

控制与决策

Control and Decision

微生物批式流加发酵过程中的时滞最优控制

刘重阳, 韩美佳

引用本文:

刘重阳, 韩美佳. 微生物批式流加发酵过程中的时滞最优控制[J]. *控制与决策*, 2020, 35(10): 2407–2414.

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.13195/j.kzyjc.2019.0254>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

[非线性时变时延系统的模糊采样最优控制](#)

Fuzzy sampled-data optimal control for nonlinear systems with time-varying delay
控制与决策. 2018, 33(11): 2069–2072 <https://doi.org/10.13195/j.kzyjc.2017.0809>

[含状态和输入时滞的离散时间系统的近似最优跟踪控制](#)

Optimal output tracking control for discrete-time systems with delayed state and input
控制与决策. 2017, 32(1): 157–162 <https://doi.org/10.13195/j.kzyjc.2016.0060>

[一类不受控离散事件驱动不确定线性切换系统优化控制](#)

Optimization control of a class of switched linear uncertain systems driven by uncontrollable discrete-events
控制与决策. 2016, 31(8): 1407–1412 <https://doi.org/10.13195/j.kzyjc.2015.0774>

[基于策略迭代的连续时间系统的随机线性二次最优控制](#)

Stochastic linear quadratic optimal control for continuous-time systems based on policy iteration
控制与决策. 2015(9): 1674–1678 <https://doi.org/10.13195/j.kzyjc.2014.0856>

[基于评价网络近似误差的自适应动态规划优化控制](#)

Adaptive dynamic programming optimal control based on approximation error of critic network
控制与决策. 2015(3): 495–499 <https://doi.org/10.13195/j.kzyjc.2014.0102>

微生物批式流加发酵过程中的时滞最优控制

刘重阳^{1†}, 韩美佳²

(1. 山东工商学院 数学与信息科学学院, 山东 烟台 264005;
2. 山东工商学院 计算机科学与技术学院, 山东 烟台 264005)

摘要: 考虑到 1,3-丙二醇(1,3-PD)批式流加发酵过程中的时滞现象, 提出一个非线性时滞微分方程来描述该过程. 以终端时刻 1,3-PD 的单位时间产量作为性能指标, 同时, 以甘油和碱的流加速度、发酵过程的终端时刻作为控制向量, 建立一个含控制和状态约束的时滞最优控制模型. 为了求解该最优控制问题, 首先通过时间尺度变换, 将该最优控制问题转化为具有固定终端时刻的等价最优控制问题; 然后, 应用控制参数化方法, 将等价的最优控制问题用一系列有限维优化问题来近似; 最后, 构造一种改进的粒子群优化方法来求解相应的近似优化问题. 数值结果表明, 终端时刻的 1,3-PD 的单位时间产量比已有结果提高了约 58%.

关键词: 非线性时滞系统; 控制参数化; 改进粒子群算法; 批式流加发酵

中图分类号: O232

文献标志码: A

DOI: 10.13195/j.kzyjc.2019.0254

开放科学(资源服务)标识码(OSID):



引用格式: 刘重阳, 韩美佳. 微生物批式流加发酵过程中的时滞最优控制 [J]. 控制与决策, 2020, 35(10): 2407-2414.

Time-delay optimal control problem in microbial fed-batch fermentation process

LIU Chong-yang^{1†}, HAN Mei-jia²

(1. School of Mathematics and Information Science, Shandong Technology and Business University, Yantai 264005, China; 2. School of Computer Science and Technology, Shandong Technology and Business University, Yantai 264005, China)

Abstract: Considering the time-delay in fermentation process, we propose a nonlinear time-delay system to describe the fed-batch process of glycerol bioconversion to 1,3-propanediol (1,3-PD). Taking the 1,3-PD yield of per unit time at the terminal time as the performance index, regarding the feeding rates of glycerol and 1,3-PD as well as the terminal time as the control variables, we present a time-delay optimal control problem subject to control and state constraints. To solve this optimal control problem, by using time-scaling transformation, we first transform it into an equivalent one with fixed terminal time. Then, the equivalent problem is approximated by a sequence of finite-dimensional optimization problems using the control parameterization method. Finally, an improved particle swarm optimization method is constructed to solve the approximate optimization problem. Numerical results show that 1,3-PD yield of per unit time at the terminal time increases 58% compared with the previous result.

