

TỐI ƯU ĐA MỤC TIÊU VỚI CÁC CHUẨN TỐI ƯU TỔ HỢP S VÀ R ỨNG DỤNG TRONG QUÁ TRÌNH CHIẾT TÁCH CHẤT MÀU ANTHOCYANIN

Lê Xuân Hải ⁽¹⁾, Nguyễn Thị Lan ⁽²⁾

(1) Trường Đại học Bách khoa, ĐHQG-HCM

(2) Trường Đại học Bách khoa, Đại học Đà Nẵng

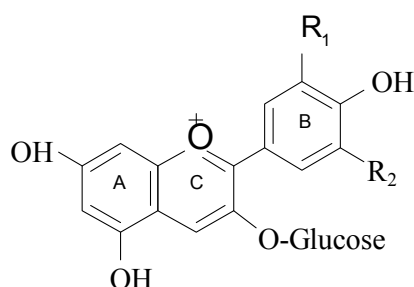
(Bài nhận ngày 10 tháng 01 năm 2008, hoàn chỉnh sửa chữa ngày 12 tháng 06 năm 2008)

TÓM TẮT: Bài báo này trình bày những kết quả nghiên cứu các phương pháp giải quyết bài toán tối ưu đa mục tiêu với chuẩn tối ưu tổ hợp S và chuẩn tối ưu tổ hợp R. Đã tiến hành nghiên cứu thực nghiệm để xây dựng các hàm mục tiêu mô tả sự ảnh hưởng của các yếu tố công nghệ (nhiệt độ, thời gian, nồng độ HCl) đến quá trình chiết chất màu anthocyanin. Bằng phương pháp tối ưu đa mục tiêu với chuẩn tối ưu tổ hợp R đã xác định được điều kiện công nghệ tối ưu cho quá trình chiết tách chất màu anthocyanin có độ màu cao: nhiệt độ - 510C, thời gian chiết - 56 phút, nồng độ HCl - 0,41N và thu được kết quả: hàm lượng anthocyanin đạt 1,203% với độ màu là 3,202.

1.ĐẶT VẤN ĐỀ

Anthocyanin là hợp chất màu hữu cơ thiên nhiên thuộc nhóm flavonoid có màu đỏ tím, tồn tại trong một số rau quả. Anthocyanin là một glucoside do gốc đường glucose, galactose, hay rhamnose kết hợp với gốc aglucone. Khung carbon gồm hai vòng benzen A,B (R₁, R₂ là nhóm hydroxy hoặc metoxy) và vòng pyran C. Ngoài việc cho màu sắc đẹp, anthocyanin giúp cơ thể ngăn ngừa, chống một số bệnh và có khả năng kháng khuẩn. Chính vì vậy việc nghiên cứu thu nhận chất màu anthocyanin từ các loại rau quả làm chất màu an toàn trong thực phẩm là vấn đề cần thiết.

Trong quá trình nghiên cứu chiết tách anthocyanin cả hai tiêu chí: hàm lượng và độ màu của dung dịch thu được đều mong muốn đạt được kết quả tốt nhất. Vì vậy đã xuất hiện sự đòi hỏi phải đặt ra và giải quyết một cách chuẩn mực bài toán tối ưu (BTTU) đa mục tiêu. Đây là lớp bài toán tối ưu thường xuyên xuất hiện trong thực tế và gây ra rất nhiều lúng túng cho các nhà nghiên cứu thuộc các lĩnh vực khác nhau. Bài báo này trình bày các kết quả nghiên cứu về mặt lý thuyết giải bài toán tối ưu đa mục tiêu với hai chuẩn tối ưu tổ hợp **S(Z)** và **R(Z)**. Các kết quả đó được vận dụng trong nghiên cứu thực nghiệm xác định điều kiện chiết tách tối ưu anthocyanin từ quả dâu trên cơ sở xác lập và giải bài toán tối ưu đa mục tiêu với chuẩn tối ưu tổ hợp **R(Z)** của phương pháp vùng cấm.



