

SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
FAKULTET KEMIJSKOG INŽENJERSTVA I TEHNOLOGIJE
SVEUČILIŠNI PREDDIPLOMSKI STUDIJ

Marina Sirotković

OPTIMIRANJE PROIZVODNJE BIOETANOLA
UPOTREBOM GENETSKOG ALGORITMA

ZAVRŠNI RAD

Voditelj rada: dr.sc. Bruno Zelić, izv. prof.

Članovi ispitne komisije: dr.sc. Bruno Zelić, izv. prof. (mentor)

dr.sc. Nenad Bolf, docent

dr.sc. Vanja Kosar, docent

Zagreb, srpanj 2008.

SAŽETAK

Najveća količina bioetanolâ danas otpada na njegovu primjenu kao biogoriva. Zbog brojnih prednosti pred fosilnim gorivima koji su ne samo ekološke već i ekonomske i energetske prirode, sve se veća važnost poklanja proizvodnji bioetanolâ iz razliĉitih izvora.

U ovom radu je optimiran proces enzimske hidrolize škroba, odnosno proces proizvodnje glukoze primjenom genetskog algoritma. Proizvodnja glukoze jedan je od koraka u procesu dobivanja bioetanolâ. Genetski algoritam je heuristiĉka metoda optimiranja koja oponaša prirodni evolucijski proces, te ga primjenjuje u traženju optimalnog rješenja zadanog problema.

Pomoću programskih paketa GALOP i SCIENTIST provedeno je optimiranje početnih uvjeta procesa enzimske hidrolize škroba, odnosno optimiranje početnih koncentracija škroba, enzima Liquozyme i Dextrozyme, i vremena u svrhu dobivanja maksimalnog iskorištenja na glukozi i konverzije škroba. Pritom je razvijen programski kod, u programskom paketu SCIENTIST, s kojim su provedene simulacije postavljenog matematiĉkog modela procesa. U programskom paketu GALOP definirani su parametri procesa koji su optimirani (koncentracija škroba, oba enzima i vrijeme), njihovo područje optimiranja (donja i gornja granica, te korak) i funkcije cilja (iskorištenje na glukozi i konverzija škroba). Prema planu pokusa dobivenom u GALOP-u, provedene su simulacije matematiĉkog modela procesa, a rezultati procesa su korištenâ u ciklusima selekcije, reprodukcije i manipulacije genetskog algoritma u svrhu kreiranja novog plana pokusa. Određene su optimalne početne vrijednosti koncentracija škroba $c_s = 3 \text{ mmol dm}^{-3}$, enzima Dextrozyme $c_{\text{Dextrozyme}} = 0,055 \text{ mmol dm}^{-3}$ i Liquozime $c_{\text{Liquozyme}} = 0,0085 \text{ mmol dm}^{-3}$ te vremena provedbe procesa $t = 540 \text{ min}$. Pri ovim optimalnim uvjetima dobivene su vrijednosti iskorištenje na glukozi $Y = 0,3631$ i konverzija škroba $X = 0,9998$.

Ključne rijeĉi: genetski algoritam, bioetanol, enzimska hidroliza škroba, optimiranje, matematiĉki model procesa

ABSTRACT

Today the largest amount of bioethanol is used in its application as biofuel. Because of numerous advantages over fossil fuels which are not just environmental but and economic and energy nature, importance of production of bioethanol is every day larger.

In this research, the process of starch enzyme hydrolysis, or manufacturing process of glucose, was optimized using genetic algorithm. Production of glucose is one step in the process of getting the bioethanol. Genetic algorithm is a heuristic optimization method which imitates the natural evolutionary process, and it uses it in searching for optimal solution of assigned problem.

Using application packages GALLOP and SCIENTIST, optimization of initial conditions of starch enzyme hydrolysis or finding out optimal initial concentrations of starch, enzymes Liquozyme and Dextrozyme and the time, was performed for the purpose of getting maximum utilization and conversion. In this matter, it was necessary to develop the program code, in application package SCIENTIST, for simulation of developed mathematical process model. In program package GALOP optimized process parameters (concentrations of starch, both enzyme and time), their optimization area (lower and upper border, and the step) and target functions (utilization and conversion) were defined. According to experimental plan developed in GALOP, simulations of mathematical process model were performed, and process results were used in cycle of selection, reproduction and manipulation of genetic algorithm in the purpose of creating new experimental plan. Optimal initial concentration values of starch $c_s = 3 \text{ mmol dm}^{-3}$, enzyme Dextrozyme $c_{\text{Dextrozyme}} = 0,055 \text{ mmol dm}^{-3}$ and Liquozime $c_{\text{Liquozyme}} = 0,0085 \text{ mmol dm}^{-3}$, and process time $t = 540 \text{ min}$ were gotten. Finally achieved yield and conversion values are $Y = 0,3631$ and $X = 0,9998$.

Key words: genetic algorithm, bioethanol, starch enzyme hydrolysis, optimization

SADRŽAJ

1. UVOD.....	1
2. OPĆI DIO.....	2
2.1 Bioetanol	2
2.1.1 Proizvođači bioetanola	5
2.2 Proces proizvodnje bioetanola	7
2.2.1 Matematički model enzimske hidrolize škroba.....	8
2.3 Genetski algoritam.....	10
2.3.1 Razvoj genetskog algoritma	10
2.3.2 Genetski algoritam.....	12
2.3.3 Prikaz rješenja	14
2.3.4 Inicijalizacija i uvjet završetka	14
2.3.5 Funkcija usklađenosti (<i>fitness function</i>)	15
2.3.6 Selekcija	17
2.3.7 Analogija <i>roulette wheel parent selection</i>.....	18
2.3.8 Genetski operatori	19
<i>2.3.8.1 Križanje.....</i>	<i>20</i>
<i>2.3.8.2 Mutacija</i>	<i>20</i>
2.3.9 Parametri algoritma	21
2.3.10 Rad s genetskim algoritmom.....	22

3. METODE	23
3.1 Metoda Runge-Kutta IV	23
3.2 Simulacija procesa u SCIENTIST-u	24
3.3 Optimiranje procesa pomoću programskog paketa GALOP	26
4. REZULTATI I RASPRAVA	27
5. ZAKLJUČAK	43
6. LITERATURA	44
7. POPIS OZNAKA	45
8. PRILOZI	47

Životopis

1. UVOD

Najveća količina etanola koristi se kao biogorivo za pogon motornih vozila. Prema istraživanjima, od svih zagađivača okoliša u R. Hrvatskoj, motorna vozila u ukupnom onečišćenju sudjeluju sa više od 50%. U svijetu oko 21% otpadnih plinova dolazi iz prometa. No razlozi za korištenje bioetanola nisu samo ekološke, već i ekonomske te energetske prirode. Osim što se njegovom upotrebom smanjuje emisija stakleničkih plinova, smanjuje se i ovisnost društva o nafti čije se preostale rezerve sve teže koriste te je posljedično sve skuplja. Dodatno, proizvodnjom bioetanola iz različitih prirodnih izvora, ostvaruje se zamjena fosilnih goriva, iz sporednih proizvoda njegove proizvodnje se ostvaruju raznoliki prihodi, potiče se zapošljavanje u ruralnim područjima te ostvaruje energetska samodostatnost. Brazil se zahvaljujući proizvodnji bioetanola oslobodio uvoza nafte te je, s godišnjom proizvodnjom od oko 16 milijuna litara bioetanola, uz SAD, sa 16,1 milijun litara, vodeća zemlja u svijetu u proizvodnji bioetanola. ^[4]

Uzevši u obzir nedostatke fosilnih goriva, nastajanje stakleničkih plinova prilikom njihova izgaranja, poremećaje u opskrbi naftom i ograničene rezerve, jasni su razlozi za sve rasprostranjeniju primjenu jeftinog, obnovljivog i učinkovitog goriva kao što je bioetanol.

Bioetanol se proizvodi fermentacijom šećera ili materijala koji se mogu prevesti u šećere, kao što su škrob i celuloza. Proces proizvodnje bioetanola sastoji se od nekoliko stupnjeva koji uključuju hidrolizu škroba u šećere, fermentaciju šećera u etanol i destilaciju radi postizanja željene čistoće etanola.

Pri razvoju bioprocasa, pa tako i proizvodnje bioetanola, treba provesti optimizaciju početnih procesnih uvjeta. Za to je potrebno pronaći odgovarajuću optimizacijsku metodu jer neke karakteristike procesa poput velikog broja parametara mogu utjecati na uspješnost metode u pronalaženju globalnog optimuma procesa. ^[1]

Postoje dva tipa optimizacijskih metoda: statičke i stohastičke. Genetski algoritam, koji se koristi u ovom radu, je primjer stohastičke optimizacijske metode temeljen na principima evolucije. Analogija između genetskog algoritma i evolucijskog procesa očituje se u procesu selekcije i genetskim operatorima. U prirodi jedinka koja je najbolje prilagođena ima najveću vjerojatnost preživljavanja i razmnožavanja, a time i prenošenja svog genetskog materijala na

potomke. Selekcijom se odabiru dobre jedinke koje se prenose u sljedeću populaciju, a manipulacijom genetskog materijala poboljšavaju se svojstva i karakteristike novih jedinki. U prirodi se takav ciklus selekcije, reprodukcije i manipulacije genetskim materijalom ponavlja se sve do odumiranja promatrane vrste. Prilikom optimiranja nekog procesa genetskim algoritmom ciklusu selekcije, reprodukcije i manipulacije ponavljaju se sve do postizanja optimuma prethodno postavljene funkcije cilja. Genetski algoritam se uspješno primjenjuje u optimiranju problema s velikim brojem parametara, a neprikladan za pronalaženje optimuma procesa s malim brojem bitnih procesnih veličina. Postupak primjene genetskog algoritma, kao i svake druge stohastičke metode može se podijeliti u nekoliko stupnjeva

(1) stvaranje prvotnog eksperimentalnog plana-generacije,

(2) definiranje funkcija cilja,

(3) stvaranje novog eksperimentalnog plana-generacija uz prenošenje najboljih karakteristika prethodne. Genetski algoritam često se upotrebljava i za eksperimentalnu optimizaciju, ali također i za procjenu parametara nelinearnih sustava. ^[1]

U ovom radu se provodi optimizacija enzimske hidrolize škroba upotrebom genetskog algoritma s ciljem dobivanja maksimalne konverzije škroba i iskorištenja na glukozu koje su postavljene kao funkcije cilja. Početni parametri koji se optimiranju su koncentracija škroba, enzima Dextrozyme i Liquozyme te vrijeme. U tu svrhu primijenjeni su programski paketi Scientist i GALOP.

2. TEORIJSKI DIO

2.1 Bioetanol

Bioetanol je bezbojna, biorazgradiva, niskotoksična kapljevina koja u slučaju nezgode izaziva mala onečišćenja. Uglavnom se dobiva iz žitarica, kukuruza i pšenice, krumpira i šećerne trske, tj. iz biljaka u kojima ima šećera, škroba i celuloze. Zanimljivo je i korisno znati da se osim iz zrna kukuruza bioetanol može dobiti i iz stabljike što povećava produktivnost procesa proizvodnje bioetanola po jedinici obradive površine.

Tablica 2.1 *Prinos etanola iz raznih sirovina* ^[10]

sirovina	prinos etanola, dm ³ /t	prinos sirovine, t/ha	prinos alkohola, t/ha godišnje	energija,GJ/ha godišnje
šećerna trska	70	50	3500	1350
slatki sirak	86	35	3010	945
kukuruz	370	6	2200	162
drvo	160	20	3200	540

Iz tablice 2.1 se vidi da je najveći prinos bioetanola po hektaru godišnje dobiven njegovom proizvodnjom iz šećerne trske.

