



TỐI ƯU HÓA ĐA MỤC TIÊU THỰC NGHIỆM HÓA HỌC BẰNG PHƯƠNG PHÁP THỎA DỤNG MỜ TƯƠNG TÁC VỚI VIỆC ĐO MÀU DUNG DỊCH ANTHOCYANIN TRONG PHƯƠNG PHÁP CHIẾT ĐO QUANG

Trương Bách Chiến¹

¹Trường Đại học Công nghiệp Thực phẩm Tp.HCM

Thông tin chung:

Ngày nhận bài: 01/08/2018

Ngày nhận kết quả bình duyệt:
12/01/2019

Ngày chấp nhận đăng:
04/2020

Title:

The multi-objective optimization method using the fuzzy utility function to extraction of the high colour degree anthocyanin

Keywords:

Combinatorial optimization, Multi-Object function, anthocyanin, experimental optimization method

Từ khóa:

Tối ưu hóa tổ hợp, hàm đa mục tiêu, anthocyanin, phương pháp tối ưu hóa thực nghiệm

ABSTRACT

This paper presents the research results on methods for solving multi-objective optimization problem using the fuzzy utility function. Empirical research is conducted to develop objective functions that describe the influence of technical factors (pH, optical wavelength λ and sample volume) to the extraction of anthocyanin pigment. By employing the multi-objective optimization method using the fuzzy utility function, the best technological parameters on the anthocyanin extract process are defined: pH = 1.0, λ = 420 nm and sample volume = 10 mL, and in this extract condition, the high concentration of anthocyanins- 3.18% and the colour degree reaches the optimat value - 0.337.

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 việc sử dụng hàm thỏa dụng mờ. Nhóm nghiên cứu đã tiến hành thực nghiệm để xây dựng các hàm mục tiêu mô tả sự ảnh hưởng của các yếu tố công nghệ (pH, bước sóng đo quang λ , thể tích mẫu sử dụng) đến quá trình tách chiết chất màu anthocyanin. Bằng cách tối ưu đa mục tiêu với phương pháp sử dụng hàm thỏa dụng mờ, đã xác định được điều kiện phân tích tối ưu cho quá trình chiết tách chất màu anthocyanin trong môi trường ethanol, có độ màu cao tại pH = 1, đo quang ở bước sóng 420 nm, và thể tích mẫu sử dụng là 10 mL, thì thu được kết quả: hàm lượng anthocyanin đạt 3,18 %, với độ màu đo được đạt cực trị 0,337.

1. GIỚI THIỆU

Trong quá trình thực nghiệm, việc phát hiện những phương án tối ưu cho phép rút ngắn thời gian, số lần thí nghiệm và lượng kinh phí cho các hoạt động nghiên cứu là một việc cần thiết và cần triển khai thường xuyên trong các đề tài khoa học. Với một nghiên cứu thực nghiệm bao gồm nhiều

cách phải giải quyết các mục tiêu đặt ra, thì việc tìm kiếm cách giải cho bài toán tối ưu đa mục tiêu là điều mong mỏi của các nhà nghiên cứu ở các lĩnh vực khác nhau.

Anthocyanin là chất hữu cơ màu thiên nhiên thuộc nhóm Flavonoid, có màu đỏ đặc trưng dễ chuyển đổi màu ở những điều kiện nhất định. Đây là một

dạng Glucoside do các gốc họ đường: Glucose, Galactose, Rhamnose kết hợp với gốc aglucone mà tạo thành, nó có nhiều trong các loại rau quả thực phẩm. Chính vì vậy, việc kiểm tra, định lượng anthocyanin trong các loại rau quả, hay chiết tách chúng ra, làm các chất màu cho thực phẩm hay cho mỹ phẩm, là vấn đề cần thiết.

Dựa vào số liệu đo được từ việc xác định các yếu tố vào điều kiện tách chiết lượng Anthocyanin trong dung môi Ethanol/ nước hoặc Ethanol/dung dịch HCl, xác lập và giải bài toán tối ưu 2 mục tiêu (màu đo quang và lượng chất chiết anthocyanin). Hai mục tiêu (độ màu và lượng chất anthocyanin) là kết quả mà tất cả các nghiên cứu về chúng đều cố gắng đạt được số liệu tốt nhất.