Keywords: nonlinear time-delay system; control parameterization; improved PSO algorithm; fed-batch fermentation

0 引言

1,3-丙二醇(1,3-PD)是一种无色、无味的粘稠液体, 可以作为单体合成聚酯、聚醚、聚氨酯和杂环化合物等^[1]. 特别地, 以 1,3-PD 为单体合成的新型聚酯材料——聚对苯二甲酸丙二酯, 具有优异的回弹性、易染性、抗污性和可生物降解等特性^[2]. 1,3-PD 已经被广泛地应用于食品、化妆品、制药等众多领域^[3]. 1,3-PD 可以通过化学合成法和微生物发酵法来生产. 与

化学合成法相比, 微生物发酵法生产 1,3-PD 具有条件温和、操作简单、副产物少、绿色环保等优点. 因此, 这方面研究正受到国内外越来越多专家和学者的重视^[4].

1,3-PD 微生物发酵法有 3 种发酵方式: 间歇发酵、连续发酵和批式流加发酵. 批式流加发酵法作为微生物发酵生产 1,3-PD 方式之一, 包括间歇和流加两个模式. 与其他发酵方式相比, 批式流加发酵具

收稿日期: 2019-03-06; 修回日期: 2019-07-08.

基金项目: 国家自然科学基金项目(11771008); 山东省自然科学基金项目(ZR2017MA005, ZR2019MA031).

责任编辑: 张国山.

[†]通讯作者. E-mail: liu_chongyang@yahoo.com.

有克服精细化学品生产过程中产生分解代谢物抑制的能力. 因此, 批式流加发酵已经被广泛应用到工业化生产 1, 3-PD 过程中^[5-6]. 在批式流加发酵过程中甘油和碱被分批次地加入到发酵罐中, 以此保持适宜的发酵环境, 提高 1, 3-PD 的产量. 因此, 在批式流加发酵中对甘油和碱的流加速度的最优控制受到广泛关注. 文献[7]将流加过程看作脉冲形式, 研究了脉冲最优控制问题. 文献[8]研究了批式流加发酵过程的最优多阶段控制问题. 针对间歇过程和流加过程之间的切换, 文献[9]研究了批式流加发酵过程最优切换控制问题. 但是, 上述最优控制研究都忽略了反应过程中的时滞现象. 实际上, 类似于其他实际化工过程, 批式流加发酵过程存在时滞现象^[10]. 因此, 文献[11]研究了批式流加发酵过程的时滞最优切换控制问题. 然而, 上述最优控制研究仅以甘油的流加速度为控制变量, 而碱的流加速度通过一个经验比例常数计算得到, 显然这种方法不能保证碱流加速度的最优性.

本文针对批式流加发酵过程中存在的时滞现象, 以甘油和碱的流加速度及发酵过程的终端时刻作为控制向量, 提出一个含控制的时滞微分方程来描述该过程. 为了最大化 1, 3-PD 生产, 以终端时刻 1, 3-PD 单位时间产量为性能指标, 提出一个含控制和状态约束的时滞最优控制模型. 通过时间尺度变换, 将该最优控制问题转换为等价的具有固定终端时刻的时滞最优控制模型. 然后, 利用控制参数方法和约束转换技术, 将该等价问题用一系列非线性规划问题来近似. 进一步, 提出一种改进的粒子群优化算法求解相应的非线性规划问题. 最后通过数值结果表明了所提出算法的有效性.

1 非线性时滞微分方程

在批式流加发酵生产过程中, 甘油和碱被分批次加入到发酵罐中, 为反应提供足够的营养物质和适宜增长的环境. 根据实际发酵过程, 本文假设:

(H₁): 反应器中反应物的浓度是均匀的, 忽略空间分布的不均匀性.

(H₂): 在批式流加过程中, 只有甘油和碱被加入到发酵罐中.

(H₃): 在每一个流加过程中, 甘油和碱的流加速度都是有限的、连续可微的并且具有有界的导函数.

