


# Bioethanol Production Optimization by Direct Numerical Methods and Evolutionary Algorithms

M.C. Fernández , M.N. Pantano , M.C. Groff , R.M. Gil , and G. Scaglia 

**Abstract**—This paper develops a dynamic optimization methodology based on direct numerical methods, for the bioethanol fed-batch production from glucose and fructose as a substrate. The mathematical model that governs the process consists of six differential equations and is highly nonlinear. The proposed strategy uses the Fourier trigonometric basis and normalized orthogonal polynomials for substrate feeding rate parameterization. Then, evolutionary algorithms and gradient methods are combined to search parameters that generate the best control action. This parameterization methodology requires a minimum number of parameters to optimize. Also, the continuous and differentiable nature of the optimal profile enables its direct implementation in the physical process, eliminating the necessity for filtering or smoothing it. In addition, they are ideal for bioprocesses, in which it is preferable to avoid abrupt changes in the operating modes of the process to promote cell growth. As a result, using only 3 parameters, a 3.5% increase in ethanol production was achieved, while the reference uses at least 10 parameters and provides a stepped feed profile. The simulations have yielded promising results, making this proposal an alternative with excellent potential for process optimization.

Link to graphical and video abstracts, and to code: <https://latam.ieceer9.org/index.php/transactions/article/view/8307>

**Index Terms**—Nonlinear system, Fourier series, optimal control, evolutionary algorithms, bioethanol production.

## I. INTRODUCCIÓN

A lo largo de la historia, el etanol ha sido imprescindible para un gran número de procesos. Este compuesto, por su excelente capacidad como disolvente, es utilizado para mantener estables los componentes de diversos cosméticos, pinturas, productos de limpieza, extractos y medicamentos. También es utilizado en aerosoles, en la producción de biodiesel, y en el corte de naftas. Como biocombustible es menos tóxico, fácilmente biodegradable y produce menos contaminantes que los derivados del petróleo [1]. El etanol puede obtenerse mediante hidratación de etileno (con exceso de vapor bajo presión, ácido fosfórico, y altas temperaturas) o, a partir de la fermentación de materia orgánica con alto contenido de azúcares (con levaduras del género *Saccharomyces*, o bacterias *Zymomonas mobilis*). El consumo excesivo de combustibles

fósiles ha conducido a una disminución de los mismos y a la contaminación del medio ambiente [2], [3]. Algunas de las consecuencias más visibles son el calentamiento global, la lluvia ácida y el smog urbano [4]. Por ese motivo, los combustibles no contaminantes y renovables se han convertido en un foco de investigación, resultando la síntesis química tendiente a ser reemplazada por la biotecnológica. No obstante, a pesar de los beneficios mencionados, su implementación, a gran escala, se ve limitada por el elevado costo que implican [5]. Consecuentemente, las tecnologías existentes para bioprocessos deben ser optimizadas constantemente para hacer más rentable su producción [5]. En estos casos, un mínimo aumento en el rendimiento del proceso, se considera un gran avance en el camino hacia un desarrollo sustentable.

Los bioprocessos pueden ser operados en modo continuo, batch o fed-batch, siendo este último el más utilizado a nivel industrial. En términos generales, este tipo de procesos se caracterizan por involucrar un gran número de variables, y tener dinámicas no lineales sujetas a variaciones temporales. Además, una alimentación insuficiente o una sobrealimentación puede perjudicar el desarrollo óptimo de los microorganismos, y la obtención de los productos o subproductos esperados. Por lo tanto, es de crucial importancia establecer políticas de alimentación apropiadas [6], [7]. Otra particularidad de trabajar con microorganismos, es que los cambios bruscos del entorno pueden disminuir el rendimiento del proceso, cambiar las vías metabólicas, o incluso causar la muerte de células. Son varias las técnicas propuestas e investigadas para abordar los desafíos relacionados con la optimización dinámica del proceso de bioetanol [8]. Gran parte de la comunidad científica aborda la optimización de sistemas fed-batch mediante modelos basados en primeros principios, cuyo nivel de complejidad y detalle es bastante elevado [9], [10]. Esto significa una dificultad considerable no solo a la hora de conseguirlos, sino también cuando se quieren implementar para control óptimo. Una de las estrategias más empleadas es la parametrización de la acción de control por medio de una función constante por partes, que consiste en fraccionar el tiempo total en sub-intervalos, y hallar un óptimo constante para el vector de control en cada uno [11]. Si bien es una metodología muy usada, tiene la desventaja de tener muchos parámetros para optimizar. Además, el perfil óptimo obtenido es una función escalonada, imposible de reproducir en cualquier sistema real, lo que implica que los valores óptimos de simulación jamás puedan ser alcanzados. Por otro lado, al no ser una función suave y continua, los microorganismos pueden verse perjudicados por los cambios abruptos generados. Existen técnicas que se centran en enfoques como

El Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), el Instituto de Ingeniería Química (IIQ) y el Instituto de Biotecnología (IBT), pertenecientes a la Universidad Nacional de San Juan (UNSJ) brindaron apoyo financiero para esta investigación.

M.C. Fernández, M. N. Pantano, M.C. Groff, R. M. Gil and G. Scaglia are with the CONICET-IIQ-UNSJ, San Juan, J5400ARL, Argentina (e-mails: mcfernandez@unsj.edu.ar, npantano@unsj.edu.ar, mgroff@unsj.edu.ar, rocio.mariel.gil@gmail.com and mgroff@unsj.edu.ar).

optimización aleatoria heurística [12], métodos directos de búsqueda [9], redes neuronales [13], entre otros [14]–[16]. Se puede encontrar información precisa y detallada de las metodologías mencionadas en [17] y [18]. No obstante, todas poseen las mismas desventajas, por lo que, el desafío es lograr un procedimiento simple que consiga un perfil óptimo, suave y continuo, con un mínimo número de parámetros involucrados.

