

XÁC ĐỊNH CÁC THÔNG SỐ ĐỘNG HỌC CỦA FRUCTOSYLTRANSFERASE (FTS) BẰNG PHƯƠNG PHÁP MÔ PHÒNG LUYỆN KIM (SA - SIMULATED ANNEALING)

Lê Thị Hồng Ánh*, Lư Nhật Vinh

*Trường Đại học Công nghiệp Thực phẩm Tp. HCM,
149 Lê Trọng Tấn, Quận Tân Phú, TP. Hồ Chí Minh*

*Email: anhlth@cntp.edu.vn

Đến Tòa soạn: 17/11/2012; Chấp nhận đăng: 15/11/2013

TÓM TẮT

Phương pháp mô phỏng luyện kim (SA – Simulated Annealing) được giới thiệu một cách độc lập bởi S. Kirkpatrick, C. D. Gellatt, M. P. Vecchi năm 1983. Phương pháp này được xây dựng dựa trên mô phỏng kiểu Metropolis với các tham số điều khiển biến thiên theo chu trình tiến hóa của giải thuật. Đây là một công cụ hiệu quả để xử lý các bài toán tìm kiếm và tối ưu, đặc biệt là những bài toán có không gian tìm kiếm lớn.

Trong bài báo này, chúng tôi đã xác định được các thông số động học của fructosyltransferase (FTS) bằng phương pháp mô phỏng luyện kim, giúp giảm thiểu số thí nghiệm, thời gian và chi phí khi nghiên cứu động học phản ứng enzyme, đặc biệt là trong trường hợp phản ứng có nhiều cơ chất.

Từ khóa: mô phỏng luyện kim, FTS, động học, tối ưu.

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Mô phỏng luyện kim là giải thuật Metaheuristic tìm kiếm địa phương khá phổ biến trong việc giải các bài toán tối ưu tổ hợp rời rạc. Tính năng chính của giải thuật là cho phép việc thoát khỏi cực trị địa phương bằng cách cho phép di chuyển ngược với hy vọng tìm được lời giải tối ưu. Tính dễ cài đặt, khả năng hội tụ và việc kỹ thuật này sử dụng các bước di chuyển lùi để thoát khỏi cực trị địa phương đã làm cho nó trở nên phổ biến từ cách đây 2 thập kỉ [1].

Giải thuật luyện kim mô phỏng quá trình luyện kim thông thường, trong đó tinh thể thép được nung nóng và sau đó được cho phép làm nguội rất chậm cho tới khi nó đạt được cấu hình tinh thể cứng nhất, nếu quá trình làm nguội đủ chậm, kết quả cuối cùng sẽ là kim loại với cấu trúc rất tốt. Giải thuật áp dụng cho bài toán tối ưu tổ hợp với mỗi lần lặp, hàm mục tiêu được xem xét cho 2 lời giải, lời giải hiện tại và lời giải mới. Chúng được so sánh với nhau và nếu lời giải mới tốt hơn nó sẽ luôn luôn được chọn. Ngược lại nếu hàm mục tiêu của lời giải mới không

tốt hơn, nó vẫn có khả năng được chấp nhận trong hy vọng thoát ra khỏi cực trị địa phương để tìm kiếm cực trị toàn cục, xác suất chấp nhận lời giải kém hơn tùy thuộc vào tham số nhiệt độ, tham số này sẽ giảm dần khi các lần lặp tiếp diễn, khi nhiệt độ giảm xuống tới gần 0, quá trình này sẽ ít xảy ra hơn và phân bố lời giải sẽ có nhiều khả năng hội tụ đến cực trị toàn cục một cách nhanh chóng [1].

Để giải quyết các bài toán tìm kiếm và tối ưu trong công nghệ thực phẩm và công nghệ sinh học, phương pháp được sử dụng nhiều nhất là phương pháp ngẫu nhiên. Tuy nhiên, phương pháp này có nhiều hạn chế như dễ rơi vào cực trị địa phương, tốn nhiều thời gian vì phụ thuộc vào quá trình ngẫu nhiên hóa [2]. Gần đây có nhiều nhà khoa học đã ứng dụng phương pháp SA thay cho phương pháp ngẫu nhiên truyền thống [3, 4].

