

可视化方法对提取总黄酮工艺条件的优化

华 丽 翁连进 鄢烈祥

(华侨大学材料科学与工程学院, 福建 泉州 362011; 武汉理工大学化学工程研究所, 湖北 武汉 430070)

摘要 采用一种新的工业过程操作优化方法——可视化优化方法,对超声波法从银杏叶中提取总黄酮工艺条件进行优化.通过对实验数据进行分析、处理和降维映射产生平面图,并对各影响参数与目的指标之间进行函数拟合,生成目标函数等值线.从等值线图中找出最佳操作点或方向,进而作出优化决策.实例计算结果表明,该方法是有用的.

关键词 银杏叶,总黄酮,可视化优化方法,降维映射,超声波

中图分类号 TQ 460.36 R 972 O 232

文献标识码 A

银杏叶富含黄酮类化合物,这些物质具有防心血管疾病的功能.早在 20 世纪 60 年代,国外就开始了银杏叶加工利用研究,我国在 70 年代初,也开始了对银杏黄酮的提取工艺及其制药的研究.超声波法提取时,超声波产生的强烈振动、高加速度、强烈空化效应和搅拌作用等,都可以加速药物有效成分进入溶剂,从而提高提出率,缩短提取时间,并且免去高温对提出成分的影响.文[1]就采用超声法从银杏叶中提取总黄酮,运用多元线性和二次多项式逐步回归分析法,对试验数据进行处理,并找出最佳试验条件.但是,这种方法在各影响因素相互间有交叉影响时,特别是当数据离散性很大时,就很难准确预测优化方向,更难找出优化操作条件.而且,即使它能找出最佳操作条件,也不一定是准确可靠的.本文提出了一种新的工艺条件优化方法——可视化优化方法^[1,2],它通过降维映射将样本数据多维空间面貌特征映射到二维平面上,并自动产生目标函数等值线.因此,它可直观地从等值线图中找出最优点或最优化操作方向,并通过对总黄酮提取工艺条件优化,得出了比均匀设计法更优化的操作条件.

1 原始条件

文[1]采用超声波工艺,从银杏叶中提取总黄酮数据,用均匀设计法产生 14 组实验数据.在文[1]超声波提取工艺中,影响总黄酮提出率(用 Y 表示)的主要因素有,浸取剂中乙醇体积分数 X_1 、超声波作用时间 X_2 (min)、浸泡时间 X_3 (h)、浸取剂与银杏叶比例 X_4 (mL·g⁻¹).其中,提出率 Y 大于 15.8% 为符合要求.均匀设计法得出的最佳操作条件是,乙醇体积分数为 0.64,超声波提取 49.2 min,浸泡 31.8 h,浸取剂与银杏叶比例为 45.6 mL·g⁻¹,其对应的总黄酮提出率,为每 1 克银杏叶中能提取 20.1 mg 总黄酮.本文采用可视化优化方法对这组数据进行分析、处理,得出比均匀设计法更优化的工艺操作条件.可视化优化方法的详细描述参见文[3,4],该方法用于提取工艺中的优化分两步.首先,将这组数据输入给计算机,运用 MATLAB 软件编写程序语言,产生映射输出结果.然后,从映射平面图中找出满足工艺生产要求的最优点或最优化方向,进而指导下一步实验或生产.

2 结果与讨论

2.1 输出映射平面

图 1 是可视化方法对银杏叶中提取总黄酮实验数据进行处理后,所产生的映射输出结果.根据工艺

收稿日期 2004-01-19

作者简介 华 丽(1974-),女,助教,硕士,主要从事工业过程操作优化方法的研究. E-mail: txuehua @163.com

基金项目 国家自然科学基金资助项目(2000J004)

生产要求,当总黄酮提出率达到 15.8 % 为优类. 在实验设备不变情况下,提出率越高越好. 因此,映射图中可把样本分为两大类,分别用“ * ”和“ + ”表示. 当目标函数值 $Y \geq 15.8\%$ 时,为“ * ”类样本聚集区;当目标函数值 $Y < 15.8\%$ 时,为“ + ”类样本聚集区. 从图中可看出,“ * ”类样本被“ + ”类样本包围,且两类样本之间相互没有交叉,其数据的分类效果很好. 而且,实验没有因测量或记录失误带来较大的误差. 对于分类很好的样本集,由于没有离群样本出现,运用可视化方法优化时,不需再筛选样本数据,可直接进行函数拟合.