El presente estudio toma como base un proceso de producción de bioetanol en modo fed-batch, llevado a cabo en un biorreactor modelado y optimizado por Hunag *et al* [19]. El propósito de esta investigación es identificar el caudal de alimentación de sustrato que hace máximo el bioetanol en el tiempo final de producción. Asimismo, dicho perfil debe ser continuo, suave, diferenciable, y conseguirse con un mínimo número de parámetros. El proceso involucra dos etapas, la parametrización del perfil a optimizar y la búsqueda de los parámetros que hacen que sea el mejor. Por lo tanto, inicialmente se plantea un procedimiento de parametrización fundado en el uso de bases ortonormales y serie de Fourier, que no requiere de la partición del intervalo de tiempo de reacción. Adicionalmente, se propone una mejora a una metodología híbrida para la búsqueda de parámetros, que fue planteada con anterioridad [20], la misma, combina algoritmos aleatorizados con algoritmos evolutivos y método de gradiente. Se utiliza Matlab® y Simulink® para la programación completa de los algoritmos mencionados, sin hacer uso de paquetes preestablecidos. Cabe mencionar que una gran ventaja de la metodología presentada es que se resuelve un problema de optimización dinámica utilizando herramientas de optimización estática.

## II. MODELO MATEMÁTICO DEL PROCESO

Las siguientes ecuaciones describen un proceso fed-batch para la obtención de bioetanol utilizando el microorganismo *Saccharomyces diastaticus* y una corriente de alimentación compuesta de glucosa y fructosa en igual proporción [19]. Se trata de un sistema SIMO, donde la entrada es el caudal de alimentación de sustrato ( $U$ , variable manipulada), y las salidas son las concentraciones de células ( $X$ ), etanol ( $P_1$ ), glicerol ( $P_2$ ), glucosa ( $S_1$ ) y fructosa ( $S_2$ ) dentro del reactor (variables de estado).

Para desarrollar este modelo [19], se mantuvo la temperatura a  $35^\circ\text{C}$ , el flujo de aire en  $1.5\text{vvm}$  y el pH en  $5.0$ . La concentración de biomasa se determinó por espectrofotometría a  $540\text{nm}$ , y el peso seco de las células se obtuvo por una curva de calibración. Las demás variables se analizaron con un cromatógrafo líquido de alto rendimiento. Luego, los autores aplicaron un procedimiento de optimización *run-to-run* de dos fases. Estos resultados serán utilizados para comparar los obtenidos con la estrategia propuesta en este trabajo.

$$\begin{cases} \dot{X}(t) = (\mu_1 + \mu_2)X - \frac{U}{V}X \\ \dot{S}_1(t) = -\left(\frac{q_{S_1/P_1}}{Y_{P_1/S_1}} + \frac{q_{S_1/P_2}}{Y_{P_2/S_1}}\right)X + \frac{U}{V}(\lambda S_f - S_1) \\ \dot{S}_2(t) = -\left(\frac{q_{S_2/P_1}}{Y_{P_1/S_2}} + \frac{q_{S_2/P_2}}{Y_{P_2/S_2}}\right)X + \frac{U}{V}((1-\lambda)S_f - S_2) \\ \dot{P}_1(t) = (q_{S_1/P_1} + q_{S_2/P_1})X - \frac{U}{V}P_1 \\ \dot{P}_2(t) = (q_{S_1/P_2} + q_{S_2/P_2})X - \frac{U}{V}P_2 \end{cases} \quad (1)$$

donde,

$$\begin{aligned} \dot{V}(t) &= U \\ \mu_1 &= \frac{\mu_{m_1} S_1}{K_{S_1} + S_1 + S_1^2/K_{S_{1I}}} \frac{K_{P_{1I}}}{K_{P_{1I}} + P_1 + P_1^2/K_{P_{1I}}} \\ \mu_2 &= \frac{\mu_{m_2} S_2}{K_{S_2} + S_2 + S_2^2/K_{S_{2I}}} \frac{K_{P_{2I}}}{K_{P_{2I}} + P_2 + P_2^2/K_{P_{2I}}} \\ q_{S_1/P_1} &= \frac{\nu_{S_1 P_1} S_1}{K_{S_1 P_1} + S_1} \frac{k_{S_1 P_1}}{k_{S_1 P_1} + P_1} \\ q_{S_2/P_2} &= \frac{\nu_{S_2 P_2} S_2}{K_{S_2 P_2} + S_2} \frac{k_{S_2 P_2}}{k_{S_2 P_2} + P_2} \\ q_{S_1/P_2} &= \frac{\nu_{S_1 P_2} S_1}{K_{S_1 P_2} + S_1} \frac{k_{S_1 P_2}}{k_{S_1 P_2} + P_2} \\ q_{S_2/P_1} &= \frac{\nu_{S_2 P_1} S_2}{K_{S_2 P_1} + S_2} \frac{k_{S_2 P_1}}{k_{S_2 P_1} + P_1} \end{aligned} \quad (2)$$

La descripción detallada de cada parte del modelo escapa de los objetivos de este trabajo, se sugiere al lector que, de necesitar más información, revise las siguientes referencias: [19], [21], además, en el siguiente sitio web, <https://github.com/mcfernandezp/Public-Matlab-code>, se encuentra el código para las implementaciones presentadas en el artículo.

