Controlo óptimo de processos semi-contínuos com optimização por colónias de partículas

A. Ismael F. Vaz

Departamento de Produção e Sistemas

Escola de Engenharia, Universidade do Minho

aivaz@dps.uminho.pt

Eugénio C. Ferreira

Centro de Engenharia Biológica

Escola de Engenharia, Universidade do Minho

ecferreira@deb.uminho.pt

Universidade do Minho

Conteúdo

- O problema de controlo óptimo semi-contínuo
- A abordagem usada na resolução do problema de controlo óptimo
- O paradigma das colónias de partículas
- Resultados numéricos e conclusões

Universidade do Minho

Conteúdo

- O problema de controlo óptimo semi-contínuo
- A abordagem usada na resolução do problema de controlo óptimo
- O paradigma das colónias de partículas
- Resultados numéricos e conclusões

Universidade do Minho

Conteúdo

- O problema de controlo óptimo semi-contínuo
- A abordagem usada na resolução do problema de controlo óptimo
- O paradigma das colónias de partículas
- Resultados numéricos e conclusões

Universidade do Minho

Conteúdo

- O problema de controlo óptimo semi-contínuo
- A abordagem usada na resolução do problema de controlo óptimo
- O paradigma das colónias de partículas
- Resultados numéricos e conclusões

Universidade do Minho

Controlo óptimo

Universidade do Minho

Motivação

- Um grande número de produtos valiosos são produzidos através de processos de fermentação e consequentemente optimizar estes processos é de enorme interesse económico.
- A modelação de processos de fermentação envolvem, em geral, equações diferenciais não lineares e complexas.
- Frequentemente optimizar estes processos resulta em problemas de controlo óptimo para os quais uma solução analítica não é possível.

Motivação

Universidade do Minho

- Um grande número de produtos valiosos são produzidos através de processos de fermentação e consequentemente optimizar estes processos é de enorme interesse económico.
- A modelação de processos de fermentação envolvem, em geral, equações diferenciais não lineares e complexas.
- Frequentemente optimizar estes processos resulta em problemas de controlo óptimo para os quais uma solução analítica não é possível.

Motivação

- Um grande número de produtos valiosos são produzidos através de processos de fermentação e consequentemente optimizar estes processos é de enorme interesse económico.
- A modelação de processos de fermentação envolvem, em geral, equações diferenciais não lineares e complexas.
- Frequentemente optimizar estes processos resulta em problemas de controlo óptimo para os quais uma solução analítica não é possível.

O problema de controlo óptimo

- O problema de controlo óptimo é descrito por um conjunto de equações diferenciais
  $\dot{x} = f(x, u, t), \quad x(t_0) = x^0, \quad t_0 \leq t \leq t_f$.
- O índice de desempenho J pode ser descrito por

$$J(t_f) = \varphi(x(t_f), t_f) + \int_{t_0}^{t_f} \phi(x, u, t)dt,$$

  onde φ é o índice de desempenho das variáveis de estado no instante de tempo final t_f e ϕ é o índice de desempenho integrado durante a operação.
- Podem ser impostas restrições adicionais que reflectem algumas limitações físicas do sistema.

O problema de controlo óptimo

- O problema de controlo óptimo é descrito por um conjunto de equações diferenciais
  $\dot{x} = f(x, u, t), \;\; x(t_0) = x^0, \;\; t_0 \leq t \leq t_f.$
- O índice de desempenho J pode ser descrito por

$$J(t_f) = \varphi(x(t_f), t_f) + \int_{t_0}^{t_f} \phi(x, u, t)dt,$$

  onde φ é o índice de desempenho das variáveis de estado no instante de tempo final t_f e ϕ é o índice de desempenho integrado durante a operação.
- Podem ser impostas restrições adicionais que reflectem algumas limitações físicas do sistema.

O problema de controlo óptimo

- O problema de controlo óptimo é descrito por um conjunto de equações diferenciais
  $\dot{x} = f(x, u, t), \ \ x(t_0) = x^0, \ \ t_0 \leq t \leq t_f.$
- O índice de desempenho J pode ser descrito por

$$J(t_f) = \varphi(x(t_f), t_f) + \int_{t_0}^{t_f} \phi(x, u, t)dt,$$

onde φ é o índice de desempenho das variáveis de estado no instante de tempo final t_f e ϕ é o índice de desempenho integrado durante a operação.

- Podem ser impostas restrições adicionais que reflectem algumas limitações físicas do sistema.

Fermentador semi-contínuo para produção de penicilina

O problema de optimização é:

$$\max_{u(t)} \; J(t_f) \equiv x_2(t_f)x_4(t_f)$$

$$\begin{aligned}
s.a \quad & \dot{x}_1 = h_1 x_1 - u x_1/(500 x_4), \quad \dot{x}_2 = h_2 x_1 - 0.01 x_2 - u x_2/(500 x_4) \\
& \dot{x}_3 = -(h_1 x_1)/0.47 - h_2 x_1/1.2 - 0.029 x_1 x_3/(0.0001 + x_3) + \\
& \quad + u(1 - x_3/500)/x_4, \quad \dot{x}_4 = u/500 \\
& 0 \leq x_1(t) \leq 40, \quad 0 \leq x_3(t) \leq 25, \quad 0 \leq x_4(t) \leq 10, \quad 0 \leq u(t) \leq 50, \\
& \forall t \in [t_0, t_f]
\end{aligned}$$

com

$h_1 = 0.11(x_3/(0.006 x_1 + x_3))$ e $h_2 = 0.0055(x_3/(0.0001 + x_3(1 + 10 x_3))$

onde x_1, x_2 e x_3 são as concentrações de biomassa, penicilina e substrato (g/L), e x_4 é o volume (L). As condições iniciais são $x(t_0) = (1.5, 0, 0, 7)^T$.