2.2 函数拟合结果

图 2 是目标函数经过几千次迭代拟合计算后,产生的拟合曲线图. 从图中可知,其逼近能力很强,除

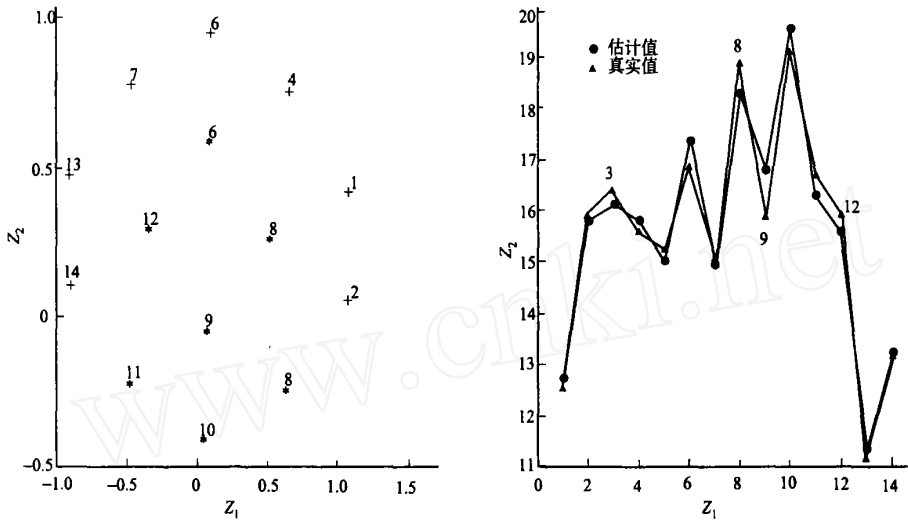


图 1 从银杏叶中提取黄酮的实验数据映射图

图 2 函数拟合图

少数几个点(如图中 3 # ,8 # ,9 # 和 12 # 点)稍微有些偏差以外,其余的点几乎与原始点重合. 表 1 是各

表 1 可视化优化方法的优化结果

$Y_1/\text{mg}\cdot\text{g}^{-1}$	$Y_2/\text{mg}\cdot\text{g}^{-1}$	Z_1	Z_2	$Y_1/\text{mg}\cdot\text{g}^{-1}$	$Y_2/\text{mg}\cdot\text{g}^{-1}$	Z_1	Z_2
12.50	12.613 8	- 0.685 8	- 0.638 9	18.90	18.395 8	0.120 7	- 0.902 5
15.80	15.867 6	- 0.469 0	- 0.889 7	15.90	16.675 9	0.426 8	- 0.753 6
16.40	16.025 5	- 0.162 9	- 0.740 9	19.20	19.678 2	0.643 6	- 1.004 5
15.60	15.633 3	- 0.168 1	- 0.693 1	16.70	16.161 0	0.949 7	- 0.855 7
15.20	15.128 4	0.138 0	- 0.544 3	15.90	15.499 4	0.944 5	- 0.807 9
17.00	17.221 1	0.354 8	- 0.795 1	11.10	11.319 4	1.250 6	- 0.659 0
15.00	14.918 9	0.660 9	- 0.646 3	13.10	13.160 6	1.467 4	- 0.909 9

样本点的网络计算结果 Y_2 与 Y_1 真实值的比较,两者的相对平均误差只有 0.018 %. 从表中也可看出,计算值与真实值非常接近. 这说明可视化优化方法所用的人工神经网络降维映射模型,能用来预测优化方向,找出优化规律.

2.3 产生目标函数等值线

图 3 是产生的目标函数等值线. 其中,样本数据点是图中分别标为 1,2,...,14 的点,其目标函数值增大的方向是图中正下方. 取第 10 # 与 11 # 两样本点向该方向进行外推,先取步长 $= 1.2$,得到坐标点 $Z_1 = 0.582\ 4$, $Z_2 = - 1.034\ 3$ 处. 如图中第 1 个星号点,标为“ A ”点(其预测结果见表 2),在该点处的目标函数值(即总黄酮得率值)为 $20.291\ 8\ \text{mg}\cdot\text{g}^{-1}$,大于文[1]所确定的最佳操作条件(乙醇体积分数