## III. ESTRATEGIA DE OPTIMIZACIÓN DINÁMICA

En esta sección se detalla una metodología de optimización que se enmarca dentro de los métodos directos secuenciales. Su principal ventaja es que no es necesario modificar el planteo original del Problema de Control Óptimo, es decir, no se agregan variables adjuntas. La Fig. 1 muestra un diagrama que resume las etapas de la técnica propuesta. Cabe aclarar que no se tienen en cuenta las perturbaciones que puedan existir en el entorno del sistema, ya que solo se busca describir la política de alimentación del reactor más apropiada para alcanzar los objetivos planteados.

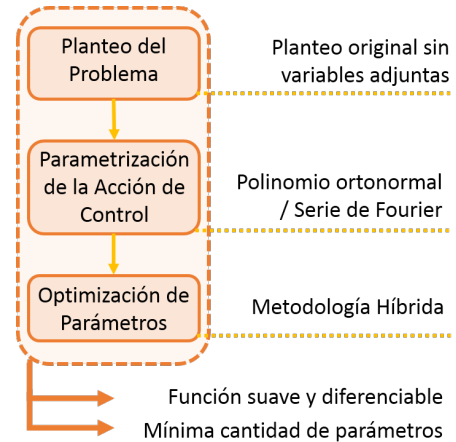


Fig. 1. Diagrama de la estrategia de optimización.

### A. Planteo del Problema de Optimización

Se llevarán a cabo dos planteos diferentes para la optimización dinámica del proceso, el primero considerando restricciones en la acción de control sin saturar; el segundo, saturando la acción de control cuando supera los límites

impuestos. En ambos casos se emplearán tres índices de optimización diferentes. En primer lugar, se optimizará la concentración de etanol en el tiempo final de reacción, luego, se optimizará la cantidad de etanol producido en el tiempo final y finalmente, se maximizará la cantidad de etanol minimizando el remanente de sustrato en el tiempo final. En todos los casos se debe encontrar el mejor perfil de caudal de alimentación que logre los objetivos planteados.

1) **Planteo 1:** En el sistema descrito en II, el propósito es obtener el mejor caudal de alimentación en un tiempo de reacción dado ( $t_f = 15.7h$ , definido por ([19]) para el cual se logra la función objetivo planteada:

**Índice 1:** Maximizar la concentración de etanol ([g/L]) en  $t_f$ :

$$J_1 = \max[P_1(t_f)] \quad (3)$$

**Índice 2:** Maximizar la cantidad de etanol ([g]) en  $t_f$ :

$$J_2 = \max[P_1(t_f)V(t_f)] \quad (4)$$

**Índice 3:** Maximizar la cantidad de etanol ([g]), minimizando la cantidad de sustrato ([g]) en  $t_f$ :

$$J_3 = \max[P_1(t_f)V(t_f) - [S_1(t_f) + S_2(t_f)]V(t_f)] \quad (5)$$

En todos los casos, se evaluará la función objetivo teniendo en cuenta restricciones de igualdad, dadas por el modelo matemático del proceso (ver (1) y (2)); los valores iniciales que tomen las variables de estado (definidas por [19]), las mismas se muestran en (6); y restricciones de desigualdad de las variables del proceso, ver (7):

$$[X_0, P_{10}, P_{20}, S_{10}, S_{20}] = [1.5, 5.3, 0.0001, 8.6, 8.6]g/L \quad (6)$$

$$V_0 = 1.35L$$

$$1.35L \leq V(t_f) \leq 5L \quad (7)$$

$$0L/h \leq U \leq 1L/h$$

Toda acción de control que no cumpla con (7) es eliminada.

2) **Planteo 2:** En el segundo planteo de optimización, cambia la manera en que se cumple la restricción de desigualdad para la acción de control. Aquellas posibles soluciones que superan los límites establecidos (ver (7)) no se eliminan, sino que se saturan, es decir, si en algún punto del perfil, el valor de la acción de control infringe el valor máximo o mínimo, inmediatamente se reemplaza dicho valor por el límite correspondiente.

### B. Procedimiento de Parametrización. Bases y Principios.

La estrategia que se propone para parametrizar el caudal de alimentación al reactor fue originalmente descrita en [22], y asume que el perfil óptimo existe y puede ser expresado por una función perteneciente al espacio de Hilbert  $L_2 [0; t_f]$ , donde  $t_f$  es la duración total del proceso, y está definido. Al ser  $L_2$  un espacio de dimensión infinita, los elementos de la base tienen que ser independientes, infinitos, y completos [23]. Consecuentemente, por definición de espacio, la función que representa el caudal óptimo de alimentación puede obtenerse mediante combinación lineal de los elementos de la base  $L_2$

$[0; t_f]$ . Dos bases que pertenecen a dicho espacio son: La base trigonométrica de Fourier:

$$A = \left\{ 1, \cos\left(1\frac{2\pi}{t_f}t\right), \sin\left(1\frac{2\pi}{t_f}t\right), \cos\left(2\frac{2\pi}{t_f}t\right), \sin\left(2\frac{2\pi}{t_f}t\right), \dots \right\} \quad (8)$$

y la base ortonormal:

$$B = \{p_0, p_1, p_2, p_3, \dots\} \quad (9)$$

donde  $p_i$ , con  $i = 1, 2, 3, \dots$ , se consiguen a través de una ortogonalización de Gram-Schmidt y normalización de la base  $B' = \{1, t, t^2, t^3, \dots\}$ , y dependen de  $t_f$ , con:

$$\langle p_i, p_j \rangle = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases}; \forall i, j \in \{0, 1, 2, \dots\} \quad (10)$$

donde, “ $\langle \rangle$ ” representa el producto interno. Por tanto, se considera que con las dos bases se puede generar cualquier función continua por partes, lo que incluye el caudal a optimizar. Para el espacio de Hilbert, el producto interno entre dos funciones  $x, y \in L_2 [0; t_f]$ , está definido como [24]:

$$\langle x, y \rangle = \int_0^{t_f} x(t)y(t)dt \quad (11)$$

Entonces, si se asume que el perfil óptimo de control,  $u(t)_{opt}$ , está caracterizado por una función continua, ésta puede ser aproximada por una combinación lineal de la base ortonormal  $B$ :

$$\tilde{u}(t) = c_0p_0 + c_1p_1 + c_2p_2 + \dots + c_l p_l \quad (12)$$

donde  $\tilde{u}(t)$  es el vector de control óptimo aproximado,  $c_i$  los coeficientes del polinomio y  $l$  su orden. De esta manera, encontrando los coeficientes del polinomio se resuelve el problema de optimización. Este procedimiento aprovecha las características de la serie de Fourier (combinación lineal de 8) para aproximar  $\tilde{u}(t)$ . Entonces, como se necesita que la acción de control sea una señal suave y continua, los primeros términos de Fourier, que poseen bajo contenido frecuencial, son suficientes para lograr una buena aproximación [24], esto implica involucrar pocos parámetros. Luego, para una función continua o continua por partes,  $f(t)$ , el desarrollo en serie de Fourier viene dado por [25]:

$$f(t) = a_0 + \sum_{k=1}^{\infty} \left[ \underbrace{a_k \cos\left(\frac{2k\pi}{t_f}t\right)}_{w_k} + \underbrace{b_k \sin\left(\frac{2k\pi}{t_f}t\right)}_{v_k} \right] \quad (13)$$

donde,  $k$  es un entero que corresponde al número de términos trigonométricos de la serie, mientras que  $a_0, a_k, b_k$  son sus parámetros. Entonces, para cada desarrollo de la serie truncada, con sus respectivos parámetros, existe un único polinomio de orden  $l$ , de coeficientes  $\{c_0, c_1, \dots, c_l\}$ , que representa una  $\tilde{u}(t)$  determinada. De esta forma, los coeficientes de 12, se obtienen de igualar las Ecs. (12) y (13):

$$c_0 = \frac{a_0}{p_0}; c_1 = b_1 \frac{\langle v_1, v_1 \rangle}{\langle p_1, v_1 \rangle}; c_2 = a_1 \frac{\langle w_1, w_1 \rangle}{\langle p_2, w_1 \rangle}; \dots \quad (14)$$

Entonces, encontrando los parámetros de Fourier que construyan un vector para la acción de control (12) que maximice la función objetivo (Ecs. (3), (4) y (5)), se cumple con el objetivo de optimización planteado inicialmente.

El procedimiento descrito se resume en los siguientes pasos:

- 1) Especificar el número de términos de Fourier a utilizar,  $m$ , y definir el número de parámetros como:  $n = 2m + 1$  (para una señal suave y continua, con 3 términos es suficiente);  $n$  coincide con el número de coeficientes que tendrá el polinomio de la Ec. (12) por lo que fija el orden del mismo,  $l$ .
- 2) Establecer el rango de valores que pueden adoptar los parámetros de Fourier, partiendo del supuesto de que dichos valores están comprendidos entre los límites del vector de control (ver Ec. (7)). Dar un valor de partida a los parámetros, comprendido entre los límites fijados, utilizando cualquier algoritmo de búsqueda aleatoria (ejemplo, Monte Carlo).
- 3) Realizar la ortogonalización de la base  $B$  con Gram-Schmidt para el intervalo de tiempo  $[0; t_f]$ , y luego la normalización de la misma.
- 4) Calcular los coeficientes del polinomio, Ec. (12), con la Ec. (14). El polinomio definido representa una opción de acción de control.
- 5) Evaluar el perfil de la variable de control obtenida en el paso anterior, resolviendo las Ecs. (1) y (2), teniendo en cuenta que  $\tilde{u}(t) = U$ . Determinar el valor de la función objetivo correspondiente (Ecs. (3), (4) y (5)).
- 6) Realizar la optimización de los parámetros de Fourier usando un algoritmo determinado.

Los pasos 4, 5 y 6 se repiten de forma iterativa hasta alcanzar la convergencia de los resultados. Finalmente, se obtiene la acción de control óptima para el problema planteado.

Cabe destacar que esta estrategia de optimización dinámica no se limita solo a la búsqueda de funciones suaves, ya que pueden obtenerse perfiles no uniformes (aunque continuos) adicionando términos a la Serie de Fourier y aumentando, consecuentemente, el orden del polinomio.

### C. Optimización de Parámetros. Metodología.

Una vez definida (12), que depende del valor que tomen los parámetros asociados a la Serie de Fourier (sujeto a (14)), resta encontrar el valor de dichos parámetros para que la acción de control dé un resultado óptimo al aplicarse en el sistema. Para este proceso se propone una mejora a un algoritmo híbrido presentado en un trabajo anterior [20]. El mismo consiste en hacer una combinación del método aleatorio Monte Carlo con Algoritmos Genéticos y método del gradiente.

Monte Carlo es una técnica de simulación y análisis estadístico utilizada para resolver problemas complejos y estimar resultados a partir del muestreo aleatorio [20]. En este caso en particular, se usa para generar la población inicial de individuos que ingresarán al algoritmo genético. Suponiendo que los parámetros de Fourier son números reales, se emplea la codificación de valores directos. Se lleva a cabo una metodología elitista para la selección de los individuos más capaces. El procedimiento general consiste en formar conjuntos aleatorios de los parámetros de Fourier, cada conjunto (individuo) se evalúa construyendo el polinomio correspondiente y simulando el proceso, considerando ese polinomio como entrada al sistema, luego se calcula la función objetivo.

