

Estimasi Parameter Model Reaksi Enzimatis Sintesis Biodiesel Menggunakan Particle Swarm Optimization

SYAIFUL ANAM ^{a)}, INDAH YANTI ^{a)}, WURYANSARI MUHARINI K ^{a)}

^{a)}Jurusan Matematika, Fakultas MIPA, Universitas Brawijaya, Malang, Indonesia

diterima 13 Januari 2010, direvisi 25 Maret 2011

ABSTRAK

Semakin banyaknya emisi gas buang yang dihasilkan oleh kendaraan dan industri mengakibatkan polusi udara mendekati ambang yang membahayakan manusia. Eksplorasi minyak bumi besar-besaran mempercepat habisnya cadangan minyak bumi. Penemuan biodiesel memberikan alternatif penyelesaian masalah di atas, karena biodiesel dapat mengurangi emisi gas buang dan merupakan energi alternatif terbarukan. Sintesis biodiesel dapat dilakukan melalui suatu reaksi yang memanfaatkan enzim sehingga disebut sebagai reaksi enzimatis sintesis biodiesel. Model reaksi enzimatis yang sah menjadi kunci dalam proses reaksi sintesis biodiesel. Dalam model reaksi enzimatis yang sah terdapat parameter yang harus diperkirakan. Oleh karena itu, perkiraan parameter (estimasi parameter) kinetik enzim adalah penting. Estimasi parameter dapat dilakukan dengan menggunakan algoritma optimasi lokal, tetapi algoritma ini mempunyai kelemahan utama yaitu nilai optimal yang didapatkan adalah nilai optimal lokal. Oleh karena itu pada penelitian ini diterapkan algoritma optimasi global *Particle Swarm Optimization* untuk estimasi parameter karena memiliki kemampuan untuk menemukan solusi secara cepat. Berdasarkan hasil simulasi diperoleh nilai estimasi parameter terbaik sebagai berikut: $k_1=0,0500000000000$, $k_2=0,1100000000000$, $k_3=0,2150000000000$, $k_4=1,2279999999995$, $k_5=0,2420000000000$, $k_6=0,0070000000000$ dengan nilai *Sum Square Error* sebesar 2.51×10^{-27} .

Kata kunci: Estimasi Parameter, Model Reaksi Enzimatis Sintesis Biodiesel, *Particle Swarm Optimization*

ABSTRACT

Increasing number of vehicles and industries that emit exhaust gas emissions that cause air pollution close to the threshold of a dangerous man. Oil exploration major cause rapid depletion of petroleum. The discovery of biodiesel provides an alternative solution to the above, because biodiesel can reduce exhaust emissions and is a renewable alternative energy. Synthesis biodiesel can be done through an enzyme reaction that utilizes so-called biodiesel synthesis enzymatic reaction. Valid model enzymatic reaction is the key in the process of biodiesel synthesis reaction. This enzymatic reaction model contains the parameters to be estimated. Therefore, the determination of the parameters (parameter estimation) is an important enzyme kinetic. Parameter estimation can be performed using local optimization algorithms, but this algorithm has the major drawback is the optimal value obtained is a local optimal value. Therefore in this research have been applied to global optimization algorithm, Particle Swarm Optimization for parameter estimation because it has the ability to find solutions quickly. Based on the simulation results obtained by the best parameter estimates as follows: $k_1=0.05000000000$, $k_2=0.11000000000$, $k_3=0.21500000000$, $k_4=1.2279999999995$, $k_5=0.2420000000000$, $k_6=0.0070000000000$ and Sum

*Corresponding author : Syaiful Anam
E-mail: syaiful@ub.ac.id

Square Error is 2.51×10^{-27} .