Bioetanol se koristi za pogon motornih vozila i to najčešće u pet i desetpostotnim mješavinama s benzinom, a može se koristiti i čisti. Prilikom dodavanje više od 18 posto bioetanola u benzin, te za upotrebu čistog bioetanola treba napraviti manje preinake na motorima automobila starijih od deset godina. Trenutna zakonska regulativa u Hrvatskoj dozvoljava miješanje 5% bioetanola s benzinom. ^[10]

Glavna prednost bioetanola u odnosu na fosilna goriva je smanjenje neto emisije stakleničkih plinova. Uporabom 100 % bioetanola emisije bi se, u usporedbi s primjenom običnih fosilnih goriva, smanjile za 50-60 %, i to s obzirom na zatvoreni "životni krug" goriva. Pri uporabi mješavina korist je, naravno, manja, primjerice 5%-na mješavina bi neto emisije

smanjila za približno 2,5-3 %. Kao i kod biodizelskog goriva pozitivni utjecaji na klimatske promjene često su ovisni o osnovnim sirovinama iz kojih se etanol proizvodi. 50-60 % smanjenje emisija stakleničkih plinova uzrokovao bi bioetanol dobiven iz šećerne repe ili pšenice. Ako se za proizvodnju bioetanola koriste celulozni materijali, neto smanjenje emisija stakleničkih plinova bi bilo veće od 75. Uporaba bioetanola bez sumnje može pripomoći ublažavanju klimatskih promjena. Bioetanol može smanjiti i emisije ispušnih plinova cestovnih vozila, iako njegova stvarna učinkovitost oscilira s obzirom na tip vozila i značajke goriva. ^[5]

S obzirom na benzin bioetanol je:

- kvalitetniji jer ga karakterizira veći oktanski broj (približno 106) što znači da je i veća otpornost na detonantno izgaranje (detonantno izgaranje je pojava kad prije preskakanja iskre (kod otto motora) dolazi do samozapaljenja smjese, odnosno do nekontrolirane eksplozije (detonacije)),
- jeftiniji je, cijena u svijetu trenutno iznosi 4,4 kn/L u odnosu na benzin koja je oko 9 kn/L,
- ispušni plinovi nemaju tako neugodan miris i sadrže manje krutih čestica

Tablica 2.2 *Usporedba svojstava bioetanola i benzina* ^[2]

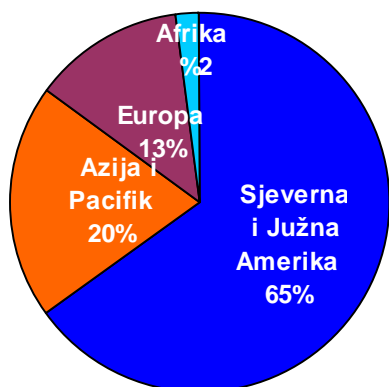
svojstvo	Bioetanol	benzin
gustoća, kg/m ³	789	720 - 750
ogrjevnost, MJ/kg	21,3 - 29,7	32,0 - 46,47
temperatura vrenja kod 1 bar, °C	7,5	30,23
oktanski broj	106	91 - 100

2.1.1 Proizvođači bioetanola

Prema podacima iz 2006. SAD je najveći proizvođač bioetanola (proizvedeno oko 17,4 milijardi litara) dok je Brazil na drugom mjestu sa nešto manjom proizvodnjom (oko 17 milijardi litara). Skupa čine dvije trećine ukupne proizvodnje tog biogoriva.

U Brazilu, gdje je sve više zastupljena proizvodnja bioetanola iz šećerne trske, potrošnja bioetanola ima udio od preko 18 % u ukupnoj potrošnji goriva. Država je godinama imala problem ovisnosti o uvozu nafte, koji je, zahvaljujući intenzivnom programu proizvodnje biogoriva, konačno riješen. Proizvodnja se odvija na površini od oko 5 milijuna hektara, što je tek 5 % od ukupne raspoložive poljoprivredne površine Brazila. Ovogodišnje istraživanje brazilske vlade pokazalo je da Brazil ima mogućnost za 20 godina nadomjestiti 10 % ukupne potrošnje goriva, a projektom se planira povećanje proizvodnje do 15 puta, čime bi, bez potrebe za ugrožavanjem Amazonske prašume, šećernom trskom bilo zasađeno oko 20 milijuna hektara zemlje. SAD se često, što se tiče proizvodnje bioetanola, kritizira zbog visokih iznosa subvencija, koje su rezultirale da se poljoprivredna površina koja bi se trebala koristiti za proizvodnju hrane, koristi za uzgoj poljoprivrednih kultura za proizvodnju bioetanola, čime se za ostvarenje većih prinosa koristi veća količina pesticida i umjetnih goriva, što dodatno zagađuje tlo. Masovna proizvodnja bioetanola dovela je i do poremećaja na tržištu žitarica, što dovodi do rasta njihovih cijena. ^[3]

Prema podacima iz 2006. ukupna godišnja proizvodnja u EU je oko 1.186.000 t što predstavlja udio od 19,5% u proizvodnji biogoriva. Najveći proizvođač je Španjolska s oko 317.000 t proizvedenog etanola godišnje. Najveći porast u odnosu na prethodnu godinu doživjele su Njemačka i Francuska sa povećanjem proizvodnje od 263 odnosno 234 %. Za sve članice Europske Unije vrijedi Direktiva 2003/30/EC Europske komisije na temelju koje bi trebale ostvariti potrošnju od 5,75 % biogoriva u ukupnoj potrošnji goriva.

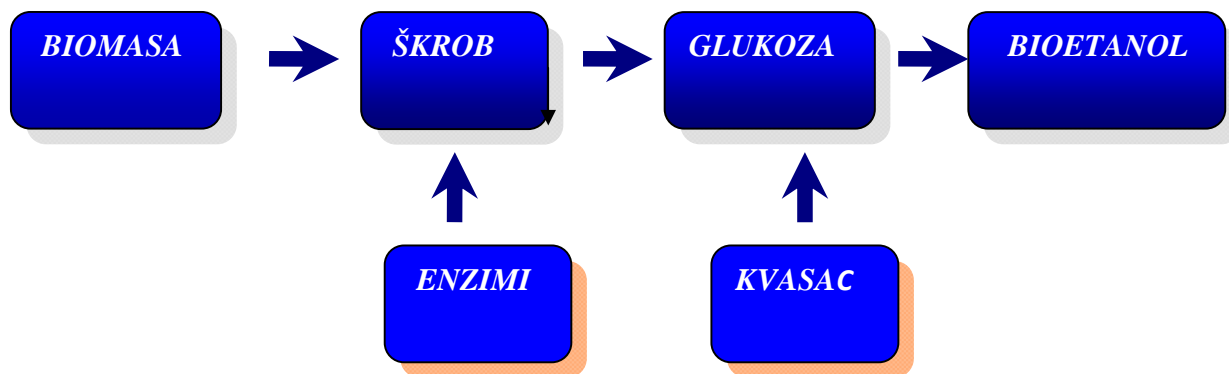


Slika 2.1 Zastupljenost proizvodnje bioetanola u svijetu

Iz slike 2.1 je vidljivo da je najveća proizvodnja bioetanola u Sjevernoj i Južnoj Americi (čak 65 %). Europa je tek na trećem mjestu sa zastupljenosti proizvodnje od 13 %.

Tvornica za proizvodnje bioetanola u Hrvatskoj još nema, ali se radi se na stvaranju i realizaciji projekata uvođenja proizvodnje i veće potrošnje bioetanola. Povećanom potrošnjom biogoriva, osim smanjenja štetnih tvari, potiče se i zapošljavanje, otvara se mogućnost povezivanja i međunarodne suradnje , te promovira ekološka i osviještena Hrvatska.

2.2 Proces proizvodnje bioetanola



Slika 2.2 *Pojednostavljeni shematski prikaz procesa proizvodnje bioetanola*

Proces proizvodnje bioetanola može se podijeliti u nekoliko stupnjeva. Prvi stupanj je proces hidrolize škroba do glukoze koji se u zadnje vrijeme najčešće provodi enzimskom hidrolizom koja uključuje procese likvefakcije i saharifikacije. Ta dva procesa razlikuju se u katalitičkom djelovanju enzima. Kod procesa likvefakcije koristi se amilaza koja nasumično cijepa alfa-1,4-glikozidne veze pri čemu nastaju niži ugljikohidrati, dok se kod procesa saharifikacije koristi glukoamilaza koja cijepa navedene veze sa kraja molekule pri čemu nastaje glukoza. Osim enzimskog procesa, hidroliza škroba može se provesti i kemijskim putem u prisustvu kiselina, ali takvi procesi se izbjegavaju zbog velike količine energije koje se troše na zagrijavanje. Dodatno se zbog korozivnog djelovanja kiselina moraju koristiti skupi materijali za izradu procesne opreme. ^[12]

U drugom stupnju glukoza fermentira u prisustvu kvasaca pri čemu nastaje 8 – 10 % etanol nakon 24 – 72 sata. ^[6]

Treći i ujedno i posljednji stupanj je destilacija dobivenog etanola u svrhu dobivanja što veće čistoće. Destilacijom se uglavnom dobiva 95 %-tni etanol, a za postizanje 99,8%-tne čistoće dodaje se benzen. Etanol je tek tad moguće miješati s benzinom.

2.2.1 Matematički model procesa enzimske hidrolize škroba

Modeliranje kao načelo reakcijskog inženjerstva ima veliku ulogu u enzimskim reakcija. Modeliranje nam omogućuje predviđanje ponašanja reakcijskog sustava, odabir početnih uvjeta provedbe procesa te odabir najpovoljnijeg tipa reaktora. Ovo je moguće uz uvjet da se pravilno odabere matematički model i procijene kinetički parametri. Matematički modeli pokazali su se veoma učinkovitim pri traženju optimalnih radnih uvjeta s ciljem optimiranja produktivnosti i konverzije supstrata. Prilikom optimiranja procesa može se predvidjeti tijek reakcije u određenim uvjetima, te se na taj način može uštedjeti vrijeme i novac potreban za provedbu istraživanja. Matematički modeli procesa se obično sastoje od kinetičkog modela i bilančnih jednadžbi koje ovise o tipu procesa. ^[12]

Za opis integriranog procesa enzimske razgradnje škroba likvefakcijom i saharifikacijom primijenjen je prethodno razvijeni matematički model koji sastoji od kinetičkog modela i bilančnih jednadžbi (2.1-2.6).

Kinetički model hidrolize škroba katalizirane enzimom Liquozyme prikazan je jednadžbom 2.1. Ovaj model uzima u obzir vremensku deaktivaciju enzima i inhibiciju razgradnje škroba glukozom i maltozom. Kinetički model hidrolize škroba katalizirane enzimom Dextrozyme prikazan je jednadžbom 2.2. Osim vremenske deaktivacije enzima ovaj kinetički model također uzima u obzir inhibiciju razgradnje škroba glukozom. Kinetički model razgradnje maltoze enzimom Dextrozyme prikazan je jednadžbom 2.3. Svi upotrijebljeni kinetički modeli temeljeni su na Michaelis-Menteničinoj kinetici.

Jednadžbe 2.4-2.6 prikazuju bilance tvari za škrob, glukozu i maltozu u kotlastom reaktoru. Škrob se troši enzimatskom hidrolizom uz prisustvo oba enzima, a glukoza nastaje enzimatskom razgradnjom škroba uz djelovanje oba enzima, te razgradnjom maltoze djelovanjem enzima Dextrozyme. Maltoza nastaje hidrolizom škroba uz enzim Liquozyme uz istovremenu potrošnju zbog djelovanja enzima Dextrozyme. ^[12]

$$r_1 = \frac{\varphi_{Liquozyme} \cdot V_m \cdot e^{-k_{d1}t} \cdot c_s}{K_m^s \cdot \left(1 + \frac{c_g}{K_i^g} + \frac{c_m}{K_i^m} \right) + c_s} \quad (2.1)$$

$$r_2 = \frac{\varphi_{Dextrozyme} \cdot V_m \cdot e^{-k_{a2} \cdot t} \cdot c_{\bar{s}}}{K_m^{\bar{s}} \cdot \left(1 + \frac{c_g}{K_i^g}\right) + c_{\bar{s}}} \quad (2.2)$$

$$r_3 = \frac{\varphi_{Dextrozyme} \cdot V_m \cdot c_m}{K_m^m + c_m} \quad (2.3)$$

$$\frac{dc_{\bar{s}}}{dt} = -r_1 - r_2 \quad (2.4)$$

$$\frac{dc_g}{dt} = Y_{g/\bar{s}1} \cdot r_1 + Y_{g/\bar{s}2} \cdot r_2 + r_3 \quad (2.5)$$

$$\frac{dc_m}{dt} = Y_{m/\bar{s}1} \cdot r_1 - r_3 \quad (2.6)$$

2.3. Genetski algoritam

2.3.1 Razvoj genetskog algoritma

Proučavajući evolucijske sustave šezdesetih godina dvadesetog stoljeća, nekolicina znanstvenika došla je na ideju da bi se evolucija mogla primijeniti kao optimizacijska metoda za inženjerske probleme. Ideja ovih pristupa bila je da se iterativno evoluiraju populacija (skup) potencijalnih rješenja određenog problema, koristeći operatore inspirirane genetskim manipulacijama i prirodnom selekcijom.^[10]

John H. Holland krajem 60-ih godina je počeo proučavati genetski algoritam. U to vrijeme bavio se proučavanjem adaptivnih umjetnih sustava, a genetski algoritam želio je iskoristiti u svom istraživanju. 70-ih je predstavio napredak kod genetskog algoritma u odnosu na „evolucijske“ strategije (optimizacijske metode koje su prethodile genetskom algoritmu). Genetski algoritam koriste operatore selekcije, križanja i mutacije za razliku od evolucijskih koje koriste samo mutaciju. Populacija može sadržavati i veći broj jedinki.

Danas se genetski algoritmi koriste za optimiranje procesa u mnogim inženjerskim područjima. Prednost genetskog algoritma je njegova jednostavnost i prilagodljivost velikom broju procesa. Najvažnija prednost je i mogućnost određivanja globalnog optimuma u prostoru s više lokalnih ekstrema. Genetski algoritmi nisu ovisni o nekoj početnoj točki, a sigurnost dobivenih rezultata povećava se postupkom ponavljanja procesa rješavanja.