设 $x(t) = (x_1(t), x_2(t), x_3(t), x_4(t), x_5(t), x_6(t))^T \in R^6$ 为状态向量. $x(t)$ 的分量表示生物量、甘油、1, 3-PD、乙酸和乙醇的浓度及发酵液体积; $x(t - \tau)$ 为时滞状态向量, τ 为一个时滞; x_0 为给定的初始状态. $\phi(t) : R \rightarrow R^6$ 为给定的历史函数; $u(t) = (u_1(t),$

$u_2(t))^T \in R^2$ 为控制函数, 其分量表示甘油和碱的流加速度. 基于假设 (H₁) ~ (H₃), 本文提出如下非线性时滞微分方程:

$$\begin{cases} \dot{x}(t) = f^{(i)}(x(t), x(t - \tau), u(t)); \\ u(t) \in U(t), t \in (t_{i-1}, t_i], i = 1, 2, \dots, 2N + 1; \\ x(0) = x_0; \\ x(t) = \phi(t), t \in [-\tau, 0]. \end{cases} \quad (1)$$

其中: t_{2i} 表示发酵过程中间歇模式的开始时刻, t_{2i+1} 表示发酵过程中流加模式的开始时刻; $t_{2N+1} = T$ 为终端时刻, 且 $2N + 1$ 由终端时刻决定. 特别地, 当 $t \in (t_{2j}, t_{2j+1}], j \in \{0, 1, \dots, N\}$ 时, 批式流加发酵过程处于间歇过程且

$$f^{2j}(x(t), x(t - \tau), u(t)) = \begin{bmatrix} \mu(x(t))x_1(t - \tau) \\ -q_2(x(t))x_1(t - \tau) \\ q_3(x(t))x_1(t - \tau) \\ q_4(x(t))x_1(t - \tau) \\ q_5(x(t))x_1(t - \tau) \\ 0 \end{bmatrix}.$$

当 $t \in (t_{2j+1}, t_{2j+2}], j \in \{0, 1, \dots, N - 1\}$ 时, 批式流加发酵过程处于流加过程且

$$f^{2j+1}(x(t), x(t - \tau), u(t)) = \begin{bmatrix} \mu(x(t))x_1(t - \tau) - D(x(t), u(t))x_1(t) \\ D(x(t), u(t))(C_{s0} - x_2(t)) - q_2(x(t))x_1(t - \tau) \\ q_3(x(t))x_1(t - \tau) - D(x(t), u(t))x_3(t) \\ q_4(x(t))x_1(t - \tau) - D(x(t), u(t))x_4(t) \\ q_5(x(t))x_1(t - \tau) - D(x(t), u(t))x_5(t) \\ u_1(t) + u_2(t) \end{bmatrix}. \quad (2)$$

其中: $C_{s0} > 0$ 表示甘油的初始注入浓度, $D(x(t), u(t))$ 表示 t 时刻的稀释速率, 定义为

$$D(x(t), u(t)) = \frac{u_1(t) + u_2(t)}{x_6(t)}.$$

基于文献 [12], $\mu(x(t))$ 为细胞的比生长率, $q_2(x(t))$ 为底物的比消耗速率, $q_\ell(x(t)) (\ell = 3, 4)$ 为 1, 3-PD 和乙酸的比生成速率, $q_5(x(t))$ 为乙醇的比生成速率. 它们分别定义为

$$\mu(x(t)) = \frac{\Delta_1 x_2(t)}{k_1 + x_2(t)} \prod_{\ell=2}^5 \left(1 - \frac{x_\ell(t)}{x_\ell^*}\right); \quad (3)$$

$$q_2(x(t)) = m_2 + \frac{\mu(x(t))}{Y_2} + \frac{\Delta_2 x_2(t)}{k_2 + x_2(t)}; \quad (4)$$

$$q_\ell(x(t)) = m_\ell + \mu(x(t))Y_\ell + \frac{\Delta_\ell x_2(t)}{k_\ell + x_2(t)}, \ell = 3, 4; \quad (5)$$

$$q_5(x(t)) = \frac{d_1 q_2(x(t))}{d_2 + \mu(x(t))x_2(t)} + \frac{d_3 q_2(x(t))}{d_4 + \mu(x(t))x_2(t)}. \quad (6)$$

其中: Δ_1 为最大比生长率, k_1 为 Monod 饱和常数, m_2 为底物限制条件下底物消耗的维持期, Y_2 为最大生长速率, k_2 为底物的饱和常数, Δ_2 为在底物充分条件下底物消耗速率的最大增量, m_ℓ 为底物限制条件下产物生长的维持期, Y_ℓ 为产物最大产量, k_ℓ 为在底物限制条件下产物形成饱和常数, Δ_ℓ 为在底物充分的条件下产物形成速率的最大增量, d_1 、 d_2 、 d_3 和 d_4 是用于测定乙醇在甘油上的产率常数. 在厌氧条件和 pH 值 7.0 下, 上述动力学参数值如表 1 所示.