Key word: Parameter Estimation, Biodiesel Synthesis Enzymatic Reaction Model, Particle Swarm Optimization

PENDAHULUAN

Salah satu permasalahan besar dalam kehidupan manusia adalah masalah lingkungan. Kehancuran hutan tropis, erosi tanah, polusi tanah, air, dan udara, hilangnya sumber air segar, meluasnya gurun pasir, punahnya berbagai spesies, pemanasan global, serta penipisan lapisan ozon stratosfer adalah contoh perubahan lingkungan yang semakin mengkhawatirkan dan mengancam kelangsungan peradaban manusia. Salah satu usaha untuk mengurangi polusi udara adalah menciptakan bahan bakar yang menghasilkan emisi gas buang sesedikit mungkin, karena emisi gas buang dapat menimbulkan efek rumah kaca. Selain masalah lingkungan, kehidupan manusia saat ini juga mengalami krisis energi yang diakibatkan kebutuhan bahan bakar yang tinggi sebagai dampak pertambahan jumlah penduduk dan kemajuan ekonomi yang pesat di beberapa negara tidak diimbangi oleh ketersediaan minyak bumi sebagai sumber utama bahan bakar. Minyak bumi perlu waktu yang lama untuk membentuknya kembali, dengan demikian minyak bumi merupakan sumber energi yang tidak bisa diperbaharui. Sementara itu, tingginya tingkat ketergantungan masyarakat dunia pada minyak bumi mendorong eksplorasi besar-besaran sehingga menyebabkan cepat habisnya cadangan minyak bumi. Penemuan biodiesel memberikan alternatif penyelesaian masalah di atas, karena biodiesel dapat mengurangi emisi gas buang dan merupakan energi alternatif terbarukan.

Penggunaan biodiesel dapat menjadi solusi bagi Indonesia untuk mengurangi ketergantungan pada impor bahan bakar solar. Biodiesel pun sudah terbukti ramah lingkungan karena tidak mengandung sulfur[1]. Selain itu biodiesel merupakan satu di antara berbagai macam sumber energi alternatif terbarukan yang menjanjikan untuk dikembangkan, karena bahan

baku biodiesel tersedia melimpah di dalam negeri.

Sintesis biodiesel dapat dilakukan melalui reaksi enzim yang disebut sebagai reaksi enzimatis sintesis biodiesel. Secara matematis reaksi enzimatis sintesis biodiesel dapat dinyatakan sebagai sistem persamaan diferensial biasa. Model reaksi enzimatis berisi parameter yang harus diperkirakan, perkiraan parameter (estimasi parameter) kinetik enzim ini menentukan kesesuaian antara model dan data eksperimen. Semakin baik parameter maka semakin cocok antara model dan kenyataannya. Masalah estimasi parameter suatu sistem dinamik nonlinear dinyatakan sebagai masalah meminimalkan fungsi yang mengukur kesesuaian model dengan himpunan data eksperimen. Permasalahan optimasi ini dapat diselesaikan dengan menggunakan algoritma optimasi lokal. Namun, pendekatan ini biasanya tidak bekerja untuk aplikasi realistik, karena adanya suatu kelemahan utama yaitu kebergantungan solusi titik minimum terhadap nilai awal, sehingga metode menjadi sangat tidak efisien[2]. Algoritma optimasi global telah dikembangkan untuk meningkatkan efisiensi, karena algoritma ini bekerja dengan baik pada fungsi yang tidak konveks, nonsmoothness dan memiliki banyak minimum lokal. Salah satu algoritma optimasi global yang dapat digunakan adalah algoritma Particle Swarm Optimization, yang telah diaplikasikan pada pembelajaran jaringan syaraf tiruan, pengontrol pembangkit listrik, dynamic clustering dan permainan sudoku. Algoritma optimasi Particle Swarm Optimization diperkenalkan oleh Eberhart dan Kennedy pada tahun 1995, yang terinspirasi oleh perilaku sosial sekawanan burung atau ikan[3]. Selain mudah diimplementasikan, algoritma Particle Swarm Optimization juga memiliki tingkat konvergensi yang tinggi dan memiliki keuntungan yang lebih besar daripada Algoritma Genetika diantaranya : Particle

Swarm Optimization lebih mudah untuk diterapkan dan memiliki lebih sedikit parameter yang harus ditentukan, setiap partikel pada Particle Swarm Optimization menyimpan nilai terbaik sebelumnya serta lingkungan terbaik, sehingga ia memiliki kemampuan memori lebih efektif daripada Algoritma Genetika, dan Particle Swarm Optimization lebih efisien dalam memelihara keragaman swarm [4].