O problema de controlo óptimo

O problema geral de maximização (P) pode ser descrito como

$$
\begin{aligned}
&\max \quad J(t_f) && (1)\\
&s.a \quad \dot{x} = f(x,u,t) && (2)\\
&\qquad \underline{x} \leq x(t) \leq \overline{x}, && (3)\\
&\qquad \underline{u} \leq u(t) \leq \overline{u}, && (4)\\
&\qquad \forall t \in [t_0, t_f] && (5)
\end{aligned}
$$

Onde as restrições de estado (3) e restrições de controlo (4) são entendidas como componente a componente.

O problema de controlo óptimo

O problema geral de maximização (P) pode ser descrito como

$$\max \quad J(t_f) \tag{1}$$

$$s.a \quad \dot{x} = f(x,u,t) \tag{2}$$

$$\underline{x} \leq x(t) \leq \overline{x}, \tag{3}$$

$$\underline{u} \leq u(t) \leq \overline{u}, \tag{4}$$

$$\forall t \in [t_0, t_f] \tag{5}$$

Onde as restrições de estado (3) e restrições de controlo (4) são entendidas como componente a componente.

Como abordamos o problema (P)?

Abordagem

- Impondo uma penalidade infinita para as restrições de estado resulta na redefinição da função objectivo como

$$\hat{J}(t_f) = \begin{cases} J(t_f) & \text{se } \underline{x} \leq x(t) \leq \overline{x}, \forall t \in [t_0, t_f] \\ -\infty & \text{caso contrário} \end{cases}$$

- Será usada uma função interpoladora segmentada $w(t)$ (spline linear) para aproximar a trajectória de alimentação $u(t)$.
O segmento da spline $w^i(t)$, $i = 1, \ldots, n$, é definido como:

$$w^i(t) = u_{i-1} + (u_i - u_{i-1})(t - t_{i-1})/(t_i - t_{i-1}), \text{ para } t \in [t_{i-1}, t_i].$$

onde t_i, $i = 0, \ldots, n$, são os instantes de tempo e $u_{i-1} = u(t_{i-1})$.

Abordagem

Universidade do Minho

- Impondo uma penalidade infinita para as restrições de estado resulta na redefinição da função objectivo como

$$\hat{J}(t_f) = \begin{cases} J(t_f) & \text{se } \underline{x} \leq x(t) \leq \overline{x}, \forall t \in [t_0, t_f] \\ -\infty & \text{caso contrário} \end{cases}$$

- Será usada uma função interpoladora segmentada $w(t)$ (spline linear) para aproximar a trajectória de alimentação $u(t)$.
  O segmento da spline $w^i(t)$, $i = 1, \ldots, n$, é definido como:

$$w^i(t) = u_{i-1} + (u_i - u_{i-1})(t - t_{i-1})/(t_i - t_{i-1}), \text{ para } t \in [t_{i-1}, t_i].$$

  onde t_i, $i = 0, \ldots, n$, são os instantes de tempo e $u_{i-1} = u(t_{i-1})$.

Programação não linear (PNL)

O problema de programação semi-infinita é definido como:

$$\begin{array}{rl} & \max \hat{J}(t_f) \\ s.a & \dot{x} = f(x, w, t) \\ & \underline{u} \leq w(t) \leq \overline{u}, \quad \forall t \in T = [t_0, t_f]. \end{array}$$

e usando as condições de optimalidade o problema de PSI é redefinido como o seguinte problema de PNL.

Universidade do Minho

Programação não linear (PNL)

O problema de programação semi-infinita é definido como:

$$
\begin{aligned}
& \max \hat{J}(t_f) \\
s.a \quad & \dot{x} = f(x, w, t) \\
& \underline{u} \leq w(t) \leq \overline{u}, \quad \forall t \in T = [t_0, t_f].
\end{aligned}
$$

e usando as condições de optimalidade o problema de PSI é redefinido como o seguinte problema de PNL.

$$
\begin{aligned}
& \max_{u \in R^{n+1}} \hat{J}(t_f) \\
s.a \quad & \dot{x} = f(x, w, t) \\
& \underline{u} \leq u(t_i) \leq \overline{u}, \quad i = 1, \ldots, n.
\end{aligned}
$$

Optimização não linear

- $u(t_i)$ são variáveis a optimizar.
- As condições iniciais do sistema dinâmico ($x(t_0)$) podem ser consideradas como variáveis.
- $h \in R^{n+1}$ e t_f podem também ser consideradas como variáveis a optimizar ($h_i = t_i - t_{i-1}, i = 1, \ldots, n$).

Universidade do Minho

Optimização não linear

- $u(t_i)$ são variáveis a optimizar.
- As condições iniciais do sistema dinâmico ($x(t_0)$) podem ser consideradas como variáveis.
- $h \in R^{n+1}$ e t_f podem também ser consideradas como variáveis a optimizar ($h_i = t_i - t_{i-1}, i = 1, \ldots, n$).