Tại Việt Nam, Bùi Công Thành và Trương Tuấn Hiệp [5] đã tối ưu đồng thời các biến kích thước và vị tương của kết cấu dàn phẳng dựa vào giải thuật mô phỏng luyện kim; Đỗ Quang Bình [6] nghiên cứu khả năng thiết kế các mẫu tái nạp nhiên liệu tối ưu cho lò phản ứng hạt nhân bằng phương pháp mô phỏng luyện kim; Nguyễn Ngọc Tú và Trần Văn Lăng [7] kết hợp giải thuật di truyền và mô phỏng luyện kim giải bài toán sắp hàng đa trình tự sinh học; Vũ Mạnh Xuân [8] sử dụng giải thuật di truyền, chiến lược tiến hoá và giải thuật mô phỏng luyện kim để giải bài toán tối ưu số.

Thông thường, để xác định các thông số động học của enzyme như K_m , K_i , V_{max} , phải tiến hành hàng loạt thí nghiệm trực tiếp và sử dụng phương pháp đồ thị Lineweaver – Burk. Muốn dựng được các đồ thị Lineweaver – Burk có độ tin cậy cao, cần thăm dò, tìm các nồng độ enzyme và các nồng độ cơ chất thích hợp, tìm thời gian thích hợp để xác định tốc độ ban đầu của phản ứng enzyme, cũng như ảnh hưởng của thời gian trong quá trình phản ứng [9].

Trong một số trường hợp, ví dụ như đối với fructosyltransferase (FTS) thu nhận từ *Aspergillus flavipes* đang nghiên cứu, việc xác định 11 thông số động học của enzyme FTS (K_{ms} , K_{mk} , K_{mn} , K_{igs} , K_{igk} , K_{ign} , V_{ms} , V_{mk} , V_{mn} , K_{mhn} , V_{mhn}) theo phương pháp này rất phức tạp và khó khăn. Để giải quyết vấn đề này, chúng tôi đề xuất sử dụng phương pháp mô phỏng luyện kim nhằm xác định đồng thời 11 thông số động học của enzyme thông qua dữ liệu thực nghiệm thu được trong các thí nghiệm theo dõi ảnh hưởng của thời gian đến quá trình tổng hợp Fructooligosaccharide (FOS).

2. VẬT LIỆU VÀ PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU

2.1. Vật liệu

- Saccharose (Công ty CP Bourbon Tây Ninh, Việt Nam).
- Hóa chất: FOS chuẩn (Wako, Nhật); saccharose, glucose, fructose, acetonitrile và nước để phân tích HPLC (Merck, Đức).
- Fructosyltransferase (Viện Công nghiệp thực phẩm, Việt Nam).

2.2. Phương pháp nghiên cứu

- Xác định thành phần fructose, glucose, saccharose, FOS (GF_2 , GF_3 , GF_4) bằng phương pháp sắc kí lỏng cao áp (HPLC).

- Giải hệ phương trình vi phân bằng phương pháp Runge – Kutta.
- Giải bài toán tối ưu bằng phương pháp mô phỏng luyện kim [10].

Procedure Simulated_Annealing;

begin

$t \leftarrow 0;$

$u \leftarrow$ trạng thái ban đầu nào đó;

$T \leftarrow$ nhiệt độ ban đầu;

repeat

$v \leftarrow$ trạng thái được chọn ngẫu nhiên trong lân cận $u;$

if $cost(v) > cost(u)$ **then** $u \leftarrow v$

else $u \leftarrow v$ với xác suất $e^{-\Delta T};$

$T \leftarrow g(T, t);$

$t \leftarrow t + 1;$

until T đủ nhỏ

end;

- Đánh giá mức độ tương thích của mô hình động học đã đề xuất với thực nghiệm thông qua hệ số tương quan R được tính bằng công thức (2).

$$R = \sqrt{\frac{\sum_{t=0}^{\tau} \sum_{i=1}^n (\bar{y}_i(t) - M \bar{y}_i)^2 - \sum_{t=0}^{\tau} \sum_{i=1}^n (\bar{y}_i(t) - y_i(t, \bar{X}^*))^2}{\sum_{t=0}^{\tau} \sum_{i=1}^n (\bar{y}_i(t) - M \bar{y}_i)^2}} \quad (2)$$

trong đó:

$\bar{y}_i(t)$ là giá trị thực nghiệm của nồng độ chất (i) tại thời điểm t.