Tulisan menjelaskan bagaimana mengestimasi parameter model reaksi enzimatis sintesis biodiesel menggunakan Particle Swarm Optimization dan menganalisis hasil estimasi parameter model reaksi enzimatis sintesis biodiesel menggunakan Particle Swarm Optimization.

METODE PENELITIAN

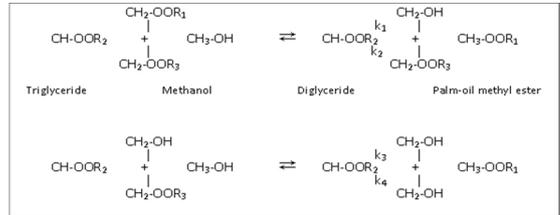
Tahap – tahap penelitian yang dilakukan pada penelitian ini adalah sebagai berikut

1. Tahap pertama
Kajian teori tentang model reaksi enzimatik sintesis biodiesel, estimasi parameter dan Particle Swarm Optimization.
2. Tahap ke dua
Membangkitkan data penelitian dengan metode Runge Kutta. Metode Runge Kutta yang digunakan adalah metode Runge Kutta orde 4, karena metode ini memiliki orde kesalahan yang cukup baik.
3. Tahap ketiga
Penerapan Particle Swarm Optimization untuk estimasi parameter model reaksi enzimatik sintesis biodiesel.
4. Tahap ke empat
Pembuatan program dengan menggunakan software MATLAB.
5. Tahap ke lima
 - a. Simulasi
 - b. Analisa hasil

HASIL DAN PEMBAHASAN

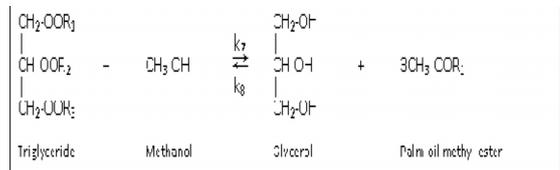
Struktur Model Reaksi Enzimatis Proses Pembentukan Biodiesel. Palm-oil methyl ester adalah salah satu biodiesel yang dibentuk dari minyak alami dan telah diujicoba pada kendaraan di Eropa, Amerika, dan yang terbaru

di Thailand. Berikut adalah salah satu proses kimia untuk mendapatkan palm-oil methyl ester yang akan digunakan sebagai test function dalam proses estimasi parameter.



Gambar 1. Reaksi Kimia Untuk Mendapatkan Palm-Oil

Pada Gambar 1 triglyceride direaksikan dengan methanol untuk menghasilkan diglyceride, diglyceride direaksikan dengan methanol yang kedua untuk menghasilkan monoglyceride dan monoglyceride direaksikan dengan methanol yang ketiga untuk menghasilkan glycerol. Pada tiap tingkatan dihasilkan satu molekul methyl ester sehingga dari proses dihasilkan tiga molekul ester dan satu molekul glycerol seperti yang terlihat pada Gambar 1.



