

ESTUDO DO DESEMPENHO DO ALGORITMO DE EVOLUÇÃO DIFERENCIAL NA SOLUÇÃO DE UM PROBLEMA DE OTIMIZAÇÃO DINÂMICA DE FERMENTAÇÃO ALCOÓLICA EM BATELADA ALIMENTADA.

C. L. Nascentes¹, V. V. Murata²

¹Universidade Federal de Uberlândia, Faculdade de Engenharia Química

²Universidade Federal de Uberlândia, Faculdade de Engenharia Química

E-mail para contato: cleutonnascentes@gmail.com

RESUMO – Os Problemas de Otimização Dinâmica em processos de fermentação alcoólica em batelada alimentada são singulares na variável de controle. A solução destes problemas através de métodos numéricos clássicos (Indiretos, Diretos, Híbridos) exige um grande número de diferenciações de uma Função Identificadora de Fases para tornar a variável de controle explícita. O algoritmo de Evolução Diferencial, de natureza estocástica e de inspiração biológica, é de fácil implementação, com histórico de aplicações diversas em problemas de otimização. A obtenção da solução de um Problema de Otimização Dinâmica singular através do algoritmo de Evolução Diferencial supriu o grande número de manipulações algébricas necessárias para a solução através de métodos clássicos de solução. Uma análise que relaciona diferentes sementes (geradores de números pseudo-aleatórios distribuídos uniformemente) e diferentes parâmetros penalidade é realizada observando a variação da Função Objetivo. A análise demonstra a importância do parâmetro penalidade no atendimento da restrição e no valor da Função Objetivo.

1. INTRODUÇÃO

Os processos biotecnológicos, dentre eles a fermentação alcoólica, são processos que através da utilização de microorganismos geram um grande número de produtos tais como proteínas recombinantes e antibióticos. O atrativo na utilização de tais processos está, entre outras coisas, na utilização de matérias-primas renováveis e de baixo custo como alternativa no desenvolvimento de produtos mais competitivos, ambientalmente corretos e obtidos de maneira diferente de processos tradicionais (exemplo, indústrias química e petroquímica).

O objetivo na solução de um Problema de Otimização Dinâmica (POD) é a determinação das trajetórias ótimas de uma ou mais de uma variável de controle que maximize ou minimize uma determinada Função Objetivo. Nos problemas que apresentam a variável de controle na forma linear, denominados POD singular, ocorrem singularidades devido à flutuação do índice diferencial entre as fases de ativação e desativação das restrições.

Os métodos numéricos clássicos de solução dos POD são classificados em indiretos, método HJB (Hamilton-Jacobi-Bellman), diretos e híbridos. Os métodos indiretos utilizam o Princípio do Mínimo de Pontryagin (Bryson, Ho, 1975) transformando o problema de otimização em um problema de valor no contorno. Modak e Lim (1986) apresentam a solução de problemas de fermentação com batelada alimentada utilizando o Princípio do Mínimo de

Pontryagin. Fu e Barford (1993) apresentam a solução de problemas de fermentação através de um sistema de equações algébrico-diferenciais aplicando o Princípio do Mínimo de Pontryagin. Borges (2008), Lobato (2011) aplicaram o Princípio de Pontryagin na solução de problemas de fermentação em batelada alimentada para transformação do problema original em um problema de identificação de fases através de uma Função Identificadora de Fases. O método HJB consiste da solução de uma equação diferencial parcial em cada etapa de integração no tempo. Os métodos diretos transformam o POD em um problema de dimensão finita através da parametrização das variáveis. (Feehery, 1998, Rohman e Aziz, 2011, Assassa e Marquardt, 2014). Os métodos híbridos combinam a precisão dos métodos indiretos com uma maior facilidade dos métodos diretos em encontrar estimativas para algumas variáveis obtidas através do método indireto. (Stryk e Bulirsch, 1992), (Lobato et al., 2007), (Pfeifer, 2007).