$M \bar{y}_i$ là giá trị trung bình của nồng độ chất (i) trong khoảng thời gian $t = 0 \rightarrow \tau$

$$M \bar{y}_i = \sum_{t=0}^{\tau} \frac{\bar{y}_i(t)}{N_t} ; N_t \text{ là số điểm đo trong khoảng thời gian } t = 0 \rightarrow \tau$$

$y_i(t, \bar{X}^*)$ là nồng độ chất (i) tính toán được tại thời điểm t bằng cách giải hệ phương trình vi phân với các hằng số động học $\bar{X} = \bar{X}^*$.

3. KẾT QUẢ NGHIÊN CỨU VÀ BÀN LUẬN

3.1. Cơ chế và mô hình động học phản ứng chuyển hóa saccharose thành FOS bằng FTS

Trong những nghiên cứu trước đây, chúng tôi đã đề xuất cơ chế phản ứng chuyển hóa saccharose thành FOS bằng enzyme FTS gồm 3 phản ứng chuyển hóa (từ 3 đến 5) và 1 phản ứng

thủy phân nystose GF₃ (phản ứng 6) và mô hình động học phản ứng chuyển hóa saccharose thành FOS bằng enzyme FTS dưới dạng hệ phương trình vi phân (từ 7 đến 12).



Với:

+ [G], [F], [GF], [GF₂], [GF₃], [GF₄] là nồng độ của glucose, fructose, saccharose, 1-kestose, nystose, fructofuranosyl nystose, tính bằng g/L.

+ K_{ms}, K_{mk}, K_{mn}, K_{mhn} là hằng số Michaelis–Menten (chuyển hóa) của saccharose, kestose, nystose và hằng số Michaelis–Menten (thủy phân) của nystose, tính bằng g/L.

+ K_{igs}, K_{igk}, K_{ign} là hằng số ức chế cạnh tranh của glucose với cơ chất là saccharose, kestose, nystose, tính bằng g/L.

+ V_{ms}, V_{mk}, V_{mn}, V_{mhn} là tốc độ chuyển fructosyl tối đa với cơ chất là saccharose, kestose, nystose và tốc độ thủy phân tối đa (cơ chất là nystose), tính bằng g/L.h.

+ Các giá trị 180, 342, 504, 666, 828 là khối lượng phân tử của glucose, saccharose, 1-kestose, nystose và fructofuranosyl nystose.

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dGF}{dt} = \frac{-V_{ms} \cdot [GF]}{[GF] + K_{ms} \left(1 + \frac{[G]}{K_{igs}}\right)} + \frac{342}{2.504} \cdot \frac{V_{mk} \cdot [GF_2]}{[GF_2] + K_{mk} \left(1 + \frac{[G]}{K_{igk}}\right)} \quad (7) \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dG}{dt} = \frac{180}{2.342} \cdot \frac{V_{ms} \cdot [GF]}{[GF] + K_{ms} \left(1 + \frac{[G]}{K_{igs}}\right)} \quad (8) \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dF}{dt} = \frac{180}{666} \cdot \frac{V_{mhn} \cdot [GF_3]}{[GF_3] + K_{mhn}} \quad (9) \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dGF_2}{dt} = \frac{504}{2.342} \cdot \frac{V_{ms} \cdot [GF]}{[GF] + K_{ms} \left(1 + \frac{[G]}{K_{igs}}\right)} - \frac{V_{mk} \cdot [GF_2]}{[GF_2] + K_{mk} \left(1 + \frac{[G]}{K_{igk}}\right)} + \frac{504}{2.666} \cdot \frac{V_{mn} \cdot [GF_3]}{[GF_3] + K_{mn} \left(1 + \frac{[G]}{K_{ign}}\right)} + \frac{504}{666} \cdot \frac{V_{mhn} \cdot [GF_3]}{[GF_3] + K_{mhn}} \quad (10) \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dGF_3}{dt} = \frac{666}{2.504} \cdot \frac{V_{mk} \cdot [GF_2]}{[GF_2] + K_{mk} \left(1 + \frac{[G]}{K_{igk}}\right)} - \frac{V_{mn} \cdot [GF_3]}{[GF_3] + K_{mn} \left(1 + \frac{[G]}{K_{ign}}\right)} - \frac{V_{mhn} \cdot [GF_3]}{[GF_3] + K_{mhn}} \quad (11) \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dGF_4}{dt} = \frac{828}{2.666} \cdot \frac{V_{mn} \cdot [GF_3]}{[GF_3] + K_{mn} \left(1 + \frac{[G]}{K_{ign}}\right)} \quad (12) \end{array} \right.$$