Optimização não linear

- $u(t_i)$ são variáveis a optimizar.
- As condições iniciais do sistema dinâmico ($x(t_0)$) podem ser consideradas como variáveis.
- $h \in R^{n+1}$ e t_f podem também ser consideradas como variáveis a optimizar ($h_i = t_i - t_{i-1}, i = 1, \ldots, n$).

Optimização não linear

Universidade do Minho

- $u(t_i)$ são variáveis a optimizar.
- As condições iniciais do sistema dinâmico ($x(t_0)$) podem ser consideradas como variáveis.
- $h \in R^{n+1}$ e t_f podem também ser consideradas como variáveis a optimizar ($h_i = t_i - t_{i-1}, i = 1, \ldots, n$).

$w(t)$ não é diferenciável e vamos aplicar um algoritmo que não use derivadas.

O óptimo global é desejável e vamos usar um algoritmo estocástico.

Universidade do Minho

O algoritmo de colónia de partículas

O paradigma das colónias de partículas (CP)

As CP são algoritmos baseados em populações (colónia - enxame) que imitam o comportamento social de um conjunto de indivíduos (partículas).

O comportamento de um indivíduo é uma combinação da sua experiência passada (influência cognitiva) e da experiência da sociedade (influência social).

No contexto da optimização uma partícula p, no instante de tempo k, é representada pela sua posição corrente ($u^p(k)$), a sua melhor posição de sempre ($y^p(k)$) e da sua velocidade de viagem ($v^p(k)$).

A nova posição e velocidade de viagem

Universidade do Minho

Uma nova posição da partícula é actualizada por

$$u^p(k+1) = u^p(k) + v^p(k+1),$$

onde $v^p(k+1)$ é a nova velocidade dada por

$$v_j^p(k+1) = \iota(k)v_j^p(k) + \mu\omega_{1j}(k)\left(y_j^p(k) - u_j^p(k)\right) + \nu\omega_{2j}(k)\left(\hat{y}_j(k) - u_j^p(k)\right)$$

para $j = 1, \ldots, n$.

- $\iota(k)$ é o factor de inércia
- μ é o parâmetro *cognitivo* e ν é o parâmetro *social*
- $\omega_{1j}(k)$ e $\omega_{2j}(k)$ são números aleatórios obtidos da distribuição uniforme $(0, 1)$.

A nova posição e velocidade de viagem

Universidade do Minho

O algoritmo de colónia de partículas
- O paradigma das colónias de partículas (CP)
- A nova posição e velocidade de viagem
- A melhor partícula de sempre
- Características

Uma nova posição da partícula é actualizada por

$$u^p(k+1) = u^p(k) + v^p(k+1),$$

onde $v^p(k+1)$ é a nova velocidade dada por

$$v_j^p(k+1) = \iota(k)v_j^p(k) + \mu\omega_{1j}(k)\left(y_j^p(k) - u_j^p(k)\right) + \nu\omega_{2j}(k)\left(\hat{y}_j(k) - u_j^p(k)\right)$$

para $j = 1, \ldots, n$.

- $\iota(k)$ é o factor de inércia
- μ é o parâmetro *cognitivo* e ν é o parâmetro *social*
- $\omega_{1j}(k)$ e $\omega_{2j}(k)$ são números aleatórios obtidos da distribuição uniforme $(0, 1)$.

A nova posição e velocidade de viagem

Uma nova posição da partícula é actualizada por

$$u^p(k+1) = u^p(k) + v^p(k+1),$$

onde $v^p(k+1)$ é a nova velocidade dada por

$$v_j^p(k+1) = \iota(k) v_j^p(k) + \mu\omega_{1j}(k)\left(y_j^p(k) - u_j^p(k)\right) + \nu\omega_{2j}(k)\left(\hat{y}_j(k) - u_j^p(k)\right)$$

para $j = 1, \ldots, n$.

- $\iota(k)$ é o factor de inércia
- μ é o parâmetro *cognitivo* e ν é o parâmetro *social*
- $\omega_{1j}(k)$ e $\omega_{2j}(k)$ são números aleatórios obtidos da distribuição uniforme $(0, 1)$.

A nova posição e velocidade de viagem

Uma nova posição da partícula é actualizada por

$$u^p(k+1) = u^p(k) + v^p(k+1),$$

onde $v^p(k+1)$ é a nova velocidade dada por

$$v_j^p(k+1) = \iota(k) v_j^p(k) + \mu \omega_{1j}(k) \left(y_j^p(k) - u_j^p(k) \right) + \nu \omega_{2j}(k) \left(\hat{y}_j(k) - u_j^p(k) \right)$$

para $j = 1, \ldots, n$.

- $\iota(k)$ é o factor de inércia
- μ é o parâmetro *cognitivo* e ν é o parâmetro *social*
- $\omega_{1j}(k)$ e $\omega_{2j}(k)$ são números aleatórios obtidos da distribuição uniforme $(0, 1)$.

A melhor partícula de sempre

$\hat{y}(k)$ é a posição da partícula com melhor valor da função até ao momento, *i.e.*,

$$\hat{y}(k) = \arg\min_{a \in \mathcal{A}} f(a)$$

$$\mathcal{A} = \left\{ y^1(k), \ldots, y^s(k) \right\}.$$

onde s é o número de partículas da colónia.