Bài nghiên cứu này đã cố gắng đi đến 2 mục tiêu này, nghiên cứu trình bày các kết quả nghiên cứu về mặt lý thuyết giải bài toán tối ưu hai mục tiêu dựa trên phương pháp dùng hàm thỏa dụng mờ theo nguyên lý Pareto và kiểm chứng chúng bằng thực nghiệm trực quan. Đây là một hướng nghiên cứu mới và có thể thực hiện trong phòng thí nghiệm, nhằm hướng đến giải quyết cho bài toán tối ưu nhiều mục tiêu (3,4.. mục tiêu) có các nghiên cứu thực nghiệm tương lai.

2. CƠ SỞ LÝ THUYẾT VÀ PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU

2.1 Cơ sở lý thuyết

2.1.1 Mô tả

Giả sử một hệ thống công nghệ được biểu diễn là : $Y = f(Z_1, Z_2, \dots, Z_k)$

Trong đó : Z_1, Z_2, \dots, Z_p : là p thành phần của vecto thông số đầu vào.

Hàm mục tiêu được xác định ở dạng: $Y = Y(Z_1, Z_2, \dots, Z_k)$.

Bài toán được biểu diễn $Y^{opt} = \text{opt } Y(Z_1, Z_2, \dots, Z_k) = Y(Z_1^{opt}, Z_2^{opt}, \dots, Z_k^{opt})$.

hoặc $Y^{opt} = \max Y(Z_1, Z_2, \dots, Z_k)$: đối với bài toán max.

$Y^{opt} = \min Y(Z_1, Z_2, \dots, Z_k)$: đối với bài toán min.

Y^{opt} : hiệu quả tối ưu cho mục tiêu Y (Z_1, Z_2, \dots, Z_k).

$Z_1^{opt}, Z_2^{opt}, \dots, Z_k^{opt}$ là nghiệm tối ưu hoặc phương án tối ưu.

Các điều kiện ràng buộc nên được chọn lựa từ các yếu tố ảnh hưởng, hay điều kiện thực nghiệm, sẽ giúp giải quyết việc chọn hướng thực nghiệm tốt nhất trong thực tế.

Với việc xác lập nhiều mục tiêu Y_j ($j = 1, 2, \dots, p$) cần quy hoạch để tìm cực trị Y_j^{opt} , thì việc tìm nghiệm tối ưu phức tạp hơn nhiều.

2.1.2 Các nguyên tắc thực hiện:

- Nguyên tắc 1 (nguyên tắc phức tạp dần mô hình toán học):

Từ các số liệu để xây dựng hàm mục tiêu cần được xây dựng, từ những mô hình đơn giản, rồi từ kiểm tra tính tương thích của mô hình. Nếu phù hợp, thì sử dụng mô hình đó, nếu không phù hợp thì tiến hành xây dựng các bước tiếp theo của các mô hình nâng cao, mô hình phức tạp hơn dựa trên các thí nghiệm thực nghiệm. Sau đó kiểm tra mô hình mới cho đến khi đạt được mô hình phù hợp với thực nghiệm.

- Nguyên tắc 2 (nguyên tắc đối chứng từ các yếu tố ảnh hưởng thực nghiệm):

Khi xây dựng mô hình, việc xuất hiện các hiệu ứng tác động đến các yếu tố ảnh hưởng, đến các điều kiện thực nghiệm là điều tất yếu. Vì thế, mô hình càng chính xác, càng chặt chẽ, mô tả được các yếu tố này, thì sự tác động các hiệu ứng đó sẽ làm tăng độ chính xác của kết quả nghiên cứu lên.

- Nguyên tắc 3 (nguyên tắc tối ưu Pareto):

Lập miền các phương án khả thi của bài toán, tức là phải thỏa mãn tất cả các ràng buộc: $R^* \in D$. Xét phương án khả thi $R \in D$, $R \neq R^*$. Nếu tồn tại một chỉ số $i \in \{1, 2, \dots, p\}$ sao cho $Y_j(Z) > Y_j(Z^*)$ thì tồn tại $j \in \{1, 2, \dots, p\}$, $j \neq i$, sao cho $Y_j(x) < Y_j(Z^*)$. Nói một cách khác, không tồn tại một phương án khả thi nào $R \in D$ có thể trội hơn Z^* trên f tổng thể tất cả các mục tiêu.