El Algoritmo Genético es una técnica de optimización y búsqueda basada en la evolución biológica y los principios de la genética. Se inspira en la teoría de evolución de Charles Darwin y la reproducción genética [20]. Para su programación, se toma el conjunto de individuos que se originó con Monte Carlo y se selecciona un grupo reducido de individuos (población inicial), cuyo valor de la función objetivo sea el mejor. Una vez seleccionados los individuos se realizan las operaciones de cruce y mutación. Se emplea un cruce de un solo punto, que detecta un punto de cruce al azar antes de dividir a los padres, produciendo así descendencia mediante el intercambio de colas. El objetivo del cruce es conseguir que la descendencia mejore la aptitud de sus padres. Para la operación de mutación, se elige una posición aleatoria en el cromosoma y su valor se cambia aleatoriamente. Además, en cada iteración, se genera una serie de individuos en forma aleatoria para descartar la posibilidad de convergencia a un extremo relativo. Cada individuo de la población se evalúa según la función objetivo y en cada generación se seleccionan los mejores. Los pasos se repiten durante un número fijo de iteraciones o hasta que se cumpla algún criterio de convergencia.

El método del gradiente, es una técnica de optimización utilizada para encontrar extremos locales o globales de una función [26]. Teniendo en cuenta que el gradiente de una función es un vector que indica la dirección de máximo crecimiento de la misma en un punto dado, esta técnica se basa en seguir la dirección del gradiente en cada iteración y así localizar un extremo. En este caso, el procedimiento a seguir consiste en tomar como punto de partida el mejor individuo obtenido con el algoritmo genético, descartando así, la posibilidad de converger en un extremo local. Luego se calcula el gradiente de la función en ese punto utilizando derivadas parciales, posteriormente se actualiza el individuo multiplicando el gradiente por un factor de aprendizaje y se evalúa si se ha alcanzado algún criterio de convergencia, de no ser así, se repite el proceso hasta lograrlo.

La Fig. (2) muestra un resumen del paso a paso para llevar a cabo la optimización de los parámetros.

## IV. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Para optimizar la producción de bioetanol se simuló los algoritmos descritos en Matlab® y Simulink®. Luego, se realizaron comparaciones entre los resultados obtenidos y los presentados en [19]. Es importante destacar que, con el fin de realizar una comparación legítima, se ha utilizado el mismo tiempo final, restricciones, parámetros del modelo y condiciones iniciales que en el estudio mencionado.

En [19], los autores aplican un procedimiento de optimización *run-to-run* de dos fases. En la primera, se determinan los parámetros cinéticos del modelo y en la segunda, la velocidad de alimentación óptima, las concentraciones de glucosa y fructosa en la alimentación y el tiempo de fermentación, para maximizar la producción de etanol. Para la aproximación de la velocidad de alimentación de sustrato utilizan una parametrización por partes, hacen una normalización del tiempo de reacción y lo particionan en 10 sub-intervalos. En cada uno, obtienen un valor óptimo constante para el

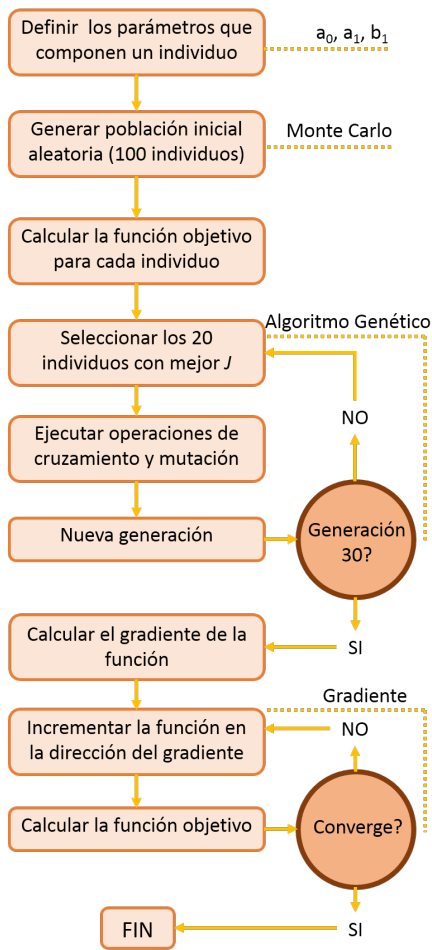


Fig. 2. Pasos a seguir para optimizar los parámetros.

vector de control. La metodología que usan en la búsqueda de los parámetros correspondientes es un algoritmo evolutivo híbrido (HDE). La desventaja principal de esta metodología, es la gran cantidad de parámetros a optimizar y el número de simulaciones requeridas. Además, el perfil óptimo no es suave, siendo necesaria una etapa de suavizado para poder aplicarse en el sistema real, obteniéndose una solución subóptima. El óptimo informado en [19] fue  $103.63g/L$  de etanol.

En esta investigación, se parametrizó el caudal de alimentación siguiendo el procedimiento descrito en III-B. Posteriormente, mediante un algoritmo híbrido que combina las estrategias expuestas en III-C, se optimizaron los parámetros  $a_0$ ,  $a_1$  y  $b_1$  (variando estos parámetros entre los límites de la acción de control). Inicialmente, se aplicó el *Planteo 1*, descrito en III-A1, el índice  $J_1$  (Ec. 3) se empleó para llevar a cabo una comparación directa con lo publicado en [19]. Sin embargo, en dicho trabajo no se informa el volumen final alcanzado y por ende la cantidad de etanol obtenido. Por lo que, en este trabajo, se definió un índice  $J_2$  (Ec. 4) que contempla la cantidad de etanol en el tiempo final. Además, analizando los resultados de sustrato remanente en los lotes simulados, se decidió replantear la función objetivo con el fin de considerar el consumo de materias primas para que sea mínimo. Consecuentemente, se propuso el índice  $J_3$  (Ec. 5), que no solo maximiza la cantidad de etanol, sino

que minimiza la glucosa y fructosa remanente en el reactor al final del proceso. Considerando que con el índice  $J_3$  el sustrato remanente en el reactor era aún elevado ( $0.2833g/L$  de glucosa y  $4.1419g/L$  de fructosa), y analizando que en [19] la alimentación al reactor se hace cero a las  $6h$  de iniciado el proceso, se consideró saturar la acción de control, proponiendo el *Planteo 2* descrito en III-A2, para que los microorganismos puedan consumir el sustrato administrado.