Usporedno sa širenjem upotrebe genetskih algoritama rastu i naponi da se njihov rad pokuša svesti na teoretske osnove. No, kako su u osnovi heurističke metode, analiza rada genetskih algoritama sadrži složene proračune iz područja teorije vjerojatnosti i statistike, pa veliki dio načina rada genetskih algoritama još uvijek nije dovoljno kvalitetno teorijski opisan.^[6]

2.3.2 Genetski algoritam

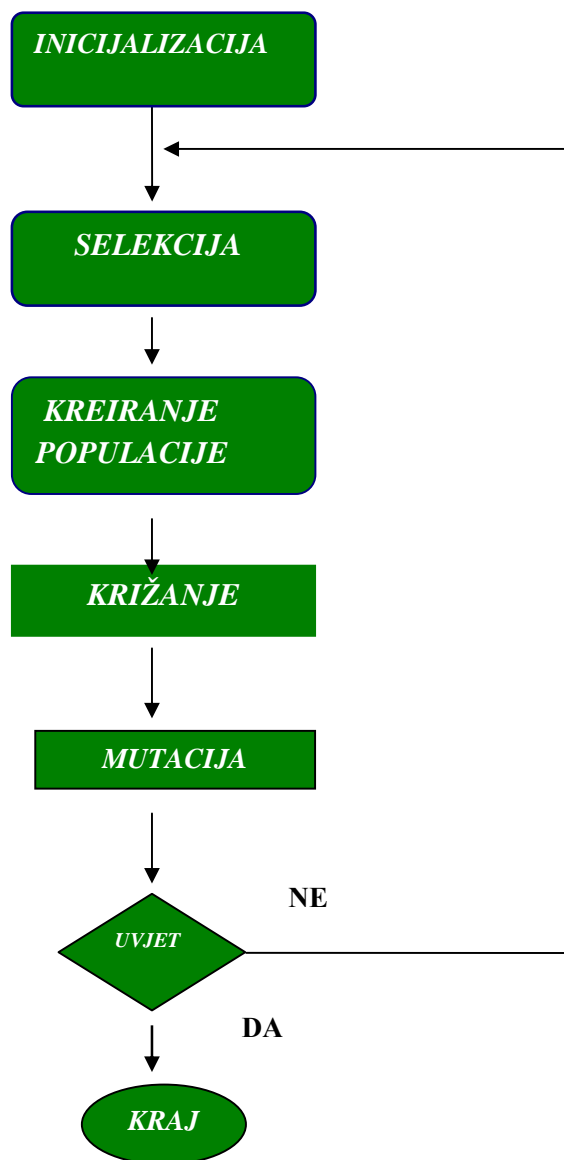
Genetski algoritmi kao heurističke metode optimiranja nastali su oponašanjem prirodne biološke evolucije.^[11] Za razliku od evolucije GA je robustan proces pretraživanja prostora rješenja. Analogija evolucije kao prirodnog procesa i genetskog algoritma kao metode optimiranja, očituje se u procesu selekcije i genetskim operatorima križanju i mutaciji. Mehanizam odabira nad nekom individuumom u evolucijskom procesu čine okolina i uvjeti u

prirodi. U genetskim algoritmima selekcija je sadržana u funkciji cilja, koja na odgovarajući način predstavlja problem koji se rješava. U prirodi jedinka koja je najbolje prilagođena uvjetima i okolini u kojoj živi ima najveću vjerojatnost preživljavanja i reprodukcije, a time i prenošenja svoga genetskog materijala na potomke.

U prirodi evolucija vrste nije potraga za rješenjem (jedinkom koja je najbolje prilagođena uvjetima u prirodi), već prilagođavanje postojeće populacije na nove uvjete. U genetskim algoritmima svaka individua predstavlja potencijalno rješenje problema koji se obrađuje pri čemu to može biti matematička funkcija, ali i plan rada neke tvrtke. Svaka je jedinka predstavljena u jednakom obliku (broj, niz, matrica itd.), a te jedinke se nazivaju kromosomi. Svakom rješenju pridjeljuje se određena mjera kvalitete (usklađenost, eng. *fitness*), dok se funkcija koja tu kvalitetu određuje naziva funkcija cilja ili funkcija usklađenosti (eng. *fitness function*). Iz prethodne (stare) populacije se formira nova populacija, izdvajanjem (selekcijom) prilagođenijih, odnosno boljih individua iz skupa postojećih. Neke individue nove populacije se podvrgavaju utjecajima genetskih operatora koji kreiraju nove individue kombinirajući osobine nekoliko jedinki. Takvim postupkom se postiže iz generacije u generaciju sve veća i veća prosječna dobrota (kvaliteta) populacije. Takav ciklus selekcije, reprodukcije i manipulacije genetskim materijalom individue se ponavlja dok nije zadovoljen uvjet zaustavljanja evolucijskog procesa, a najbolji član trenutne populacije predstavlja rješenje koje bi trebalo biti u blizini optimuma.

Stoga se za evolucijski proces kao i za genetski algoritam može ustanoviti da:

- postoji populacija individua,
- neke individue su bolje (bolje su prilagođene okolini),
- bolje jedinke imaju veću vjerojatnost preživljavanja i reprodukcije,
- svojstva jedinki su zapisana u kromosomima s pomoću genetskog koda,
- potomci nasljeđuju svojstva roditelja,
- nad individuom može djelovati mutacija.



Slika 2.3 *Pojednostavljena shema principa rada genetskog algoritma*

2.3.3 Prikaz rješenja

Izbor prikaza rješenja značajan je jer može bitno utjecati na učinkovitost genetskog algoritma. Jednostavni genetski algoritmi koriste binarni prikaz za koji se pokazalo da daje

najbolje rezultate u većini primjera gdje se može iskoristiti. Binarni sustav je sustav sa bazom 2 i za prikazivanje koristimo dvije znamenke 0 i 1. Primjer prikazivanja nekog broja, primjerice 25 je kako slijedi:

$$25 = 1 \cdot 2^4 + 1 \cdot 2^3 + 0 \cdot 2^2 + 0 \cdot 2^1 + 1 \cdot 2^0 = [11001]$$

Kod takvog izbora prikaza rješenja kromosom se prikazuje kao binarni vektor sa kodiranom vrijednošću $x \in [dg, gg]$. U takav vektor moguće je zapisati 2^n različitih kombinacija nula i jedinica, tj. moguće je zapisati bilo koji broj u intervalu $[0, 2^n - 1]$.^[11]

Binarni vektor $v(0) = [000\dots 0]$ predstavlja vrijednost $x = dg$ odnosno donju granicu, a vektor $v(2^n - 1) = [111\dots 1]$ predstavlja vrijednost $x = gg$ odnosno gornju granicu.

Ako je binarni broj $b \in [0, 2^{2^n} - 1]$ zapisan kao binarni vektor $v(b) = [B_{n-1}, B_{n-2}, \dots, B_1, B_0]$ gdje je $B_i = 0$ ili 1 vrijede jednadžbe 2.7 i 2.8 (x je realan ekvivalentan broj, a $d = (dg - gg)$ duljina intervala na kojem je definirana funkcija usklađenosti).

$$b = \sum_0^j b_j \cdot 2^n \quad (2.7)$$

$$x = dg + \frac{b}{(2^n - 1)}(gg - dg) \quad (2.8)$$

Binarni broj b za neki realan broj x određuje se na temelju formule (2.9). To je postupak kodiranja, dok je dekodiranje postupak pretvaranja binarnog broja u potencijalno rješenje x iz intervala $[dg, gg]$. Vrijednost x računa se prema formuli (2.8)

$$b = \frac{x - dg}{gg - dg} \cdot (2^n - 1) \quad (2.9)$$

Da bi znali koliko realan broj odstupa od točnog rješenja potrebno je poznavati preciznost p . Preciznost je definirana duljinom kromosoma odnosno brojem bitova (broj jedinica i nula).

Rješenje x je preciznosti p ako je zadovoljena nejednakost

$$n \geq \frac{\log[(gg - dg) \cdot 10^p + 1]}{\log 2} \quad (2.10)$$

2.3.4 Inicijalizacija i uvjet završetka

Prvi korak je kreiranje početne populacije jedinki. Ona može biti kreirana slučajnim odabirom iz domene problema ili je korisnik sam može kreirati. Daljnje stvaranje novih generacija se događa sve dok nije zadovoljen uvjet završetka koji se definira na početku. To može biti postizanje konačnog vremena, broja generacija odnosno postizanje zadanog broja iteracija. Ovisi o problemu koji se rješava i o uvjetima u kojima se problem rješava.

2.3.5 Funkcija usklađenosti (*fitness function*)

Funkcija usklađenosti je funkcija ocjene kvalitete pojedine individue koja se još naziva *fitness* funkcija ili funkcija cilja. ^[11] U najjednostavnijem slučaju ekvivalentna je funkciji f koja se optimira. Tada je funkcija usklađenosti definirana kao:

$$F(v) = f(x) \quad (2.11)$$

pri čemu je:

f – funkcija koju treba optimirati, odnosno ispitna funkcija,

v - binarni vektor koji predstavlja realni broj $x \in [dg, gg]$,

F - usklađenost.

Što je funkcija usklađenosti promatrane jedinice veća, individua ima veću vjerojatnost preživljavanja i križanja. Funkcija usklađenosti je ključ za proces selekcije budući ona treba vjerno opisivati domenu problema. U općenitom slučaju se na f -ju usklađenosti ne postavljaju ograničenja, mada je potrebno primijeniti određene transformacije kako bi se zadovoljili neki uvjeti koje može postavljati proces selekcije.

Postupak linearne transformacije (jednadžba 2.12) temelji se na vrednovanju individua po njihovoj usklađenosti, odnosno funkciji usklađenosti. Kromosom s najmanjom vrijednošću $f(x_i)$

ima vrijednost usklađenosti $\min F(v)$, a sljedeći po veličini je $\min F(v) + \text{korak}$ itd., pri čemu je veličina koraka zadani parametar algoritma.

$$F(v) = g(f(x)) \quad (2.12)$$

pri čemu je:

g – operator koji transformira funkciju f u ne-negativan broj.

U "dobrom" genetskom algoritmu, kroz generacije ukupna (jednadžba 2.13) i prosječna (jednadžba 2.14) funkcija usklađenosti populacije rastu. Ukupna i prosječna funkcija usklađenosti populacije definirani su izrazima:

$$F_u = \sum_{i=1}^n F(v_i) \quad (2.13)$$

pri čemu je:

$$\bar{F}_u = \frac{F_u}{n} \quad (2.14)$$

F_u – ukupna funkcija usklađenosti populacije,

\bar{F}_u – prosječna funkcija usklađenosti populacije,

n - veličina populacije.

2.3.6 Selekcija

Osnovna svrha selekcije je čuvanje i prenošenje dobrih svojstava na sljedeću populaciju. Selekcijom se odabiru dobre jedinke koje će sudjelovati u reprodukciji, čime se dobar genetski materijal čuva i prenosi na sljedeću populaciju dok loš genetski materijal odumire. ^[11] Pri tome je potrebno osigurati takav proces selekcije koji će i lošim individuama, koje mogu sadržavati i dobar genetski materijal, omogućiti da sudjeluju u reprodukciji kako proces selekcije ne bi rezultirao prebrzom konvergencijom algoritma u slučaju selekcije samo najboljih jedinki.

Genetske algoritme, s obzirom na vrstu selekcije, dijelimo na generacijske i eliminacijske. Kod generacijskog algoritma se procesom selekcije iz stare generacije stvara nova, a u slučaju eliminacijskog se praznina u populaciji nastala eliminacijom loših individua popunjava novim jedinkama. U generacijske genetske algoritme ubrajaju se jednostavna selekcija (*roulette wheel parent selection*) i turnirska selekcija.

Jednostavna selekcija generira novu populaciju koja ima jednak broj jedinki kao i prethodna populacija. Cilj jednostavne selekcije je odabir roditelja čija je vjerojatnost selekcije proporcionalna njihovoj funkciji usklađenosti.

Postupak je sljedeći:

- ako $f(x)$ poprima negativne vrijednosti, tada se dodaje pozitivna konstanta C ,

$$F(v) = f(x) + C \quad (2.15)$$

- tako da je $F(v) \geq 0$, za svaki $x \in [dg, gg]$.
- izračunaju se sve vrijednosti funkcija usklađenosti $F(v_i)$,
- izračuna se ukupna funkcija usklađenosti populacije prema jednadžbi (2.13),
- izračunaju se kumulativne funkcije usklađenosti q_k (jednadžba 2.16) za svaki kromosom tako da vjerojatnost za svaki kromosom v_k iznosi p_k (jednadžba 2.17):

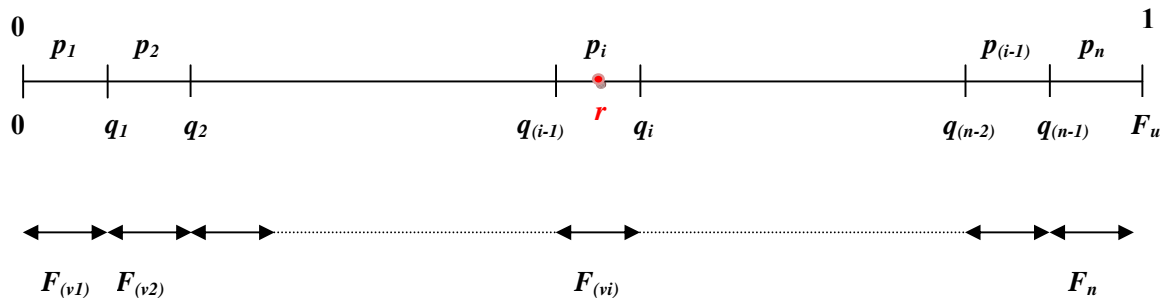
$$q_k = \sum_{i=1}^k F(v_i) \quad k = 1, 2, \dots, n \quad (2.16)$$

$$p_k = \frac{F(v_k)}{F_u} \quad (2.17)$$

Time se dobiva da je vjerojatnost selekcije, p_k , proporcionalna funkciji usklađenosti kromosoma, v_k , (jednadžba 2.18):

$$p_k \approx F(v_k) \quad (2.18)$$

Ako se unutar intervala $[0, F_u]$ nasumičnim odabirom izabere slučajni realni broj, r , koji pripada kromosomu, $r \in [q_{i-1}, q_i]$, tada se taj kromosom prenosi u sljedeću populaciju (slika 2.4).