Gambar 2. Penggabungan Reaksi Kimia Untuk Mendapatkan Palm-Oil Methyl Ester

Tiap-tiap reaksi adalah reaksi yang dapat dibalik (*reversible*) dengan konstanta kecepatan yang berbeda (k_n) menunjukkan bahwa reaksi maju dan reaksi kebalikannya mempunyai konstanta kecepatan yang berbeda. Keseluruhan proses kimia dapat dimodelkan dalam persamaan diferensial sebagai berikut:

$$\begin{cases}
 \frac{d[TG]}{dt} = -k_1[TG][A] + k_2[DG][E] \\
 \frac{d[DG]}{dt} = k_1[TG][A] - k_2[DG][E] - k_3[DG][A] + k_4[MG][E] \\
 \frac{d[MG]}{dt} = k_3[DG][A] - k_4[MG][E] - k_5[MG][A] + k_6[GL][E] \\
 \frac{d[GL]}{dt} = k_5[MG][A] - k_6[GL][E] \\
 \frac{d[E]}{dt} = k_1[TG][A] - k_2[DG][E] + k_3[DG][A] - k_4[MG][E] \\
 \quad + k_5[MG][A] - k_6[GL][E] \\
 \frac{d[A]}{dt} = -\frac{d[E]}{dt}
 \end{cases} \tag{1}$$

dimana

- [TG] : konsentrasi molar *triglyceride*
 [DG] : konsentrasi molar *diglyceride*
 [MG] : konsentrasi molar *monoglyceride*
 [A] : konsentrasi molar *methanol*
 [E] : konsentrasi molar *ester*.

Selanjutnya akan dibahas mengenai penyelesaian secara numerik dan estimasi parameter model transesterifikasi minyak sawit dengan methanol seperti yang tampak pada persamaan (1), dimana k_1, k_2, k_3, k_4, k_5 dan k_6 adalah parameter positif [5].

Estimasi Parameter Model Reaksi Biodiesel. Pembangkitan Data Simulasi. Pada penelitian ini, data yang digunakan adalah data hasil pembangkitan data dengan menggunakan metode Runge Kutta. Pembangkitan data dilakukan karena sulitnya memperoleh data hasil penelitian tentang reaksi biodiesel. Pembangkitan data dilakukan dengan memberikan nilai awal $k_1=0,050, k_2=0,11, k_3=0,215, k_4=1,22, k_5=0,242, k_6=0,007$ dan $TG=1 DG=0, A=6$ pada sistem persamaan differensial (1), kemudian solusi numeriknya dengan menggunakan metode Runge-Kutta orde empat dengan $t=[0;10]$ dan $\Delta t=0,1$

Simulasi Estimasi Parameter dengan Menggunakan Data yang Dibangkitkan. Berdasarkan data, dilakukan proses estimasi dengan menggunakan algoritma *Particle Swarm Optimization*, dengan nilai parameter k_1, k_2, k_3, k_4, k_5 dan k_6 , terletak pada interval $[0,2]$ dan $[0,5]$.

Parameter algoritma *Particle Swarm Optimization* sangat menentukan keberhasilan algoritma dalam menyelesaikan masalah optimasi. Oleh karena itu, penentuan parameter yang ada, terutama parameter bobot inersia yang mempengaruhi kekonvergenan, tidak boleh dilakukan secara sembarangan.

Untuk algoritma *Particle Swarm Optimization*, parameter yang diberikan adalah sebagai berikut:

- Iterasi maksimum : 500
- Ukuran *Swarm* : 10; 20; 50; 100; 150
- Kemampuan individu (c_1) : 1,49
- Kemampuan sosial (c_2) : 1,49
- *Inertia weight* (w) : 0,72
- Kecepatan maksimum $v_{maks} : x_{maks}$

Pengambilan nilai parameter c_1, c_2 dan w tersebut didasarkan pada parameter yang sering digunakan pada penelitian sebelumnya [6] dan memenuhi kondisi

$$(i) \sqrt{w}=\sqrt{0,7}=0,8367<1$$

$$(ii) 0,0267=1+w-2\sqrt{w}<c_1+c_2=2,98<1$$

$$w+2\sqrt{w}=3,3733$$

yang menjamin kekonvergenan algoritma tersebut.