Métodos numéricos de solução com inspiração em fenômenos naturais (analogias físicas ou biológicas) são métodos relativamente simples de implementação e não requerem uma estimativa inicial para a solução, uma vez que os candidatos iniciais são escolhidos aleatoriamente, sendo cada candidato a ótimo avaliado por sua aptidão (para todos os indivíduos da população é calculado um valor de Função Objetivo). Upreti (2003) apresentou a solução de problemas de fermentação utilizando Algoritmos Genéticos. Kapadi e Gudi (2004) utilizaram o algoritmo de Evolução Diferencial para a solução de problemas de Controle Ótimo em batelada alimentada envolvendo múltiplas alimentações. Rocha et al. (2014) apresentaram a solução de problemas de otimização de processos fermentativos em batelada alimentada utilizando os algoritmos de Evolução Diferencial e Enxame de Partículas demonstrando que o algoritmo de Evolução Diferencial apresenta os melhores resultados.

O objetivo deste trabalho é avaliar o desempenho do algoritmo de Evolução Diferencial na solução de um problema de Otimização Dinâmica de Fermentação Alcoólica em batelada alimentada. A utilização do algoritmo de Evolução Diferencial suprime as etapas tediosas de redução do índice diferencial, de determinação da ordem do POD singular e da Função Identificadora de Fases (FIF), necessárias na aplicação dos métodos clássicos de solução. Será analisada neste trabalho a influência exercida pelas sementes (geradores de números pseudo-aleatórios distribuídos uniformemente) e pelo parâmetro penalidade no valor da Função Objetivo (para uma restrição de igualdade). Nos trabalhos citados no parágrafo anterior não há uma análise de alguma técnica de restrições observando a influência de algum parâmetro no atendimento à restrição e no valor da Função Objetivo.

2. EVOLUÇÃO DIFERENCIAL

O algoritmo de Evolução Diferencial (ED) é um método direto de busca estocástico desenvolvido por Storn e Price, que opera sobre uma população de soluções potenciais, aplicando o princípio de sobrevivência do mais apto para gerar uma solução ótima. Computacionalmente, a ED é bastante simples sendo necessária a definição de poucos parâmetros pelo usuário (Kapadi e Gudi, 2004).

O algoritmo de Evolução Diferencial utiliza diferentes operadores ao longo das gerações (iterações) que procuram melhorar os indivíduos (vetores) da população escolhendo os melhores indivíduos para as próximas gerações.

O operador de mutação é utilizada para introduzir e manter a variabilidade de indivíduos na população. O operador cruzamento é introduzido na Evolução do diferencial para aumentar a diversidade de indivíduos que foram submetidos a mutação. A seleção é o processo de gerar melhores descendentes

O algoritmo de Evolução Diferencial apresenta diferentes estratégias para a solução de problemas de otimização. As estratégias podem variar com base no vetor a ser perturbado e no número de vetores diferença considerado para a perturbação (na etapa de mutação) e pelo operador de cruzamento utilizado.

Elas são classificadas de acordo com a notação:

ED/x/y/z

Sendo:

- x representa o vetor a ser perturbado. Caso este vetor seja escolhido aleatoriamente, este parâmetro da estratégia é classificado como "x=rand". Por outro lado, se o vetor a ser perturbado for o de menor valor de Função Objetivo da população, o parâmetro será representado por "x=best";
- y representa o número de vetores diferença utilizados na perturbação para a obtenção do vetor doador;
- z representa o tipo de cruzamento adotado. Se o cruzamento utilizado for binomial, tem-se o parâmetro "z=bin", se o cruzamento for exponencial, z=exp.

3. METODOLOGIA

A equação 1 representa a Função Objetivo. O modelo de Equações representativo do processo de fermentação alcoólica em batelada alimentada (para um tempo total de processo de 11 horas) é apresentado através das Equações 2-5 e os limites inferior e superior da variável de controle u é representando em 6.

$$J = \max[x_3(t_f) * x_4(t_f) - x_3(t_0) * x_4(t_0)] \quad (1)$$

$$\dot{x}_1 = -\frac{u}{x_4}x_1 + \mu x_1 \quad x_1(0) = 83 \text{ g/L} \quad (2)$$

$$\dot{x}_2 = \frac{u}{x_4}(x_{2f} - x_2) - \sigma x_1 \quad x_2(0) = 0 \text{ g/L} \quad (3)$$

$$\dot{x}_3 = -\frac{u}{x_4}x_3 + \pi x_1 \quad x_3(0) = 36,78 \text{ g/L} \quad (4)$$

$$\dot{x}_4 = u \quad x_4(0) = 1,5 \quad x_4(t_f = 11) = 4,985 \text{ L} \quad (5)$$

$$0 \leq u \leq 2 \left(\frac{L}{h} \right) \quad (6)$$

As variáveis x_1, x_2, x_3 representam as concentrações de células, sacarose e etanol, x_4 representa o volume do fermentador, u é vazão de alimentação do substrato, x_{2f} é a concentração de sacarose no meio de alimentação e μ, σ, π são as taxas específicas de crescimento de células, consumo de substrato e formação de produto.

