

OPTIMISATION DE LA COMPOSITION AROMATIQUE DE LA BIÈRE PAR ESSAIM DE PARTICULES

I.C. TRELEA , E. LATRILLE et G. CORRIEU

UMR Génie et Microbiologie des Procédés Alimentaires
INRA, INA P-G, BP 01
F-78850 Thiverval-Grignon - France
trelea@grignon.inra.fr

RESUME : *L’optimisation par essaim de particules (OEP) est une technique récente d’optimisation stochastique, basée sur la métaphore de la communication entre individus sociaux. Cet article décrit l’utilisation de l’OEP pour l’optimisation dynamique des conditions opératoires lors de la fermentation alcoolique en brasserie. Le critère d’optimisation tient compte du profil aromatique désiré pour le produit fini, de la formation de composés non désirés, des contraintes technologiques de mise en œuvre et de la réduction du coût de fabrication.*

MOTS-CLES : *optimisation stochastique, essaim de particules, profil aromatique, bière, fermentation alcoolique*

1. INTRODUCTION

L’optimisation par essaim de particules (OEP) est une technique d’optimisation parallèle développée par Kennedy et Eberhart [4], en s’inspirant du comportement social des individus qui ont tendance à imiter les comportements réussis qu’ils observent dans leur entourage, tout en y apportant leurs variations personnelles. A la différence des algorithmes génétiques, qui miment les mécanismes génétiques de l’évolution, l’OEP s’inspire plutôt de la formation d’une culture. Un ouvrage complet sur les racines sociales de l’OEP et les techniques mathématiques mises en œuvre est [5].

L’algorithme OEP est initialisé par une population de solutions potentielles aléatoires, interprétées comme des particules se déplaçant dans l’espace de recherche. Chaque particule est attirée vers sa meilleure position découverte par le passé ainsi que vers la meilleure position découverte par les particules de son voisinage (ou de tout l’essaim, dans la version globale de l’algorithme).

L’OEP est une méthode récente, et les applications aux problèmes réels sont encore rares. Ce travail décrit l’utilisation de l’OEP pour résoudre un problème d’optimisation dynamique, à savoir la détermination des profils des conditions opératoires d’un procédé de fermentation alcoolique de la bière. Ce problème avait précédemment été traité par une méthode classique de programmation quadratique séquentielle (SQP) [8].

2. ALGORITHME D’OPTIMISATION

L’algorithme OEP classique peut être décrit sous forme vectorielle de la façon suivante :

$$\begin{aligned}\vec{v}_{k+1} &= \vec{a} \otimes \vec{v}_k + \vec{b}_1 \otimes \vec{r}_1 \otimes (\vec{p}_1 - \vec{x}_k) \\ &\quad + \vec{b}_2 \otimes \vec{r}_2 \otimes (\vec{p}_2 - \vec{x}_k) \\ \vec{x}_{k+1} &= \vec{x}_k + \vec{v}_{k+1}\end{aligned}$$

Le symbole \otimes signifie ici la multiplication des vecteurs élément par élément. A l’itération k , la vitesse \vec{v}_k d’une particule est modifiée à partir de sa valeur courante, affectée d’un coefficient d’inertie (\vec{a}), et de deux forces qui attirent la particule vers sa propre meilleure position passée (\vec{p}_1) et la meilleure position (\vec{p}_2) de son voisinage topologique. L’intensité de l’attraction est donnée par les coefficients \vec{b}_1 et \vec{b}_2 . La position de la particule \vec{x}_k est modifiée à partir de la position courante et de la nouvelle vitesse calculée \vec{v}_{k+1} . L’expérience montre qu’une bonne exploration du domaine de recherche est obtenue en introduisant les nombres aléatoires \vec{r}_1 and \vec{r}_2 , en général avec une répartition uniforme entre 0 et 1.

Les valeurs des paramètres utilisés dans ce travail ont été déterminées lors d’études préalables [1,7], sur un ensemble de fonctions de test classiques mentionnées dans la littérature. Le coefficient vectoriel \vec{a} a tous les éléments

égaux à 1.7, \vec{b}_1 et \vec{b}_2 ont tous les éléments égaux à 0.6, le nombre de particules dans l'essaim est de 30 et la topologie de l'essaim est totalement connectée, toutes les particules étant considérées comme voisines. Les positions et les vitesses des particules sont initialisées aléatoirement par une distribution uniforme à l'intérieur du domaine de recherche, les particules ne sont pas autorisées à sortir du domaine de recherche et la vitesse des particules qui touchent les bords est remise à zéro. Ces deux derniers réglages facilitent la convergence au cas où l'optimum se situerait sur une borne du domaine, ce qui arrive assez souvent en conduite des procédés.