2. TỐI ƯU ĐA MỤC TIÊU VỚI CÁC CHUẨN TỐI ƯU TỔ HỢP S VÀ R

2.1. Một số khái niệm cơ sở

Xét một đối tượng công nghệ với m hàm mục tiêu $I_1(\mathbf{Z}), I_2(\mathbf{Z}), \dots, I_m(\mathbf{Z})$ tạo thành **vector hàm mục tiêu** $\mathbf{I}(\mathbf{Z}) = \{ I_j(\mathbf{Z}) \} = (I_1(\mathbf{Z}), I_2(\mathbf{Z}), \dots, I_m(\mathbf{Z}))$, trong đó mỗi hàm mục tiêu thành phần $I_j(\mathbf{Z})$ phụ thuộc vào n biến tác động $Z_1, Z_2, \dots, Z_n$ (tạo thành **vector các yếu tố ảnh hưởng** hay còn gọi là **vector biến** $\mathbf{Z}$). Các biến này biến thiên trong **miền giới hạn** Ω_Z và các giá trị của các hàm mục tiêu sẽ tạo thành **miền giá trị của hàm mục tiêu** Ω_I (miền nằm trong đường cong kín $A - I(Z^S) - I(Z^R) - B - N - M - A$ trên hình 1). Mỗi hàm mục tiêu $I_j(\mathbf{Z})$ cùng với vector biến $\mathbf{Z} = \{ Z_i \} = (Z_1, Z_2, \dots, Z_n) \in \Omega_Z$ hình thành một BTTU một mục tiêu. Để đơn giản nhưng không hề làm mất tính chất tổng quát, trong bài báo này BTTU m mục tiêu sẽ được trình bày cho trường hợp **toàn bộ m BTTU một mục tiêu đều là các bài toán tìm cực tiểu** có dạng:

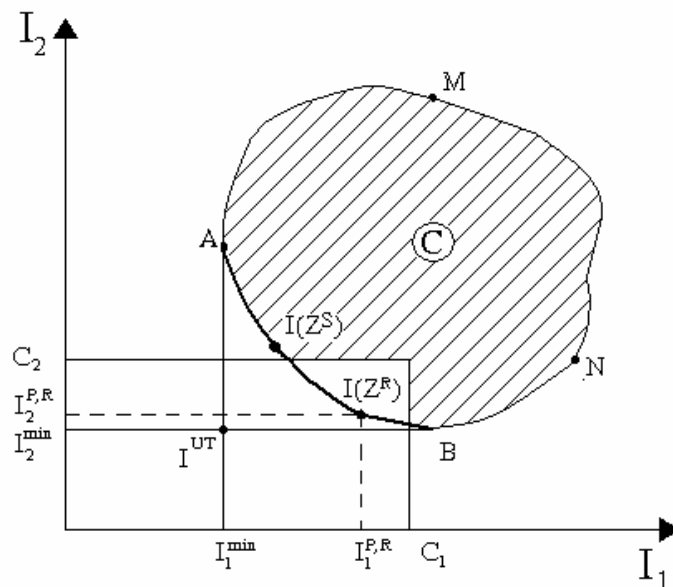
$$I_{j\min} = I_j(Z_{1,jopt}, Z_{2,jopt}, \dots, Z_{n,jopt}) = \min I_j(Z_1, Z_2, \dots, Z_n) \quad (1)$$