Slika 2.4 Kumulativna usklađenost q_i i vjerojatnost selekcije p_i

Što je funkcija usklađenosti kromosoma veća, kromosom (individua) ima veću vjerojatnost preživljavanja i križanja, te pojavljivanja u sljedećim generacijama.

Nedostaci jednostavne selekcije su:

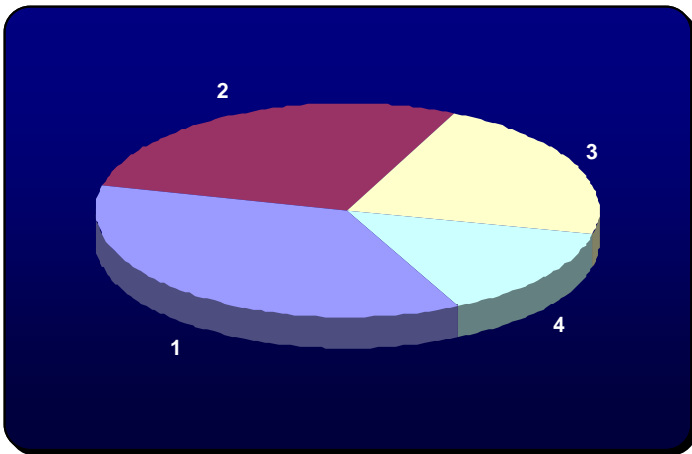
- funkcija $f(x)$ ne smije poprimati negativne vrijednosti, što se može riješiti transformacijama funkcije,
- ako funkcija $f(x)$ poprima velike vrijednosti za svaki x , prilikom selekcije će svi kromosomi imati jednaku vjerojatnost pojavljivanja u sljedećoj populaciji (svi su podjednako dobri i loši),
- pojavljivanje duplikata kromosoma što usporava algoritam.

2.3.7 Analogija *roulette wheel parent selection*

Jedna od metoda selekcije kojom se odabiru jedinke koje će sudjelovati u reprodukciji i na taj način omogućiti očuvanje i prenošenje dobrih svojstava na sljedeću populaciju jest *roulette wheel parent selection*.^[11]

Primjerice neka se sa Sum označi neki realni interval, koji može biti izražen kao suma funkcija usklađenosti individua ili kao suma vjerojatnosti selekcije individua. Tada se svaka individua unosi u interval u području $[0, Sum]$. Segment intervala kojeg će svaka individua zauzeti proporcionalna je veličini funkcije usklađenosti ili vjerojatnosti selekcije individue.

Što je veći segment intervala kojeg individua zauzima, odnosno što je veća funkcija usklađenosti ili vjerojatnost selekcije individue, to je veća i vjerojatnost da će individua biti izabrana, odnosno da će pri nasumičnom odabiranju brojeva iz intervala $[0, Sum]$ upravo biti odabran neki realni broj koji leži u dijelu segmenta intervala kojeg zauzima promatrana individua (slika 2.5).



$$F(v) = \frac{f(x_i)}{\sum_{i=1}^{N_{ind}} f(x_i)}$$

Slika 2.5 *Pojednostavljeni prikaz roulette wheel parent selection*

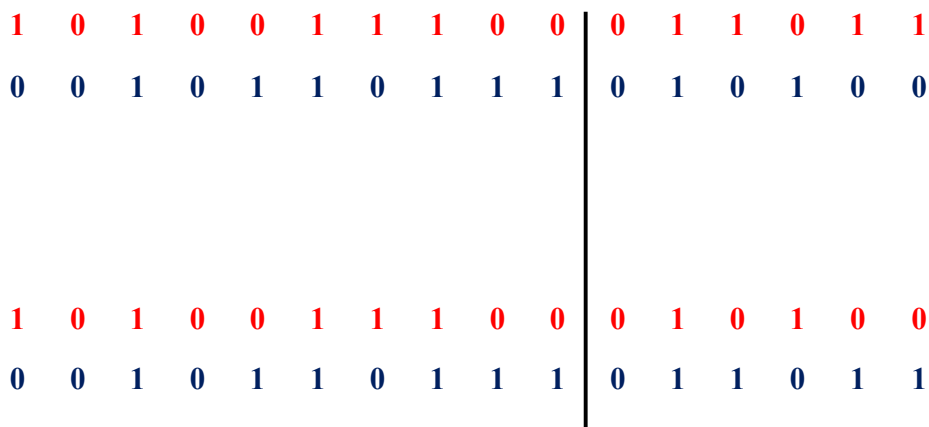
2.3.8 Genetski operatori

Uz selekciju, reprodukcija je druga važna značajka genetskog algoritma. Reprodukcija je razmnožavanje pomoću genetskog operatora križanja i mutacije. ^[11] *Dobre* jedinke odnosno jedinke koje su preživjele proces selekcije sada su izvrgnute procesu križanja. Može doći i do slučajne promjene gena - mutacije.

2.3.8.1 Križanje

Procesom križanja (*eng. crossover*) iz dvije jedinke (roditelji) nastaju jedna ili dvije nove jedinke (djeca) pri čemu djeca nasljeđuju svojstva svojih roditelja. Ako dolazi do križanja *dobrih* jedinki odnosno jedinki koje su preživjele proces selekcije, djeca će biti jednako *dobra* kao i roditelji ako ne i bolja.

Križanje je binarni operator koji može biti definiran s proizvoljnim brojem prekidnih točaka. Jednostavni genetski algoritam koristi križanje s jednom točkom prekida (slika 2.6). Kod takvog križanja slučajno se odabire ta jedna točka prekida, geni roditelja se zamijene i dobivaju se dva potomka.



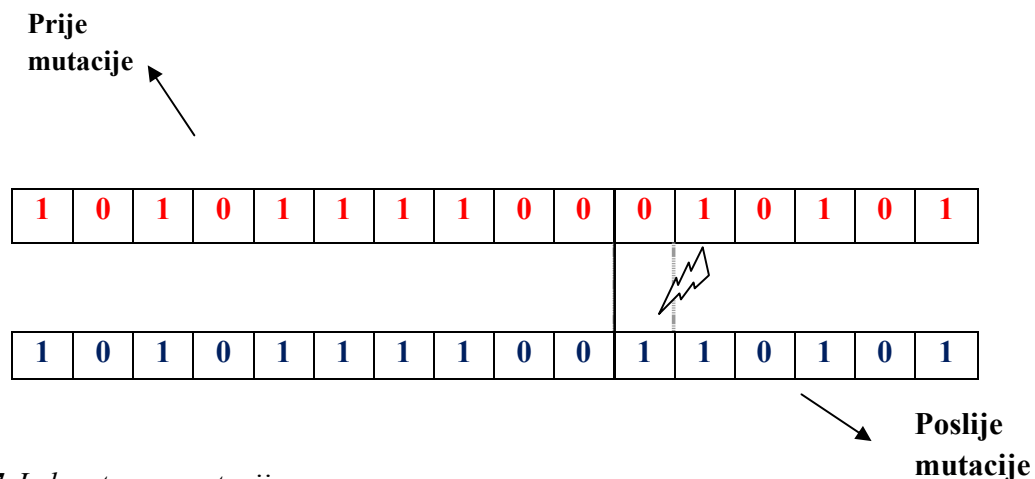
Slika 2.6 Binarni operator križanja s jednom točkom prekida.

Križanje još može biti i uniformno, segmentno i miješajuće. Vjerojatnost križanja predstavlja vjerojatnost da dijete naslijedi svojstva jednog roditelja.

Pretpostavlja se da je upravo operator križanja to što razlikuje genetski algoritam od drugih optimizacijskih metoda jer mutaciju možemo još pronaći i kod simuliranog kaljenja i evolucijske strategije.

2.3.8.2 Mutacija

Mutacija je proces slučajne promjene jednog ili više gena. Djeluje na svaku jedinku zasebno. Najjednostavniji oblik je jednostavna mutacija koja mijenja svaki bit kromosoma sa jednakom vjerojatnošću. Na slici 2.7 prikazana je jednostavna mutacija



Slika 2.7 Jednostavna mutacija

Uz jednostavnu postoje i miješajuća, potpuno miješajuća te invertirajuća miješajuća mutacija.

Osnovna uloga operatora mutacije je da se koristi pri pretraživanju prostora rješenja kao mehanizam za izbjegavanje lokalnih ekstrema i u obnavljanju izgubljenog genetskog materijala, čime se proširuje prostor rješenja koji se pretražuje. ^[11]

Vjerojatnost mutacije mora biti u intervalu $[0,1]$. Ako vjerojatnost mutacije teži k jedinici, tada se genetski algoritam pretvara u postupak slučajne pretrage prostora rješenja, a ako vjerojatnost mutacije teži k nuli postoji vjerojatnost da će genetski algoritam stati u nekom lokalnom optimumu. ^[11]

2.3.9 Parametri algoritma

Osnovni parametri genetskog algoritma su: veličina populacije, broj generacija ili iteracija, vjerojatnost križanja i vjerojatnost mutacije. ^[11] Za različite vrijednosti parametara

algoritama, genetski algoritam daje različite rezultate, te brže ili sporije dolazi do boljeg ili lošijeg rješenja. Optimiranje parametara genetskog algoritma je složen postupak i zahtjeva izvođenje velikog broja eksperimenata. Kako bi se riješio ovaj složen problem optimiranja parametara, može se realizirati tzv. genetski algoritam nad genetskim algoritmom.

Za optimiranje višedimenzijskih funkcija, genetski algoritmi trebaju posjedovati dvije važne karakteristike. Prva je sposobnost konvergiranja k optimumu, lokalnom ili globalnom, nakon pronalaženja područja u kojem se isti nalazi. Druga je karakteristika sposobnost da se konstantno istražuju nova područja problemskog prostora u potrazi za globalnim optimumom.

2.3.10 Rad s genetskim algoritmom

Za određeni optimizacijski problem koji želimo riješiti pomoću genetskog algoritma potrebno je odrediti:

- funkciju usklađenosti,
- selekciju (jednostavnu, turnirsku, eliminacijsku,...),
- predstavljanje (binarno, s bazom većom od 2,...),
- definirati uvjet završetka evolucijskog procesa (vrijeme, broj generacija,...),
- generacijski procjep (broj jedinki koje se direktno prenosi iz generacije u generaciju),
- genetske operatore,
 - križanje (s jednom ili više točaka prekida, ili posebno definirano),
 - mutaciju (jednostavna, miješajuća,...),
 - zamjenu gena.
- parametre,
 - veličinu populacije,
 - vjerojatnost križanja,
 - vjerojatnost mutacije.

Prilikom izbora genetskog algoritma kao optimizacijske tehnike potrebno je uzeti u obzir njegove brojne prednosti u odnosu na druge metode, primjerice:

- funkcija koju treba optimirati potpuno je proizvoljna tj. nema posebnih zahtjeva kao što su neprekinutost, derivabilnost, itd.,
- primjenjiv na veliki broj problema,
- struktura algoritma nudi velike mogućnosti nadogradnje i povećanja efikasnosti algoritma jednostavnim zahvatima (puno stupnjeva slobode),
- jednostavnim ponavljanjem postupka može se povećati pouzdanost rezultata,
- ako ne nađe rješenje (globalni optimum), daje nekakvo "dobro" rješenje koje može zadovoljiti,
- rezultat je skup rješenja, a ne jedno rješenje,
- rješava sve probleme koje se mogu predstaviti kao optimizacijski, bez obzira da li funkcija koju treba optimirati ima za argumente realne brojeve, bitove, znakove ili bilo koju vrstu informacije,
- jednostavna primjena na višedimenzionalnim (višedimenzionalnim) problemima,
- jednostavnost ideje i dostupnost programske podrške. ^[11]

Kao i sve druge optimizacijske tehnike postoje i slučajevi kada genetski algoritam treba izbjegavati, primjerice:

- teško se definira "dobra" funkcija usklađenosti na temelju f ,
- potrebno je prilagoditi genetski algoritam zadanim ograničenjima,
- česta potreba prilagodbe problema algoritmu,
- teško je postaviti "dobre" parametre (veliki utjecaj parametra na efikasnost),
- ne može se postići 100 %-tna pouzdanost rješenja,
- konvergencija je znatno sporija u odnosu na ostale numeričke metode,
- potrebno je posebno definirati genetske operatore za posebne vrste prikaza,
- zbog stohastičnosti nikad ne znamo prirodu nađenog rješenja,
- zbog izvođenja velikog broja računskih operacija genetski algoritam je spor, te se traži velika procesorska snaga.

3. METODE

3.1 Metoda Runge-Kutta IV

Runge-Kutta IV je numerička metoda za rješavanje diferencijalnih jednačbi 1.reda.