3. MODELE DU PROCEDURE DE FERMENTATION ALCOOLIQUE

Le procédé de fermentation alcoolique de la bière, sa modélisation, la procédure expérimentale et la validation du modèle ont été décrits en détail dans [8].

Le modèle comporte 12 variables d'état regroupées dans le vecteur \vec{y} . L'avancement de la fermentation est décrit par la quantité de CO₂ produit ($y_1 = C_p$), qui est directement liée à la production de l'éthanol (E) et à la consommation des sucres fermentescibles (S). Le bilan gazeux dans le fermenteur fait intervenir le CO₂ dissous dans le moût ($y_2 = C_d$), le CO₂ dans l'espace de tête ($y_3 = C_h$) et l'air présent dans l'espace de tête ($y_4 = C_a$).

La qualité organoleptique du produit fini est décrite par un ensemble représentatif de composés aromatiques produits pendant la fermentation : alcool isoamylique ($y_5 = A_{IAL}$), alcool phénylique ($y_6 = A_{PHL}$), acétate d'éthyle ($y_7 = A_{ETA}$), hexanoate d'éthyle ($y_8 = A_{ETX}$), acétate d'isoamyle ($y_9 = A_{IAA}$) et diacétyl ($y_{10} = A_{DIA}$). Le modèle du diacétyl fait intervenir un rendement de production qui décroît au cours du temps ($y_{11} = Y_{DIA/C}$).

La température du moût ($y_{12} = \theta$) évolue en fonction de la chaleur produite par la fermentation. La température est régulée à une consigne imposée par ailleurs (θ_c) par un régulateur proportionnel en agissant sur le refroidissement externe du fermenteur équipé d'une double enveloppe. De même, la pression totale (air + CO₂) dans l'espace de tête du fermenteur (p) est régulée à une consigne imposée (p_c) par l'ouverture d'une vanne d'évacuation du gaz.

Les variables de commande sont regroupées dans le vecteur \vec{u} . Ce sont la durée totale de la fermentation ($u_1 = t_f$), la consigne de température discrétisée en n_t points régulièrement espacés entre 0 et t_f , ($u_{2...n_t+1} = \theta_c$), la consigne de pression discrétisée en n_p points régulièrement espacés entre 0 et t_f , ($u_{n_t+2...n_t+n_p+1} = p_c$) et la concentration initiale de micro-organismes dans le fermenteur ($u_{n_t+n_p+2} = X_0$).

Le modèle dynamique de la fermentation s'écrit sous la forme :

$$\frac{d\vec{y}}{dt}(t) = \vec{f}(\vec{y}(t), \vec{u})$$

4. LE CRITERE D'OPTIMISATION ET CONTRAINTES

Le problème d'optimisation comporte des critères multiples ainsi que des contraintes technologiques et de qualité du produit. Le critère global est une somme pondérée de dix critères partiels. Les inconnues du problème d'optimisation sont les variables de commande du procédé \vec{u} .

$$\min_{\vec{u}} Q = \sum_{i \in \{ETA, ETX, IAA, IAL, PHL, DIA, t, \theta, p, S\}} Q_i$$

La forme détaillée du critère est décrite dans [8]. Les critères partiels Q_{ETA} à Q_{PHL} sont des écarts quadratiques entre les concentrations des arômes respectifs calculés par le modèle et des cibles aromatiques imposés à l'avance. Les cibles ont été déterminées par des mesures dans des bières du commerce. Les écarts sont normalisés par la précision du modèle et le seuil organoleptique de perception différentiel [2].

Le critère partiel Q_{DIA} pénalise la concentration du diacétyl à la fin de la fermentation, normalisée par une valeur de concentration habituelle. Le diacétyl est un composé non désiré, éliminé par un traitement d'autant plus coûteux que la concentration en fin de fermentation est élevée. Q_t pénalise le temps total de fermentation, normalisé par une durée de fermentation standard. Q_θ et Q_p pénalisent la courbure moyenne (dérivée seconde) des profils de consigne pour la température et la pression respectivement, normalisée par la gamme habituelle de variation de ces grandeurs. Ils expriment l'intérêt technologique d'avoir un profil de commande le plus régulier possible.