表 1 临界浓度及式 (3)~(6) 中参数值^[12]

ℓ	m_ℓ	Y_ℓ	Δ_ℓ	k_ℓ	d_ℓ	$x_{*\ell}$	x_ℓ^*
1	—	—	0.67	0.28	0.025	0.01	6.00
2	2.20	113.60	28.58	11.43	0.060	15	2 039.00
3	-2.69	67.69	26.59	11.50	5.180	0	1 036.00
4	-0.97	33.70	5.74	85.71	50.45	0	1 026.00
5	—	—	—	—	—	0	360.90
6	—	—	—	—	—	5	10.00

式 (1) 中 $u(t)$ 为控制函数, 设 $U(t)$ 表示允许控制函数的集合, 定义为

$$U(t) = \{u(t) | a_{i,l} \leq u_i(t) \leq b_{i,l}, l = 1, 2\}, \\ t \in (t_{i-1}, t_i], i = 1, 2, \dots, 2N + 1.$$

其中: $a_{1,2j+2}, a_{2,2j+2}, b_{1,2j+2}, b_{2,2j+2} (j \in \{0, 1, \dots, N-1\})$ 分别表示甘油和碱的流加速度下界和上界. $a_{1,2j+1}, a_{2,2j+1}, b_{1,2j+1}, b_{2,2j+1} (j \in \{0, 1, \dots, N\})$ 恒等于零. 此时, 任意的由 $[0, T]$ 映射到 R^2 并且满足 $u(t) \in U(t)$ 及 $u(\cdot)$ 在 $t \in (t_{i-1}, t_i] (i = 1, 2, \dots, 2N + 1)$ 上连续可微的函数 u 称为允许控制函数. 同时, 终端时刻 T 也是控制变量, 定义

$$T \in [T_{\min}, T_{\max}], \quad (7)$$

其中 T_{\min} 和 T_{\max} 分别为终端时刻的下界和上界. 此时, 任意满足式 (7) 的终端时刻 T 称为允许终端时刻.

在发酵过程中, 生物量、甘油、1, 3-PD、乙酸、乙醇和发酵液体积存在临界浓度, 超出临界浓度范围细胞将会停止生长甚至死亡. 因此, 根据生物学意义需将生物量、甘油和产物的浓度限制在集合 W 中, 即

$$x^T(t) \in W = \prod_{\ell=1}^6 [x_{*\ell}, x_\ell^*], t \in [0, T]. \quad (8)$$

根据时滞微分方程理论^[13], 可得如下性质.

性质 1 对于给定的 $u(t) \in U(t)$, 有 $t \in [0, T]$ 和 $T \in [T_{\min}, T_{\max}]$, 非线性时滞微分系统 (1) 存在唯一连续解 $x(\cdot | u, T)$, 并且 $x(\cdot | u, T)$ 在 $[0, T]$ 上是一致有界的.

2 最优控制模型

在批式流加发酵过程中, 生产者期望在终端时刻目标产物 1, 3-PD 的产量最大化, 同时也期望操作过程费用最小化. 因此, 以甘油和碱的流加速度为控制函数, 以 1, 3-PD 在终端时刻的单位时间产量为性能指标, 本文提出如下最优控制模型:

$$(OCP) \max J(u, T) = \frac{x_3(T|u, T)x_6(T|u, T)}{T}. \\ \text{s.t. } x^T(t|u, T) \in W; \\ u(t) \in U(t); \\ t \in (t_{i-1}, t_i], i = 1, 2, \dots, 2N + 1; \\ T \in [T_{\min}, T_{\max}].$$

在最优控制问题 (OCP) 中, 终端时间不是固定的而是自由变化的, 这使得系统状态对终端时刻产生隐式依赖性, 从而数值求解时滞微分方程变得非常困难. 为克服这一困难, 现通过如下时间尺度变换:

$$t = Ts,$$

将 $t \in [0, T]$ 映射成为 $s \in [0, 1]$.