2.1.3 Quy hoạch thực nghiệm TYT / TYP

- Xây dựng vùng khảo sát, miền quy hoạch với số yếu tố khảo sát (k) thì số biến (Z_1, Z_2, \dots, Z_k).
- Mức yếu tố : Z_1^{\min} ; Z_2^{\min} ; Z_3^{\min} v.v.... và Z_1^{\max} ; Z_2^{\max} ; Z_3^{\max} v.v..
- Lập mô hình quy hoạch bậc 1, bậc 2, phương trình hồi quy tuyến tính, phương trình phi tuyến.

$$Y = f(B, Z) = B_0 + \sum_{j=1}^k B_j \cdot Z_j$$

$$Y = B_0 + \sum_{j=1}^k B_j \cdot Z_j + \sum_{\substack{j, u=1 \\ j \neq u}}^k B_{ju} \cdot Z_j \cdot Z_u + \dots$$

$$Y = B_0 + \sum_{j=1}^k B_j \cdot Z_j + \sum_{j=1}^k B_j \cdot Z_j^2$$

$$Y = B_0 + \sum_{j=1}^k B_j \cdot Z_j + \sum_{j=1}^k B_j \cdot Z_j^2 + \sum_{\substack{j, u=1 \\ j \neq u}}^k B_{ju} \cdot Z_j \cdot Z_u + \dots$$

- Tìm các hệ số $B = [B_0, B_1, B_2 \dots, B_k, B_{12}, B_{13}, \dots, B_{ij}, \dots, B_{jj}, \dots]$
- Dùng chuẩn Student để kiểm tra các hệ số (B) phương trình.
- Dùng chuẩn Fisher để kiểm tra tính tương thích giữa phương trình toán học và thực nghiệm.
- Xác định hàm mục tiêu : $Y_1 = f_1 (Z_1, Z_2, \dots, Z_k)$; $Y_2 = f_2 (Z_1, Z_2, \dots, Z_k) \dots$
- Giải tìm điểm tối ưu bằng phương pháp thỏa dụng mờ tương tác: $Y^{opt} = \text{opt } Y (Z_1, Z_2, \dots, Z_k)$ với nghiệm $Z_1^{opt}, Z_2^{opt}, \dots, Z_k^{opt}$.
- Tiến hành thực nghiệm xác nhận mô hình tối ưu hóa thực nghiệm thành công.

2.1.4 Tối ưu đa mục tiêu bằng phương pháp thỏa dụng mờ tương tác

Có khá nhiều các phương án để giải quyết bài toán tối ưu đa mục tiêu, như: Phương pháp tham số, phương pháp nón pháp tuyến, phương pháp véc tơ cực đại, phương pháp trọng số tương tác, phương pháp thỏa dụng mờ tương tác v.v.... Mỗi phương án đều có các ưu điểm trong hướng giải quyết vấn đề cho các đối tượng của mình.

Các bước thực hiện cho phương pháp phương thỏa dụng mờ tương tác:

2.1.4.1. Khởi tạo

- Xác định số liệu cho các hàm mục tiêu Y_j ($j = 1, 2, 3, \dots, p$) với các yếu tố tương tác Z_i ($i = 1, 2, 3, \dots$) trong các điều kiện ràng buộc R_m ($m = 1, 2, 3, \dots$). (Nếu với mục tiêu nào đó bài toán không cho phương án tối ưu thì cần xem xét để điều chỉnh lại các điều kiện ràng buộc ban đầu).
- Lập bảng Pay-off.
- Xác định giá trị cận trên $Y^{(b)}$ và giá trị cận dưới $Y^{(w)}$ cho từng mục tiêu Y_j .
- Xác định các hàm thỏa dụng mờ $\mu_1(Y_1), \dots, \mu_p(Y_p)$ cho từng mục tiêu dựa vào bảng Pay-off, theo công thức (1):

$$\mu_i(Y_i) = \frac{Y_i - Y_i^w}{Y_i^b - Y_i^w} \quad \text{với } i = 1, \dots, p \quad (1)$$

2.1.4.2. Lập các bước (theo k):

- Xây dựng hàm mục tiêu tổ hợp từ các hàm thỏa dụng trên theo dạng công thức (2):

$$u = \sum_{i=1}^p W_i \mu_i(Y_i) \rightarrow Opt \quad (2)$$

Trong đó: W_i là các hệ số phản ánh tầm quan trọng của từng hàm thỏa dụng trong thành

phần hàm tổ hợp và $\sum_{i=1}^p W_i = 1, 0 \leq W_i \leq 1$

- Đặt: $S_p = \{X_1, X_2, \dots, X_p\}$, $k = 1$ và $a_i^k = Y_j^{(b)}$ với $j = 1, \dots, p$.