3.2. Khảo sát ảnh hưởng của thời gian đến quá trình tổng hợp FOS bằng enzyme FTS

Tiến hành khảo sát ảnh hưởng của thời gian đến hiệu suất tổng hợp FOS bằng cách thực hiện các thí nghiệm chuyển hóa FOS ở điều kiện tối ưu đã xác định (nhiệt độ 40 °C; pH 5,7; nồng độ saccharose ban đầu 700 g/L; tỉ lệ enzyme 11,9 U/g saccharose) và thời gian phản ứng thay đổi từ 0 đến 24 giờ. Kết quả được thể hiện trong bảng 1.

Xác định các thông số động học của fructosyltransferase (FTS) bằng phương pháp mô phỏng...

Từ kết quả thực nghiệm, chúng tôi thấy trong giai đoạn đầu (0–6 giờ), saccharose được chuyển hóa rất nhanh, đồng thời sản phẩm chuyển hóa chủ yếu là 1-kestose và glucose. Khi nồng độ 1-kestose tăng lên, nồng độ của nystose cũng tăng do sự chuyển nhóm fructosyl tới 1-kestose. Ở giai đoạn cuối (sau 22 giờ), nồng độ nystose bằng và sau đó tăng cao hơn nồng độ 1-kestose. Nồng độ saccharose, glucose và FOS đạt trạng thái ổn định sau 11 giờ.

Bảng 1. Ảnh hưởng của thời gian phản ứng đến quá trình tổng hợp FOS bằng enzyme FTS.

Thời gian (giờ)	Nồng độ (g/L)							Hiệu suất tổng hợp FOS (%)
	GF	G	F	GF ₂	GF ₃	GF ₄	FOS	
0	706,21	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
2	372,13	78,80	1,98	228,68	24,50	0,00	253,18	35,86
4	233,06	116,20	3,16	306,81	46,10	0,00	352,91	50,03
6	149,01	153,32	4,25	334,70	64,49	1,04	400,23	56,62
8	104,63	164,31	5,91	326,12	102,68	2,68	431,48	61,09
10	83,66	179,02	5,84	305,06	130,05	2,88	437,99	61,99
11	79,10	178,34	6,66	295,79	140,94	5,07	441,80	62,59
12	77,68	180,00	5,32	281,76	148,58	10,81	441,15	62,65
13	74,55	181,96	5,26	267,49	161,84	10,90	440,23	62,71
14	70,89	183,23	6,50	263,31	169,71	10,92	443,94	63,01
15	70,58	180,66	6,44	260,16	176,33	10,88	447,37	63,45
16	70,24	178,92	7,56	247,68	191,08	10,87	449,63	63,66
17	65,69	182,71	6,85	214,15	207,82	29,46	451,43	63,88
18	65,79	186,58	5,16	228,53	199,60	21,67	449,80	63,59
19	65,36	186,37	6,28	227,61	197,64	22,98	448,23	63,47
20	64,95	185,94	6,38	216,30	208,84	22,49	447,63	63,50
22	64,28	189,99	6,81	202,56	216,62	26,01	445,19	63,03
24	60,94	191,68	9,45	189,46	228,36	27,52	445,34	62,95

3.3. Đặt bài toán tối ưu xác định các thông số động học của enzyme FTS

Bài toán tối ưu xác định các thông số động học của enzyme FTS bằng phương pháp mô phỏng luyện kim được mô tả như sau:

Hãy tìm bộ nghiệm $\{K_{ms}, K_{mk}, K_{mn}, K_{igs}, K_{igk}, K_{ign}, V_{ms}, V_{mk}, V_{mn}, K_{mhn}, V_{mhn}\}$ thích hợp để tổng bình phương độ lệch E giữa dữ liệu lý thuyết tính theo mô hình động học và dữ liệu thực nghiệm là nhỏ nhất.