令 $\tilde{x}(s) := x(t(s)), \tilde{u}(s) := u(t(s)), \tilde{f}(\tilde{x}(s), \tilde{x}(s-\tilde{\tau}), \tilde{u}(s), T) := Tf(\tilde{x}(s), \tilde{x}(s-\tilde{\tau}), \tilde{u}(s)), \tilde{\phi}(s) := \phi(t(s))$. 系统 (1) 可转化为如下形式:

$$\begin{cases} \dot{\tilde{x}}(s) = \tilde{f}(\tilde{x}(s), \tilde{x}(s-\tilde{\tau}), \tilde{u}(s), T); \\ \tilde{u}(s) \in \tilde{U}(s), s \in (0, 1]; \\ \tilde{x}(0) = x_0; \\ \tilde{x}(s) = \tilde{\phi}(s), s \in [-\tilde{\tau}, 0]. \end{cases} \quad (9)$$

进一步, 原来的切换时刻 t_i 变换为 $s_i = t_i/T$. 令转换后的系统 (9) 的连续解为 $\tilde{x}(\cdot | \tilde{u}, T)$, 则系统的状态约束 (8) 转化为

$$\tilde{x}^T(s | \tilde{u}, T) \in W, s \in [0, 1]. \quad (10)$$

这样, 最优控制问题 (OCP) 可转化为如下等价形式:

$$(EOCP) \max \tilde{J}(\tilde{u}, T) = \frac{\tilde{x}_3(1 | \tilde{u}, T)\tilde{x}_6(1 | \tilde{u}, T)}{T}. \\ \text{s.t. } \tilde{x}^T(s | \tilde{u}, T) \in W; \\ \tilde{u}(s) \in \tilde{U}(s), s \in [0, 1]; \\ T \in [T_{\min}, T_{\max}].$$

值得注意的是: 最优控制问题 (EOCP) 具有固定的终端时刻.

3 计算方法

对于每个 $p_i \geq 1, i = 1, 2, \dots, 2N + 1$, 将时间子区间 $[s_{i-1}, s_i]$ 划分为具有 $n_{p_i} + 1$ 个划分点 $\tau_0^{p_i}, \tau_1^{p_i}, \dots, \tau_{n_{p_i}}^{p_i}$ 的子区间, 并满足以下性质:

$$\begin{cases} \tau_0^{p_i} = s_{i-1}, \\ \tau_{n_{p_i}}^{p_i} = s_i, \\ n_{p_i+1} \geq n_{p_i}, \\ \lim_{p_i \rightarrow \infty} |\tau_k^{p_i} - \tau_{k-1}^{p_i}| = 0. \end{cases}$$

下面通过分段常值函数来近似控制函数:

$$\tilde{u}^p(s|\sigma^p, T) = \sum_{i=1}^{2N+1} \sum_{k=1}^{n_{p_i}} \sigma^{p_i, k} \chi_{(\tau_{k-1}^{p_i}, \tau_k^{p_i}]}(s), \quad s \in [0, 1].$$

其中: $\sigma^p = (\sigma^{p_1}, \dots, \sigma^{p_{2N+1}})$, $\sigma^{p_i} = (\sigma^{p_i, 1}, \dots, \sigma^{p_i, n_{p_i}})$,

$\chi_{(\tau_{k-1}^{p_i}, \tau_k^{p_i}]}$ 为区间 $(\tau_{k-1}^{p_i}, \tau_k^{p_i}]$ 上的示性函数, 定义为

$$\chi_{(\tau_{k-1}^{p_i}, \tau_k^{p_i}]}(s) = \begin{cases} 1, & s \in (\tau_{k-1}^{p_i}, \tau_k^{p_i}]; \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

定义

$$\kappa = \sum_{i=1}^{2N+1} n_{p_i},$$

$$\Xi^p = \{\sigma^p \in R^\kappa | \tilde{u}^p(s|\sigma^p, T) \in \tilde{u}(s), s \in [0, 1]\},$$

则系统(9)成为

$$\begin{cases} \dot{\tilde{x}}(s) = \tilde{f}(\tilde{x}(s), \tilde{x}(s - \tilde{\tau}), \sigma^p, T), \\ \sigma^p \in \Xi^p, \\ \tilde{x}(0) = x_0, \\ \tilde{x}(s) = \tilde{\phi}(s), \quad s \in [-\tilde{\tau}, 0]. \end{cases} \quad (11)$$