Os modelos cinéticos não estruturados são apresentados nas Equações 7-9.

$$\mu = \mu_m \left(\frac{x_2}{k_s + x_2 \frac{x_2^2}{k_i}} \right) \left(1 - \frac{x_3}{x_{3m}} \right)^n \quad (7)$$

$$\sigma = \left(\frac{1}{Y_{xs}} \mu + m_s \right) \quad (8)$$

$$\pi = \frac{Y_{ps}}{Y_{xs}} \mu \quad (9)$$

As constantes utilizadas na solução do problema são apresentadas na tabela 1.

Tabela 1-Constantes utilizadas na solução do Problema (Retirado de Borges, 2008)

x_{2f}	μ_m	k_s	k_i	x_{3m}	Y_{xs}	m_s	Y_{ps}	n
285	0,02805	30,19	197,2	147,5	0,017	0,003871	0,413	0,1

Neste trabalho, através da utilização do algoritmo de Evolução Diferencial, o problema de otimização dinâmica é transformado em um problema de identificação das variáveis de controle u_i , $1 \leq i \leq n_{control}$, e do tamanho dessas variáveis (instantes de atuação dos elementos) (j), $1 \leq j \leq n_{elementos}-1$, totalizando $2n_{elementos}-1$ variáveis de projeto, como ilustrado a seguir:

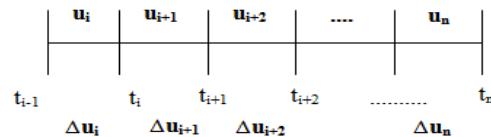


Figura 1-Elementos de Controle discretizados.

Para a solução do sistema de equações diferenciais (Equações 2-5) foi empregado o método de Runge-Kutta 4^a e 5^a ordem com passo de integração variável, tolerância relativa de 10^{-8} e tolerância absoluta de 10^{-16} através da rotina ode45 disponível no software Matlab®.

Para a não ocorrência da violação da restrição de igualdade ($V(t_f) = 4.985$, Equação 5) foi utilizada a técnica de penalidade estática em que a Função Objetivo (Equação 1) passa a ser representada pela Equação 10.

$$J = \max[x_3(t_f) * x_4(t_f) - x_3(t_0) * x_4(t_0) + rp * (x_4(t_f) - 4.985)^2] \quad (10)$$

Na Equação 10, rp é o parâmetro penalidade. São realizadas as análises da influência das sementes (geradores de números pseudo-aleatórios distribuídos uniformemente) e do parâmetro penalidade no atendimento a restrição de igualdade e no melhor valor de Função Objetivo obtido. Os parâmetros do algoritmo de Evolução Diferencial utilizados são apresentados na Tabela 2.

Tabela 2-Parâmetros do algoritmo de Evolução Diferencial utilizados na solução do problema

Número de Indivíduos da População	40
Número de Gerações	100
Fator de Perturbação	0,3
Probabilidade de Cruzamento	0,8
Estratégia	ED/best/1/exp
Vetor de Sementes	[1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18 19 20]

4. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Na Tabela 3 são apresentados a média aritmética dos valores de Função Objetivo para as vinte sementes e diferentes parâmetros penalidade. A Tabela 4 apresenta o valor médio de Função Objetivo para as sementes que não violam a restrição de igualdade considerando diferentes parâmetros penalidade.