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y) \quad \text{odnosno } y' = f(x, y) \quad (3.1)$$

Početni uvjet je $y(x_0) = y_0$, a rješenje diferencijalne jednačbe (3.1) možemo napisati u obliku

$$y_{i+1} = y_i + (a_1k_1 + a_2k_2 + a_3k_3 + a_4k_4) \cdot h \quad (3.2)$$

Poznavajući vrijednosti $y = y_i$ za vrijednost x_i možemo pronaći $y = y_{i+1}$ za x_{i+1}

Za izvod Runge-Kutta metoda potrebno je proširiti Taylorov teorem na funkciju s dvije varijable.

$$y_{i+1} = y_i + \frac{dy}{dx} \Big|_{x_i, y_i} (x_{i+1} - x_i) + \frac{1d^2y}{2!dx^2} \Big|_{x_i, y_i} (x_{i+1} - x_i)^2 + \frac{1d^3y}{3!dx^3} \Big|_{x_i, y_i} (x_{i+1} - x_i)^3 + \frac{1d^4y}{4!dx^4} \Big|_{x_i, y_i} (x_{i+1} - x_i)^4 \quad (3.3)$$

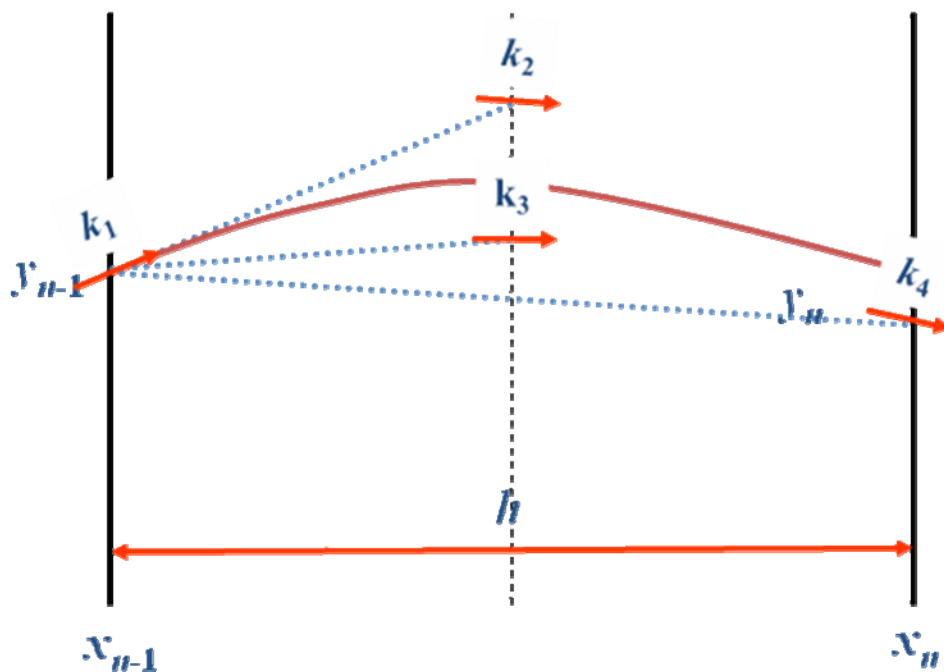
Poznavajući $\frac{dy}{dx} = f(x, y)$ i $x_{i+1} - x_i = h$ jednačba (3.3) poprima sljedeći oblik

$$y_{i+1} = y_i + f(x, y)h + \frac{1}{2!} f'(x_i, y_i)h^2 + \frac{1}{3!} f''(x_i, y_i)h^3 + \frac{1}{4!} f'''(x_i, y_i)h^4 \quad (3.4)$$

Na temelju jednačbi (3.3 i 3.4) dobivamo formule koje se najčešće koriste za dobivanje rješenja diferencijalnih jednačbi primjenom metode Runge-Kutta IV (jednačbe 3.5).

$$\begin{aligned} y_{i+1} &= y_i + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \cdot h \\ k_1 &= f(x_i, y_i) \\ k_2 &= f\left(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}k_1h\right) \\ k_3 &= f\left(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}k_2h\right) \\ k_4 &= f\left(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + k_3h\right) \end{aligned} \quad (3.5)$$

Runge-Kutta metoda je zamišljena da ima aproksimacijsku grešku višeg stupnja, ali i da za nju nije potrebno računati parcijalne derivacije funkcije $f(t, x)$, što je u fizikalnim simulacijama neizvedivo, jer se unaprijed ne zna buduće stanje sustava. ^[9]



Slika 3.1. Grafički prikaz metode Runge-Kutta IV

3.2. Simulacija matematičkog modela procesa u programskom paketu

SCIENTIST

Za simulaciju procesa enzimske hidrolize škroba u programskom paketu SCIENTIST (MicroMath®) razvijen je programski kod (prilog 8.1).. Programski kod sadrži kinetičke jednadžbe saharifikacije i likvefakcije škroba (jednadžbe 2.1 - 2.3) i bilančne jednadžbe integralnog procesa (2.4-2.6) kojima su opisane dinamičke promjene koncentracije škroba, glukoze i maltoze. Osim programskog koda potrebno je odrediti i definirati vrijednosti parametara i konstanti procesa. Pregled prethodno određenih parametara procesa integralne enzimske razgradnje škroba prikazan je u Tablici 3.1. Većina enzimskih reakcija, pa tako i ova, sadrže povećani broj parametara. Većina se parametara može odrediti pomoću metode početnih reakcijskih brzina. Princip je da izvodimo neovisna kinetička mjerenja odnosno ispituje se utjecaj samo jedne komponente na reakcijsku brzinu dok se utjecaj ostalih drži konstantnim. Tako se određuje i Michaelis-Menteničina konstanta enzima K_m i konstanta inhibicije za produkt reakcije na enzim K_i . Pri određivanju konstante inhibicije mijenja se koncentracija produkta, dok

se koncentracija supstrata drži stalnom. Nelinearnim ili linearnim regresijskim metodama procjenjuju se vrijednosti parametara iz tako dobivenih eksperimentalnih podataka.

Tablica 3.1. *Parametri procesa enzimske hidrolize škroba*

PARAMETAR	VRIJEDNOST
$V_{m1}, \text{mg cm}^{-3} \text{min}^{-1}$	190,00
$V_{m2}, \text{mg cm}^{-3} \text{min}^{-1}$	17,42
k_{d1}, min^{-1}	0,022
k_{d2}, min^{-1}	0,004
$V_{m3}, \text{mg cm}^{-3} \text{min}^{-1}$	395,10
$K_{m1}^s, \text{g dm}^{-3}$	7,59
$K_{m2}^s, \text{g dm}^{-3}$	18,56
$K_{i1}^g, \text{g dm}^{-3}$	10,35
$K_{i1}^m, \text{g dm}^{-3}$	18,8
$K_{i2}^g, \text{g dm}^{-3}$	0,000434
$K_m^m, \text{g dm}^{-3}$	7,07
$Y_{g/s1}, -$	0,504
$Y_{g/s2}$	0,167
$Y_{m/s1}$	0,196

Osim definiranja parametara odnosno konstanti procesa, definirane su početne vrijednosti nezavisnih i zavisnih varijabli procesa. Nezavisna varijabla u procesu enzimske razgradnje škroba je vrijeme, t , dok su zavisne varijable koncentracije škroba (c_s), glukoze (c_g) i maltoze (c_m) te brzine reakcija r_1 , r_2 i r_3 . Simulacijom matematičkog modela enzimske hidrolize škroba uz odabrane parametre modela i početne uvjete dobivaju se dinamičke promjene koncentracija škroba, maltoze i glukoze. Na temelju rezultata simulacija računaju se vrijednosti iskorištenja na glukozi i konverzije škroba prema sljedećim jednadžbama (3.6 i 3.7):

$$X = \frac{c_{s0} - c_s}{c_{s0}} \quad (3.6)$$

$$Y = \frac{c_g}{c_{s,0}} \quad (3.7)$$

Iskorištenje i konverzija izuzetno su važne značajke svakog procesa, a što su njihove vrijednosti veće karakteristike procesa su bolje.

3.3. Optimiranje procesa pomoću programskog paketa GALOP

Programski paket GALOP (Genetski algoritam za optimizaciju procesa), verzija 1.24 razvijen je na Biotehnološkom institutu, Istraživačkog centra Jülich, Njemačka, te je korišten i za optimizaciju procesa pomoću matematičkog modela kao i za eksperimentalnu optimizaciju. Programski paket GALOP uključuje sljedeće dijelove:

- listu parametara (uključujući minimalnu i maksimalnu granicu svakog optimizacijskog parametra i korak po kojem se njegova vrijednost mijenja);
- listu funkcija cilja koje optimiramo;
- listu funkcija cilja koje optimiramo s težinskim faktorima i pripadajućim funkcijama. ^[1]

Prvu generaciju GALOP slučajno odabire ili je korisnik sam definira. Dobivene vrijednosti početnih parametara procesa, unose se u programski kod za simulaciju matematičkog modela procesa. Rezultati simulacija, konverzija i iskorištenje, odnosno funkcije cilja, se upisuju u GALOP kao povratne informacije na temelju kojih genetski algoritam razvija sljedeće generacije.

4. REZULTATI I RASPRAVA

Cilj ovog rada je optimiranje početnih uvjeta enzimske hidrolize škroba, odnosno proizvodnje glukoze upotrebom genetskog algoritma. Optimirani su početna koncentracija škroba, koncentracije enzima Liquozyme i Dextrozyme te vrijeme provedbe procesa za koje će iskorištenje na glukozi i konverzija škroba biti maksimalni.

U tablici 4.1. definirani su parametri procesa koji su optimirani, područje optimiranja parametara procesa, te korak

Tablica 4.1 Parametri procesa, područje i korak optimiranja

parametar	mjerna jedinica	korak	donja granica	gornja granica
c_s	mmol dm ⁻³	1	1	50
$c_{\text{Dextrozyme}}$	mmol dm ⁻³	0,005	0,01	0,1
$c_{\text{Liquozyme}}$	mmol dm ⁻³	0,0005	0,001	0,01
t	min	10	10	1000

Funkcijama cilja, iskorištenju na glukozi i konverziji škroba, dana je jednaka važnost u optimiranju izabranih veličina procesa (1 u oba slučaja). Vrijednost parametra mutacije genetskog algoritma je postavljena 0,01 a parametra križanja na 0,95. To znači da će u jednom od 100 slučajeva kreiranja novih vrijednosti procesnih veličina doći do mutacije, a u 95 slučajeva do križanja. Broj jedinki u svakoj generaciji je postavljen na 8, a kao metoda selekcije izabrana je jest *roulette wheel parent selection*.

1. GENERACIJA

Uz uvažavanje navedenog izborom slučajnog kreiranja prve generacije genetskog algoritma dobiveni su početni uvjeti provedbe procesa za prvu generaciju (tablica 4.2).

Tablica 4.2. Vrijednosti parametara procesa 1. generacije

parametar	1.	2.	3.	4.	5.	6.	7.	8.
$c_s, \text{mmol dm}^{-3}$	2	3	41	26	39	29	29	4
$c_{\text{Dextrozyme}}, \text{mmol dm}^{-3}$	0,04	0,015	0,015	0,045	0,015	0,1	0,09	0,04
$c_{\text{Liquozyme}}, \text{mmol dm}^{-3}$	0,004	0,007	0,007	0,004	0,002	0,0035	0,004	0,0055
t, min	540	590	590	40	490	150	490	820

Vrijednosti parametara procesa za svaku jedinku iz prvog plana pokusa (tablica 4.2) unose se u programski kod prethodno razvijen u SCIENTIST-u. Simulacijom matematičkog modela procesa za svaku jedinku prvog plana pokusa dobivaju se dinamičke promjene koncentracije škroba, glukoze i maltoze iz kojih se računaju konverzija škroba i iskorištenje na glukozi na temelju jednadžbi 3.5 i 3.6.

Tablica 4.3. Početna koncentracija škroba, koncentracija škroba i glukoze u vremenu t , te izračunate konverzije i iskorištenja za sve jedinice 1. plana pokusa

$c_{s,0}, \text{mmol dm}^{-3}$	$c_s, \text{mmol dm}^{-3}$	$c_g, \text{mmol dm}^{-3}$	X	Y
2	0,033688	0,71452	0,9832	0,3573
3	0,0028769	1,0882	0,9990	0,3627
41	6,1192	12,637	0,8508	0,3082
26	12,65	4,8361	0,5135	0,1860
39	25,6610	4,8458	0,3420	0,1243
29	10,473	6,7331	0,6389	0,2322
29	8,1935	7,5599	0,7175	0,2607
4	0,023051	1,4444	0,9942	0,3611
	Srednje vrijednosti		0,7549	0,2741

Ovako dobivene vrijednosti funkcija cilja, iskorištenja na glukozi i konverzije škroba, se unose u programski paket GALOP. One su osnova za postupke selekcije, mutacije i križanja koji rezultiraju novim planom pokusa. Vrijednosti parametara procesa drugog plana pokusa prikazani su u tablici 4.4.