Biểu đạt toán học của bài toán tối ưu trên có dạng:

$$E_{\min} = \min E (K_{ms}, K_{mk}, K_{mn}, K_{igs}, K_{igk}, K_{ign}, V_{ms}, V_{mk}, V_{mn}, K_{mhn}, V_{mhn})$$

$$\text{Với miền giới hạn } \Omega_x = \begin{pmatrix} K_{ms} < K_{mk} < K_{mn} \\ V_{ms} > V_{mk} > V_{mn} \end{pmatrix} \quad (13)$$

trong đó: hàm mục tiêu E là tổng bình phương độ lệch giữa dữ liệu lí thuyết tính theo mô hình động học (gồm hệ phương trình vi phân từ 7 đến 12) và dữ liệu thực nghiệm (bảng 1).

$$E = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m (a_{ij} - b_{ij})^2 \quad (14)$$

Với: + $\{a_{ij}\}$ là ma trận số liệu lí thuyết (nồng độ các đường sau một khoảng thời gian phản ứng xác định) tính theo mô hình.

+ $\{b_{ij}\}$ là ma trận số liệu thực nghiệm.

3.4. Giải bài toán tối ưu xác định các thông số động học của enzyme FTS

Thuật toán mô phỏng luyện kim:

- Bước 1:

+ Chọn u là tập 11 số ngẫu nhiên tương ứng với $K_{ms}, K_{mk}, K_{mn}, K_{igs}, K_{igk}, K_{ign}, V_{ms}, V_{mk}, V_{mn}, K_{mhn}, V_{mhn}$

+ Giải hệ phương trình vi phân bằng phương pháp Runge-Kutta bậc 4

+ Tính giá trị của hàm mục tiêu E_0 từ công thức (14)

+ Cho $t_i = 1000000$

- Bước 2:

+ Chọn v là tập 11 số ngẫu nhiên trong lân cận của u tương ứng với $K_{ms}, K_{mk}, K_{mn}, K_{igs}, K_{igk}, K_{ign}, V_{ms}, V_{mk}, V_{mn}, K_{mhn}, V_{mhn}$

+ Giải hệ phương trình vi phân bằng phương pháp Runge-Kutta bậc 4.

+ Tính giá trị của hàm mục tiêu E từ công thức (14)

Nếu $E_0 < E$

Gán $u = v$

Gán $E_0 = E$

Ngược lại

Nếu $\text{RANDOM}(0,1) < \exp(-(E-E_0)/t_i)$

Gán $u = v$

Gán $E_0 = E$

Cuối nếu

Cuối nếu

+ Thay đổi $t_i = t_i * 0.9$

- Bước 3: Lặp lại bước 2 nếu $t_i > 0.000001$.

Nghiệm của bài toán tối ưu là tập u (có E nhỏ nhất)

Nghiệm tối ưu của bài toán cho biết các thông số động học của enzyme FTS thu nhận từ *Aspergillus flavipes* (K_{ms} , K_{mk} , K_{mn} , K_{gs} , K_{gk} , K_{gn} , V_{ms} , V_{mk} , V_{mn} , K_{mhn} , V_{mhn}) được tổng hợp trong bảng 2. Khi đó hàm mục tiêu E đạt giá trị nhỏ nhất là 8.322.

Bảng 2. Thông số động học của enzyme FTS thu nhận từ *Aspergillus flavipes* xác định bằng phương pháp mô phỏng luyện kim.

