава комерцијалну употребу дела.

6. Ауторство - делити под истим условима. Дозвољавате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце и ако се прерада дистрибуира под истом или сличном лиценцом. Ова лиценца дозвољава комерцијалну употребу дела и прерада. Слична је софтверским лиценцама, односно лиценцама отвореног кода.