Tabela 3-Relação entre Função Objetivo e Parâmetro Penalidade (rp)

rp	10^3	10^4	10^6	10^8	10^{10}	10^{12}
Função Objetivo (g)	410,037	407,142	406,783	406,722	406,548	390,404

Tabela 4- Relação entre Função Objetivo e Parâmetro Penalidade (rp)

rp	10^6	10^8	10^{10}	10^{12}
Função Objetivo(g)	406,751	406,744	406,726	406,067

Nas Figuras 2-7 está representada a relação entre a semente e o valor do volume do fermentador no tempo final para diferentes valores do parâmetro penalidade. Os círculos na cor preta representam os casos onde não há a violação da restrição

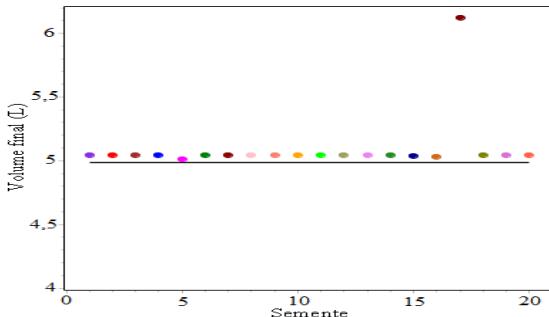


Figura 2- Relação entre semente e volume do fermentador no tempo final ($rp=10^3$)

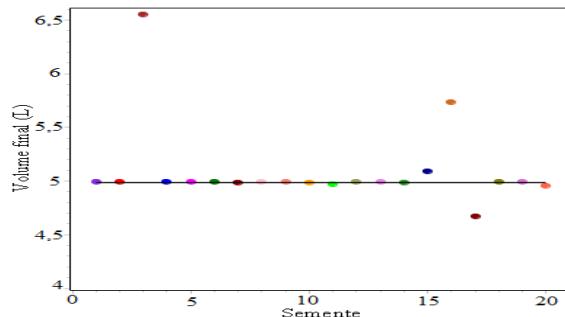


Figura 3- Relação entre semente e volume do fermentador no tempo final ($rp=10^4$)

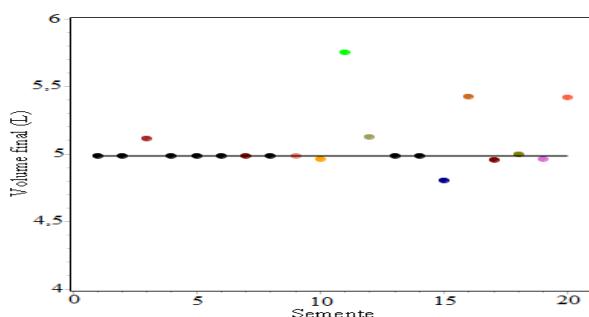


Figura 4-Relação entre semente e volume do fermentador no tempo final ($rp=10^6$)

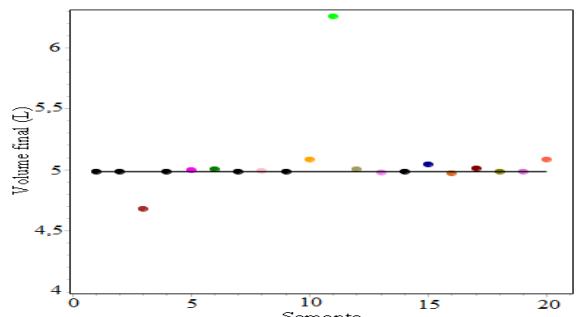


Figura 5-Relação entre semente e volume do fermentador no tempo final ($rp=10^8$)

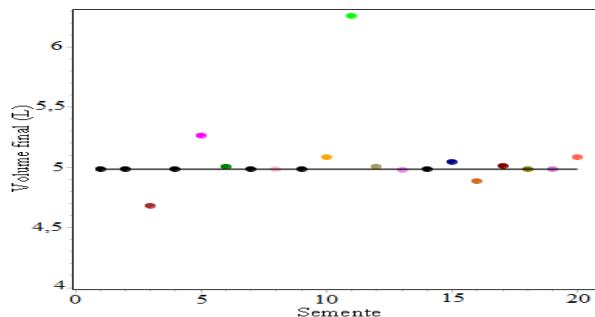


Figura 6-Relação entre semente e volume do fermentador no tempo final ($rp=10^{10}$)