Le procédé est soumis à un certain nombre de contraintes technologiques. La température, la pression de dôme et la concentration initiale en micro-organismes doivent rester dans les limites de validité du modèle, qui sont les bornes du plan d'expériences qui a fourni les données expérimentales pour son identification [6]. La température ne peut monter que par la chaleur produite par fermentation. La vitesse de montée en température est limitée par la vitesse de fermentation. La vitesse de descente de la température est limitée par la capacité de l'installation frigorifique. De même, la montée en pression se réalise par le dégagement du CO₂ produit par la fermentation. La vitesse de montée de la pression est donc limitée elle aussi par la vitesse de fermentation. La vitesse de la descente de la pression est limitée par le diamètre de la vanne de sortie du gaz.

Toutes ces contraintes peuvent être introduites soit dans le modèle (expression de la fonction \bar{f}), soit dans l'algorithme d'optimisation sous formes de bornes simples (min-max) sur les variables de commande \vec{u} , bornes que l'algorithme OEP gère très facilement. En revanche, la contrainte d'épuisement des sucres fermentescibles en fin de fermentation doit être gérée par pénalisation dans le critère d'optimisation Q sous la forme :

$$Q_s = W_s \max(0, S(t_f) - S_{res})$$

Cette contrainte est équivalente à la contrainte d'atteindre le degré alcoolique imposé de la bière. On peut montrer (par ex. [3]) que si le poids W_s dépasse en valeur absolue le multiplicateur de Lagrange associé à cette contrainte, la solution du problème d'optimisation sous contrainte coïncide avec la solution du problème sans contrainte, mais avec le critère augmenté par la pénalisation Q_s .

5. RESULTATS ET DISCUSSION

L'algorithme OEP a été utilisé pour calculer les profils de commande optimaux pour le procédé de fermentation alcoolique de la bière. Ce même problème a été traité précédemment [8] par un algorithme classique de type programmation quadratique séquentielle. Les résultats obtenus, ainsi que les avantages et les inconvénients respectifs des deux méthodes sont discutés dans ce qui suit.

Les conditions opératoires calculées par l'algorithme OEP pour reproduire le profil aromatique d'une bière commerciale donnée sont représentées à la figure 1. A titre de comparaison, la solution trouvée précédemment par l'algorithme SQP est donnée sur la figure 2. Les résultats sont très proches en termes de profil aromatique du produit fini et de temps de fermentation. Les conditions opératoires sont légèrement différentes, même si l'allure générale est conservée. Le profil de température et de pression calculé par OEP est plus régulier et plus pratique à mettre en œuvre en conditions industrielles.

L'effort de calcul, exprimé sous forme de nombre d'opérations arithmétiques en virgule flottante (flops) est environ 10 fois supérieur pour l'OEP par rapport à SQP. Sur un PC de bureau standard (Pentium 4 à 1 GHz, logiciel de simulation Matlab) il s'agit de quelques dizaines de minutes contre quelques minutes. Ces chiffres sont des moyennes constatées sur une dizaines d'essais, l'effort de calcul exact dépendant fortement de l'initialisation aléatoire du profil de commande, aussi bien en OEP qu'en SQP.

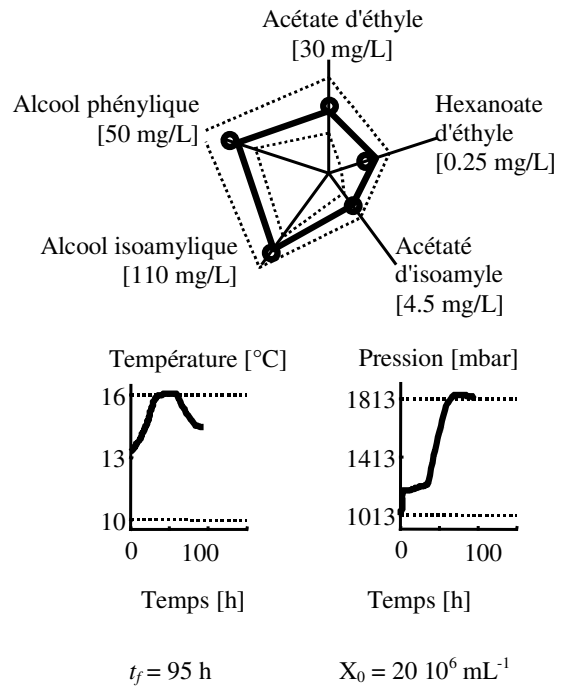


Figure 1. Résultat de l'optimisation par OEP. Profil aromatique du produit fini et conditions opératoires. Cibles (o), domaine admissible (---) et valeurs calculées (—)