En la Tabla I se comparan los resultados obtenidos por [19] y los alcanzados con los *Planteos 1* y *2* propuestos en este trabajo, tomando como función objetivo los índices  $J_1$ ,  $J_2$  y  $J_3$ , respectivamente. En la Fig. 3 a) y b) se observan las velocidades de alimentación de sustrato obtenidas en cada situación planteada. En todos los casos, los resultados alcanzados presentan perfiles suaves, continuos y diferenciables, lo que permite aplicarlos en el sistema real sin necesidad de utilizar filtros que suavicen la señal. Además, se emplearon solo tres parámetros para la optimización, mientras que en [19] al menos diez. Cabe destacar que, cada simulación del algoritmo planteado, involucra aproximadamente  $3500$  iteraciones, y el tiempo de simulación es de  $3min$  aproximadamente.

La Fig. 3 c) y d) muestra los perfiles de concentración de etanol para cada caso, resultantes de simular las ecuaciones 1 y 2 utilizando las acciones de control informadas en la Fig. 3 a) y b). Los mismos se comparan con el perfil obtenido por [19]. Se puede observar una mejora en la concentración final de etanol empleando la técnica de Fourier.

Cabe destacar que la máxima cantidad de etanol ( $536.2599g$ ) la mínima concentración de sustrato remanente ( $0.0023g/L$  de glucosa y  $1.2105g/L$  de fructosa), en el tiempo final de reacción, se consiguió con el *Planteo 2*, índice  $J_3$ . Además, para llevar a cabo el proceso de optimización se han empleado solamente tres parámetros, obteniéndose una señal directamente aplicable en procesos reales. Los resultados presentados respaldan que la estrategia propuesta es eficiente para resolver el problema establecido.

## V. CONCLUSIONES

Esta investigación aborda una metodología de optimización dinámica a partir de herramientas de optimización estática, utilizando la base trigonométrica de Fourier y polinomios ortogonales en la parametrización de la acción de control de un bioproceso fed-batch de bioetanol. En este desarrollo, se usa una combinación de algoritmos aleatorios, evolutivos y gradiente para encontrar los coeficientes de Fourier. Una de las ventajas es el mínimo número de parámetros involucrados, para proporcionar perfiles óptimos, continuos y diferenciables, que son directamente aplicables a sistemas reales. Además, con esta estrategia, no es necesario simplificar el planteo del problema de optimización ni el modelo matemático del proceso, a diferencia del modelo de primeros principios en el que hay que agregar variables adjuntas.

Los algoritmos propuestos se evaluaron mediante simulación, y se compararon los resultados con aquellos previamente publicados por otros investigadores.

Los resultados obtenidos muestran el buen funcionamiento de la estrategia presentada, ya que se consigue una mejora



TABLA I  
RESULTADOS OBTENIDOS POR SIMULACIÓN ( $F$  INDICA MEDIDO EN EL TIEMPO FINAL)

Índice	Hunag et al.		Este trabajo			
			<i>Planteo 1</i>		<i>Planteo 2</i>	
	$P_{1f}$	$P_{1f} * V_f$	$P_{1f}$	$P_{1f} * V_f$	$P_{1f}$	$P_{1f} * V_f$
$J_1$	103.63g/L	-	105.3839g/L	518.2596g	107.2307g/L	535.9110g
$J_2$	-	-	105.3143g/L	517.5894g	107.0824g/L	535.8857g
$J_3$	-	-	105.7793g/L	528.5961g	107.2160g/L	536.2599g

