

УДК 519.876.5, 663.452.2

Р. М. Пасічник, к. ф-м. н., доц.;

Ю. Р. Піговський, асп.

## ІДЕНТИФІКАЦІЯ МОДЕЛІ БРОВАРНОГО БРОДІННЯ В УМОВАХ НЕВИЗНАЧЕНОСТІ

*Побудовано алгоритм ідентифікації нечіткої моделі броварного бродіння. Проаналізовано якість ідентифікації при використанні різних схем алгоритму. Експериментальна перевірка алгоритму показала хорошу узгодженість модельного прогнозу з експериментальними даними. Ідентифікована модель буде використана для оптимізації процесу броварного бродіння в промислових умовах.*

### Вступ

Броварне бродіння — це періодичний процес метаболізму дріжджових клітин, який відбувається в замкнутій системі. В результаті бродіння вуглеводи перетворюються на етиловий спирт, вищі спирти і ефіри, концентрація яких визначає якість кінцевого виробу. На динаміку концентрації цих речовин впливають температура, раса і кількість введених засівних дріжджів, масова частка сухої речовини та хімічний склад субстрату [1].

Броварне бродіння відбувається без механічного перемішування, тому після внесення дріжджів у субстрат, управляти процесом можна лише змінюючи температурний режим. В промислових умовах за ходом процесу спостерігають через вимірювання густини субстрату, яка добре корелює з концентрацією зброджуваних вуглеводів. Проте для оптимізації умов процесу і ефективного керування необхідна математична модель, яка дозволить прогнозувати перебіг біопроцесу в різних умовах.

Труднощі в моделюванні процесу бродіння пов'язані із складністю самого процесу та створенням достатньо точної вимірювальної системи для забезпечення відповідної експериментальної бази. Математична модель, розглянута в [2, 3, 4], базується на фундаментальних знаннях біохімічних реакцій, що забезпечує її високу адекватність. Однак високоточна апаратура, яка використовується для її налаштування на характеристики конкретного процесу, як правило не застосовується у виробництві. Крім того, експериментальні дослідження виявили нечіткість в перебігу модельованих ферментаційних процесів. В даній роботі вдосконалено цю модель і запропоновано підхід до її ідентифікації в умовах невизначеності.

### Модель броварного бродіння

Кінетична модель броварного бродіння описується системами диференціальних рівнянь для лагової та ферментаційної фаз. Лагова фаза — це період адаптації дріжджової біомаси до нових умов і підготовка клітин до розмноження. В цій фазі не відбувається зброджування вуглеводів і ріст біомаси. Лагова фаза триває з моменту введення дріжджів до появи ферментативної активності. Протягом лагової фази здійснюється активація пасивних дріжджових клітин і осідання мертвої біомаси, що описується системою з трьох диференціальних рівнянь

$$\begin{aligned} \frac{dX_{act}(t)}{dt} &= \mu_{lag}(t)X_{lag}(t); & \frac{dX_{lag}(t)}{dt} &= -\mu_{lag}(t)X_{lag}(t); \\ \frac{dX_{dea}(t)}{dt} &= -\mu_{D0}(t)X_{dea}(t), & 0 \leq t \leq t_{lag}, \end{aligned} \quad (1)$$

де  $X_{act}(t)$ ,  $X_{lag}(t)$ ,  $X_{dea}(t)$  — кількість активної, лагової і мертвої біомаси в час  $t$ ,  $t_{lag}$  — тривалість лагової фази,  $\mu_{lag}(t)$ ;  $\mu_{D0}(t)$  — функції Ареніуса, які описують температурну залежність швидкостей активації і осідання біомаси [2, 3, 4].