$$\mathbf{Z} = \{ Z_i \} = (Z_1, Z_2, \dots, Z_n) \in \Omega_Z \quad (2)$$

$$j = 1 \div m \quad (3)$$

2.1.1. Phương án không tương và hiệu quả không tương

Nếu tồn tại vector biến $\mathbf{Z}^{UT} = \{ Z_i^{UT} \} = (Z_1^{UT}, Z_2^{UT}, \dots, Z_n^{UT}) \in \Omega_Z$ là nghiệm chung cho tất cả m BTTU một mục tiêu (1) + (2), nghĩa là $Z_i^{UT} = Z_{i,jopt}$ với mọi $i = 1 \div n$, thì $\mathbf{Z}^{UT}$ được gọi là phương án không tương hoặc nghiệm không tương của BTTU m mục tiêu. Trong thực tế thường không tồn tại $\mathbf{Z}^{UT}$ nhưng vì mỗi BTTU một mục tiêu (1) + (2) vẫn có các $I_{j\min}$ tương ứng nên vẫn tồn tại $\mathbf{I}^{UT} = (I_{1\min}, I_{2\min}, \dots, I_{m\min})$ và khi đó $\mathbf{I}^{UT} = (I_{1\min}, I_{2\min}, \dots, I_{m\min})$ được gọi là hiệu quả không tương hay điểm không tương. Trên hình 1 điểm không tương $\mathbf{I}^{UT}$ của BTTU hai mục tiêu tồn tại nhưng nằm ngoài miền Ω_I tức là nghiệm không tương $\mathbf{Z}^{UT}$ không tồn tại.



Hình 1. Không gian hàm mục tiêu của BTTU hai mục tiêu

2.1.2. Phương án trội và phương án bị trội

Với hai vectơ biến $ZQ = \{ Z_iQ \}$ và $ZV = \{ Z_iV \}$, $i = 1 \div n$, sẽ có hai vectơ hàm mục tiêu tương ứng $I(ZQ) = \{ I_j(ZQ) \}$, $I(ZV) = \{ I_j(ZV) \}$, $j = 1 \div m$. Nếu với mọi j đều có:

$$I_j(ZQ) \leq I_j(ZV) \quad (4)$$

thì ZQ được gọi là **phương án trội** (hay **ng nghiệm trội**) so với ZV (ký hiệu $ZQ \succ ZV$), còn ZV được gọi là **phương án bị trội** (hay **ng nghiệm bị trội**) bởi ZQ (ký hiệu $ZV \prec ZQ$). Một cách tương ứng cũng có $I(ZQ) \succ I(ZV)$ và $I(ZV) \prec I(ZQ)$.

2.1.3. Phương án paréto-tối ưu

Phương án ZP được gọi là **phương án paréto-tối ưu** nếu ZP không thể bị trội bởi bất kỳ phương án nào khác thuộc miền giới hạn Ω_Z . Khi đó $I(ZP)$ được gọi là một **hiệu quả paréto-tối ưu** nằm trong **tập hiệu quả paréto-tối ưu** Ω_{IP} . Trên hình 1 tập hiệu quả paréto-tối ưu Ω_{IP} chính là đường cong $A - I(ZS) - I(ZR) - B$.

2.2. Kết quả và thảo luận

2.2.1. Định lý paréto-tối ưu

Định lý 1: Nếu BTTU' đa mục tiêu có nghiệm được gọi là tối ưu theo một cách định nghĩa nào đó thì không phụ thuộc vào cách định nghĩa đã chọn, nghiệm tối ưu đó phải là một phương án paréto-tối ưu.

Chứng minh: Nếu nghiệm tối ưu Z của BTTU' đa mục tiêu không phải là một phương án paréto-tối ưu thì chắc chắn có thể tìm được ít nhất một phương án trội hơn Z . Điều đó chứng tỏ rằng Z không thể được công nhận là nghiệm tối ưu và dẫn đến mâu thuẫn với giả thiết rằng Z đã là nghiệm tối ưu. Vậy Z phải là một phương án không thể bị trội, tức là một phương án paréto-tối ưu.

Như vậy, theo Định lý paréto-tối ưu, một nghiệm của BTTU' đa mục tiêu (1) + (2) + (3) tìm được bằng một phương pháp giải bất kỳ nào đó, muốn được công nhận là tối ưu theo phương pháp giải đã lựa chọn, trước hết phải được chứng minh rằng nghiệm đó phải là một phương án paréto-tối ưu.