- Giải hàm mục tiêu tổ hợp $u = \sum_{i=1}^p W_i \mu_i(Y_j)$

với m ràng buộc R_m ban đầu và p ràng buộc bổ sung $Y_j < a_i^k$.

Nếu cảm thấy chưa thỏa mãn với các giá trị đạt được của các hàm mục tiêu cũng như của các hàm thỏa dụng thì phương án thu được

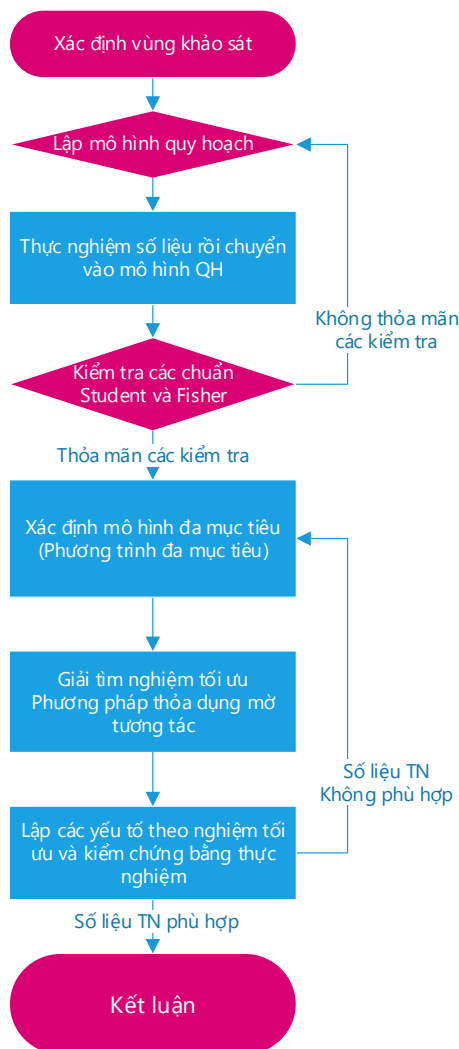
$X_{(k)}$ chưa phải là phương án tối ưu thỏa mãn nhất, cần thay k bởi $k+1$, quay về bước trên.

Nếu đã cảm thấy thỏa mãn thì phương án thu được là $X_{(k)}$.

2.1.4.3. Giải nghiệm tối ưu

Kết quả có được cùng một bộ nghiệm tối ưu cho hàm thỏa dụng mờ tương tác $\mu_1(Y_1), \dots, \mu_p(Y_p)$ tương ứng với bước lặp $k: Z_1^{opt}, Z_2^{opt}, \dots, Z_k^{opt}$. xác định được vùng không tồn tại trị số thỏa dụng hơn, không tồn tại điểm tối ưu khác.

2.2 Phương pháp nghiên cứu



3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

3.1 Nghiên cứu

3.1.1 Nguyên liệu

Trong quả dâu tây, lượng nước chiếm 91%, carbohydrat 7.7%, protein 0.7%, và các phần còn lại khác, nhưng một quả dâu tây có chứa đến 25 loại anthocyanin khác nhau. Đây là nguyên nhân làm nên màu sắc đậm rỡ của quả thực vật này. Do đó quả dâu tây được chọn làm là nguyên liệu thực nghiệm để khảo sát hàm lượng anthocyanin.

Quả dâu đỏ Lái Thiêu, được làm sạch, cân mỗi mẫu 20 g, bảo quản ở 8 °C để làm nguyên liệu trong suốt quá trình nghiên cứu.