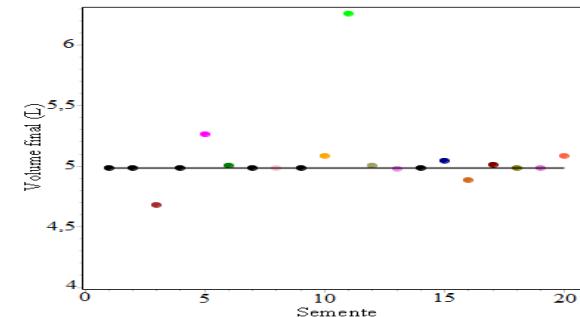


Figura 7-Relação entre semente e volume do fermentador no tempo final ($rp=10^{12}$)

Observamos que com o aumento do parâmetro penalidade há uma tendência de que a restrição seja atendida em diferentes sementes. Neste estudo a solução do Problema de Otimização Dinâmica apresenta apenas uma restrição de igualdade não havendo assim uma ou mais de uma região viável. Baixos valores do parâmetro penalidade tendem a levar o processo de busca pelo ótimo para regiões inviáveis (que não atendem a restrição). Como observado, por exemplo, na Figura 2, um parâmetro penalidade $rp=10^3$ apresenta um valor médio de Função Objetivo $FO= 410,037$, no entanto, para todas sementes o valor do volume final no fermentador é superior ao valor da restrição apresentado na Equação 5. Para parâmetros penalidade muito altos, tendo em vista que o ótimo se situa no ponto que atende a restrição ($V(t_f)=4.985$), o processo de busca através algoritmo de Evolução Diferencial é direcionado muito rapidamente para regiões que não atendem a restrição não retornando ao ponto que atende a restrição. Observamos através das Figuras 4-7 que o parâmetro penalidade

$rp=10^6$ apresenta o maior número de sementes que atendem a restrição de igualdade (oito sementes) e os parâmetros penalidade $rp=10^8$, 10^{10} e 10^{12} apresentam cada um seis sementes que atendem a restrição. Através da Figuras 6 e 7 observamos que após 100 iterações (Gerações) em todas as sementes (para $rp=10^{10}$ e $rp=10^{12}$) os valores do volume final no fermentador são os mesmos. Entretanto, o valor médio da Função Objetivo é inferior para o parâmetro $rp=10^{12}$. O processo de convergência do algoritmo de Evolução Diferencial para a melhor solução tende a ser mais lento para parâmetros penalidade mais altos, ou seja, o momento em que o processo de busca pelo ótimo se aproxima do atendimento da restrição é mais tardio para valores de parâmetro penalidade maiores.

Nas Figuras 8 e 9 são apresentados os perfis da variável de controle u e o rendimento do processo fazendo um comparativo com Borges (2008).

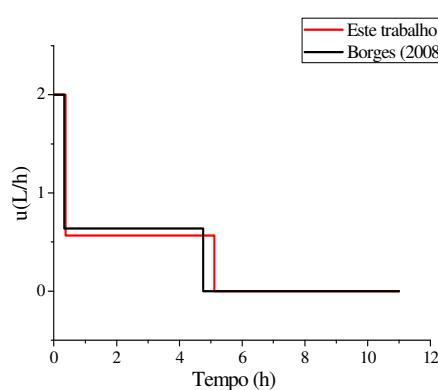


Figura 8-Perfis das variáveis de controle

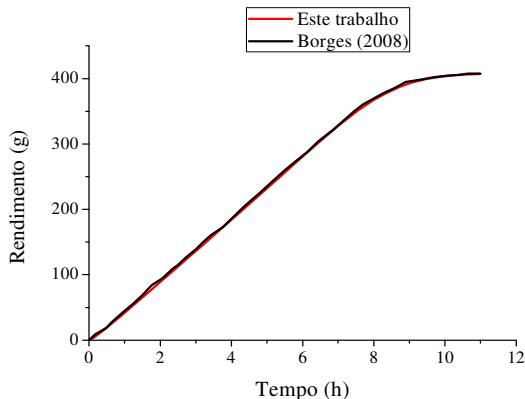


Figura 9-Perfis do rendimento do processo

O rendimento do processo (Função Objetivo) apresentado por Borges (2008) foi de 408,78 g e o melhor resultado obtido por Evolução Diferencial foi de 406,891 (Figura 9)