2.2.2. Phương pháp điểm không tương

Xét BTTU' m mục tiêu (1) + (2) + (3). Sau khi giải từng BTTU' một mục tiêu sẽ xác định được các giá trị tối ưu $I_1^{\min}$, $I_2^{\min}$, ..., $I_m^{\min}$ và điểm không tương $IUT = (I_1^{\min}, I_2^{\min}, \dots, I_m^{\min})$. Định nghĩa một chuẩn tối ưu tổ hợp S theo biểu thức sau:

$$S(Z) = \left[\sum_{j=1}^m s_j^2(Z) \right]^{1/2} = \left[\sum_{j=1}^m (I_j(Z) - I_j^{\min})^2 \right]^{1/2} \quad (5)$$

Dễ dàng thấy rằng $S(Z)$ chính là khoảng cách từ điểm $I(Z)$ tới điểm không tương IUT . Chọn chuẩn tối ưu tổ hợp $S(Z)$ làm hàm mục tiêu, BTTU' m mục tiêu được phát biểu lại như sau:

Hãy tìm nghiệm $ZS = (Z_1S, Z_2S, \dots, Z_nS)$ nằm trong miền giới hạn Ω_Z sao cho hàm mục tiêu $S(Z)$ đạt giá trị cực tiểu.

$$S_{\min} = S(ZS) = \min S(Z) = \min \left[\sum_{j=1}^m (I_j(Z) - I_j^{\min})^2 \right]^{1/2} \quad (6)$$

$$Z = \{ Z_i \} = (Z_1, Z_2, \dots, Z_n) \in \Omega_Z$$

BTTU' đa mục tiêu (6) đã được đề xuất cho các bài toán công nghệ [6] nhưng chưa chứng minh được rằng nghiệm ZS là một nghiệm paréto-tối ưu. Trong bài báo này sẽ đưa ra chứng minh quan trọng này.

- Định lý 2: Nghiệm ZS của BTTU' (6) , nếu tồn tại, sẽ là nghiệm paréto-tối ưu của BTTU' m mục tiêu (1) + (2) + (3).

- Chứng minh : Giả sử ZS không phải là nghiệm paréto-tối ưu. Khi đó sẽ tìm được một nghiệm ZS* trội hơn ZS . Theo định nghĩa, nghiệm trội ZS* nhất định phải có ít nhất một hiệu quả $I_k(ZS^*)$, trong đó $m \geq k \geq 1$, sao cho $I_k(ZS^*) < I_k(ZS)$. Từ đó suy ra $S(ZS^*) < S(ZS)$. Điều này mâu thuẫn với giả thiết rằng ZS là nghiệm tối ưu (6). Vậy không thể tồn tại bất cứ nghiệm nào khác trội hơn ZS và ZS phải là một nghiệm paréto-tối ưu.

Ký hiệu $I(ZS) = IP,S = (I1P,S, I2P,S, \dots, ImP,S)$. Với phương pháp điểm không tương nghiệm paréto-tối ưu ZS tìm được sẽ cho hiệu quả paréto-tối ưu $I(ZS) = IP,S$ đứng gần điểm không tương $IUT = (I1min, I2min, \dots, Immin)$ nhất. Trường hợp $m=2$ được minh họa trên hình 1.

2.2.3. Phương pháp vùng cấm

Trong thực tế nhiều BTTU' đa mục tiêu được đặt ra có các điều kiện ràng buộc đối với chính các giá trị của các hàm mục tiêu thành phần $I_j(Z)$:

$$I_j(Z) < C_j, j = 1 \div m \quad (7)$$

Các ràng buộc (7) tạo thành vùng cấm $C = \{ I_j(Z) > C_j \}$ đối với hàm mục tiêu $I(Z)$.

Phương pháp vùng cấm [6,7] đề xuất cách giải BTTU' m mục tiêu với chuẩn tối ưu tổ hợp $R(Z)$:

$$R(Z) = r1(Z).r2(Z) \dots rm(Z) = \prod_{j=1}^m r_j(Z) \quad (8)$$

$$\text{trong đó :} \quad r_j(Z) = [C_j - I_j(Z)] / (C_j - I_{jmin}) \quad \text{khi } I_j(Z) < C_j \quad (9)$$

$$\text{và :} \quad r_j(Z) = 0 \quad \text{khi } I_j(Z) > C_j \quad (10)$$

Với chuẩn tối ưu tổ hợp $R(Z)$ BTTU' m mục tiêu được phát biểu như sau:

Hãy tìm nghiệm $ZR = (Z1R, Z2R, \dots, ZnR)$ nằm trong miền giới hạn ΩZ sao cho hàm mục tiêu $R(Z)$ đạt giá trị cực đại.