Після завершення лагової фази розпочинається ферментаційна фаза, в якій відбувається ріст біомаси і зброджування вуглеводів з синтезом продуктів бродіння. В умовах броварного виробництва найважливіше значення серед продуктів бродіння мають етанол та діацетил. Запропонована модель поєднує рівняння оцінки концентрації біомаси, вуглеводів і етанолу, опубліковані в дослі-

джені [2, 3, 4], та вдосконалені рівняння оцінки концентрації діацетилу, розроблені в [5],

$$t_{lag} < t \leq t_{fer} : \begin{cases} \frac{dX_{act}(t)}{dt} = \frac{\mu_{x0}(t)S(t)}{0,5S_{ini} + E(t)} X_{act}(t) + \mu_{lag}(t)X_{lag}(t) - k_m(t)X_{act}(t); \\ \frac{dX_{lag}(t)}{dt} = -\mu_{lag}(t)X_{lag}(t); \\ \frac{dX_{dea}(t)}{dt} = k_m(t)X_{act}(t) - \frac{0,5S_{ini}\mu_{D0}(t)}{0,5S_{ini} + E(t)} X_{dea}(t); \\ \frac{dS(t)}{dt} = -\frac{\mu_{s0}(t)S(t)}{k_S(t) + S(t)} X_{act}(t); \quad S(0) = S_{ini}; \\ \frac{dE(t)}{dt} = \left(1 - \frac{2E(t)}{S_{ini}}\right) \frac{\mu_{E0}(t)S(t)}{k_S(t) + S(t)} X_{act}(t); \quad E(0) = 0, \end{cases} \quad (2)$$

де  $S(t)$ ,  $E(t)$  — значення концентрацій вуглеводів і етанолу в час  $t$ ;  $S_{ini} = S(0)$  — початкова концентрація вуглеводів;  $t_{fer}$  — тривалість ферментаційної фази;  $\mu_{x0}(t)$ ,  $k_m(t)$  — функції Ареніуса, які описують залежність максимальних швидкостей росту і старіння біомаси від температури;  $\mu_{s0}(t)$ ,  $k_S(t)$ ,  $\mu_{E0}(t)$  — функції Ареніуса, які описують динаміку споживання вуглеводів та утворення етанолу,

$$t_{lag} < t \leq t_{fer} : \begin{cases} \frac{dDY(t)}{dt} = Y_{A/C}(t) \frac{dC_p(t)}{dt} - K_A(t) DY(t); \quad DY(0) = 0; \\ \frac{dY_{A/C}(t)}{dt} = -K_Y Y_{A/C}(t) \frac{dC_p(t)}{dt}; \quad Y_{A/C}(0) = Y_0, \end{cases} \quad (3)$$

де  $Y_{A/C}(t)$  — змінна, яка задає залежність синтезу діацетилу від виходу  $CO_2$  в ході ферментації;  $K_A(t)$  — функція Ареніуса, яка визначає температурну залежність динаміки редукції діацетилу;  $K_Y$  — константа залежності динаміки синтезу діацетилу від виходу  $CO_2$ ;  $Y_0$  — початкове значення залежності синтезу діацетилу від виходу  $CO_2$ ;  $dC_p(t)/dt = Y_{C/S} \cdot dS(t)/dt$  — похідна виходу  $CO_2$  під час ферментаційного процесу;  $Y_{C/S}$  — константа залежності між обсягом виділеного  $CO_2$  та концентрацією зброджених вуглеводів.

Хоча моделі [2, 3, 4, 5] отримали експериментальне підтвердження в лабораторних умовах, нами встановлено, що вони потребують суттєвого доопрацювання для використання в промисловості. Зокрема в цих моделях використовуються показники концентрації зброджуваних вуглеводів і етанолу, вимірювання яких в промислових умовах утруднене. Крім того, як свідчать дані моніторингу виробничого процесу, динаміка концентрації вуглеводів в заводському технологічному процесі характеризується нечіткістю, оскільки на хід процесу бродіння крім температури впливають також характеристики сировини: хімічний склад субстрату і стан дріжджів. Для адекватного опису процесу ми пропонуємо розширити базову модель броварного бродіння (1)—(3) шляхом введення нечітких параметрів. Це дасть змогу отримувати оцінку значень концентрації продуктів бродіння в інтервальній формі.