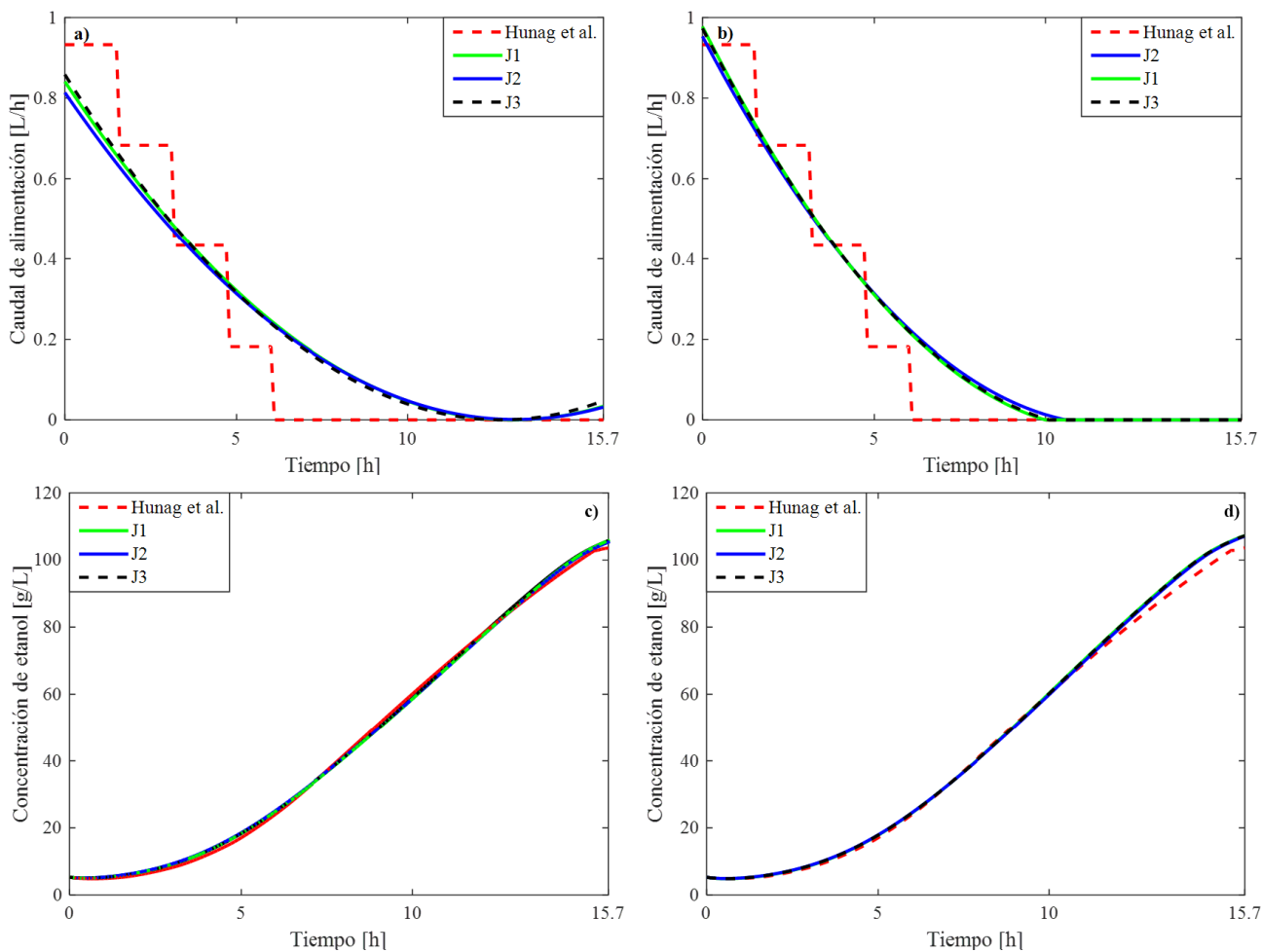


Fig. 3. Caudal de alimentación de sustrato: a) *Planteo 1* y b) *Planteo 2*. Perfiles óptimos de concentración de etanol a lo largo del proceso. c) *Planteo 1* y d) *Planteo 2*.

en la producción final de etanol, empleando únicamente tres parámetros para la optimización, en lugar de diez, que utilizan otros autores en el mismo sistema. Además, no fue necesario particionar el intervalo de tiempo, asegurando un perfil óptimo de alimentación apropiado para evitar el estrés de los microorganismos (perfil suave). Estos resultados llevan a concluir que la metodología desarrollada es altamente recomendable para optimizar sistemas no lineales y con múltiples variables, como es el caso de los bioprocesos.

### VI. AGRADECIMIENTOS

Se agradece al Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Tecnológicas (CONICET) por la financiación de este

proyecto, y al Instituto de Ingeniería Química (IIQ) de la Universidad Nacional de San Juan (UNSJ) por brindar su espacio y colaboración constante.

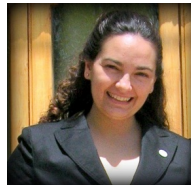
### REFERENCES

- [1] S. H. M. Azhar, R. Abdulla, S. A. Jambo, H. Marbawi, J. A. Gansau, A. A. M. Faik, and K. F. Rodrigues, "Yeasts in sustainable bioethanol production: A review," *Biochemistry and biophysics reports*, vol. 10, pp. 52–61, 2017.
- [2] A. de Azevedo, F. Fornasier, M. da Silva Szarblewski, R. d. C. de Souza Schneider, M. Hoeltz, and D. de Souza, "Life cycle assessment of bioethanol production from cattle manure," *Journal of cleaner production*, vol. 162, pp. 1021–1030, 2017.
- [3] A. G. B. Ozdingis and G. Kocar, "Current and future aspects of bioethanol production and utilization in turkey," *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 81, pp. 2196–2203, 2018.