$$R_{max} = R(ZR) = \max_{Z \in \Omega Z} R(Z) = \max_{Z \in \Omega Z} \left[\prod_{j=1}^m r_j(Z) \right] \quad (11)$$

$$Z = \{ Z_i \} = (Z1, Z2, \dots, Zn) \in \Omega Z$$

Dễ dàng thấy rằng $1 \geq R(ZR) \geq 0$, trong đó $R(ZR) = 1$ khi nghiệm tối ưu chính là nghiệm không tương ZUT và $R(ZR) = 0$ khi chỉ cần một trong các giá trị $I_j(Z)$ vi phạm bất đẳng thức (7), nghĩa là khi điểm $I(Z)$ rơi vào vùng cấm C.

Nghiệm tối ưu ZR cũng đã được chứng minh là một nghiệm paréto-tối ưu [6,7] .

Ký hiệu $I(ZR) = IP,R = (I1P,R, I2P,R, \dots, ImP,R)$. Với nghiệm tối ưu ZR, hiệu quả paréto-tối ưu $IP,R = (I1P,R, I2P,R, \dots, ImP,R)$ đứng cách xa vùng cấm C nhất. Một cách hoàn toàn tương đương có thể thay chuẩn tối ưu $R(Z)$ bằng chuẩn tối ưu $R^*(Z) = [R(Z)]^{1/m}$.

Trên hình 1 cả hai hiệu quả paréto-tối ưu $I(ZS)$ và $I(ZR)$ đều thuộc tập hợp các hiệu quả paréto-tối ưu ΩIP (đường cong A - $I(ZS)$ - $I(ZR)$ - B) nhưng nghiệm paréto-tối ưu ZR cho hiệu quả paréto-tối ưu $I(ZR)$ nằm xa vùng cấm nhất. Trong khi đó nghiệm paréto-tối ưu ZS

cho hiệu paréto-tối ưu I(ZS) nằm gần điểm không tương IUT nhất nhưng lại rơi vào vùng cấm C.

3.TỐI ƯU HÓA ĐIỀU KIỆN CHIẾT TÁCH CHẤT MÀU ANTHOCYANIN CÓ ĐỘ MÀU CAO TỪ QUẢ DÂU

3.1. Nguyên liệu

Quả dâu tằm Hội An, được làm sạch, cân mỗi mẫu 50g, bảo quản ở -200C để làm nguyên liệu trong suốt quá trình nghiên cứu.

Hệ dung môi phân cực để chiết là ethanol-nước-HCl [2]

3.2. Phương pháp nghiên cứu

* Phương pháp pH vi sai để xác định hàm lượng anthocyanin thô và độ màu [5]

* Phương pháp qui hoạch thực nghiệm quay cấp hai của Box- Hunter [1] để xây dựng mô tả toán học biểu diễn các hàm mục tiêu thành phần.

* Xác lập và giải BTTU 2 mục tiêu bằng phương pháp vùng cấm.

3.3. Kết quả nghiên cứu thực nghiệm và thảo luận

3.3.1. Thiết lập các hàm mục tiêu thành phần dưới dạng các phương trình hồi quy

Quá trình chiết chất màu anthocyanin có độ màu cao phụ thuộc vào các yếu tố: nhiệt độ chiết (Z1), thời gian chiết (Z2) và nồng độ HCl (Z3). Từ kết quả nghiên cứu [3] đã xác định được các điều kiện thí nghiệm (Bảng 1), xây dựng ma trận thực nghiệm với $k = 3$, tiến hành 20 thí nghiệm và biểu diễn kết quả ở bảng 2. Các biến x_1, x_2, x_3 là các biến mã hóa tương ứng của Z1, Z2, Z3. Cánh tay đòn α có giá trị bằng 1.682 [1].