A melhor partícula de sempre

$\hat{y}(k)$ é a posição da partícula com melhor valor da função até ao momento, *i.e.*,

$$\hat{y}(k) = \arg\min_{a \in \mathcal{A}} f(a)$$

$$\mathcal{A} = \left\{ y^1(k), \ldots, y^s(k) \right\}.$$

onde s é o número de partículas da colónia.

Do ponto de vista do algoritmo apenas é necessário guardar o índice da partícula que atingiu o melhor valor da função objectivo até então.

Características

Algoritmo baseado numa população.

1. Boas
   (a) Fácil implementação.
   (b) Fácil paralelização.
   (c) Tratamento fácil de variáveis discretas.
   (d) Usa apenas valores da função objectivo.
2. Não tão boas
   (a) Razão de convergência baixa perto do óptimo.
   (b) Muitas avaliações da função objectivo.
   (c) Na presença de vários óptimos globais o algoritmo pode não convergir.

Características

Algoritmo baseado numa população.

1. Boas
   (a) Fácil implementação.
   (b) Fácil paralelização.
   (c) Tratamento fácil de variáveis discretas.
   (d) Usa apenas valores da função objectivo.
2. Não tão boas
   (a) Razão de convergência baixa perto do óptimo.
   (b) Muitas avaliações da função objectivo.
   (c) Na presença de vários óptimos globais o algoritmo pode não convergir.

Universidade do Minho

Características

Algoritmo baseado numa população.

1. Boas
   (a) Fácil implementação.
   (b) Fácil paralelização.
   (c) Tratamento fácil de variáveis discretas.
   (d) Usa apenas valores da função objectivo.
2. Não tão boas
   (a) Razão de convergência baixa perto do óptimo.
   (b) Muitas avaliações da função objectivo.
   (c) Na presença de vários óptimos globais o algoritmo pode não convergir.

Universidade do Minho

Características

Algoritmo baseado numa população.

1. Boas
   (a) Fácil implementação.
   (b) Fácil paralelização.
   (c) Tratamento fácil de variáveis discretas.
   (d) Usa apenas valores da função objectivo.
2. Não tão boas
   (a) Razão de convergência baixa perto do óptimo.
   (b) Muitas avaliações da função objectivo.
   (c) Na presença de vários óptimos globais o algoritmo pode não convergir.

Características

Universidade do Minho

Algoritmo baseado numa população.

1. Boas
   (a) Fácil implementação.
   (b) Fácil paralelização.
   (c) Tratamento fácil de variáveis discretas.
   (d) Usa apenas valores da função objectivo.
2. Não tão boas
   (a) Razão de convergência baixa perto do óptimo.
   (b) Muitas avaliações da função objectivo.
   (c) Na presença de vários óptimos globais o algoritmo pode não convergir.

Características

Algoritmo baseado numa população.

1. Boas
   (a) Fácil implementação.
   (b) Fácil paralelização.
   (c) Tratamento fácil de variáveis discretas.
   (d) Usa apenas valores da função objectivo.
2. Não tão boas
   (a) Razão de convergência baixa perto do óptimo.
   (b) Muitas avaliações da função objectivo.
   (c) Na presença de vários óptimos globais o algoritmo pode não convergir.

Universidade do Minho

Características

Algoritmo baseado numa população.

1. Boas
   (a) Fácil implementação.
   (b) Fácil paralelização.
   (c) Tratamento fácil de variáveis discretas.
   (d) Usa apenas valores da função objectivo.
2. Não tão boas
   (a) Razão de convergência baixa perto do óptimo.
   (b) Muitas avaliações da função objectivo.
   (c) Na presença de vários óptimos globais o algoritmo pode não convergir.

Ambiente

Universidade do Minho

Ambiente

- Linguagem de modelação - AMPL
- Exemplo
- Restrições adicionais
- Alguns detalhes

Linguagem de modelação - AMPL

O AMPL é uma linguagem de modelação para programação matemática.
AMPL - A Modeling Programming Language

www.ampl.com

AMPL é software comercial, mas existe uma versão *student edition* disponível.

A possibilidade de usar uma biblioteca externa é explorado neste trabalho para resolver as equações diferenciais ordinárias.

Um breve exemplo é apresentado de seguida para o caso de quimioterapia `chemotherapy`.

Exemplo

Universidade do Minho

```
function chemotherapy;          # external function to be called
param Tumor_mass := log(100); # Tumor cells N=10^12*exp(-x1)
param Drug       := 0;          # Drug concentration in the body
param Cumulative := 0;          # Cumulative effect of the drug
param n := 4;                   # Number of times displacements (knots-1)
param h{1..n} := 21;            # Time displacements, could be variables.
var u{1..n+1};                  # Spline knots

maximize obj:            # maximize objective function
    chemotherapy(0, n, {i in 1..n} h[i], {i in 1..n+1} u[i],
       Tumor_mass, Drug, Cumulative);
subject to hbounds {i in 1..n}:   # constraints on time instants
    1<= h[i] <= 100;              # AMPL just checks for correctness
subject to ubounds {i in 1..n+1}: # constraints on drug delivery
    0.01<= u[i] <= 50;            # problem constraints
option solver mlocpsoa;   # mlocpsoa solver
option mlocpsoa_options 'mlocal=0 size=60 maxiter=1000';
         # global search, population size of 60, maximum of 1000 iterations
solve;                    # solve problem
```

Restrições adicionais

Restrições adicionais são facilmente incorporadas no modelo. Se, por exemplo, uma restrição na glicose total adicionada (t_G) fosse imposta, a restrição

$$\sum_{i=0}^{n-1} h_{i+1}(u_i + u_{i+1})/2 \leq t_G$$

pode facilmente ser considerada, acrescentando ao modelo

```
subject to totalfeed:
   sum {i in 0..n-1} (h[i+1]*(u[i]+u[i+1])/2)<=t_G;
```

e definindo o parâmetro `t_G` convenientemente.