Thông số động học	Đơn vị	Giá trị
Hằng số Michaelis–Menten (chuyển hóa) của saccharose K_{ms}	g/L	226,5
Hằng số Michaelis–Menten (chuyển hóa) của kestose K_{mk}	g/L	485,5
Hằng số Michaelis–Menten (chuyển hóa) của nystose K_{mn}	g/L	954,4
Hằng số Michaelis–Menten (thủy phân) của nystose K_{mhn}	g/L	279,6
Hằng số ức chế cạnh tranh của glucose (cơ chất là saccharose) K_{igs}	g/L	13,3
Hằng số ức chế cạnh tranh của glucose (cơ chất là kestose) K_{igk}	g/L	500,8
Hằng số ức chế cạnh tranh của glucose (cơ chất là nystose) K_{ign}	g/L	121,6
Tốc độ chuyển fructosyl tối đa (cơ chất là saccharose) V_{ms}	g/L.h	592,5
Tốc độ chuyển fructosyl tối đa (cơ chất là kestose) V_{mk}	g/L.h	67,7
Tốc độ chuyển fructosyl tối đa (cơ chất là nystose) V_{mn}	g/L.h	35,6
Tốc độ thủy phân tối đa (cơ chất là nystose) V_{mhn}	g/L.h	3,0

Chúng tôi cũng tiến hành đánh giá mức độ tương thích của mô hình động học (với các giá trị thông số động học enzyme FTS tìm được trong (bảng 3) với thực nghiệm thông qua hệ số tương quan R được tính bằng công thức (2).

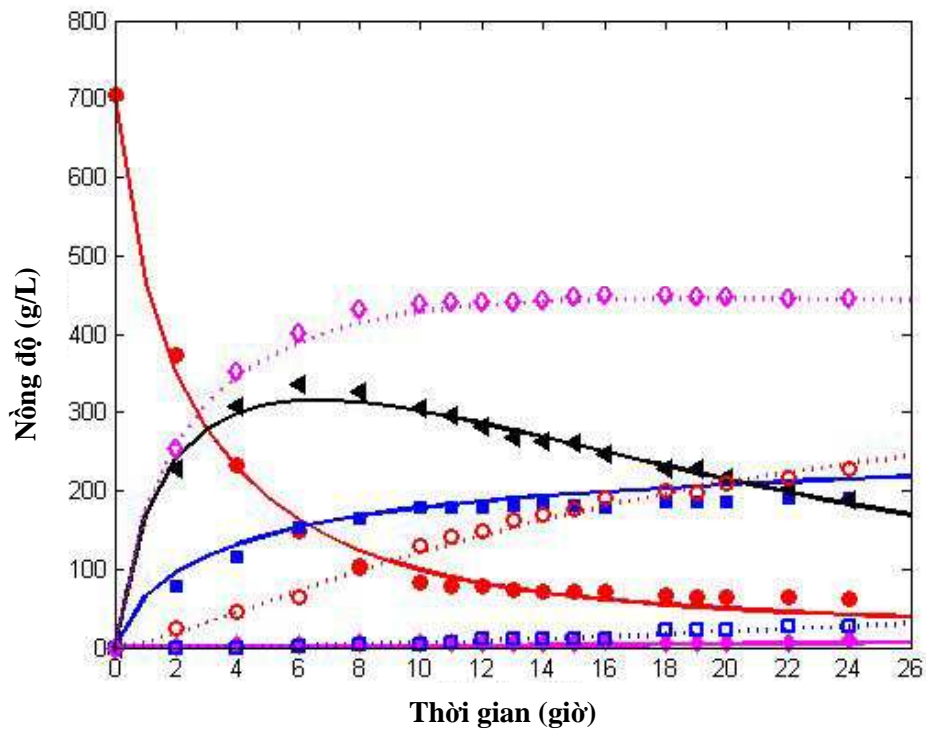
Dựa vào các số liệu thực nghiệm trong bảng 1 và số liệu thu được từ việc giải hệ phương trình vi phân (từ 7 đến 12) theo phương pháp Runge – Kutta với nồng độ saccharose ban đầu là 700 g/L, xác định được hệ số tương quan R là 0,994.

Hình 1 thể hiện sự so sánh giữa số liệu thu được từ mô hình lí thuyết (nồng độ các đường theo kết quả giải hệ phương trình vi phân - đường liền nét) và số liệu thực nghiệm (các điểm).

Kết quả này cho thấy các giá trị thông số động học enzyme FTS tìm được bằng phương pháp mô phỏng luyện kim có độ tương thích cao so với thực nghiệm.