2. GENERACIJA

Tablica 4.4. *Vrijednosti parametara procesa 2. generacije*

	1.	2.	3.	4.	5.	6.	7.	8.
$c_{\text{š}}, \text{mmol dm}^{-3}$	14	2	28	2	41	3	39	3
$c_{\text{Dextrozyme}}, \text{mmol dm}^{-3}$	0,1	0,04	0,015	0,05	0,015	0,015	0,015	0,015
$c_{\text{Liquozyme}}, \text{mmol dm}^{-3}$	0,003	0,004	0,007	0,004	0,007	0,002	0,007	0,007
t, min	910	540	590	540	590	490	90	590

Tablica 4.5. *Početna koncentracija škroba, koncentracija škroba i glukoze u vremenu t , te izračunate konverzije i iskorištenja za sve jedinice 2. plana pokusa*

$c_{\text{š},0}, \text{mmol dm}^{-3}$	$c_{\text{š}}, \text{mmol dm}^{-3}$	$c_{\text{g}}, \text{mmol dm}^{-3}$	X	Y
14	2,8934	4,0376	0,7933	0,2884
2	0,033688	0,71452	0,9832	0,3573
28	1,7983	9,5121	0,9358	0,3397
2	0,03363	0,71469	0,9832	0,3574
41	6,1921	12,637	0,8490	0,3082
3	0,47545	0,91776	0,8415	0,3059
39	7,6843	11,354	0,8030	0,2911
3	0,002877	1,0882	0,9990	0,3627
Srednje vrijednosti			0,7549	0,2741

Postupak je isti kao i za prvu generaciju. Razlika je u tome što je GA nasumičnim odabirom generirao prvu generaciju dok daljnje generacije generira na temelju unesenih vrijednosti konverzije i iskorištenja s ciljem dobivanja njihovog maksimuma procesima selekcije, križanja i mutacije. U tablici 4.4 dane su vrijednosti parametara procesa druge generacije koje unosimo u programski kod napravljen u SCIENTIST-u. Program nam za definirano vrijeme t izbacuje vrijednosti koncentracije glukoze i škroba preko kojih računamo iskorištenje i konverziju. Te vrijednosti ponovo unosimo u GA.

Uspoređujući prvu i drugu generaciju primjećujemo da su tri jединke (prva, druga i treća) potpuno prenesene iz prve u drugu generaciju kao najbolje jединke.

PREOSTALE GENERECIJE

Tablica 4.6. Vrijednosti parametara procesa 3. i 4. generacije

Br. jединki	3. generacija				4. generacija			
	c_{ξ} , mmol dm ⁻³	$c_{Dextrozyme}$, mmol dm ⁻³	$c_{Liquozymes}$, mmol dm ⁻³	t , min	c_{ξ} , mmol dm ⁻³	$c_{Dextrozyme}$, mmol dm ⁻³	$c_{Liquozymes}$, mmol dm ⁻³	t , min
1	3	0,015	0,007	590	31	0,075	0,009	850
2	14	0,095	0,003	900	23	0,055	0,009	530
3	13	0,07	0,0085	320	23	0,055	0,009	540
4	2	0,04	0,004	540	49	0,05	0,006	710
5	23	0,055	0,009	710	41	0,1	0,003	570
6	49	0,05	0,006	530	6	0,015	0,0085	700
7	41	0,1	0,003	910	25	0,035	0,007	590
8	25	0,035	0,0085	700	2	0,04	0,004	710

Tablica 4.7. Vrijednosti parametara procesa 5. i 6. generacije

5. generacija					6. generacija			
Br. jedinki	$c_s, \text{mmol dm}^{-3}$	$c_{\text{Dextrozyme}}, \text{mmol dm}^{-3}$	$c_{\text{Liquozyme}}, \text{mmol dm}^{-3}$	t, min	$c_s, \text{mmol dm}^{-3}$	$c_{\text{Dextrozyme}}, \text{mmol dm}^{-3}$	$c_{\text{Liquozyme}}, \text{mmol dm}^{-3}$	t, min
1	6	0,015	0,0085	700	6	0,015	0,0085	700
2	49	0,05	0,009	850	6	0,01	0,0085	720
3	31	0,075	0,006	710	23	0,055	0,009	700
4	25	0,035	0,0085	710	49	0,05	0,009	850
5	23	0,055	0,009	540	49	0,05	0,009	850
6	31	0,075	0,009	830	6	0,055	0,009	540
7	2	0,04	0,0025	590	23	0,015	0,0085	700
8	23	0,055	0,009	530	6	0,015	0,0085	700

Tablica 4.8. Vrijednosti parametara procesa 7. i 8. generacije

7. generacija					8. generacija			
Br. jedinki	$c_s, \text{mmol dm}^{-3}$	$c_{\text{Dextrozyme}}, \text{mmol dm}^{-3}$	$c_{\text{Liquozyme}}, \text{mmol dm}^{-3}$	t, min	$c_s, \text{mmol dm}^{-3}$	$c_{\text{Dextrozyme}}, \text{mmol dm}^{-3}$	$c_{\text{Liquozyme}}, \text{mmol dm}^{-3}$	t, min
1	6	0,055	0,009	540	6	0,055	0,009	540
2	6	0,015	0,0085	700	6	0,05	0,009	520
3	6	0,055	0,009	540	6	0,01	0,0095	540
4	6	0,025	0,0085	700	6	0,015	0,0085	700
5	23	0,055	0,0085	720	6	0,015	0,0085	700
6	6	0,01	0,009	850	6	0,055	0,0085	720
7	49	0,05	0,0085	220	23	0,055	0,009	540
8	6	0,01	0,009	700	6	0,01	0,009	730

Tablica 4.9. Vrijednosti parametara procesa 9. i 10. generacije

9. generacija					10. generacija			
Br. jedinki	$c_s, \text{mmol dm}^{-3}$	$c_{\text{Dextrozyme}}, \text{mmol dm}^{-3}$	$c_{\text{Liquozyme}}, \text{mmol dm}^{-3}$	t, min	$c_s, \text{mmol dm}^{-3}$	$c_{\text{Dextrozyme}}, \text{mmol dm}^{-3}$	$c_{\text{Liquozyme}}, \text{mmol dm}^{-3}$	t, min
1	6	0,055	0,009	540	6	0,055	0,009	540
2	6	0,015	0,0085	700	6	0,05	0,009	520
3	6	0,055	0,009	540	6	0,01	0,0095	540
4	6	0,025	0,0085	700	6	0,015	0,0085	700
5	23	0,055	0,0085	720	6	0,015	0,0085	700
6	6	0,01	0,009	850	6	0,055	0,0085	720
7	49	0,05	0,0085	220	23	0,055	0,009	540
8	6	0,01	0,009	700	6	0,01	0,009	730

Tablica 4.10. Vrijednosti parametara procesa 11. i 12. generacije

11. generacija					12. generacija			
Br. jedinki	$c_s, \text{mmol dm}^{-3}$	$c_{\text{Dextrozyme}}, \text{mmol dm}^{-3}$	$c_{\text{Liquozyme}}, \text{mmol dm}^{-3}$	t, min	$c_s, \text{mmol dm}^{-3}$	$c_{\text{Dextrozyme}}, \text{mmol dm}^{-3}$	$c_{\text{Liquozyme}}, \text{mmol dm}^{-3}$	t, min
1	6	0,055	0,0085	720	6	0,055	0,0085	540
2	6	0,055	0,0085	540	6	0,055	0,0085	720
3	6	0,055	0,0085	720	6	0,055	0,0085	540
4	6	0,04	0,0085	540	6	0,055	0,0085	540
5	6	0,055	0,0085	720	6	0,055	0,0085	720
6	6	0,055	0,0085	540	6	0,055	0,0085	720
7	6	0,055	0,0085	220	6	0,055	0,0085	540
8	6	0,055	0,0085	540	6	0,04	0,0085	540

Tablica 4.11. Vrijednosti parametara procesa 13. i 14. generacije

13. generacija					14. generacija			
Br. jedinki	$c_s, \text{mmol dm}^{-3}$	$c_{\text{Dextrozyme}}, \text{mmol dm}^{-3}$	$c_{\text{Liquozyme}}, \text{mmol dm}^{-3}$	t, min	$c_s, \text{mmol dm}^{-3}$	$c_{\text{Dextrozyme}}, \text{mmol dm}^{-3}$	$c_{\text{Liquozyme}}, \text{mmol dm}^{-3}$	t, min
1	6	0,04	0,0085	540	3	0,055	0,0085	540
2	3	0,055	0,0085	540	6	0,04	0,0085	540
3	6	0,055	0,0085	540	3	0,055	0,0085	540
4	6	0,055	0,006	540	6	0,05	0,0085	540
5	6	0,055	0,0085	720	6	0,055	0,0085	540
6	6	0,055	0,0085	720	3	0,055	0,0085	720
7	6	0,04	0,0085	540	6	0,055	0,0085	40
8	6	0,055	0,0085	720	3	0,055	0,0085	540

Tablica 4.12. Vrijednosti parametara procesa 15. i 16. generacije

15. generacija					16. generacija			
Br. jedinki	$c_s, \text{mmol dm}^{-3}$	$c_{\text{Dextrozyme}}, \text{mmol dm}^{-3}$	$c_{\text{Liquozyme}}, \text{mmol dm}^{-3}$	t, min	$c_s, \text{mmol dm}^{-3}$	$c_{\text{Dextrozyme}}, \text{mmol dm}^{-3}$	$c_{\text{Liquozyme}}, \text{mmol dm}^{-3}$	t, min
1	3	0,055	0,0085	540	3	0,055	0,0085	550
2	3	0,05	0,0085	540	3	0,055	0,0085	540
3	3	0,055	0,008	540	3	0,055	0,0085	550
4	6	0,04	0,0085	540	3	0,04	0,0085	540
5	6	0,04	0,0085	540	3	0,055	0,0085	540
6	3	0,055	0,0085	540	3	0,05	0,0085	540
7	6	0,055	0,0085	540	6	0,04	0,0085	40
8	3	0,055	0,0085	550	3	0,05	0,008	540

Tablica 4.13. Vrijednosti parametara procesa 17. i 18. generacije

17. generacija					18. generacija			
Br. jedinki	$c_s, \text{mmol dm}^{-3}$	$c_{\text{Dextrozyme}}, \text{mmol dm}^{-3}$	$c_{\text{Liquozyme}}, \text{mmol dm}^{-3}$	t, min	$c_s, \text{mmol dm}^{-3}$	$c_{\text{Dextrozyme}}, \text{mmol dm}^{-3}$	$c_{\text{Liquozyme}}, \text{mmol dm}^{-3}$	t, min
1	3	0,055	0,0085	540	3	0,055	0,0085	550
2	3	0,05	0,0085	540	3	0,055	0,0085	540
3	3	0,05	0,008	540	3	0,055	0,0085	550
4	3	0,055	0,0085	540	3	0,04	0,0085	540
5	3	0,055	0,0085	540	3	0,05	0,0085	540
6	3	0,055	0,0085	540	3	0,055	0,0085	540
7	3	0,055	0,0085	550	3	0,05	0,0085	40
8	3	0,05	0,008	540	3	0,05	0,008	540

Tablica 4.14. Vrijednosti parametara procesa 19. i 20. generacije

19. generacija					20. generacija			
Br. jedinki	$c_s, \text{mmol dm}^{-3}$	$c_{\text{Dextrozyme}}, \text{mmol dm}^{-3}$	$c_{\text{Liquozyme}}, \text{mmol dm}^{-3}$	t, min	$c_s, \text{mmol dm}^{-3}$	$c_{\text{Dextrozyme}}, \text{mmol dm}^{-3}$	$c_{\text{Liquozyme}}, \text{mmol dm}^{-3}$	t, min
1	3	0,055	0,0085	540	3	0,055	0,0085	550
2	3	0,05	0,0085	540	3	0,05	0,0085	540
3	3	0,05	0,008	540	3	0,055	0,0085	550
4	3	0,055	0,0085	540	3	0,055	0,0085	540
5	3	0,055	0,0085	540	3	0,055	0,0085	540
6	3	0,05	0,0085	540	3	0,05	0,008	540
7	3	0,055	0,0085	550	3	0,05	0,008	540
8	3	0,05	0,008	540	3	0,055	0,0085	540

Uvjet završetka optimiranja procesa bio je jednakost prenesenih jedinki iz koraka $n-1$ u korak n . Možemo primijetiti da se iz generacije u generaciju prenosi sve više jedinki te da je u dvadesetu generaciju preneseno čak 7 od 8 jedinki 19. generacije. Vidljivo je primjerice da se koncentracija škroba ne mijenja kroz zadnje 4 generacije, dok su koncentracije oba enzima i vrijeme provedbe procesa praktički jednake sa vrlo malim odstupanjima između pojedinih generacija.