Pada kriteria penghentian iterasi ImpAv (*Improvement Average*) juga terdapat parameter yang harus ditentukan. Dalam implementasi program ini, parameter ditentukan sebagai berikut:

- Banyaknya iterasi pengecekan $g : 100$
- Batasan minimum peningkatan rata-rata $m : 0,0001$

Pada penelitian ini percobaan dilakukan sebanyak 5 kali dan diperoleh hasil yang ditampilkan pada Tabel 1 dan 2. Algoritma PSO untuk estimasi parameter adalah sebagai berikut:

Input : $n, w, \text{MaxIter}, \text{ncoba}, c_1, c_2, v_{\text{max}}, \text{dim}$

1. $\text{dim}=6;$
2. Tentukan R1 secara acak
3. Tentukan R2 secara acak
4. for coba = 1:ncoba
 - a. Tentukan position_PSO
 - b. Tentukan velocity_PSO
 - c. $\text{lbest_PSO} = \text{position_PSO}$
 - d. for $i = 1:n$
 1. $x = \text{position_PSO}(i)$
 2. Hitung y dengan menggunakan metode Runge Kutta Orde 4
 3. Hitung $\text{fitness_PSO}(i)$ yaitu antar *Sum Square Error* y dan data Next i
 - e. Tentukan posisi terbaik masing-masing partikel (lbest_fitness_PSO)
 - f. Tentukan Posisi terbaik populasi (gbest_fitness_PSO)
 - g. $\text{iterPSO} = 0$
 - h. while ($\text{iterPSO} < \text{Maxiter}$ and $\text{ImpAv}=0$)
 1. $\text{iterPSO} = \text{iterPSO} + 1$
 2. Lakukan Update Kecepatan velocity_PSO
 3. Lakukan position_PSO

4. Hitung solusi numerik model untuk dengan menggunakan metode Runge Kutta
5. Hitung fitness setiap praktikel
6. Tentukan posisi terbaik masing-masing partikel(lbest_fitness_PSO)
7. Tentukan Posisi terbaik populasi (gbest_fitness_PSO)
8. if current_gbest_fitness_PSO < gbest_fitness_PSO
 gbest_fitness_PSO =
 current_gbest_fitness_PSO
9. Tentukan ImpAv
 End while

Next coba

Output : Waktu Komputasi, Rata-Rata parameter, Parameter Terbaik, Parameter Terjelek

Penyelesaian numerik estimasi parameter ini diimplementasikan dengan menggunakan MATLAB 6.1 dan pengujian program dilakukan pada sistem komputer dengan spesifikasi sebagai berikut:

- Prosesor Intel(R) Pentium(R) Dual CPU T2390 (1.86 GHz, 781 MHz),
- memori 0.99 GB DDR2,
- hard disk berukuran 120 GB

sedangkan sistem operasi yang digunakan adalah sistem operasi Microsoft Windows XP Professional Service Pack 3. Pada penelitian ini program diujikan pada dua domain yang berbeda yaitu [0,2] dan [0,5].

Estimasi Parameter pada Domain [0,2].