4. KẾT LUẬN

Trên cơ sở 18 thí nghiệm khảo sát ảnh hưởng của thời gian đến nồng độ các chất trong phản ứng chuyển hóa saccharose thành FOS, chúng tôi đã xác định được 11 thông số động học của enzyme FTS bằng phương pháp mô phỏng luyện kim. Đây là một hướng mới cho việc ước lượng các thông số động học của enzyme nói riêng và các tham số quá trình công nghệ nói chung, thay thế có hiệu quả cho phương pháp xác định trực tiếp truyền thống, giúp giảm số lượng các thí nghiệm, tiết kiệm thời gian và đơn giản hóa quá trình thực nghiệm.



Hình 1. So sánh giữa mô hình động học phản ứng tổng hợp FOS bằng enzyme FTS với thực nghiệm.

	Nồng độ saccharose tính theo mô hình		Nồng độ saccharose theo thực nghiệm
	Nồng độ glucose tính theo mô hình		Nồng độ glucose theo thực nghiệm
	Nồng độ fructose tính theo mô hình		Nồng độ fructose theo thực nghiệm
	Nồng độ kestose tính theo mô hình		Nồng độ kestose theo thực nghiệm
	Nồng độ nystose tính theo mô hình		Nồng độ nystose theo thực nghiệm
	Nồng độ fructofuranosyl nystose theo mô hình		Nồng độ fructofuranosyl nystose theo thực nghiệm
	Nồng độ FOS tổng tính theo mô hình		Nồng độ FOS tổng theo thực nghiệm

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Fred Glover and Gary A. Kochenberger - Handbook of Metaheuristics, Kluwer Academic Publishers, 2003.
2. Syed M. B., Kai S., and Junker B. H. - Comparison of different algorithms for simultaneous estimation of multiple parameters in kinetic metabolic models, Journal of Integrative Bioinformatics **7** (3) (2010) 1–9.
3. Locatelli M. - Simulated annealing algorithms for continuous global optimization: convergence conditions, Journal of Optimization Theory and Applications **104** (1) (2000) 121–133.

4. Orosz J. E. and Jacobson S. H. - Finite-time performance analysis of static simulated annealing algorithms, *Computational Optimization and Applications* **21** (1) (2002) 21–53.
5. Bùi Công Thành và Trương Tuấn Hiệp - Tối ưu vị tướng của kết cấu dàn phẳng sử dụng thuật giải mô phỏng luyện kim, *Tạp chí phát triển KH&CN* **11** (5) (2008) 67–77.
6. Đỗ Quang Bình - Tối ưu hóa tái nạp nhiên liệu lò phản ứng hạt nhân nghiên cứu bằng phương pháp mô phỏng tối kim, *Tạp chí phát triển KH&CN* **14** (1) (2011) 63–71.
7. Nguyễn Ngọc Tú và Trần Văn Lăng - Giải thuật lai cho bài toán sắp hàng đa trình tự sinh học, *Tạp chí phát triển KH&CN* **10** (4) (2007) 5–14.
8. Vũ Mạnh Xuân - Khảo sát một số giải thuật tiến hóa giải bài toán tối ưu số, *Tạp chí Khoa học & Công nghệ* **43** (3) (2007) 68–73.
9. Nguyễn Hữu Chấn - Những vấn đề hóa sinh học hiện đại, Nhà xuất bản Khoa học và Kỹ thuật, Hà Nội, 1999.
10. Đinh Mạnh Tường - Giáo trình Trí tuệ nhân tạo, Đại học Quốc gia Hà Nội.

ABSTRACT

DETERMINATION OF KINETIC PARAMETERS OF FRUCTOSYLTRANSFERASE BY SIMULATED ANNEALING METHOD

Le Thi Hong Anh*, Lu Nhat Vinh

*Ho Chi Minh City University of Food Industry,
140 Le Trong Tan Str., Tan Phu Dist., HCMC*

*Email: anhlth@cntp.edu.vn

Simulated Annealing (SA) was invented by S. Kirkpatrick, C. D. Gellatt, M. P. Vecchi in the year of 1983. This method is based on Metropolis type. SA is an effective tool for solving problems related to search and optimization, especially those with large dimensional search problems.

In this article, SA was used to determinate the kinetic parameters of fructosyltransferase. The method really helped reduce the quantity of experiments, time and cost related to study of kinetics of fructosyltransferase (FTS), especially in case of multiple substrates.

Keywords: simulated annealing, FTS, kinetic, optimization.