5. CONCLUSÕES

O algoritmo de Evolução Diferencial solucionou o problema de fermentação alcoólica em batelada alimentada. Os resultados obtidos por Evolução Diferencial foram satisfatórios em comparação com os resultados obtidos por Borges (2008) utilizando um método clássico de solução. Através das Figuras 8 e 9 observamos que os perfis obtidos por Evolução Diferencial da variável de controle e do rendimento do processo foram semelhantes aos obtidos por Borges (2008). Na Figura 8 é observado que o instante de transição entre o primeiro e o segundo elemento de controle obtido por Evolução Diferencial é praticamente o mesmo daquele obtido pelo método clássico, e a diferença maior está na transição entre o segundo e o terceiro elemento de controle. Na Figura 9 observamos que o rendimento obtido por Borges (2008) é um pouco superior ao obtido por este trabalho. A técnica de tratamento de restrições através de parâmetros de penalidade estática é de simples implementação no algoritmo de Evolução Diferencial. Entretanto, é importante observar qual o valor do parâmetro que atende a restrição para o maior número de sementes e apresenta o melhor valor de Função Objetivo conforme apresentado nas Tabelas 3 e 4 e nas Figuras 2-7.

Agradecimentos- Agradecemos a Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Minas Gerais (FAPEMIG) pelos recursos concedidos no Projeto de Participação Coletiva em Eventos Técnicos-Científicos (PCE-00082-14).

6. REFERÊNCIAS

- ASSASA, F., MARQUARDT, W. Dynamic optimization using adaptive direct multiple shooting. *Computers and Chemical Engineering*, v. 60, p. 242-259, 2014.
- BORGES, P. C. S. *Otimização Dinâmica da Fermentação Alcoólica no Processo em Batelada Alimentada*. Dissertação (Mestrado), Universidade Federal de Uberlândia, 2008.
- BRYSON, A. E., HO, Y. C. *Applied Optimal Control*. Hemisphere Publishing Washington ,1975.
- FEEHERY, W. F. *Dynamic optimization with path constraints*. Tese (Doutorado) – Massachusetts Institute of Technology, 1998.
- FU, P. C., BARFORD, J. P. Non-singular optimal control for fed-batch fermentation processes with a differential-algebraic system model. *J. Proc. Cont.*, v.3, n° 4, 1993.
- KAPADI, M., GUDI, R. D. Optimal control of fed-batch fermentation involving multiple feeds using Differential Evolution. *Process Biochemistry*, v.39, p. 1709–1721, 2004.
- LOBATO, F.S., OLIVEIRA-LOPES, L.C., MURATA, V.V. A Novel Hybrid Optimization Algorithm for Differential-Algebraic Control Problems. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, v.24, n° 3, p. 445-452, 2007.
- LOBATO, F.S. Determinação do Perfil Ótimo de Alimentação de Substrato no Processo de Fermentação Alcoólica-Influência da Condição Inicial. *Mat. Apl. Comput.*, 12, No. 1 ,p.1-10, 2011.
- MODAK, J.M., LIM, H. C. General Characteristics of optimal feed rate profile for various fed-batch fermentation process. *Biotechnol. Bioeng*, 28, p.1396-1407, 1986.
- PFEIFER, A. A. *Controle Ótimo de Sistemas Algébrico- Diferenciais com Flutuação do Índice Diferencial*, Dissertação (Mestrado), Universidade Federal de Uberlândia, 2007.
- ROCHA, M., MENDES R., ROCHA, O.,ROCHA, I., FERREIRA,E.C. Optimization of fed-batch fermentation processes with bio-inspired algorithms. *Experts Systems with Applications*, 41, p.2186-2195, 2014.
- ROHMAN, F. S., AZIZ, N. Optimization of batch electrodialysis for hydrochloric acid recovery using orthogonal collocation method. *Desalination*, v. 275, p.37-49, 2011.
- STRYK, O., BULIRSCH, R. Direct and indirect methods for trajectory optimization. *Annals of Operations Research*, v. 37, p.357-373, 1992.
- UPRETI, S. R. A new robust technique for optimal control of chemical engineering processes. *Computers and Chemical Engineering*, v.28, p.1325–1336, 2004.