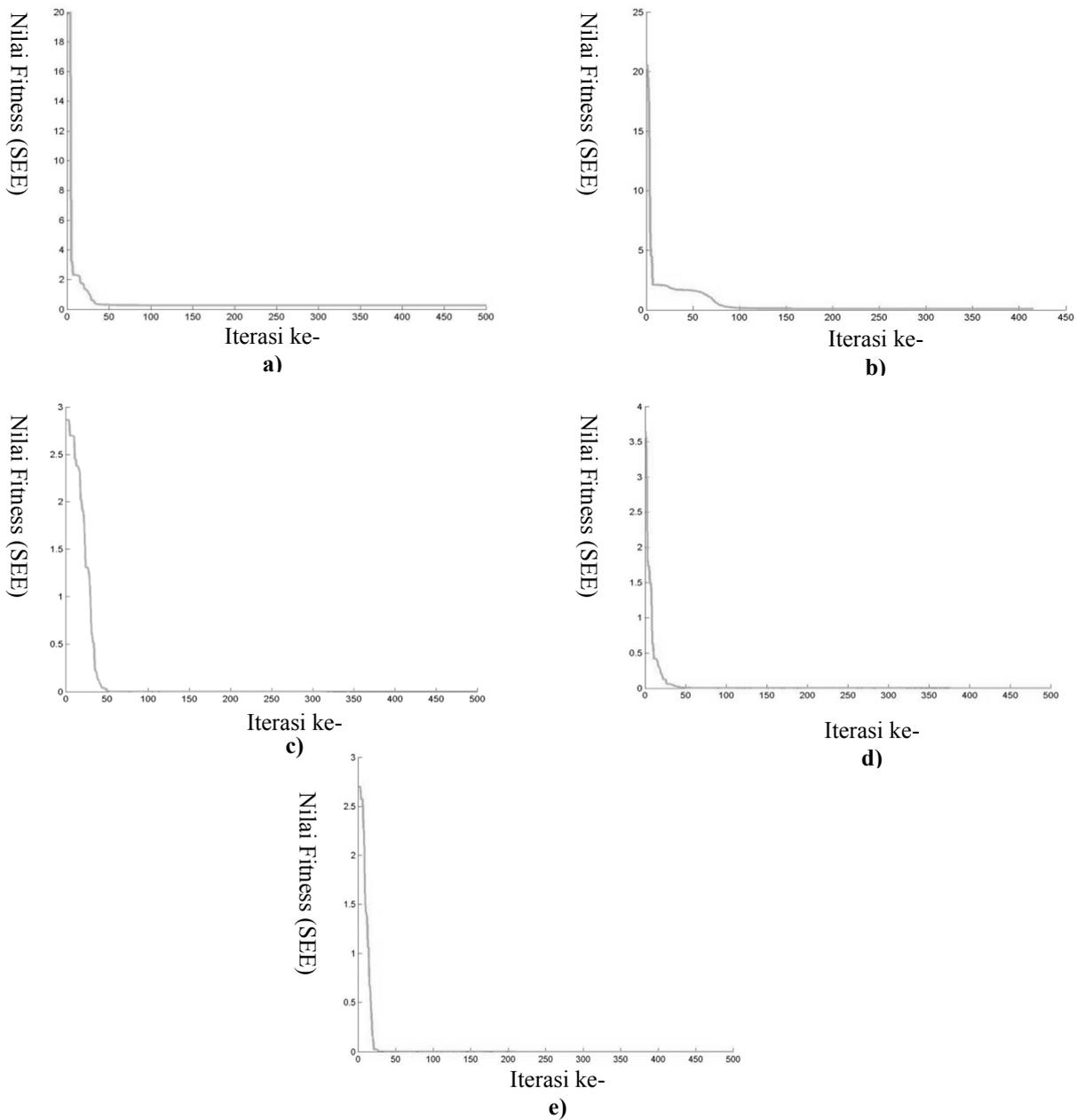
Berdasarkan Tabel 1 hasil estimasi terbaik diperoleh untuk ukuran *Swarm* 150 dengan nilai fitness sebesar $2.51384977 \times 10^{-27}$ dan yang terjelek diperoleh untuk ukuran *Swarm* 10 dengan nilai fitness sebesar 2.845. Parameter yang dihasilkan untuk fitness terbesar adalah sebagai berikut $k_1=0,050000000000000$; $k_2=0,110000000000000$; $k_3=0,215000000000000$; $k_4=1,227999999999995$; $k_5= 0,242000000000000$ dan $k_6= 0,007000000000000$.