Підходи до ідентифікації нечітких параметрів моделі

Характеристики сировини в базовій моделі (1)—(3) описуються значеннями параметрів у функціях Ареніуса. Нехай вектор  $\bar{P}$  містить значення всіх параметрів моделі. Тоді нечіткість експериментальних даних можна описати нечіткими параметрами:

$$\bar{P} \leq \Omega \leq \bar{P}^+; \quad \bar{P} \in \Omega, \quad (4)$$

де  $\Omega$  — область значень параметрів;  $\bar{P}$ ,  $\bar{P}^+$  — нижня та верхня межі області параметрів, тобто нечіткі параметри моделі.

З метою зменшення прогнозного інтервалу згідно з виразом (4) використано залежність значення початкової бродильної активності (ПБА) від характеристик сировини [1]. Користуючись цією залежністю можна підвищити точність моделі шляхом кластеризації експериментальних даних за близькими значеннями ПБА з наступною ідентифікацією нечітких параметрів окремо в кожному кластері

$$\overline{P}_k^- \leq \Omega_k \leq \overline{P}_k^+; \quad \overline{P} \in \Omega_k; \quad k = \overline{0, N}, \quad (5)$$

де  $\Omega_k$  — область параметрів  $k$ -го кластера ПБА;  $\overline{P}_k^-, \overline{P}_k^+$  — нечіткі параметри моделі  $k$ -го кластера ПБА;  $N$  — кількість кластерів ПБА.

Параметри моделі  $\overline{P}$  можна умовно поділити на дві категорії: параметри метаболізму біомаси  $\overline{M}$  та параметри продуктів бродіння  $\overline{R}$ ,  $\overline{P} = \overline{M} \cup \overline{R}$ . До параметрів метаболізму біомаси  $\overline{M}$  належать початкова концентрація живих дріжджів  $X_{act0}, X_{lag0}$  та змінні характеристики росту біомаси і споживання вуглеводів

$$\begin{aligned} \mu_{X0}(t) &= \exp[p_{X0} + p_{X1}/T(t)]; & k_m(t) &= \exp[p_{m0} + p_{m1}/T(t)]; \\ \mu_{S0}(t) &= \exp[p_{S0} + p_{S1}/T(t)]; & k_S(t) &= \exp[p_{k0} + p_{k1}/T(t)]. \end{aligned}$$

Враховуючи представлення характеристик функціями Ареніуса, отримуємо:

$$\overline{M} = [X_{act0} \quad X_{lag0} \quad p_{X0} \quad p_{X1} \quad p_{m0} \quad p_{m1} \quad p_{S0} \quad p_{S1} \quad p_{k0} \quad p_{k1}]^T. \quad (6)$$

До параметрів продуктів бродіння  $\overline{R}$  належать параметри синтезу і редукції діацетилу

$$\overline{R} = [Y_0 \quad K_Y \quad Y_{S/C} \quad p_{KA0} \quad p_{KA1}]^T, \quad \text{де } K_A(t) = \exp[p_{KA0} + p_{KA1}/T(t)]. \quad (7)$$

Введемо функції  $S_{sim}(\overline{M}, \overline{T}, t_i)$  та  $DY_{sim}(\overline{R}, \overline{T}, t_i)$ , які за системами диференціальних рівнянь (1)—(3) обчислюють модельну оцінку значень концентрації вуглеводів і діацетилу при використанні параметрів метаболізму біомаси  $\overline{M}$  і параметрів синтезу-редукції діацетилу  $\overline{R}$  під дією температурного профілю  $\overline{T} = [T(t_0) \quad T(t_1) \quad \dots \quad T(t_n)]^T$ , де  $t_i, i = \overline{0, n}$  — дискретні часові вузли, в яких відбуваються експериментальні вимірювання.