Universidade do Minho

Alguns detalhes

- As equações diferenciais ordinárias são resolvidas pelo pacote de software CVODE.
- Em cada chamada à função `chemotherapy` é calculada a spline linear com os dados fornecidos e é retornado o valor da função objectivo. A expressão da função está pois codificada na biblioteca externa.
- MLOCPSOA significa *Multi-LOCal Particle Swarm Optimization Algorithm*.
- O MLOCPSOA possui uma interface com o AMPL, permitindo uma fácil e rápida codificação e resolução de problemas nesta linguagem de modelação.
- O NLOCPSOA permite a modificação de uma grande variedade de parâmetros do algoritmo. Os parâmetros usados neste trabalho são `size` para o tamanho da população (*default* $\min(6^n, 1000)$), `maxiter` para o número máximo de iterações permitido (*default* 2000) e `mlocal` para a procura multi-local (*default* 0 – procura global em vez de procura multi-local).

Alguns detalhes

- As equações diferenciais ordinárias são resolvidas pelo pacote de software CVODE.
- Em cada chamada à função `chemotherapy` é calculada a spline linear com os dados fornecidos e é retornado o valor da função objectivo. A expressão da função está pois codificada na biblioteca externa.
- MLOCPSOA significa *Multi-LOCal Particle Swarm Optimization Algorithm*.
- O MLOCPSOA possui uma interface com o AMPL, permitindo uma fácil e rápida codificação e resolução de problemas nesta linguagem de modelação.
- O NLOCPSOA permite a modificação de uma grande variedade de parâmetros do algoritmo. Os parâmetros usados neste trabalho são `size` para o tamanho da população (*default* $\min(6^n, 1000)$), `maxiter` para o número máximo de iterações permitido (*default* 2000) e `mlocal` para a procura multi-local (*default* 0 – procura global em vez de procura multi-local).

Universidade do Minho

Alguns detalhes

- As equações diferenciais ordinárias são resolvidas pelo pacote de software CVODE.
- Em cada chamada à função `chemotherapy` é calculada a spline linear com os dados fornecidos e é retornado o valor da função objectivo. A expressão da função está pois codificada na biblioteca externa.
- MLOCPSOA significa *Multi-LOCal Particle Swarm Optimization Algorithm*.
- O MLOCPSOA possui uma interface com o AMPL, permitindo uma fácil e rápida codificação e resolução de problemas nesta linguagem de modelação.
- O NLOCPSOA permite a modificação de uma grande variedade de parâmetros do algoritmo. Os parâmetros usados neste trabalho são `size` para o tamanho da população (*default* $\min(6^n, 1000)$), `maxiter` para o número máximo de iterações permitido (*default* 2000) e `mlocal` para a procura multi-local (*default* 0 – procura global em vez de procura multi-local).

Universidade do Minho

Alguns detalhes

- As equações diferenciais ordinárias são resolvidas pelo pacote de software CVODE.
- Em cada chamada à função `chemotherapy` é calculada a spline linear com os dados fornecidos e é retornado o valor da função objectivo. A expressão da função está pois codificada na biblioteca externa.
- MLOCPSOA significa *Multi-LOCal Particle Swarm Optimization Algorithm*.
- O MLOCPSOA possui uma interface com o AMPL, permitindo uma fácil e rápida codificação e resolução de problemas nesta linguagem de modelação.
- O NLOCPSOA permite a modificação de uma grande variedade de parâmetros do algoritmo. Os parâmetros usados neste trabalho são `size` para o tamanho da população (*default* $\min(6^n, 1000)$), `maxiter` para o número máximo de iterações permitido (*default* 2000) e `mlocal` para a procura multi-local (*default* 0 – procura global em vez de procura multi-local).

Alguns detalhes

Universidade do Minho

- As equações diferenciais ordinárias são resolvidas pelo pacote de software CVODE.
- Em cada chamada à função `chemotherapy` é calculada a spline linear com os dados fornecidos e é retornado o valor da função objectivo. A expressão da função está pois codificada na biblioteca externa.
- MLOCPSOA significa *Multi-LOCal Particle Swarm Optimization Algorithm*.
- O MLOCPSOA possui uma interface com o AMPL, permitindo uma fácil e rápida codificação e resolução de problemas nesta linguagem de modelação.
- O NLOCPSOA permite a modificação de uma grande variedade de parâmetros do algoritmo. Os parâmetros usados neste trabalho são `size` para o tamanho da população (*default* $\min(6^n, 1000)$), `maxiter` para o número máximo de iterações permitido (*default* 2000) e `mlocal` para a procura multi-local (*default* 0 – procura global em vez de procura multi-local).

Resultados numéricos

Universidade do Minho

Parâmetros

- Os resultados numéricos foram obtidos com cinco casos de estudo (quatro de fermentação semi-contínua e um de quimioterapia – administração de droga).
- Os distância entre instantes de tempo (h_i) são mantidos fixos e a melhor trajectória de alimentação foi aproximada usando os valores da função como variáveis.
- Foi usada uma população de tamanho 60 e um máximo de 1000 iteração (atingindo um máximo de 60000 avaliações da função objectivo).
- Uma vez que o algoritmo implementado no *solver* é estocástico foram efectuados 10 *runs* para cada problema e a melhor solução obtida é a indicada.