设 $\tilde{x}(\cdot|\sigma^p, T)$ 为系统(11)对应于 $\sigma^p \in \Xi^p$ 的连续解, 这样, 约束(10)成为

$$\tilde{x}^T(s|\sigma^p, T) \in W, \quad s \in [0, 1]. \quad (12)$$

应用上述控制参数化方法, 最优控制问题 (EOCP) 可以用如下参数优化问题来近似:

$$(\text{EOCP}(p)) \max \tilde{J}(\sigma^p, T) = \frac{\tilde{x}_3(1|\sigma^p, T)\tilde{x}_6(1|\sigma^p, T)}{T};$$

$$\text{s.t. } \tilde{x}^T(s|\sigma^p, T) \in W,$$

$$\sigma^p \in \Xi^p,$$

$$T \in [T_{\min}, T_{\max}].$$

在 (EOCP(p)) 中, 约束(12)为一个连续状态不等式约束. 该连续状态约束相当于无限多个点约束, 这使得数值求解 (EOCP(p)) 变得十分困难. 为此, 令

$$g_\ell(\tilde{x}(s|\sigma^p, T)) := \tilde{x}_\ell(s|\sigma^p, T) - x_\ell^*,$$

$$g_{6+\ell}(\tilde{x}(s|\sigma^p, T)) := x_{* \ell} - \tilde{x}_\ell(s|\sigma^p, T), \quad \ell = 1, 2, \dots, 6.$$

则式(12)等价于

$$G(\sigma^p, T) = 0,$$

其中

$$G(\sigma^p, T) := \sum_{l=1}^{12} \int_0^1 \max\{0, g_l(\tilde{x}(s|\sigma^p, T))\}^2 ds.$$

下面定理给出了约束 $G(\cdot, \cdot)$ 的梯度计算公式.

定理1 对于约束 $G(\sigma^p, T)$, 其关于参数化控制 σ^p 和 T 的梯度为

$$\frac{\partial G(\sigma^p, T)}{\partial \sigma^p} = \int_0^1 \frac{\partial H(\tilde{x}(s), \tilde{x}(s - \tilde{\tau}), \sigma^p, \lambda(s), T)}{\partial \sigma^p} ds, \quad (13)$$

$$\frac{\partial G(\sigma^p, T)}{\partial T} = \int_0^1 \frac{\partial H(\tilde{x}(s), \tilde{x}(s - \tilde{\tau}), \sigma^p, \lambda(s), T)}{\partial T} ds. \quad (14)$$

其中

$$H(\tilde{x}(s), \tilde{x}(s - \tilde{\tau}), \sigma^p, \lambda(s), T) =$$

$$\sum_{l=1}^{12} \max\{0, g_l(\tilde{x}(s|\sigma^p, T))\}^2 +$$

$$\lambda^T(s) \tilde{f}(\tilde{x}(s), \tilde{x}(s - \tau), \sigma^p, T),$$

$$\lambda(s) = (\lambda_1(s), \lambda_2(s), \lambda_3(s), \lambda_4(s), \lambda_5(s), \lambda_6(s))^T,$$

满足如下协态系统:

$$\dot{\lambda}(s) = - \left(\frac{\partial H(\tilde{x}(s), \tilde{x}(s - \tilde{\tau}), \sigma^p, \lambda(s), T)}{\partial x} \right)^T,$$

边界条件为

$$\lambda(1) = (0, 0, T^{-1}x_6(1), 0, T^{-1}x_3(1)),$$

$$\lambda(s_i+) = \lambda(s_i-), \quad i = 1, 2, \dots, 2N.$$

应用文献 [14] 中第3章的方法, 易证式 (13) 和 (14) 成立, 证明略.

(EOCP(p)) 可视为一个非线性数学规划问题. 许多优化方法, 如基于梯度的优化方法^[14-15], 可以用来求解该问题. 但是, 基于梯度优化的方法仅能得到问题的局部最优解. 为了克服这一局限性, 本文利用粒子群优化算法 (PSO) 来寻找每一个子问题的最优解, PSO 是一种基于群体智能的进化计算方法^[16]. 目前, 粒子群算法在神经网络、优化等领域引起了广泛的关注. 在标准的 PSO (简记为 SdPSO) 中, 将优化问题的每一个解都称为一个粒子, 每个粒子都在搜索空间上以一定的速度飞行, 并且根据自己和群体的经验来动态调整飞行速度, 以此保证每个粒子在搜索过程中围绕着更好的解决方案, 向全局最好的位置飞行, 从而使优化问题得到最优解.