Після кластеризації експериментальних даних виявляються нижні  $S_k^-(t_i)$  та верхні  $S_k^+(t_i)$  межові точки динаміки концентрації субстрату, нижні  $DY_k^-(t_i)$  та верхні  $DY_k^+(t_i)$  межові точки динаміки синтезу діацетилу в кожному  $k = \overline{0, N}$  кластері за допомогою порівняння експериментальних вимірювань з математичним сподіванням динаміки процесу.

Враховуючи, що у промислових умовах недоступні вимірювання концентрації зброджуваних цукрів, ідентифікацію можна провести на двох наборах експериментальних даних: на загальній концентрації вуглеводів  $S_{i,j}$  і на концентрації активних вуглеводів  $S_{i,j}^{act}$ . Для виділення значень концентрації активних вуглеводів використовується формула

$$S_{i,j}^{act} = \begin{cases} S_{i,j} - S_{\min}, & \text{якщо } S_{n,j} \geq S_{\min}; \\ S_{i,j} - S_{n,j}, & \text{інакше,} \end{cases} \quad j = \overline{0, m}, \quad i = \overline{0, n}, \quad (8)$$

де  $S_{i,j}^{act}$  — значення концентрації активних вуглеводів  $j$ -го експерименту в час  $t_i$ ;  $m$  — кількість експериментів;  $S_{\min}$  — значення загальної концентрації вуглеводів після збродження активних вуглеводів:

$$S_{\min} = \min_{j=0, m} \{S_{n,j} : S_{n-1,j} \approx S_{n,j}\}. \quad (9)$$

Проведемо ідентифікацію нечітких параметрів  $\overline{P}_k^-, \overline{P}_k^+$  (5) за два етапи: на першому етапі знайдемо параметри метаболізму біомаси  $\overline{M}$  (6), а на другому етапі — параметри синтезу і редукції діацетилу  $\overline{R}$  (7).

Перший етап ідентифікації полягає в знаходженні таких параметрів метаболізму біомаси  $\overline{M}_k^-, \overline{M}_k^+$ , які найщільніше охоплюють всі точки експериментальних вимірювань субстрату в  $k$ -му кластері ПБА

$$\overline{M}_k^- = \arg \min_{M \in \Omega_k} \left\{ \sum_{i=0}^n \left[ S_{sim}(\overline{M}, \overline{T}_k^-, t_i) - S_k^-(t_i) \right]^2 : S_{sim}(\overline{M}, \overline{T}_k^-, t_i) \leq S_k^-(t_i), i = \overline{0}, n \right\}; \quad (10)$$

$$\overline{M}_k^+ = \arg \min_{M \in \Omega_k} \left\{ \sum_{i=0}^n \left[ S_{sim}(\overline{M}, \overline{T}_k^+, t_i) - S_k^+(t_i) \right]^2 : S_{sim}(\overline{M}, \overline{T}_k^+, t_i) \geq S_k^+(t_i), i = \overline{0}, n \right\}, \quad (11)$$

де  $\overline{T}_k^-$ ,  $\overline{T}_k^+$  — температурні профілі, для яких отримуються нижні  $S_k^-(t_i)$  та верхні  $S_k^+(t_i)$  межові точки концентрації субстрату. Вони дорівнюють тим експериментальним профілям, виміряні значення яких найчастіше утворюють нижні або верхні межові точки.

На другому етапі ідентифікації відбувається пошук параметрів синтезу і редукції діацетилу  $\overline{R}_k^-$ ,  $\overline{R}_k^+$ , які найщільніше охоплюють всі точки експериментальних вимірювань концентрації діацетилу в  $k$ -му кластері з використанням підходів аналогічних до (10), (11).

### Чисельні результати ідентифікації нечітких параметрів моделі

Для розрахунку нечітких параметрів моделі випробувано кілька схем алгоритму ідентифікації. Якість ідентифікації оцінювалася за трьома критеріями: фізична адекватність, середня  $(e_{k,avg}^-, e_{k,avg}^+)$  і максимальна  $(e_{k,max}^-, e_{k,max}^+)$  похибки ідентифікації.