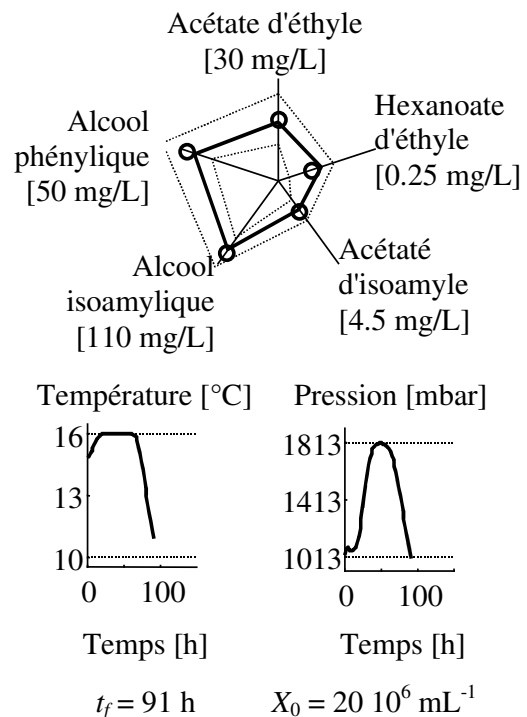


Figure 2. Résultat de l'optimisation par SQP. Profil aromatique du produit fini et conditions opératoires. Cibles (o), domaine admissible (---) et valeurs calculées (—)

Le grand avantage de l'OEP est que le problème d'optimisation peut être codé directement à partir d'un simulateur existant du procédé, sans rentrer dans le code informatique de celui-ci et sans remettre en cause sa structure. Pour réaliser une optimisation SQP il faut au préalable transformer les équations dynamiques sous une forme bien particulière, ce qui implique un effort de programmation long et pas nécessairement à la portée d'un utilisateur standard. De plus, le modèle du procédé doit satisfaire des conditions mathématiques particulières (continuité, dérivabilité deux fois) ce qui n'est en général pas le cas si le simulateur n'a pas été conçu avec l'objectif explicite de l'optimisation dynamique. Pour le procédé considéré, c'est par exemple le cas du premier modèle développé [6] où la fonction \vec{f} n'est pas dérivable.

Pour une utilisation occasionnelle, l'effort de calcul supplémentaire engendré par OEP (1 heure unité centrale \cong 0.08 €) est largement compensé par l'effort de programmation supplémentaire demandé par SQP (1 heure ingénieur \cong 30 € minimum). Pour une utilisation systématique, l'effort de développement d'un code spécifique doit être considéré attentivement.

6. CONCLUSION

Cette étude montre la faisabilité et l'intérêt de l'algorithme OEP pour l'optimisation dynamique et la commande optimale des procédés. Même dans sa version basique et sans effort d'adaptation particulier, l'OEP a fourni des résultats exploitables pour un problème industriel réaliste. Le choix des paramètres de l'algorithme et la meilleure façon de formaliser le problème d'optimisation (critère, contraintes) mériterait d'être étudiées plus en détail, afin de tirer le meilleur profit de la structure très particulière des problèmes

d'optimisation dynamique, caractérisées par exemple par une forte corrélation des variables de décision aux instants successifs.

REFERENCES

- [1] M. Clerc and J. Kennedy. The particle swarm: explosion stability and convergence in a multi-dimensional complex space. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation* 6(1) :58-73, 2002.
- [2] S. Engan, Organoleptic threshold values of some alcohols and esters in beer. *Journal of the Institute of Brewing*, 78 :33-36, 1972.
- [3] P.E. Gill, W. Murray and M.H. Wright. Practical optimisation, *Academic Press*, London 1981.
- [4] J. Kennedy and R.C. Eberhart. Particle swarm optimization. *Proceedings of the IEEE conference on Neural Networks*, Piscataway, NJ IV :1942-1948, 1995.
- [5] J. Kennedy, R.C. Eberhart, and Y. Shi. Swarm intelligence. *Morgan Kaufmann Publishers*, San Francisco, 2001.
- [6] M. Titica, S. Landaud, I.C. Trelea, E. Latrille, G. Corrieu and A. Cheruy, Modelling of higher alcohol and ester production kinetics based on CO₂ emission, with a view to beer flavour control by temperature and top pressure. *Journal of the American Society of Brewing Chemists*, 54(4) :167-174, 2000.
- [7] Trelea I.C. The particle swarm optimization algorithm: convergence analysis and parameter selection. *Information Processing Letters*, 85 :317-325, 2003.
- [8] I.C. Trelea, M. Titica, and G. Corrieu. Dynamic optimisation of the aroma production in brewing fermentation. *J. of Process Control*, 14 :1-16, 2004.