SdPSO 算法用来处理无约束的优化问题, 但是本文解决的是一个带有控制和状态约束的优化问题. 因此, 本文对标准的 PSO 提出了一些改进策略. 为了方便, 后面将改进的粒子群优化算法简记为 ImPSO 算法. 在定理 1 的基础上, 本文利用约束的梯度提出一个处理状态约束的策略, 同时, 介绍一种新

的粒子速度和位置的更新策略. 第 i 个粒子的位置和速度分别用 $\tilde{\sigma}_i^p = (\sigma_{i,1}^p, \sigma_{i,2}^p, \dots, \sigma_{i,k}^p, T)$ 和 $\tilde{v}_i^p = (v_{i,1}^p, v_{i,2}^p, \dots, v_{i,k}^p, T)$ 表示. 在第 $k + 1$ 次迭代时, 第 i 个粒子的迭代方式如下.

1) 速度和位置迭代更新策略.

通过以下迭代公式来更新速度和位置以平衡全局和找到局部最优值:

$$\begin{aligned} \tilde{v}_{i,j}^p(k+1) &= \\ \omega_{i,j}(k)\tilde{v}_{i,j}^p(k) &+ c_1(k)r_{i,j}^1(pb_{i,j}^p - \tilde{\sigma}_{i,j}^p(k)) + \\ c_2(k)r_{i,j}^2 &(gb_j^p - \tilde{\sigma}_{i,j}^p(k)), \\ \tilde{\sigma}_{i,j}^p(k+1) &= r_{i,j}^3\tilde{\sigma}_{i,j}^p(k) + (1 - r_{i,j}^3)\tilde{v}_{i,j}^p(k+1). \end{aligned}$$

其中: $pb_i^p = (pb_{i,1}^p, pb_{i,2}^p, \dots, pb_{i,k}^p)^T$ 是粒子历史最好的位置, $gb^p = (gb_1^p, gb_2^p, \dots, gb_k^p)^T$ 是全局的最优位置, $r_{i,j}^1$ 、 $r_{i,j}^2$ 、 $r_{i,j}^3$ 是在 $[0, 1]$ 范围内的随机数, $c_1(k)$ 、 $c_2(k)$ 是系数, $\omega(k)$ 是惯性权重. 它们分别定义为

$$\begin{aligned} c_1(k) &= \sin^2\left(\frac{\pi(it_{\max} - k)}{2it_{\max}}\right), \\ c_2(k) &= \sin^2\left(\frac{\pi k}{2it_{\max}}\right), \\ \omega(k) &= \omega_{\max} - (\omega_{\max} - \omega_{\min})\left(\frac{k}{it_{\max}}\right)^2. \end{aligned}$$

其中: it_{\max} 为最大迭代步数, ω_{\max} 为惯性权重的最大值, ω_{\min} 为惯性权重的最小值.

2) 处理控制出界策略.

假定第 i 个粒子在 $k + 1$ 迭代的位置的第 j 个分量违反了边界约束, 则对其重新规定, 即

$$\tilde{\sigma}_{i,j}^p(k+1) = \begin{cases} \tilde{\sigma}_{low,j}, & \tilde{\sigma}_{i,j}^p(k+1) \leq \tilde{\sigma}_{low,j}; \\ \tilde{\sigma}_{up,j}, & \tilde{\sigma}_{i,j}^p(k+1) \geq \tilde{\sigma}_{up,j}. \end{cases}$$

其中 $\tilde{\sigma}_{low,j}$ 和 $\tilde{\sigma}_{up,j}$ 分别表示位置的下界和上界.

3) 处理状态约束策略.

在第 k 次迭代时, 对于第 $i + 1$ 个粒子检验约束 $G(\tilde{\sigma}^p(k))$, 如果 $G(\tilde{\sigma}^p(k)) = 0$, 则 $\tilde{\sigma}^p(k)$ 为可行的参数化控制, 否则沿 $-\frac{\partial G(\tilde{\sigma}^p(k))}{\partial \tilde{\sigma}^p(k)}$ 方向移动.

4) 终止准则.

算法达到最大迭代步数 it_{\max} 时, 算法终止.

4 数值仿真

为了检验 ImPSO 算法, 本文通过两个数值例子验证了其有效性, 并将 ImPSO 算法应用到求解 EOCP(p) 中.

4.1 数值例子

本文选取文献 [17] 中 Sphere 函数和 Generalized Rastrigrin 函数进行测试, 每个函数的全局最小值为 0, 它们的函数表达式如下.