Фізична адекватність параметрів визначається через порівняння залежності очікуваних значень концентрації субстрату і активної біомаси від сталої температури процесу. Очікувані значення прогнозуються з використанням усереднених значень параметрів  $\overline{P}_k^m = (\overline{P}_k^- + \overline{P}_k^+)/2$ . Фізично адекватними параметри вважаються тоді, коли споживання субстрату і ріст біомаси відбуваються інтенсивніше з підвищенням температури. Коли хоча б один з цих показників має обернену залежність до температури, то параметри вважаються фізично неадекватними.

Значення середньої і максимальної похибок ідентифікації показують наскільки щільно нечіткі параметри охоплюють експериментальні дані. Похибки ідентифікації розраховуються через значення різниць між межовими точками  $S_k^-(t_i)$ ,  $S_k^+(t_i)$  і модельним прогнозом концентрації вуглеводів в  $k$ -му кластері ПБА

$$e_{k,avg}^- = \frac{1}{n+1} \sum_{i=0}^n \frac{S_k^-(t_i) - S_{sim}(\overline{P}_k^-, \overline{T}_k^-, t_i)}{S_k^-(t_0) - S_k^-(t_n)}; \quad e_{k,avg}^+ = \frac{1}{n+1} \sum_{i=0}^n \frac{S_{sim}(\overline{P}_k^+, \overline{T}_k^+, t_i) - S_k^+(t_i)}{S_k^+(t_0) - S_k^+(t_n)}. \quad (12)$$

$$e_{k,max}^- = \max_{i=0,n} \left[ \frac{S_k^-(t_i) - S_{sim}(\overline{P}_k^-, \overline{T}_k^-, t_i)}{S_k^-(t_0) - S_k^-(t_n)} \right]; \quad e_{k,max}^+ = \max_{i=0,n} \left[ \frac{S_{sim}(\overline{P}_k^+, \overline{T}_k^+, t_i) - S_k^+(t_i)}{S_k^+(t_0) - S_k^+(t_n)} \right]. \quad (13)$$

Ідентифікація була проведена на двох наборах вхідних експериментальних даних: значеннях загальної концентрації вуглеводів і на значеннях концентрації активних вуглеводів, які розраховуються за формулами (8), (9). В алгоритмі ідентифікації використано метод чисельної інтеграції жорстких систем диференційних рівнянь на базі формули Розенброка другого порядку.

Для розв'язання задачі ідентифікації (11)—(12) випробувано два відомих оптимізаційних методи: симплексний пошук Нелдера—Міда та квазі-Ньютонівський метод Бройдена—Флетчера—Голдфарба—Шано (БФГШ). Після численних експериментів виявлено, що метод БФГШ суттєво ефективніший для розв'язання цієї задачі ніж метод Нелдера—Міда [6]. Чисельні результати ідентифікації при використанні різних схем алгоритму наведено в таблиці.

Результати ідентифікації нечітких параметрів моделі

№	Схема алгоритму ідентифікації			Фізична адекватність параметрів	Значення критеріїв якості ідентифікації			
	Кластер $k$	Виділення активних вуглеводів	Викор. Якобіана		Середні похибки ідентифікації		Максимальні похибки ідентифікації	
					$e_{k,avg}^-$	$e_{k,avg}^+$	$e_{k,max}^-$	$e_{k,max}^+$
1	1	ні	ні	ні	26,5 %	10,8 %	62,2 %	20,5 %
2	1	ні	так	ні	7,11 %	7,16 %	21 %	19,2 %
3	1	так	ні	так	13,7 %	4,34 %	46,7 %	15,2 %
4	1	так	так	так	4,47 %	4,34 %	19,9 %	15,2 %
5	2	ні	ні	ні	3,22 %	4,7 %	10,1 %	15,1 %
6	2	так	ні	так	9,13 %	3,35 %	24,8 %	11,4 %
7	2	так	так	так	2,31 %	3,35 %	8,06 %	11,4 %