Bảng 1. Các mức yếu tố

Yếu tố	Các mức					Khoảng biến thiên (λ)
	$+\alpha$	Mức trên, +1	Mức cơ sở, 0	Mức dưới, -1	$-\alpha$	
Z1, 0C	61,82	55	45	35	28,18	10
Z2, phút	76,82	70	60	50	43,18	10
Z3, N	0,453	0,45	0,4	0,35	0,346	0,05

Bảng 2. Ma trận thực nghiệm phương án quay cấp hai, $k = 3$ và kết quả

N		x_0	x_1	x_2	x_3	x_1x_2	x_1x_3	x_2x_3	x_1^2	x_2^2	x_3^2	I1	I2
TYT 2k	1	+	-	-	-	+	+	+	+	+	+	1,143	2,854
	2	+	+	-	-	-	-	+	+	+	+	1,199	2,894
	3	+	-	+	-	-	+	-	+	+	+	1,083	2,874
	4	+	+	+	-	+	-	-	+	+	+	1,136	2,906
	5	+	-	-	+	+	-	-	+	+	+	1,158	3,022
	6	+	+	-	+	-	+	-	+	+	+	1,193	3,078
	7	+	-	+	+	-	-	+	+	+	+	1,149	3,022

	8	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	1,181	3,070
2.k	9	+	$-\alpha$	0	0	0	0	0	α^2	0	0	1,109	3,114
	10	+	$+\alpha$	0	0	0	0	0	α^2	0	0	1,183	3,189
	11	+	0	$-\alpha$	0	0	0	0	0	0	α^2	1,186	3,192
	12	+	0	$+\alpha$	0	0	0	0	0	0	α^2	1,126	3,202
	13	+	0	0	$-\alpha$	0	0	0	0	α^2	0	1,145	2,446
	14	+	0	0	$+\alpha$	0	0	0	0	α^2	0	1,197	2,725
n0	15	+	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1,201	3,189
	16	+	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1,210	3,199
	17	+	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1,200	3,189
	18	+	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1,210	3,199
	19	+	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1,211	3,188
	20	+	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1,199	3,200

Hai hàm mục tiêu thành phần : $I_1(x_1, x_2, x_3)$ - hàm lượng anthocyanin (%); $I_2(x_1, x_2, x_3)$ - độ màu của dung dịch thu được.

Sau khi tính toán các hệ số hồi quy, kiểm định sự có nghĩa của các hệ số hồi quy theo chuẩn Student, kiểm tra sự tương thích của phương trình hồi qui với kết quả thực nghiệm theo chuẩn Fischer đã thu được các phương trình hồi qui $I_1(x_1, x_2, x_3)$, $I_2(x_1, x_2, x_3)$ mô tả ảnh hưởng của nhiệt độ, thời gian, nồng độ HCl đến hàm lượng anthocyanin thu được và độ màu như sau:

$$I_1(x_1, x_2, x_3) = 1,204 + 0,022x_1 - 0,018x_2 + 0,015x_3 + 0,013x_2x_3 - 0,021x_1^2 - 0,017x_2^2 - 0,012x_3^2 \quad (12)$$

$$I_2(x_1, x_2, x_3) = 3,195 + 0,022x_1 + 0,083x_3 - 0,015x_1^2 - 0,215x_3^2 \quad (13)$$

3.3.2. Giải các BTTU một mục tiêu

Các BTTU một mục tiêu : $I_{1\max} = \max I_1(x_1, x_2, x_3)$ và $I_{2\max} = \max I_2(x_1, x_2, x_3)$ với miền giới hạn $\Omega_X = (-1,682 \leq x_1, x_2, x_3 \leq 1,682)$ được giải nhờ sự hỗ trợ của phần mềm Excel-Solver. Kết quả tính toán cho phép xác định được các thông số tối ưu cho từng BTTU một mục tiêu trong vùng nghiên cứu thực nghiệm :

$$I_{1\max} = 1,216 \text{ với } x_{1,1\text{opt}} = 0,524 ; x_{2,1\text{opt}} = -0,336 ; x_{3,1\text{opt}} = 0,426$$

$$I_{2\max} = 3,211 \text{ với } x_{1,2\text{opt}} = 0,073 ; x_{2,2\text{opt}} = 0,000 ; x_{3,2\text{opt}} = 0,190$$

Từ đó xác định được điểm không tương IUT = $(I_{1\max}, I_{2\max}) = (1,216, 3,211)$. Rõ ràng rằng trong nghiên cứu thực nghiệm này đã chỉ ra điểm không tương nhưng phương án không tương vẫn không tồn tại vì $x_{i,1\text{opt}} \neq x_{i,2\text{opt}}$ ($i = 1, 2, 3$).