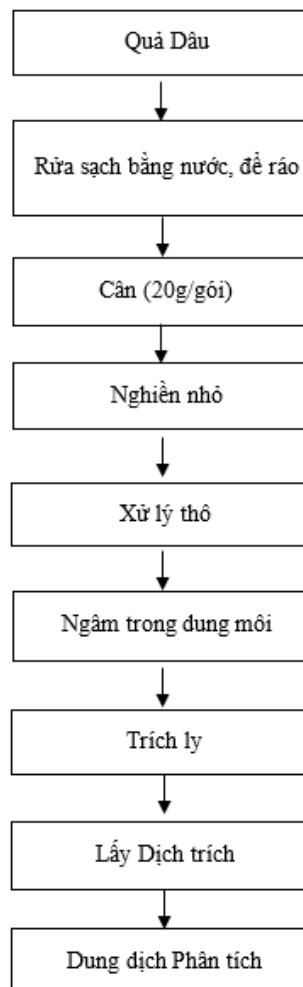
Hệ dung môi phân cực để chiết là ethanol/nước và ethanol/HCl.

3.1.2 Phương pháp thực nghiệm

- Phương pháp pH vi sai để xác định hàm lượng anthocyanin thô và độ màu: Chất màu anthocyanin thay đổi theo pH, tại pH = 1 các anthocyanin tồn tại ở dạng oxonium hoặc flavium có độ hấp thụ cực đại, còn ở pH = 4,5 thì chúng lại ở dạng carbinol không màu. Tiến hành đo mật độ quang của mẫu tại dãy bước sóng hấp thụ 420 nm – 700 nm, lần lượt với thể tích mẫu được sử dụng 5 mL – 10 mL.
- Phương pháp qui hoạch thực nghiệm trực giao cấp hai của Box- Hunter [1] để xây dựng mô tả toán học biểu diễn hàm hai mục tiêu với 3 thành phần khảo sát.
- Xác lập và giải bài toán tối ưu 2 mục tiêu bằng phương pháp thỏa dụng mờ tương tác.

3.1.3 Thực nghiệm số liệu

- Quy trình xử lý mẫu Dâu:



- Khảo sát độ màu và hàm lượng (%) anthocyanin qua các yếu tố: Bước sóng λ (Z_1), độ pH (Z_2), và thể tích lượng mẫu (Z_3) trong vùng khảo sát và mức quy hoạch theo bảng 1.

Bảng 1. Vùng khảo sát và các mức quy hoạch

	Bước sóng λ	Độ pH	Thể tích
Mức trên, (+1)	700	4,5	10
Mức dưới, (-1)	420	1	5
Mức cơ sở, (0)	560	2,75	7,5
Cánh tay đòn, ($\pm a$)	750	5,12	11
	370	0,38	4

- Số liệu thực nghiệm tại tâm quy hoạch được tiến hành theo bảng 2:

Bảng 2. Thí nghiệm tại tâm quy hoạch

STN	Bước sóng	pH	Thể tích	Mật độ quang (A)	Hàm lượng (%) Anthocyanin
1	560	2,75	7,5	0,080	1,322
2	560	2,75	7,5	0,083	1,371
3	560	2,75	7,5	0,080	1,323

3.1.4 Thiết lập quy hoạch thực nghiệm dưới dạng phương trình hồi quy

- Kế hoạch quy hoạch thực nghiệm: Bước sóng (λ) - Z_1 , pH - Z_2 , thể tích mẫu V(mL) - Z_3 , trong vùng kiểm soát: $420 \leq \lambda \leq 700$; $1,0 \leq \text{pH} \leq 4,5$; $5 \leq V \leq 10$.
- Xác định hệ số B trong phương trình theo công thức (3):

$$L = 2k + 1 + \frac{k!}{2!(k-2)!} = \frac{(k+1)(k+2)}{2} = 10 \quad (3)$$

Phương trình có dạng:

$$Y = B_0 + B_1.Z_1 + B_2.Z_2 + B_3.Z_3 + B_4.Z_1.Z_2 + B_5.Z_1.Z_3 + B_6.Z_2.Z_3 + B_7.Z_1^2 + B_8.Z_2^2 + B_9.Z_3^2$$

- Ma trận không thứ nguyên với biến số (X) được chuyển từ ma trận thứ nguyên (Z) và được hạ bậc thành (x) theo công thức (4,5,6)