Розглянемо найсуттєвіші моменти їх аналізу. Спостерігається порушення адекватності моделі ідентифікованої за загальною концентрацією вуглеводів (схеми 1, 2, 5), що виникає внаслідок порівняно високого рівня їх концентрації при завершенні бродіння. Для забезпечення цього рівня швидкість старіння клітин приймає настільки високі значення, що при рості температури процесу інтенсивність бродіння падає. Це не відповідає його фізичному змісту. Ідентифікація із врахуванням лише активних вуглеводів (схеми 3, 4, 6, 7) дозволила отримати фізично адекватні параметри. Однак при ідентифікації нижньої межі зміни параметрів  $\overline{P_k}$  помічені значні похибки ідентифікації (схеми 3, 6, рис. 1, 2). Цю проблему вдалося усунути врахувавши інформацію про матрицю правих частин систем диференційних рівнянь (1)–(3) в Якобіані (порівняння схеми 3 з 4 та 6 з 7).

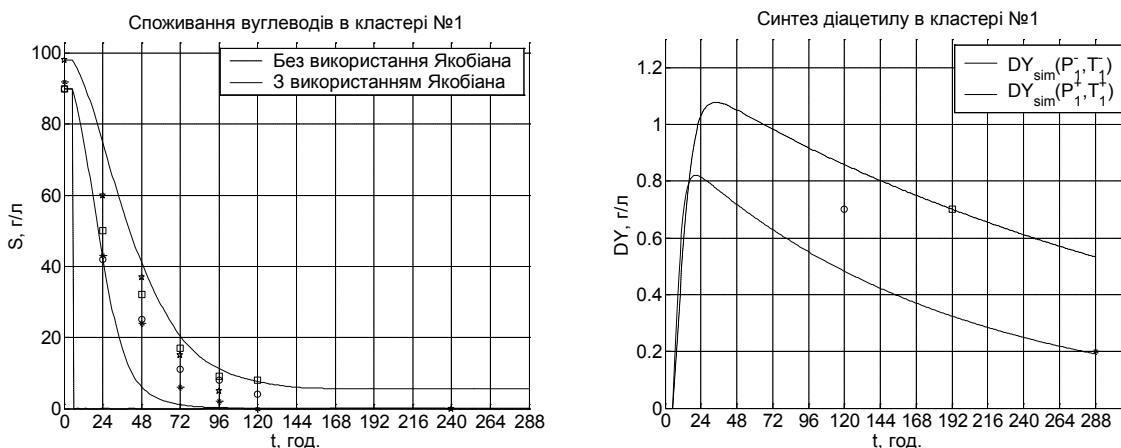


Рис. 1. Ідентифікація 1-го кластера ПБА на значеннях концентрації активних вуглеводів