Tablica 4.15. Početna koncentracija škroba, koncentracija škroba i glukoze u vremenu t , te izračunate konverzije i iskorištenja za sve jedinice 3 i 4. plana pokusa

Br. jedinice	3. plan pokusa					4. plan pokusa				
	c_{s0} , mmol dm ⁻³	c_s , mmol dm ⁻³	c_g , mmol dm ⁻³	X	Y	c_{s0} , mmol dm ⁻³	c_s , mmol dm ⁻³	c_g , mmol dm ⁻³	X	Y
1	3	0,002877	1,0882	0,9990	0,3627	31	0,99211	10,922	0,9680	0,3523
2	14	2,8941	4,0371	0,7933	0,2884	23	0,26724	8,2538	0,9884	0,3589
3	13	0,040143	4,706	0,9969	0,3620	23	0,2674	8,2538	0,9884	0,3589
4	2	0,033688	0,71452	0,9832	0,3573	49	13,847	12,765	0,7174	0,2605
5	23	0,26722	8,2538	0,9883	0,3589	41	21,637	7,043	0,4723	0,1718
6	14	0,34716	4,9576	0,9752	0,3541	6	0,00326	2,1771	0,9995	0,3629
7	41	21,634	7,0442	0,4723	0,1718	25	1,2176	8,6347	0,9513	0,3453
8	25	0,50839	8,8918	0,9797	0,3557	2	0,03368	0,7145	0,9832	0,3573

Tablica 4.16. Početna koncentracija škroba, koncentracija škroba i glukoze u vremenu t , te izračunate konverzije i iskorištenja za sve jedinke 5. i 6. plana pokusa

Br. jedin i	5. plan pokusa					6. plan pokusa				
	$c_{s0},$ $mmol$ dm^{-3}	$c_s,$ $mmol$ dm^{-3}	$c_g,$ $mmol$ dm^{-3}	X	Y	$c_{s0},$ $mmol$ dm^{-3}	$c_s,$ $mmol$ dm^{-3}	$c_g,$ $mmol$ dm^{-3}	X	Y
1	6	0,00326	2,1771	0,9995	0,3629	6	0,00326	2,1771	0,9995	0,3629
2	49	5,339	15,852	0,8910	0,3235	6	0,00325	2,177	0,9995	0,3629
3	31	4,082	9,7757	0,8683	0,3154	23	0,26723	8,2538	0,9884	0,3589
4	25	0,50839	8,8918	0,9797	0,3557	49	5,339	15,852	0,8910	0,3235
5	23	0,26724	8,2538	0,9884	0,3589	49	5,339	15,852	0,8910	0,3235
6	31	0,92112	10,922	0,9703	0,3523	6	0,00204	2,178	0,9997	0,3630
7	2	0,16378	0,66773	0,9181	0,3339	23	0,39292	8,2179	0,9829	0,3573
8	23	0,26724	8,2538	0,9884	0,3589	23	0,26724	8,2538	0,9889	0,3589

Tablica 4.17. Početna koncentracija škroba, koncentracija škroba i glukoze u vremenu t , te izračunate konverzije i iskorištenja za sve jedinke 7. i 8. plana pokusa

Br. jedin i	7. plan pokusa					8. plan pokusa				
	$c_{s0},$ $mmol$ dm^{-3}	$c_s,$ $mmol$ dm^{-3}	$c_g,$ $mmol$ dm^{-3}	X	Y	$c_{s0},$ $mmol$ dm^{-3}	$c_s,$ $mmol$ dm^{-3}	$c_g,$ $mmol$ dm^{-3}	X	Y
1	6	0,00204	2,1780	0,9997	0,3630	6	0,00204	2,1780	0,9997	0,3630
2	6	0,00326	2,1771	0,9995	0,3629	6	0,00204	2,1780	0,9997	0,3630
3	6	0,00204	2,178	0,9997	0,3630	6	0,00127	2,1777	0,9998	0,3630
4	6	0,00326	2,1771	0,9995	0,3629	6	0,00326	2,1771	0,9995	0,3629
5	23	0,36425	8,2187	0,9842	0,3573	6	0,00326	2,1771	0,9995	0,3629
6	6	0,00202	2,1774	0,9997	0,3629	6	0,00326	2,1776	0,9995	0,3629
7	49	6,4976	15,431	0,8674	0,3149	23	0,26724	8,2538	0,9884	0,3589
8	6	0,00202	2,1774	0,9997	0,3629	6	0,00203	2,1774	0,9997	0,3629

Tablica 4.18. Početna koncentracija škroba, koncentracija škroba i glukoze u vremenu t , te izračunate konverzije i iskorištenja za sve jedinice 9. i 10. plana pokusa

Br. jedinici	9. plan pokusa					10. plan pokusa				
	$c_{s0}, \text{ mmol dm}^{-3}$	$c_s, \text{ mmol dm}^{-3}$	$c_g, \text{ mmol dm}^{-3}$	X	Y	$c_{s0}, \text{ mmol dm}^{-3}$	$c_s, \text{ mmol dm}^{-3}$	$c_g, \text{ mmol dm}^{-3}$	X	Y
1	6	0,003264	2,1776	0,9996	0,3629	6	0,00327	2,1776	0,9995	0,3623
2	6	0,003265	2,1776	0,9995	0,3629	3	0,00061	1,0894	0,9998	0,3631
3	6	0,003264	2,1776	0,9995	0,3629	6	0,00325	2,177	0,9995	0,3628
4	6	0,00204	2,178	0,9997	0,3630	6	0,01332	2,1734	0,9977	0,3622
5	6	0,003258	2,1771	0,9995	0,3629	6	0,00128	2,1783	0,9998	0,3631
6	6	0,001268	2,1777	0,9998	0,3629	6	0,00326	2,1771	0,9996	0,3629
7	6	0,002029	2,1774	0,9997	0,3629	6	0,00326	2,1771	0,9995	0,3629
8	6	0,003258	2,1771	0,9995	0,3629	6	0,00326	2,1771	0,9995	0,3629

Tablica 4.19. Početna koncentracija škroba, koncentracija škroba i glukoze u vremenu t , te izračunate konverzije i iskorištenja za sve jedinice 11. i 12. plana pokusa

Br. jedinici	11. plan pokusa					12. plan pokusa				
	$c_{s0}, \text{ mmol dm}^{-3}$	$c_s, \text{ mmol dm}^{-3}$	$c_g, \text{ mmol dm}^{-3}$	X	Y	$c_{s0}, \text{ mmol dm}^{-3}$	$c_s, \text{ mmol dm}^{-3}$	$c_g, \text{ mmol dm}^{-3}$	X	Y
1	6	0,003264	2,1776	0,9995	0,3629	6	0,00326	2,1776	0,9995	0,3630
2	6	0,003265	2,1776	0,9995	0,3629	6	0,00327	2,1776	0,9995	0,3630
3	6	0,003264	2,1776	0,9995	0,3629	6	0,00326	2,1776	0,9995	0,3630
4	6	0,003266	2,1774	0,9995	0,3629	6	0,00326	2,1776	0,9995	0,3630
5	6	0,003264	2,1776	0,9995	0,3629	6	0,00327	2,1776	0,9995	0,3629
6	6	0,003265	2,1776	0,9995	0,3629	6	0,00327	2,1776	0,9995	0,3629
7	6	0,00348	2,1775	0,9994	0,3629	6	0,00326	2,1776	0,9995	0,3629
8	6	0,003265	2,1776	0,9995	0,3629	6	0,00327	2,1774	0,9995	0,3629

Tablica 4.20. Početna koncentracija škroba, koncentracija škroba i glukoze u vremenu t , te izračunate konverzije i iskorištenja za sve jedinke 13. i 14. plana pokusa

13. plan pokusa						14. plan pokusa				
Br. jediniki	c_{s0} , mmol dm^{-3}	c_s , mmol dm^{-3}	c_g , mmol dm^{-3}	X	Y	c_{s0} , mmol dm^{-3}	c_s , mmol dm^{-3}	c_g , mmol dm^{-3}	X	Y
1	6	0,003266	2,1774	0,9995	0,3629	3	0,00061	1,0894	0,9998	0,3631
2	3	0,000613	1,0894	0,9998	0,3631	6	0,00327	2,1774	0,9995	0,3629
3	6	0,003265	2,1776	0,9995	0,3629	3	0,00061	1,0894	0,9998	0,3631
4	6	0,034157	2,1667	0,9943	0,3611	6	0,00327	2,1775	0,9995	0,3629
5	6	0,003264	2,1776	0,9995	0,3629	6	0,00327	2,1776	0,9995	0,3629
6	6	0,003264	2,1776	0,9995	0,3629	3	0,00061	1,0894	0,9998	0,3631
7	6	0,003266	2,1774	0,9995	0,3629	6	0,08933	2,1459	0,9851	0,3577
8	6	0,003264	2,1776	0,9995	0,3629	3	0,00061	1,0894	0,9998	0,3631

Tablica 4.21. Početna koncentracija škroba, koncentracija škroba i glukoze u vremenu t , te izračunate konverzije i iskorištenja za sve jedinke 15. i 16. plana pokusa

15. plan pokusa						16. plan pokusa				
Br. jediniki	c_{s0} , mmol dm^{-3}	c_s , mmol dm^{-3}	c_g , mmol dm^{-3}	X	Y	c_{s0} , mmol dm^{-3}	c_s , mmol dm^{-3}	c_g , mmol dm^{-3}	X	Y
1	3	0,000613	1,0894	0,9998	0,3631	3	0,00061	1,0894	0,9998	0,3631
2	3	0,000613	1,0893	0,9998	0,3631	3	0,00061	1,0894	0,9998	0,3631
3	3	0,000613	1,0894	0,9998	0,3631	3	0,00061	1,0894	0,9998	0,3631
4	6	0,003266	2,1774	0,9995	0,3629	3	0,00061	1,0892	0,9998	0,3631
5	6	0,003266	2,1774	0,9995	0,3629	3	0,00061	1,0894	0,9998	0,3631
6	3	0,000613	1,0894	0,9998	0,3631	3	0,00061	1,0893	0,9998	0,3631
7	6	0,003265	2,1776	0,9995	0,3629	6	0,08931	2,1456	0,9851	0,3576
8	6	0,003264	2,1776	0,9995	0,3629	3	0,00061	1,0894	0,9998	0,3631

Tablica 4.22. Početna koncentracija škroba, koncentracija škroba i glukoze u vremenu t , te izračunate konverzije i iskorištenja za sve jedinke 17. i 18. plana pokusa.

Br. jedinke	17. plan pokusa					18. plan pokusa				
	$c_{s0}, \text{mmol dm}^{-3}$	$c_s, \text{mmol dm}^{-3}$	$c_g, \text{mmol dm}^{-3}$	X	Y	$c_{s0}, \text{mmol dm}^{-3}$	$c_s, \text{mmol dm}^{-3}$	$c_g, \text{mmol dm}^{-3}$	X	Y
1	3	0,000613	1,0894	0,9998	0,3631	3	0,00061	1,0894	0,9998	0,3631
2	3	0,000613	1,0893	0,9998	0,3631	3	0,00061	1,0894	0,9998	0,3631
3	3	0,001026	1,0892	0,9997	0,3631	3	0,00061	1,0894	0,9998	0,3631
4	3	0,000613	1,0894	0,9998	0,3631	3	0,00061	1,0892	0,9998	0,3631
5	3	0,000613	1,0894	0,9998	0,3631	3	0,00061	1,0893	0,9998	0,3631
6	3	0,000613	1,0894	0,9998	0,3631	3	0,00061	1,0894	0,9998	0,3631
7	3	0,000613	1,0894	0,9998	0,3631	3	0,02315	1,081	0,9923	0,3603
8	3	0,001026	1,0892	0,9997	0,3631	3	0,00103	1,0892	0,9997	0,3630

Tablica 4.23. Početna koncentracija škroba, koncentracija škroba i glukoze u vremenu t , te izračunate konverzije i iskorištenja za sve jedinke 19. i 20. plana pokusa