3.3.3. Giải bài toán Tối ưu đa mục tiêu theo phương pháp vùng cấm

Quá trình chiết tách anthocyanin có độ màu cao được biểu diễn bởi hai phương trình hồi qui (12), (13). Vì không thể có được một nghiệm chung để đạt được hai giá trị $I_{1\max}$, $I_{2\max}$ nên BTTU được đặt ra là tìm nghiệm paréto-tối ưu để hiệu quả paréto-tối ưu IP (I_{1P} , I_{2P}) cách xa vùng cấm nhất.

Từ thực tế nghiên cứu và sử dụng chất màu anthocyanin xác định được vùng cấm:

$$I_1 > C_1 = 1.1 \text{ và } I_2 > C_2 = 3.0.$$

Xây dựng hàm mục tiêu tổ hợp

$$R^*(x_1, x_2, x_3) = [r_1(x_1, x_2, x_3) \cdot r_2(x_1, x_2, x_3)]^{1/2}$$

trong đó : $r_1(x_1, x_2, x_3) = (I_1(x_1, x_2, x_3) - 1.1)/(1.216 - 1.1)$ khi $I_1(x_1, x_2, x_3) \geq 1.1$;

$r_1(x_1, x_2, x_3) = 0$ khi $I_1(x_1, x_2, x_3) < 1.1$ và $r_2(x_1, x_2, x_3) = (I_2(x_1, x_2, x_3) - 3.0)/(3.211 - 3.0)$ khi $I_2(x_1, x_2, x_3) \geq 3.0$; $r_2(x_1, x_2, x_3) = 0$ khi $I_2(x_1, x_2, x_3) < 3.0$

Giải BTTƯ : $R^*_{\max} = \max [r_1(x_1, x_2, x_3) \cdot r_2(x_1, x_2, x_3)]^{1/2}$ -
 $-1,682 \leq x_1, x_2, x_3 \leq 1,682$

Nhờ sự hỗ trợ của phần mềm Excel – Solver đã xác định được :

$x_{1R} = 0,585$; $x_{2R} = -0,448$; $x_{3R} = 0,210$;

$R^*_{\max} = 0,999$.

Thay x_{1R} , x_{2R} , x_{3R} vào phương trình (12), (13) xác định được: $I_{1R} = 1,216$ $I_{2R} = 3,210$.

Đổi sang biến thực:

$Z_{1R} = 51^{\circ}\text{C}$; $Z_{2R} = 56$ phút ; $Z_{3R} = 0,41$ N

Như vậy theo tính toán từ các mô hình thống kê thực nghiệm (12), (13) điều kiện chiết tách anthocyanin từ quả dâu đảm bảo cho chuẩn tối ưu tổ hợp R đạt cực đại ứng với nhiệt độ - 51°C , thời gian chiết – 56 phút, nồng độ HCl – 0,41 N. Khi đó hàm lượng anthocyanin đạt 1,216%, độ màu đạt giá trị 3,210. Căn cứ vào các kết quả nghiên cứu thực nghiệm đã tiến hành [2,3] có thể thấy rằng các kết quả tính toán tối ưu là phù hợp và đáp ứng tốt các mục tiêu thành phần. Để khẳng định kết luận này đã tiến hành các thí nghiệm kiểm chứng và thu được kết quả trình bày ở phần dưới đây.

3.4. Thí nghiệm kiểm chứng

Tiến hành thí nghiệm kiểm chứng tại nhiệt độ 51°C , thời gian chiết 56 phút, nồng độ HCl 0,41N và thu được kết quả % anthocyanin là 1,203%, độ màu là 3,202.

Có thể thấy rằng kết quả tính toán điều kiện chiết tách tối ưu anthocyanin bằng phương pháp vùng cấm cho kết quả hoàn toàn phù hợp với thực nghiệm.