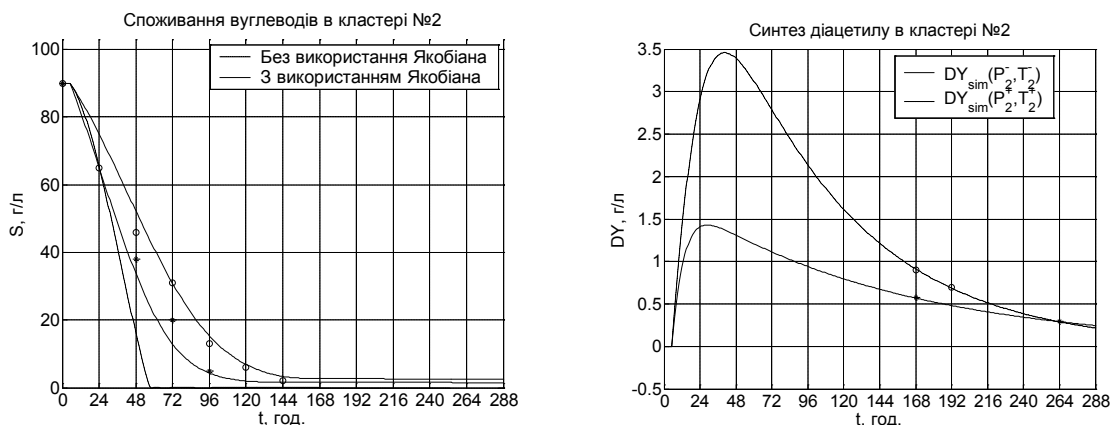


Рис. 2. Ідентифікація 2-го кластера ПБА на значеннях концентрації активних вуглеводів

Нечіткі параметри, ідентифіковані за 4 та 7 схемами щільно охоплюють експериментальні точки, а динаміка росту біомаси прямопропорційна температурі, що узгоджується з фізичною природою процесу. Тому ідентифіковані параметри придатні для оптимізації процесу броварного бродіння.

### Висновок

Труднощі в моделюванні процесу бродіння пов'язані зі складністю самого процесу та створенням достатньо точної вимірювальної системи для забезпечення відповідної експериментальної бази. Частина цих задач вирішено в роботах [2, 3, 4, 5]. Хоча згадані моделі отримали експериментальне підтвердження в лабораторних умовах, нами встановлено, що вони потребують суттєвого доопрацювання для використання в умовах промислового виробництва. Для адекватності моделі запропоновано параметри динаміки росту біомаси вважати нечіткими. Розроблено алгоритм ідентифікації, який дозволив ідентифікувати нечітку модель броварного бродіння і здійснювати інтервальний прогноз значень концентрації продуктів бродіння. Експериментальна перевірка алгоритму показала хорошу узгодженість модельного прогнозу з експериментальними даними. Ідентифікована нечітка модель броварного бродіння буде використана для оптимізації параметрів виробничого процесу.

### СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Домарецький В. А. Технологія солоду та пива. — К.: Фірма Інкос, 2004. — 426 с.
2. Andrés-Toro B. de, Girón-Sierra J. M., López-Orozco J. A., Fernández-Conde C., Peinado J. M., Garcia-Ochoa F. A kinetic model for beer production under industrial operational conditions // *Mathematics and Computers in Simulation*. — 1998. — 48. — P. 65—74.
3. Andrés-Toro B. de, Girón-Sierra J. M., Fernández-Blanco P., López-Orozco J. A., Besada-Portas E. Multiobjective optimization and multivariable control of the beer fermentation process with the use of evolutionary algorithms // *Journal of Zhejiang University Science*. — 2004. — 5(4). — P. 378—389.
4. XIAO Jie, ZHOU Ze-kui, ZHANG Guang-xin. Ant colony system algorithm for the optimization of beer fermentation control // *Journal of Zhejiang University Science*. — 2004. — 5(12). — P. 1597—1603.
5. Trelea I. C., Latrille E., Landau S., Corrieu G. Prediction of confidence limits for diacetyl concentration during beer fermentation // *J. Am. Soc. Brew. Chem.* — 2002. — 59(2). — P. 77—87.
6. Yu-Hong Dai. Convergence properties of the BFGS algorithm // *SIAM Journal on Optimization*. — 2002. — Vol. 13. — No 3. — P. 693—701.

Матеріали статті рекомендовані до опублікування оргкомітетом XIII Міжнародної конференції з автоматичного управління (Автоматика-2006, 25—28.09.2006 р.)

Надійшла до редакції 23.11.06  
Рекомендована до друку 12.12.06

**Пасічник Роман Мирославович** — доцент кафедри економічної кібернетики; **Піговський Юрій Романович** — аспірант кафедри комп'ютерних наук.

Тернопільський державний економічний університет