- [4] M. Vohra, J. Manwar, R. Manmode, S. Padgilwar, and S. Patil, "Bioethanol production: feedstock and current technologies," *Journal of Environmental Chemical Engineering*, vol. 2, no. 1, pp. 573–584, 2014.
- [5] N. Nasir, W. R. W. Daud, S. Kamarudin, and Z. Yaakob, "Process system engineering in biodiesel production: A review," *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 22, pp. 631–639, 2013.
- [6] J. Lee, S. Y. Lee, S. Park, and A. P. Middelberg, "Control of fed-batch fermentations," *Biotechnology advances*, vol. 17, no. 1, pp. 29–48, 1999.
- [7] S. Romoli, G. J. E. Scaglia, M. E. Serrano, S. A. Godoy, O. A. Ortiz, and J. R. Vega, "Control of a fed-batch fermenter based on a linear algebra strategy," *Latin America Transactions, IEEE (Revista IEEE America Latina)*, vol. 12, no. 7, pp. 1206–1213, 2014.
- [8] S. Ochoa, "A new approach for finding smooth optimal feeding profiles in fed-batch fermentations," *Biochemical engineering journal*, vol. 105, pp. 177–188, 2016.
- [9] R. Luus, "Optimization of fed-batch fermentors by iterative dynamic programming," *Biotechnology and Bioengineering*, vol. 41, no. 5, pp. 599–602, 1993.
- [10] S. Park and W. Fred Ramirez, "Optimal production of secreted protein in fed-batch reactors," *AIChE Journal*, vol. 34, no. 9, pp. 1550–1558, 1988.
- [11] A. Arpornwichanop and N. Shomchoam, "Studies on optimal control approach in a fed-batch fermentation," *Korean Journal of Chemical Engineering*, vol. 24, pp. 11–15, 2007.
- [12] J. Li and R. R. Rhinehart, "Heuristic random optimization," *Computers & chemical engineering*, vol. 22, no. 3, pp. 427–444, 1998.
- [13] J. Zhang, "Developing robust neural network models by using both dynamic and static process operating data," *Industrial & engineering chemistry research*, vol. 40, no. 1, pp. 234–241, 2001.
- [14] M. N. Pantano, M. C. Fernández, A. Amicarelli, and G. J. Scaglia, "Evolutionary algorithms and orthogonal basis for dynamic optimization in 12 space for batch biodiesel production," *Chemical Engineering Research and Design*, vol. 177, pp. 354–364, 2022.
- [15] M. N. Pantano, M. C. F. Puchol, F. G. Rossomando, and G. J. Scaglia, "Open-loop dynamic optimization for nonlinear multi-input systems. application to recombinant protein production," *IEEE Latin America Transactions*, vol. 19, no. 8, pp. 1307–1314, 2021.
- [16] M. N. Pantano, M. C. Fernández, L. Rodríguez, and G. J. E. Scaglia, "Optimización dinámica basada en fourier: Aplicación al proceso de producción de biodiesel," 2020.
- [17] J. R. Banga, E. Balsa-Canto, C. G. Moles, and A. A. Alonso, "Dynamic optimization of bioprocesses: Efficient and robust numerical strategies," *Journal of biotechnology*, vol. 117, no. 4, pp. 407–419, 2005.
- [18] B. Srinivasan, S. Palanki, and D. Bonvin, "Dynamic optimization of batch processes: I. characterization of the nominal solution," *Computers & Chemical Engineering*, vol. 27, no. 1, pp. 1–26, 2003.
- [19] W.-H. Hung, G. S. Shieh, and F.-S. Wang, "Optimization of fed-batch fermentation using mixture of sugars to produce ethanol," *Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers*, vol. 43, no. 1, pp. 1–8, 2012.
- [20] C. Fernández, N. Pantano, S. Godoy, E. Serrano, and G. Scaglia, "Optimización de parámetros utilizando los métodos de monte carlo y algoritmos evolutivos. aplicación a un controlador de seguimiento de trayectoria en sistemas no lineales," *Revista Iberoamericana de Automática e Informática industrial*, vol. 16, no. 1, pp. 89–99, 2019.
- [21] M. C. Fernández, M. N. Pantano, R. A. F. Machado, O. A. Ortiz, and G. J. Scaglia, "Nonlinear multivariable tracking control: application to an ethanol process," *International Journal of Automation and Control*, vol. 13, no. 4, pp. 440–468, 2019.
- [22] M. N. Pantano, M. C. Fernández, O. A. Ortiz, G. J. Scaglia, and J. R. Vega, "A fourier-based control vector parameterization for the optimization of nonlinear dynamic processes with a finite terminal time," *Computers & Chemical Engineering*, vol. 134, p. 106721, 2020.
- [23] W. E. Boyce, R. C. DiPrima, and D. B. Meade, *Elementary differential equations and boundary value problems*. John Wiley & Sons, 2021.
- [24] E. Kreyszig, "Introductory functional analysis with applications. jonh wiley & sons," *Inc., New York*, 1978.
- [25] R. K. Nagle, E. B. Saff, and A. D. Snider, *Ecuaciones diferenciales y problemas con valores en la frontera*. Pearson Educación, 2000.
- [26] F. L. Lewis, D. Vrabie, and V. L. Syrmos, *Optimal control*. John Wiley & Sons, 2012.



**Cecilia Fernández** received the Food Processing Engineering degree from the National University of San Juan - Argentina, in 2014. Then the Doctorate in Chemical Engineering - Mention Clean Processes degree from the same University, in 2019. At this time, she works as CONICET Assistant Researcher, her specialty is process engineering, mainly optimization and control of multivariable non-linear processes. Her main research interests include modeling, state estimation, optimization, and trajectory tracking control of biochemical processes.



**Nadia Pantano** received the Chemical Engineering degree from the National University of San Juan - Argentina, in 2008. Then the Doctorate in Chemical Engineering - Mention Clean Processes degree from the National University of San Juan - Argentina, in 2019. At this time, she is dedicated to process engineering, specifically to optimization and control of multivariable non-linear processes. Her main research interests include modeling, optimization, and trajectory tracking control of biochemical processes.



**Carla Groff** has a bachelor's degree in food technology (2012) from the Cuyo Catholic University of San Juan and PhD in Chemical Engineering-Mention Clean Processes (2022) from the National University of San Juan. At this time, she works as CONICET Postdoctoral fellow and professor in food technology. Her specialty is the bioprocess mathematical modeling. Her main interests in research are the bioproduction of lactic acid using fungi and the production of microalgae.



**Rocío Gil** is Chemical Engineer (2014) from the Faculty of Engineering of the National University of San Juan and PhD in Chemical Engineering (2022) in the same faculty. Professor/Researcher of the Bioprocess Engineering Cathedra. At this time, dedicated to the modelling of biogas generating processes. Her main interest in research is the optimization of process in bench bioreactors with microalgae.



**Gustavo Scaglia** received the Ing. degree in Electronic Engineering orientated in Control Systems from National University of San Juan, Argentina, in 1999. Then, the PhD in Control Systems from the same university, in 2006. He is a researcher of CONICET, Argentina, since 2011. He leads different technological projects and his current scientific research at the Engineering Chemical Institute from National University of San Juan. His main interests include modeling, optimization, and trajectory tracking control of biochemical processes.