Universidade do Minho

Parâmetros

- Os resultados numéricos foram obtidos com cinco casos de estudo (quatro de fermentação semi-contínua e um de quimioterapia – administração de droga).
- Os distância entre instantes de tempo (h_i) são mantidos fixos e a melhor trajectória de alimentação foi aproximada usando os valores da função como variáveis.
- Foi usada uma população de tamanho 60 e um máximo de 1000 iteração (atingindo um máximo de 60000 avaliações da função objectivo).
- Uma vez que o algoritmo implementado no *solver* é estocástico foram efectuados 10 *runs* para cada problema e a melhor solução obtida é a indicada.

Universidade do Minho

Parâmetros

- Os resultados numéricos foram obtidos com cinco casos de estudo (quatro de fermentação semi-contínua e um de quimioterapia – administração de droga).
- Os distância entre instantes de tempo (h_i) são mantidos fixos e a melhor trajectória de alimentação foi aproximada usando os valores da função como variáveis.
- Foi usada uma população de tamanho 60 e um máximo de 1000 iteração (atingindo um máximo de 60000 avaliações da função objectivo).
- Uma vez que o algoritmo implementado no *solver* é estocástico foram efectuados 10 *runs* para cada problema e a melhor solução obtida é a indicada.

Parâmetros

- Os resultados numéricos foram obtidos com cinco casos de estudo (quatro de fermentação semi-contínua e um de quimioterapia – administração de droga).
- Os distância entre instantes de tempo (h_i) são mantidos fixos e a melhor trajectória de alimentação foi aproximada usando os valores da função como variáveis.
- Foi usada uma população de tamanho 60 e um máximo de 1000 iteração (atingindo um máximo de 60000 avaliações da função objectivo).
- Uma vez que o algoritmo implementado no *solver* é estocástico foram efectuados 10 *runs* para cada problema e a melhor solução obtida é a indicada.

Resultados

Universidade do Minho

Problema	NT	n	MLOCPSOA $\hat{J}(t_f)$	MLOCPSOA t_f	Anteriores $\hat{J}(t_f)$	Anteriores t_f
`penicillin` [1]	1	5	88.29	132.00	87.99	132.00
`ethanol` [1]	1	5	20379.50	61.20	20839.00	61.17
`chemotherapy` [1]	1	4	16.83	84.00	17.48	84.00
`hprotein` [2]	1	5	32.73	15.00	32.40	15.00
`rprotein` [3]	2	5	0.12	10.00	0.16	10.00

[1] 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*, 117:407–419, 2005.

[2] S. Park and W.F. Ramirez. Optimal production of secreted protein in fed-batch reactors. *AIChE Journal*, 34(9):1550–1558, 1988.

[3] J. Lee and W.F. Ramirez. Optimal fed-batch control of induced foreign protein-production by recombinant bacteria. *AIChE Journal*, 40(5):899–907, 1994.

Resultados

Universidade do Minho

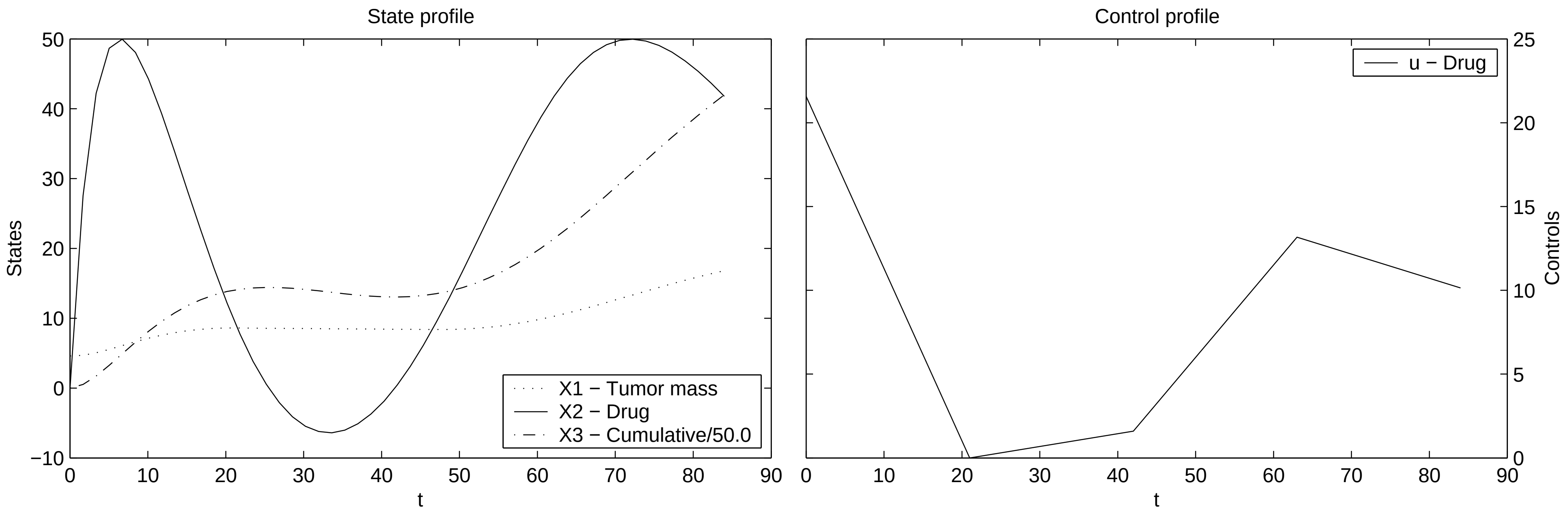
Permitindo que o espaçamento entre instantes de tempo seja variável e usando como função objectivo $\bar{J}(t_f, h) = (\hat{J}(t_f))/(\sum_{i=1}^{n} h_i)$ pode-se facilmente obter o cenário com a melhor razão por unidade de tempo.