$$x_1' = x_1^2 - v = x_1^2 - \frac{2^k + 2.\alpha^2}{N} \quad (4)$$

$$x_2' = x_2^2 - v = x_2^2 - \frac{2^k + 2.\alpha^2}{N} \quad (5)$$

$$x_3' = x_3^2 - v = x_3^2 - \frac{2^k + 2.\alpha^2}{N} \quad (6)$$

Trong đó: $\alpha = \pm \sqrt{\sqrt{N.2^{k-2}} - 2^{k-1}}$

Phương trình hạ bậc có dạng là:

$$Y = b_0 + b_1.x_1 + b_2.x_2 + b_3.x_3 + b_4.x_1.x_2 + b_5.x_1.x_3 + b_6.x_2.x_3 + b_7.x_1' + b_8.x_2' + b_9.x_3'$$

- Ma trận thực hiện phương án trực giao TYT với k = 3 theo bảng 3.

Bảng 3. Ma trận thực nghiệm phương án trực giao cấp 2

	TN	x ₀	x ₁	x ₂	x ₃	x ₁ .x ₂	x ₁ .x ₃	x ₂ .x ₃	x ₁ '	x ₂ '	x ₃ '	Y ₁	Y ₂
P/án TN quy hoạch	1	1	1	1	1	1	1	1	0,31	0,31	0,31	0,048	0,793
	2	1	1	1	-1	1	-1	-1	0,31	0,31	0,31	0,026	0,43
	3	1	1	-1	1	-1	1	-1	0,31	0,31	0,31	0,05	0,826
	4	1	1	-1	-1	-1	-1	1	0,31	0,31	0,31	0,019	0,314
	5	1	-1	1	1	-1	-1	1	0,31	0,31	0,31	0,245	4,048
	6	1	-1	1	-1	-1	1	-1	0,31	0,31	0,31	0,07	1,157
	7	1	-1	-1	1	1	-1	-1	0,31	0,31	0,31	0,337	3,18
	8	1	-1	-1	-1	1	1	1	0,31	0,31	0,31	0,17	2,809
P/án điểm giao	1	1	1,35	0	0	0	0	0	1,14	-0,69	-0,69	0,024	0,396
	2	1	-1,35	0	0	0	0	0	1,14	-0,69	-0,69	0,218	0,396
	3	1	0	1,35	0	0	0	0	-0,69	1,14	-0,69	2	0,396
	4	1	0	-1,35	0	0	0	0	-0,69	1,14	-0,69	0,101	0,396
	5	1	0	0	1,35	0	0	0	-0,69	-0,69	1,14	0,13	0,396
	6	1	0	0	-1,35	0	0	0	-0,69	-0,69	1,14	0,051	0,396
P/án Tâm	1	1	0	0	0	0	0	0	-0,69	-0,69	-0,69	0,08	1,322
	2	1	0	0	0	0	0	0	-0,69	-0,69	-0,69	0,083	1,371
	3	1	0	0	0	0	0	0	-0,69	-0,69	-0,69	0,08	1,322

3.1.5 Mô hình hai mục tiêu [2]

- Xác định từng mô hình: Dùng các quy chuẩn của Student và Fisher, thì mô hình hai mục tiêu $Y_1 = f_1(x_1, x_2, x_3)$; $Y_2 = f_2(x_1, x_2, x_3)$, thu được như sau:

$$Y_1 = 0,241 - 0,081x_1 + 0,204x_2 + 0,043x_3 + 0,0246x_1.x_2 - 0,036x_1.x_3 - 0,174x_1^2 + 0,334x_2^2 - 0,191x_3^2$$

$$Y_2 = 0,702 - 0,962x_1 - 0,264x_2 + 0,560x_3 + 0,407x_1.x_2 - 0,02375x_1.x_3 + 0,296x_1^2 + 0,296x_2^2 + 0,296x_3^2.$$

- Chuyển sang phương trình thực nghiệm $Y_1(Z_1, Z_2, Z_3)$ và $Y_2(Z_1, Z_2, Z_3)$, tính tối ưu từng mô hình mỗi mục tiêu:

$$Y_1^{opt} = \max Y_1 (Z_1^{opt}, Z_2^{opt}, Z_3^{opt}) = 0,381 \text{ với } (Z_1^{opt} = 420 ; Z_2^{opt} = 1 ; Z_3^{opt} = 10)$$

$$Y_2^{opt} = \max Y_2 (Z_1^{opt}, Z_2^{opt}, Z_3^{opt}) = 3,083 \text{ với } (Z_1^{opt} = 420 ; Z_2^{opt} = 1 ; Z_3^{opt} = 10)$$