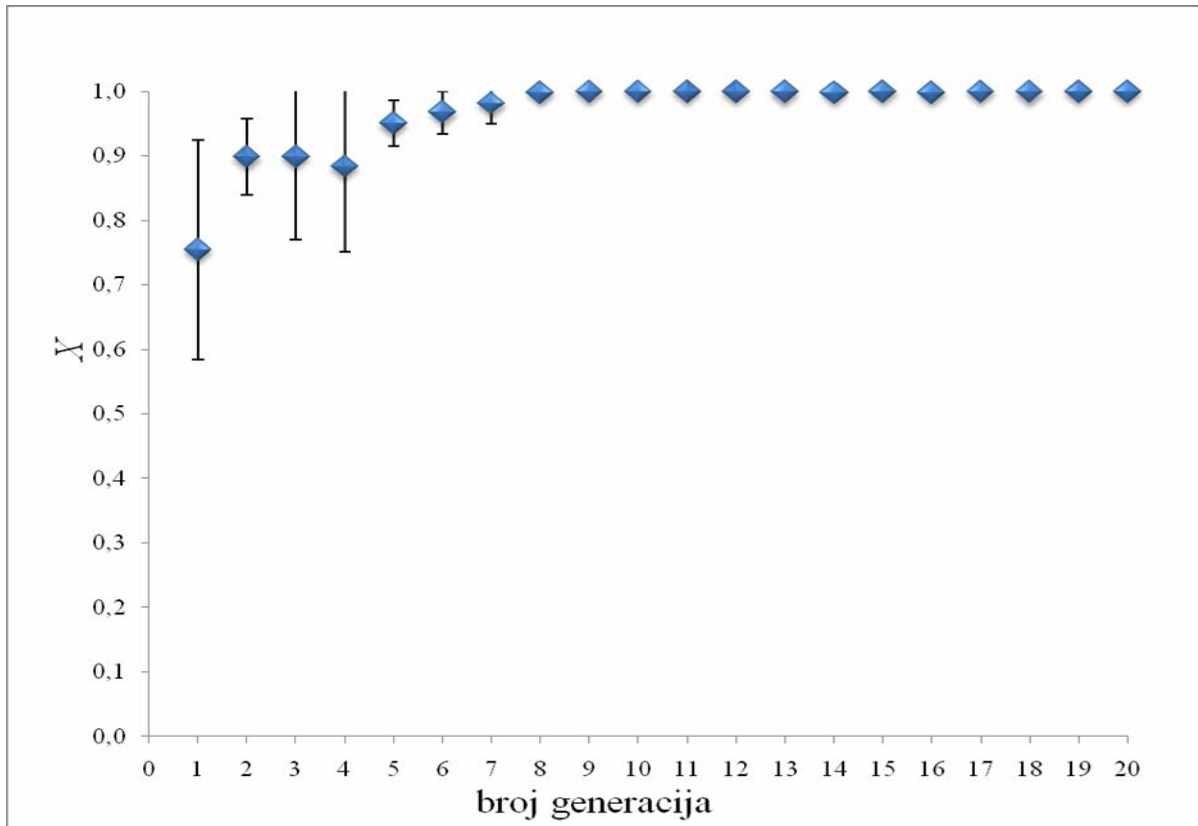
Br. jedinke	19. plan pokusa					20. plan pokusa				
	$c_{s0}, \text{mmol dm}^{-3}$	$c_s, \text{mmol dm}^{-3}$	$c_g, \text{mmol dm}^{-3}$	X	Y	$c_{s0}, \text{mmol dm}^{-3}$	$c_s, \text{mmol dm}^{-3}$	$c_g, \text{mmol dm}^{-3}$	X	Y
1	3	0,000613	1,0894	0,9998	0,3631	3	0,00061	1,0894	0,9998	0,3631
2	3	0,000613	1,0893	0,9998	0,3631	3	0,00061	1,0893	0,9998	0,3631
3	3	0,001026	1,0892	0,9997	0,3631	3	0,00061	1,0894	0,9998	0,3631
4	3	0,000613	1,0894	0,9998	0,3631	3	0,00061	1,0894	0,9998	0,3631
5	3	0,000613	1,0894	0,9998	0,3631	3	0,00061	1,0894	0,9998	0,3631
6	3	0,000613	1,0893	0,9998	0,3631	3	0,00103	1,0892	0,9997	0,3631
7	3	0,000613	1,0894	0,9998	0,3631	3	0,00103	1,0892	0,9997	0,3630
8	3	0,001026	1,0892	0,9997	0,3631	3	0,00061	1,0894	0,9998	0,3631

Tablica 4.24. Srednje vrijednosti konverzije škroba i iskorištenja na glukozi 1. – 20. generacije

broj gen.	X	Y
1	0,7549	0,2741
2	0,8985	0,3263
3	0,8985	0,3264
4	0,8835	0,3291
5	0,9505	0,3452
6	0,9675	0,3513
7	0,9812	0,3562
8	0,9982	0,3624
9	0,9995	0,3629
10	0,9993	0,3629
11	0,9995	0,3629
12	0,9995	0,3629
13	0,9989	0,3629
14	0,9978	0,36234
15	0,9997	0,3630
16	0,9980	0,3624
17	0,9998	0,3631
18	0,9988	0,3628
19	0,9998	0,3631
20	0,9998	0,3631

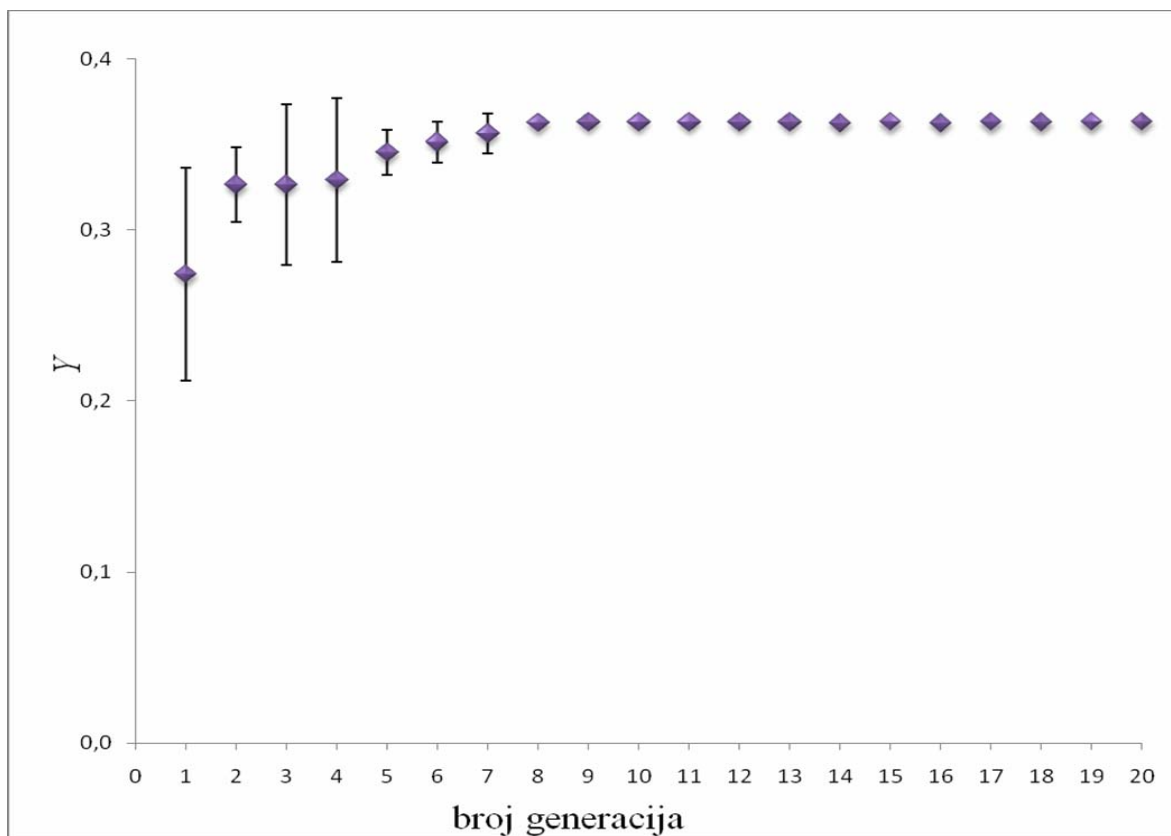
U tablici 4.24. dane su srednje vrijednosti konverzije i iskorištenja za svaku generaciju. Možemo primijetiti da se kroz svaku generaciju iskorištenje i konverzija povećavaju, odnosno optimiranje procesa genetskim algoritmom daje zadovoljavajuće rezultate. Također možemo primijeti da se već razvijanjem druge generacije znatno povećala konverzija (0,8985), a do sljedećeg skoka došlo je kod pete generacije. Konverzija se kroz zadnjih nekoliko generacija ne mijenja znatno što je vidljivo i iz područja valjanosti prikazanog na slici 4.1.

Iskorištenje se, također, poprilično promijenilo s obzirom na prvu generaciju, te u dvadesetoj generaciji ima najveću vrijednost.



Slika 4.1 Promjena konverzije i intervala pouzdanosti kroz dvadeset generacija

Iz slike 4.1. vidimo da je napravljen znatan napredak s obzirom na prvu generaciju. Kod zadnjih 13 generacija možemo primijetiti da je odstupanje premalo i da se vrijednost konverzije neznatno mijenja.



Slika 4.2. *Promjena iskorištenja i intervala pouzdanosti kroz dvadeset*

Iz slike 4.1. vidimo da je napravljen znatan napredak s obzirom na prvu generaciju. Kod zadnjih 13 generacija možemo primijetiti da je odstupanje premalo i da se vrijednost iskorištenje neznatno mijenja.

5. ZAKLJUČAK

Optimirani su početni uvjeti procesa enzimske hidrolize škroba, odnosno dobivanja glukoze upotrebom genetskog algoritma. Određene su optimalne početne vrijednosti koncentracija škroba $c_s = 3 \text{ mmol dm}^{-3}$, enzima Dextrozyme $c_{\text{Dextrozyme}} = 0,055 \text{ mmol dm}^{-3}$ i Liquozime $c_{\text{Liquozyme}} = 0,0085 \text{ mmol dm}^{-3}$ te vremena provedbe procesa $t = 540 \text{ min}$. Pri ovim optimalnim uvjetima dobiveni su iskorištenje na glukozi $Y = 0,3631$ i konverzija škroba $X = 0,9998$ koje su rasle iz generacije u generaciju kroz dvadeset generacija. Iako genetski algoritam daje skup rješenja na temelju dobivenih rezultata možemo zaključiti da bi vrijednosti koncentracija škroba, enzima i vremena koje predstavljaju optimum procesa bile s malim odstupanjima.

Upotreba genetskog algoritma pokazala se učinkovitim metodom za optimiranje procesa proizvodnje glukoze koji je samo jedan od koraka pri dobivanju bioetanola. Rezultati su pokazali znatan napredak u odnosu na prvu generaciju koja je slučajno odabrana.

6. LITERATURA

1. Findrik Z., Zelić B., Bogdan, Vasić-Rački Đ, Model-based and Experimental Optimization Using Genetic Algorithm, Chem. Biochem. Eng. Q., **18** (2), 105-107 (2004)
2. http://www.poduzetnistvo.org/novosti.php?subaction=showfull&id=1132242098&archive=1132136903&start_from=&ucat=&select=novosti&ar=1
3. <http://hgd.mvpei.hr/UserFiles/File/pdf/analize/biogoriva.pdf>
4. http://www.poduzetnistvo.org/novosti.php?subaction=showfull&id=1132242098&archive=1132136903&start_from=&ucat=&select=novosti&ar=1
5. <http://www.sugre.info/tools.phtml?id=661&sprache=co>
6. <http://www.vjesnik.hr/html/2007/03/24/Clanak.asp?r=tem&c=3>
7. http://www.zemris.fer.hr/~golub/ga/studenti/bozikovic_gpga.pdf
8. http://www.zemris.fer.hr/~golub/ga/ga_skripta1.pdf
9. http://www.zemris.fer.hr/predmeti/rg/diplomski/06Cizmek/numericka_integracija.html
10. Janeš K, Pilaš J., Optimiranje sastava medija za proizvodnju bioetanola upotrebom genetskog algoritma, Sveučilište u Zagrebu, FKIT, Zagreb, 2007, 2-3
11. Maretić D., Optimiranje ekstrakcije proteina u vodenom dvofaznom sustavu primjenom genetskog algoritma, Sveučilište u Zagrebu, FKIT, 2007, 4-17
12. Nežić I, Integrirani proces likvefakcije i sahafikacije škroba, Sveučilište u Zagrebu, FKIT, Zagreb, 2007, 7

7. POPIS SIMBOLA I OZNAKA

b – binarni broj

c – koncentracija, [mmol dm^{-3}]

d – duljina intervala

F – usklađenost

g – glukoza

g – operator

H – shema

k – koeficijent pravca

k_d – konstanta deaktivacije, [min^{-1}]

K_i – konstanta inhibicije glukozom ili maltozom, [g dm^{-3}]

K_m – Michaelis-Menteničina konstanta, [g dm^{-3}]

l – odsječak pravca

m – maltoza

n – veličina populacije

o – red sheme

p – preciznost

r – reakcijska brzina [$\text{mg cm}^{-3} \text{min}^{-1}$]

\check{s} – škrob

t – vrijeme [[s]

v – binarni vektor

V_m – maksimalna brzina reakcije, [$\text{mg cm}^{-3} \text{ min}^{-1}$]

X – konverzija [-]

x – realni broj

Y – iskorištenje, [-]

φ – volumni omjer enzima, [-]

8. PRILOZI

8.1. Ispis programskog koda u programskom paketu SCIENTIST

// MicroMath Scientist Model File

IndVars: t

DepVars: cs, cg, cm, r1, r2, r3

Params: Vm1, Vm2, kd1, kd2, Vm3, Ksm1, Ksm2, Kilg, Kilm, Ki2g, Kmm, Ygs2, Ygs1, Yms1

t=0

cs=3

cm=0

cg=0

cl=0.0085

cd=0.05

//kineticki modeli

*r1=cl*Vm1*EXP(-kd1*t)*cs/(Ksm1*(1+cg/Kilg+cm/Kilm)+cs)*

*r2=cd*Vm2*EXP(-kd2*t)*cs/(Ksm2*(1+cg/Ki2g)+cs)*

*r3=cd*Vm3*cm/(Kmm+cm)*

//integralni proces saharifikacije i likvefakcije

cs'=-r1-r2

*cg'=Ygs1*r1+Ygs2*r2+r3*

*cm'=Yms1*r1-r3*

Životopis

Marina Sirotković rođena je 9. lipnja 1986. godine u Splitu. Završila je IV. gimnaziju Marko Marulić u Splitu 2005. godine. Tijekom osnovne i srednje škole sudjelovala je na brojnim natjecanjima, a od toga valja izdvojiti Državna natjecanja iz hrvatskog jezika i kemije. Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije upisala je 2005. godine. Tijekom studija prima Državnu stipendiju koju dodjeljuje Ministarstvo znanosti i tehnologije za studente koji pripadaju u 10 % najboljih studenata.