	Tempo fixo		Tempo variável			
Problema	$\hat{J}(t_f)$	t_f	$\bar{J}(t_f)$	$\hat{J}(t_f)$	t_f	h_i^{max}
`penicillin`	88.29	132.00	0.92	76.16	83.20	60
`ethanol`	20229.50	61.20	604.20	14417.50	23.86	20
`chemotherapy`	16.83	84.00	0.70	8.06	11.52	25
`hprotein`	32.73	15.00	17.57	439.18	25	5
`rprotein`	0.12	10.00	2.38	59.61	25	5

Com as restrições adicionais $0.01 \leq h_i \leq h_i^{max}, i = 1, \ldots, n$.

Chemotherapy

Universidade do Minho



Universidade do Minho

Conclusões e trabalho futuro

- Proposta de um ambiente para a resolução de problemas de controlo óptimo
- Uso de colónias de partículas para problemas de controlo óptimo
- As colónias de partículas demonstraram ser uma ferramenta útil na resolução deste tipo de problemas

Universidade do Minho

Conclusões e trabalho futuro

- Proposta de um ambiente para a resolução de problemas de controlo óptimo
- Uso de colónias de partículas para problemas de controlo óptimo
- As colónias de partículas demonstraram ser uma ferramenta útil na resolução deste tipo de problemas

Universidade do Minho

Conclusões e trabalho futuro

❖ Conclusões e trabalho futuro

Conclusões e trabalho futuro

- Proposta de um ambiente para a resolução de problemas de controlo óptimo
- Uso de colónias de partículas para problemas de controlo óptimo
- As colónias de partículas demonstraram ser uma ferramenta útil na resolução deste tipo de problemas

Universidade do Minho

Conclusões e trabalho futuro

❖ Conclusões e trabalho futuro

Conclusões e trabalho futuro

- Proposta de um ambiente para a resolução de problemas de controlo óptimo
- Uso de colónias de partículas para problemas de controlo óptimo
- As colónias de partículas demonstraram ser uma ferramenta útil na resolução deste tipo de problemas

Como investigação futura tenciona-se usar splines cúbicas em vez de splines lineares para aproxima as trajectórias.

FIM

Universidade do Minho

email: aivaz@dps.uminho.pt

Web http://www.norg.uminho.pt/aivaz

email: ecferreira@deb.uminho.pt

Web http://www.deb.uminho.pt/ecferreira

Case studies

Fed-batch fermentor for penicillin

Universidade do Minho

Case studies
- ❖ Penicillin
- ❖ Ethanol
- ❖ Chemotherapy
- ❖ Protein(h)
- ❖ Protein(r)

The optimization problem (in (P) formulation) is:

$$
\begin{aligned}
&\max_{u(t)} \; J(t_f) \equiv x_2(t_f)x_4(t_f) \\
s.t.\quad & \dot{x}_1 = h_1 x_1 - u x_1/(500x_4), \;\; \dot{x}_2 = h_2 x_1 - 0.01x_2 - u x_2/(500x_4) \\
& \dot{x}_3 = -(h_1 x_1)/0.47 - h_2 x_1/1.2 - 0.029x_1x_3/(0.0001 + x_3) + \\
& \qquad + u(1 - x_3/500)/x_4, \;\; \dot{x}_4 = u/500 \\
& 0 \le x_1(t) \le 40, \;\; 0 \le x_3(t) \le 25, \;\; 0 \le x_4(t) \le 10, \;\; 0 \le u(t) \le 50, \\
& \forall t \in [t_0, t_f]
\end{aligned}
$$

with

$h_1 = 0.11(x_3/(0.006x_1 + x_3))$ and $h_2 = 0.0055(x_3/(0.0001 + x_3(1 + 10x_3))$

where x_1, x_2 and x_3 are the biomass, penicillin and substrate concentrations (g/L), and x_4 is the volume (L). The initial conditions are $x(t_0) = (1.5, 0, 0, 7)^T$.

Fed-batch reactor for ethanol production

Universidade do Minho

Case studies
- ❖ Penicillin
- ❖ Ethanol
- ❖ Chemotherapy
- ❖ Protein(h)
- ❖ Protein(r)

The optimization problem is:

$$\max_{u(t)} \; J(t_f) \equiv x_3(t_f)x_4(t_f)$$

$$s.t. \quad \dot{x}_1 = g_1 x_1 - u x_1/x_4, \;\; \dot{x}_2 = -10 g_1 x_1 + u(150 - x_2)/x_4, \;\; \dot{x}_4 = u$$

$$\dot{x}_3 = g_2 x_1 - u x_3/x_4, \;\; 0 \leq x_4(t_f) \leq 200, \;\; 0 \leq u(t) \leq 12, \;\; \forall t \in [t_0, t_f]$$

with

$$g_1 = (0.408/(1 + x_3/16))(x_2/(0.22 + x_2))$$

$$g_2 = (1/(1 + x_3/71.5))(x_2/(0.44 + x_2))$$

where x_1, x_2 and x_3 are the cell mass, substrate and product concentrations (g/L), and x_4 is the volume (L). The initial conditions are $x(t_0) = (1, 150, 0, 10)^T$.