3.2 Thảo luận

3.2.1 Tối ưu theo phương pháp thỏa dụng mờ

- Dùng Solver trong phần mềm MS-Excel, cho kết quả:

$$Y_1^{opt} = 0,381 \text{ tại } (420 ; 1 ; 10)$$

$$Y_2^{opt} = 3,083 \text{ tại } (420 ; 1 ; 10)$$

- Lập bảng Pay – Off:

	Y_1	Y_2
Với nghiệm 1	0,381	0,044
Với nghiệm 2	0,027	3,083

- Vậy cận trên là $Y_1^{(b)} = 0,381$ và $Y_2^{(b)} = 3,083$.

cận dưới là $Y_1^{(w)} = 0,027$ và $Y_2^{(w)} = 0,044$

- Lập các bước lặp $k=1$, hàm thỏa dụng mờ có dạng: $u = w_1\mu_1(Y_1) + w_2\mu_2(Y_2)$

Trong đó: $0 \leq w_1 \leq 1, 0 \leq w_2 \leq 1$ và $w_1 + w_2 = 1$

Với $w_1 = 0,1$ và $w_2 = 0,9$: $u = 0,282Y_1 + 0,296Y_2 + 0,021$, cần tiến hành giải cực trị cho hàm thỏa dụng mờ tương tác:

$$u = 0,295 - 0,263Z_1 + 0,024Z_2 + 0,133Z_3 + 0,062Z_1.Z_2 - 0,121Z_1.Z_3 + 0,065Z_2.Z_3 + 0,014Z_1^2 + 0,157Z_2^2 + 0,009Z_3^2.$$

Dùng phép giải solver, cho kết quả: $u^{opt} = 0,987$ với $Z_1^{opt} = 420 ; Z_2^{opt} = 1 ; Z_3^{opt} = 10$

- Tương tự lặp lại cho các bước lặp, cũng cho kết quả tương tự.

Với $w_1 = 0,2$ và $w_2 = 0,8$: $u = 0,565Y_1 + 0,263Y_2 + 0,027$; được: $u^{opt} = 0,945$ với $Z_1^{opt} = 420 ; Z_2^{opt} = 1 ; Z_3^{opt} = 10$.

Với $w_1 = 0,5$ và $w_2 = 0,5$: $u = 1,412Y_1 + 0,165Y_2 + 0,045$; được: $u^{opt} = 0,923$ với $Z_1^{opt} = 420 ; Z_2^{opt} = 1 ; Z_3^{opt} = 10$.

Với $w_1 = 0,8$ và $w_2 = 0,2$: $u = 2,26Y_1 + 0,066Y_2 + 0,064$; được: $u^{opt} = 0,968$ với $Z_1^{opt} = 420 ; Z_2^{opt} = 1 ; Z_3^{opt} = 10$.

Vậy với phương án trội của Pareto mở rộng, nghiệm được khảo sát trên được chấp nhận, vì các nghiệm thỏa hiệp giữa các mục tiêu xuất hiện không trội hơn bất kỳ nghiệm nào.

3.2.2 Thực nghiệm kiểm chứng tối ưu

Tiến hành thí nghiệm kiểm chứng với lượng mẫu 10 mL, được đem đo tại pH = 1 và bước sóng $\lambda = 420$ nm, thì thu được kết quả: % anthocyanin là 3,18%, độ màu là 0,337.

Có thể thấy rằng kết quả tính toán điều kiện chiết tách tối ưu anthocyanin bằng phương pháp tối ưu hóa thỏa dụng mờ tương tác, cho kết quả bài toán quy hoạch hoàn toàn phù hợp với thực nghiệm.

4. KẾT LUẬN

Tối ưu hóa đa mục tiêu bằng phương pháp thỏa dụng mờ tương tác, thực sự là một phương pháp hiệu quả và thích hợp cho việc giải quyết các bài toán tối ưu đa mục tiêu bằng thực nghiệm kiểm soát.

Phương pháp này mở ra một hướng đi thực tế cho người nghiên cứu số liệu thực nghiệm trên nhiều yêu cầu, nhiều mục tiêu hơn.