Dari Tabel 1 juga dapat dilihat bahwa semakin besar ukuran *Swarm* maka semakin lama waktu komputasi yang dibutuhkan. Di samping itu, dari Tabel 1 juga dapat dilihat bahwa untuk mendapatkan nilai fitness terbaik tidak selalu membutuhkan waktu yang lebih lama daripada waktu komputasi rata-rata.

Perilaku partikel pada algoritma *Particle Swarm Optimization* dapat dilihat pada Gambar 3. Dengan ukuran *Swarm* yang semakin besar maka nilai fitness yg dihasilkan akan semakin baik, hal ini seperti dapat dilihat pada Gambar 3a. Pada awal iterasi nilai fitness yang dihasilkan masih sangat besar, yaitu sekitar 10 untuk ukuran *Swarm* 20. Pada Gambar 3.e diperlihatkan bahwa pada awal iterasi sudah dihasilkan nilai fitness yang kecil, yaitu sekitar 2.7 untuk ukuran *Swarm* 150.

Tabel 1 Hasil Komputasi Estimasi Parameter pada Domain [0,2] dari 5 Kali Percobaan

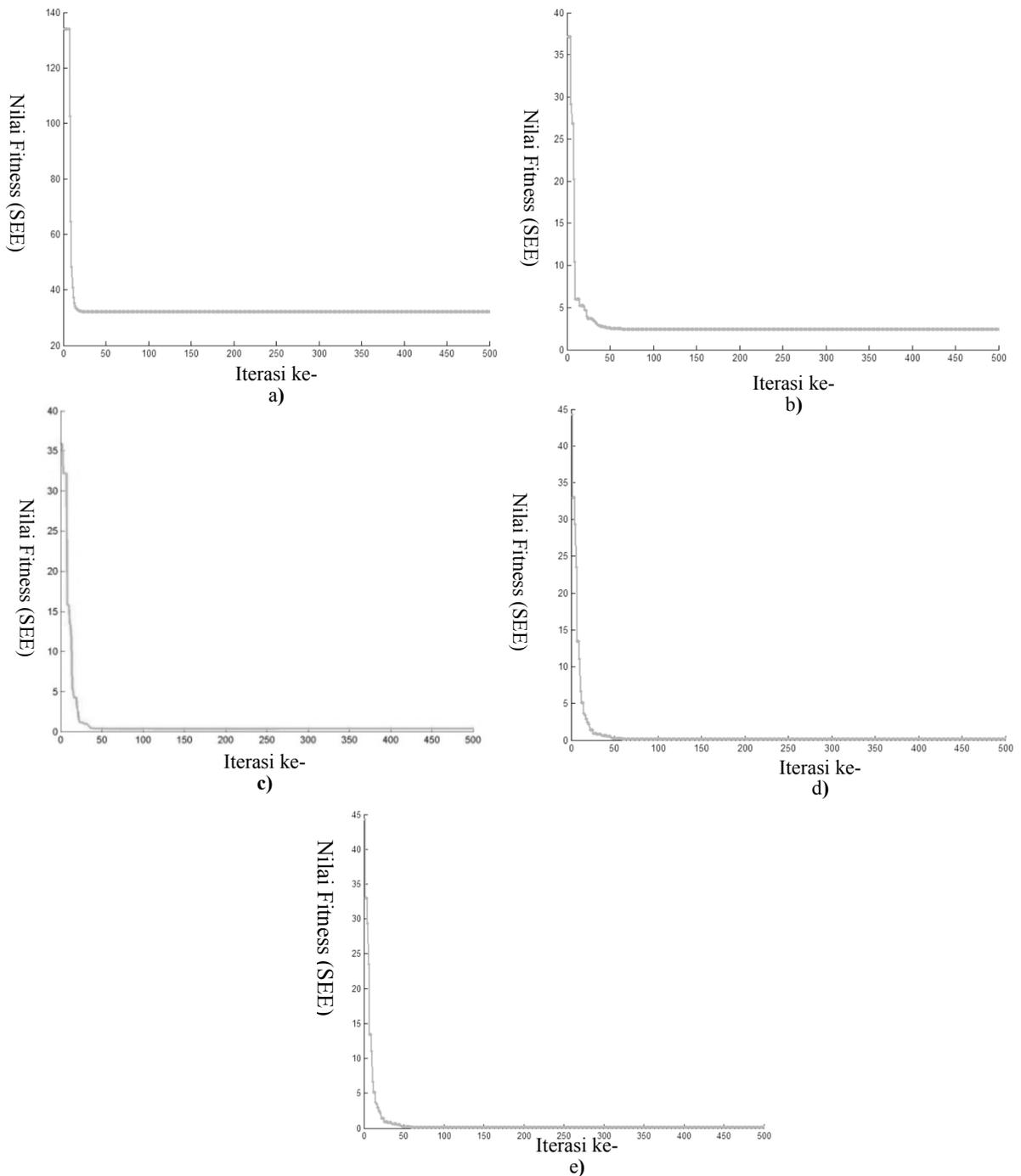
Ukuran <i>Swarm</i>	SSE (Fitness) Terbaik	Waktu Komputasi Pada Saat SSE (Nilai Fitness) Terbaik	SSE (Fitness) Terjelek	Waktu Komputasi Pada Saat SSE (Nilai Fitness) Terjelek	Rata-Rata Waktu Komputasi
10	0,2704	84,1880	2,8451	83,51500	74,8688
20	0,1011	136,0470	2,3344	7,3280	146,3968
50	$2,69 \times 10^{-4}$	386,6250	0,1437	385,5620	387,2842
100	$5,8 \times 10^{-23}$	780,8440	$3,196 \times 10^{-8}$	765,3280	783,1812
150	$2,51 \times 10^{-27}$	1318,0	$3,308 \times 10^{-12}$	1207,3	1221,8