4.KẾT LUẬN

Quá trình chiết tách chất màu anthocyanin từ quả dâu Hội An được nghiên cứu một cách hệ thống bằng phương pháp toán học kết hợp với các phương pháp thực nghiệm chuyên ngành.

Các phương trình hồi qui (12), (13) thu được từ thực nghiệm là các mô hình thống kê thực nghiệm mô tả rất tốt sự ảnh hưởng của nhiệt độ, thời gian, nồng độ HCl đến khả năng chiết tách chất màu anthocyanin có độ màu cao từ quả dâu.

Phương pháp vùng cấm với chuẩn tối ưu tổ hợp R^* (tương đương với chuẩn R) thực sự là một phương pháp hiệu quả và thích hợp cho việc giải quyết các BTTƯ đa mục tiêu.

Bằng cách vận dụng phương pháp vùng cấm đã xác định được điều kiện công nghệ tối ưu cho quá trình chiết tách chất màu anthocyanin có độ màu cao tại nhiệt độ 51°C , thời gian chiết 56 phút, nồng độ HCl 0,41N và thu được kết quả % anthocyanin là 1,203%, và độ màu là 3,202.

MULTI-OBJECT OPTIMIZATION WITH COMBINATION CRITERIA APPLIED TO EXTRACTION OF THE HIGH COLOUR DEGREE ANTHOCYANIN

Le Xuan Hai (1), Nguyen Thi Lan(2)

(1)University of Technology, VNU-HCM

(2) Da Nang University of Technology

ABSTRACT: *This paper is going to present a study of the Multi-Object Optimization Method with combination criteria **S** and **R**. The mathematical models on the basic of the experimental research showed the effect of technical factors (temperature, time and HCl concentration) to the extraction of anthocyanin pigment. By employing the multi-object optimization method with combination criterion **R**, the best technological parameters on the anthocyanin extract process are defined: Temperature - 51°C, HCl concentration - 0.41N, and extract time - 56 minutes. In this extract condition, we obtained the high concentration of anthocyanins - 1.203% and the high colour degree - 3.20.*

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1]. X.L. Akhnadarova, V.V. Kapharov, *Tối ưu hóa thực nghiệm trong hóa học và kỹ thuật hóa học*. Trường Đại Học Kỹ Thuật TP Hồ Chí Minh (người dịch: Nguyễn Cảnh, Nguyễn Đình Soa), (1994).
- [2]. Nguyễn Thị Lan, Lê Thị Lạc Quyên, *Ảnh hưởng của hệ dung môi đến khả năng chiết chất màu anthocyanin từ quả dâu*, Tạp chí Khoa học Công nghệ, Đại học Đà Nẵng, số 2 (6), tr.41-44, (2004).
- [3]. Nguyễn Thị Lan, Lê Thị Lạc Quyên, *Khảo sát một số yếu tố ảnh hưởng đến quá trình chiết tách chất màu anthocyanin từ quả dâu Hội An*, Tạp chí Khoa học và Công nghệ (Viện Khoa học và Công nghệ Việt Nam), tập 44, số 1, tr. 71-76, (2006).
- [4]. Kouki ONO, Naho Sugihara, Yuko Hirose, Kumiko Katagiki, *An Examination of optimal extraction solvents for anthocyanin pigments from black rice produced in Gifu*, Gifu city Women's Research Bulletin, 52, pp. 135-138, (03/2003).
- [5]. The INA home page, *Anthocyanin in food by pH differential spectrophotometry*, INA method 113000, 116000, 118000, Information on the INA's Methods validation program.
- [6]. Академик В.В Кафаров, И.Н. Дорохов, Динь Суан Ба, Ле Суан Хай, *Задача оптимизации с векторным критерием в химической технологии при наличии запретной области для отдельных критериев оптимальности*, Доклады АН СССР, Том 270, N04, (1983).
- [7]. И.Н. Дорохов, Ле Суан Хай, Динь Суан Ба, *Нахождение компромиссных решений в задачах многокритериальной оптимизации*, Труды МХТИ им. Д.И. Менделеева – No 140, сс. 75-83, (1986).