表 2 预测结果

参照点	W	X_2	X_3	X_4	Y	Z_1	Z_2
11 10	1.2	64.00	49.20	31.80	45.60	20.291 8	0.582 4 - 1.034
11 10	1.6	62.00	39.60	41.40	48.80	21.429 2	0.460 0 - 1.093 8

为 0.67,超声波提取 67 min,浸泡 39 h,浸取剂与银杏叶比例为 $60\ \text{mL}\cdot\text{g}^{-1}$,最高得率为 $20.1\ \text{mg}\cdot\text{g}^{-1}$)下的得率值. 并且,沿着该方向进一步外推,还可找出更优的点. 同样,以第 10 # ,11 # 两个样本,取步长

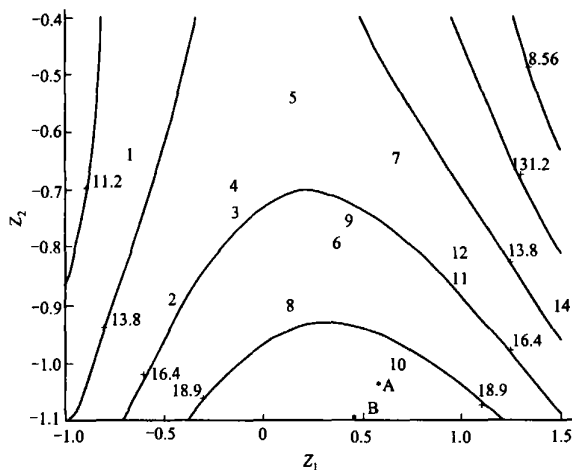


图3 目标函数等值线

= 1.6 外推,即得图中的“B”点.其对应的原始操作条件,如表2所示.所得率值为 $21.4292 \text{ mg} \cdot \text{g}^{-1}$,比用均匀设计法所确定的最高得率值($20.1 \text{ mg} \cdot \text{g}^{-1}$)还要高出很多.这说明了均匀设计法所确定的最佳操作条件并不是最优的,在此基础上调节好各变量参数值,还可使总黄酮量有所增加.

3 结束语

从上述计算结果可看出,把样本数据和目标函数映射到平面变成可视化图像后,从这个映射图像上人们就可直接地看出多维操作空间数据的拓扑构形和面貌特征.同时,也可以直观地确定出最优化操作方向.沿着该方向进一步外推(当然若要求目的指标值为一个上下界限定的范围时,则用内插),总可找到最优点.它能为工业过程操作提供了一种可视化决策支持.这种操作方式快捷、省时,与目前公认效果较好的均匀设计方法相比,具有更直观、准确、高效等优点.

参 考 文 献

- 1 刘 峥. 超声波提取银杏叶中总黄酮[J]. 桂林工学院学报(自然科学版), 2001, 21(3): 276 ~ 279
- 2 鄢烈祥, 华 丽. 工业过程操作优化可视化方法——降维分析法[J]. 武汉理工大学学报(自然科学版), 2002, 24(2): 79 ~ 82
- 3 华 丽. 可视化优化方法及其应用的研究[D]: [学位论文]. 武汉: 湖北工业大学化学工程系, 2003. 5 ~ 15
- 4 Yan Niexiang. Global optimization of nonconvex nonlinear programs using line-up competition algorithm[J]. Computer & Chemical Engineering, 2001, (9): 43 ~ 52

Optimization of Technological Condition for Extracting Total Flavone by Visualized Method

Hua Li Weng Lianjin Yan Liexiang

(College of Mater. Sci. & Eng., Huaqiao Univ., 362011, Quanzhou, China;
Inst. of Chem. Eng., Wuhan Univ. of Tech., 430070, Wuhan, China)

Abstract For optimizing the technological conditions in the extraction of total flavone from ginkgo biloba leaves by ultrasonic wave, the authors adopt visualized method as a new optimization method for the operation of industrial process. A two-dimensional plan is generated by analysis and processing of experimental data and by reduction of dimensions and mapping. And then, the magnitude contours of objective function are formed by function adapting between all influencing parameters and object index. Thus the best operational direction can be directly found from contour chart and the optimized decision can be made. As demonstrated by calculated results from examples, this is an effective method.

Keywords ginkgo bibloba leaves, total flavone, visualized optimization method, reduction of dimensions and mapping, ultrasonic wave