Gambar 3 Hubungan SSE (Nilai Fitness) Terbaik dan Iterasi pada Domain Pencarian [0,2]: a) Ukuran *Swarm* 10, b) Ukuran *Swarm* 20, c) Ukuran *Swarm* 50, d) Ukuran *Swarm* 100, e)Ukuran *Swarm* 150

Estimasi Parameter pada Domain [0,5]. Berdasarkan Tabel 2 hasil estimasi terbaik diperoleh untuk ukuran *Swarm* 150 dengan nilai fitness sebe-sar 0.110283 dan yang terjelek diperoleh untuk ukuran *Swarm* 10 dengan nilai fitness sebesar 104.566490. Sedangkan parameter yang diperoleh dari hasil estimasi parameter

diperoleh ditampilkan pada Table 2. Tabel 2 juga menampilkan nilai-nilai parameter terbaik yaitu $k_1=0,04974419939112$; $k_2=0,10012561467098$; $k_3=0,19824148479283$; $k_4=3,51219855013673$; $k_5=0,59718850763809$ dan $k_6=0$. Dari Tabel 2 juga dapat dilihat bahwa semakin besar ukuran *Swarm* maka semakin lama waktu



Gambar 4. Hubungan SSE (Nilai Fitness) Terbaik dan Iterasi: a)Ukuran Swarm 10, b)Ukuran Swarm 20, c) Ukuran Swarm 50, d)Ukuran Swarm 100, e)Ukuran Swarm 150

komputasi yang dibutuhkan. Disamping itu dari Tabel 2 juga dapat dilihat bahwa pencapaian nilai fitness terbaik tidak selalu membutuhkan

waktu yang lebih lama daripada waktu komputasi rata-rata.

Perilaku partikel pada algoritma *Particle Swarm Optimization* dapat dilihat pada Gambar

- Engineering, Faculty of Engineering, Prince of Songkia University, Thailand.
- [6]Lazinica, A.. 2009. *Particle Swarm Optimization*. In-Tech. Vienna, Austria