Drug scheduling for cancer chemotherapy

Universidade do Minho

The optimization problem is:

$$\max_{u(t)} \; J(t_f) \equiv x_1(t_f)$$

$$s.t. \quad \dot{x}_1 = -k_1 x_1 + k_2(x_2 - k_3) \times H\{x_2 - k_3\}$$

$$\dot{x}_2 = u - k_4 x_2, \quad \dot{x}_3 = x_2$$

$$x_2(t) \le 50 \;\; x_3(t) \le 2.1 \times 10^3, \quad 0 \le u(t), \quad \forall t \in [t_0, t_f]$$

with $H\{x_2 - k_3\} = 1$ if $x_2 \ge k_3$ and $H\{x_2 - k_3\} = 0$ if $x_2 < k_3$, where the tumor mass cells is given by $N = 10^{12} \times exp(-x_1)$, x_2 is the drug concentration in the body in drug units [D] and x_3 is the cumulative effect of the drug. The parameters are: $k_1 = 9.9 \times 10^{-4}$days, $k_2 = 8.4 \times 10^{-3}$days^{-1}[D^{-1}], $k_3 = 10$[D^{-1}] and $k_4 = 0.27$days^{-1}. The initial conditions are $x(t_0) = (\ln(100), 0, 0)^T$.

Some extra constraints are imposed as there should be at least a 50% reduction in the size of the tumor every three weeks. The treatment period considered is 84 days and therefore the extra constraints are $x_1(21) \ge \ln(200)$, $x_1(42) \ge \ln(400)$ and $x_1(63) \ge \ln(800)$.

Fed-batch bioreactor for protein production

Universidade do Minho

Case studies
- ❖ Penicillin
- ❖ Ethanol
- ❖ Chemotherapy
- ❖ Protein(h)
- ❖ Protein(r)

The optimization problem is:

$$\max_{u(t)} \; J(t_f) \equiv x_4(t_f) x_5(t_f)$$

$$s.t. \quad \dot{x}_1 = \mu x_1 - D x_1, \quad \dot{x}_2 = -7.3 \mu x_1 - D(x_2 - x_2^0)$$

$$\dot{x}_3 = f_P x_1 - D x_3, \quad \dot{x}_4 = \chi (x_3 - x_4) - D x_4, \quad \dot{x}_5 = u$$

$$0 \leq u(t) \leq 10, \quad \forall t \in [t_0, t_f]$$

with

$$\mu = 21.87 x_2 / ((x_2 + 0.4)(x_2 + 62.5)), \quad f_P = x_2 exp(-5 x_2)/(x_2 + 0.1)$$

$$\chi = 4.75 \mu / (0.12 + \mu), \quad D = u / x_5$$

where x_1, x_2, x_3 and x_4 are the biomass, glucose, total protein and secreted protein concentrations (g/L), and x_5 is the volume (L). The parameter x_2^0 is 20g/L and the initial conditions are $x(t_0) = (1.0, 5.0, 0.0, 0.0, 1.0)^T$.

Fed-batch fermentation for protein

Universidade do Minho

The optimization problem is:

$$\max_{u(t)} \ J(t_f) \equiv x_3(t_f)x_7(t_f)/Q - \int_{t_0}^{t_f} u_2(\tau)x_4^F \, d\tau$$

$$\begin{aligned}
s.t. \quad & \dot{x}_1 = \mu x_1 - D x_1, \quad \dot{x}_2 = -Y^{-1}\mu x_1 - D x_2 + u_1 x_2^F / x_7 \\
& \dot{x}_3 = R_{fp} x_1 - D x_3, \quad \dot{x}_4 = -D x_4 + u_2 x_4^F / x_7 \\
& \dot{x}_5 = -a_1 x_5, \quad \dot{x}_6 = a_2(1 - x_6), \quad \dot{x}_7 = u_1 + u_2 \\
& 0 \le u_1(t) \le 1, \quad 0 \le u_2(t) \le 1, \quad \forall t \in [t_0, t_f]
\end{aligned}$$

with

$$\mu = 0.407\psi(x_5 + 0.22x_6/(0.22 + x_4)), \ R_{fp} = 0.095\psi(0.0005 + x_4)/(0.022 + x_4)$$

$$D = (u_1 + u_2)/x_7, \quad \psi = x_2/(0.108 + x_2 + x_2^2/14814.8)$$

$$a_1 = a_2 = 0.09x_4/(0.034 + x_4)$$

where $Y = 0.51$ is the growth yield coefficient, $Q = 5$ is the ratio of protein value to inducer cost, $x_2^F = 100.0$g/L, $x_4^F = 4.0$g/L, x_1 is the biomass (g/L), x_2, x_3, and x_4 are the glucose, protein and inducer concentrations (g/L), x_5 and x_6 are the inducer shock and inducer recovery factors, and x_7 is the volume (L). The initial conditions are $x(t_0) = (0.1, 40, 0.0, 0.0, 1.0, 0.0, 1.0)^T$.