Các anthocyanin thể hiện màu sắc theo pH của môi trường. Màu đỏ dần qua màu cam đến không màu rồi chuyển sang màu xanh tương ứng với pH chuyển từ 1 lên 4 đến 5, rồi 7 đến 8. Vì thế kết quả phức thu được màu đỏ cực đại, khẳng định pH=1 sau khi đã quy hoạch pH từ 1 đến 4.

Bằng phép tối ưu hai mục tiêu theo phương pháp thỏa dụng mờ tương tác, đã cho kết quả là 3,18%

hàm lượng, độ màu là 0,337 (một kết quả khả quan so với cùng khảo sát phép thử anthocyanin bằng phương pháp pH vi sai, 1 hàm mục tiêu tối ưu, chỉ cho 1,188% hàm lượng).

TAI LIỆU THAM KHẢO

- Đinh Thị Thúy Hương. (2014). *Xây dựng quy trình định lượng anthocyanin trong thực phẩm chức năng bằng phương pháp HPLC và HPTLC, Kiểm nghiệm thuốc – độc chất*. Hà Nội: Trường đại học Dược Hà Nội.
- Lê Trần Bình., Nguyễn Hữu Cường., & Phạm Thị Thanh Nhân. (2011). Tách chiết và phân tích hàm lượng Anthocyanin trong các mẫu thực vật khác nhau, *Tạp chí Sinh Học, Tập 33(4)*, 79-85.
- Lê Xuân Hải., & Nguyễn Thị Lan. (2008). 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. *Tạp chí Khoa học và Công nghệ (Viện Khoa học và Công nghệ Việt Nam), tập 11, số 09*, 69-81.
- Huỳnh Thị Kim Cúc., Phạm Châu Quỳnh., Nguyễn Thị Lan, và cộng sự. (2004). Xác định hàm lượng anthocyanin trong một số nguyên liệu rau quả bằng phương pháp pH vi sai. *Tạp Chí Khoa Học và Công Nghệ, Tập 3, số 7*, 47-54, Đà Nẵng: Trường Đại Học Đà Nẵng.
- Hoàng Thị Kim Khuyên. (2009). *Ứng dụng HPLC ghép đầu dò điện hóa và diode array (HPLC ECD DAD) để xác định hệ số hấp thu phân tử và định lượng anthocyanin trong dịch trích thực vật*. Hồ Chí Minh: Khoa học - hóa học Trường Đại học Khoa học Tự nhiên, Đại học Quốc gia thành phố Hồ Chí Minh.
- Nguyễn Cảnh., & Nguyễn Đình Soa. (1985). *Tối ưu hóa thực nghiệm trong hóa học và kỹ thuật hóa học*, (Nguyễn Cảnh & Nguyễn Đình Soa, biên dịch). Hồ Chí Minh: Trường Đại Học Kỹ Thuật Tp.HCM. (Quyển sách gốc được xuất bản năm 1978).
- Nguyễn Thị Lan., Lê Thị Lạc Quyên. (2006). Nghiên cứu ảnh hưởng của hệ dung môi đến khả năng chiết tách chất màu Anthocyanin có độ màu cao từ quả dâu Hội An. *Tạp Chí Khoa Học và Công Nghệ, tập 44*, 71-76. Đà Nẵng: Trường Đại Học Đà Nẵng.
- Nguyễn Hải Thanh. (2017). Các mô hình và phần mềm tối ưu hóa và ứng dụng trong nông nghiệp, Bài giảng điện tử trong khuôn khổ dự án CNTT, Hà Nội, Việt Nam.
- Trương Bách Chiến. (2016). *Quy hoạch thực nghiệm và tối ưu hóa thực nghiệm trong công nghệ hóa học*. Hồ Chí Minh: NXB Đại học Quốc gia Tp. HCM.
- Trần Cao Sơn. (2010), *Thẩm định phương pháp trong phân tích hóa học & vi sinh vật*. Hà Nội: NXB Khoa Học và Kỹ Thuật.
- TCVN 11028:2015. (2015). *Đồ uống – Xác định tổng hàm lượng chất tạo màu anthocyanin dạng monome – Phương pháp pH vi sai*. Hà Nội : Tổng cục Tiêu chuẩn Đo lường Chất lượng thẩm định, Bộ Khoa học và Công nghệ.