1) Sphere 函数

$$f_1(x) = \sum_{i=1}^{30} x_i^2, \quad x_i \in (-100, 100), \quad i = 1, 2, \dots, 30.$$

2) Generalized Rastrigrin 函数

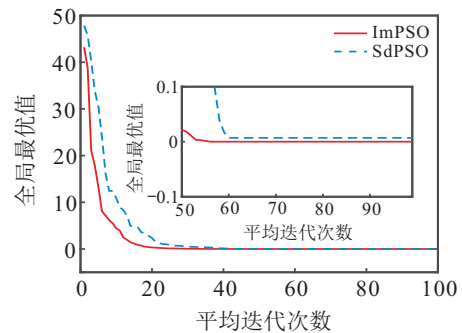
$$f_2(x) = \sum_{i=1}^{30} [x_i^2 - 10 \cos(2\pi x_i) + 10],$$

$$x_i \in (-10, 10), \quad i = 1, 2, \dots, 30.$$

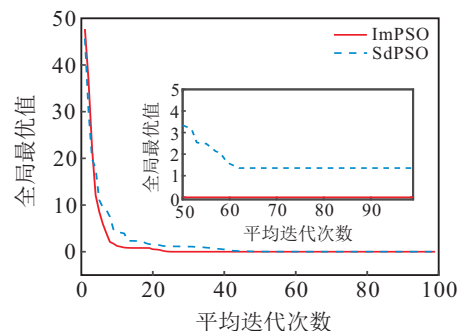
应用 ImPSO 算法和 SdPSO 算法对 Sphere 函数和 Generalized Rastrigrin 函数进行求解, 为保证结果的可靠性, 本文对两个函数进行多次求解取平均, 求解结果如表 2 所示, 两种算法的收敛性见图 1. 图 1 中同时给出迭代步数 50~99 次的小图, 以便更清晰地显示收敛效果. 这里, SdPSO 算法参数设置为 $\omega = 0.5$, $c_1 = c_2 = 2.0$, 种群初始粒子个数为 50, 最大迭代步数 $it_{\max} = 100$, 运行次数为 50 次. ImPSO 算法参数设置为: 惯性权重的最大值 $\omega_{\max} = 0.9$, 惯性权重的最小值 $\omega_{\min} = 0.4$, $\pi = 3.14$, 种群初始粒子个数为 50, 最大迭代步数 $it_{\max} = 100$, 运行次数为 50 次. 由表 2 和图 1 可以看出 ImPSO 算法的可行性和有效性.

表 2 测试结果

测试函数	算法	平均迭代次数	平均迭代时间/s	平均全局最优
$f_1(x)$	SdPSO ^[16]	61	0.128 8	0.006 939
	ImPSO	56	0.143 2	6.21e-30
$f_2(x)$	SdPSO ^[16]	62	0.140 1	1.355 3
	ImPSO	35	0.175 2	1.06e-17



(a) Sphere 函数



(b) Generalized Rastrigrin 函数

图 1 算法迭代结果

4.2 求解EOCP(p)问题

应用ImPSO算法求解EOCP(p),本文采用与文献[18-19]中同样的环境设置.反应过程中生物量、甘油、1,3-PD、乙酸、乙醇的反应初始浓度和初始发酵液体积为 $x_0 = (0.1115 \text{ g/L}, 495 \text{ mmol/L}, 0, 0, 0, 5 \text{ L})^T$;初始甘油流加浓度为 $C_{s0} = 10762 \text{ g/L}$.终端时刻的上下界为 $T_{\min} = 11.00 \text{ h}$ 和 $T_{\max} = 24.16 \text{ h}$.根据实验和实际发酵过程,本文将批式流加发酵过程分为10个阶段(阶段I~阶段X).阶段I结束时刻为5.33h,阶段II到阶段X每个阶段采取的策略为每100s中有5s、7s、8s、7s、6s、4s、3s、2s和1s为

流加模式,其余时间为间歇模式.表3列出了甘油的流加速度的上下界,表4列出了碱的流加速度的上下界.

表3 在II~X阶段的甘油流加速度上下界^[20]

阶段	II、III	IV	V、VI	VII	VIII	IX、X
上界	0.2524	0.2390	0.2524	0.2657	0.2924	0.3058
下界	0.1682	0.1594	0.1682	0.1771	0.1949	0.2038

表4 在II~X阶段的碱流加速度上下界

阶段	II、III	IV	V、VI	VII	VIII	IX、X
上界	0.1893	0.17925	0.1893	0.1993	0.2193	0.2294
下界	0.1262	0.1196	0.1262	0.1328	0.1462	0.1529

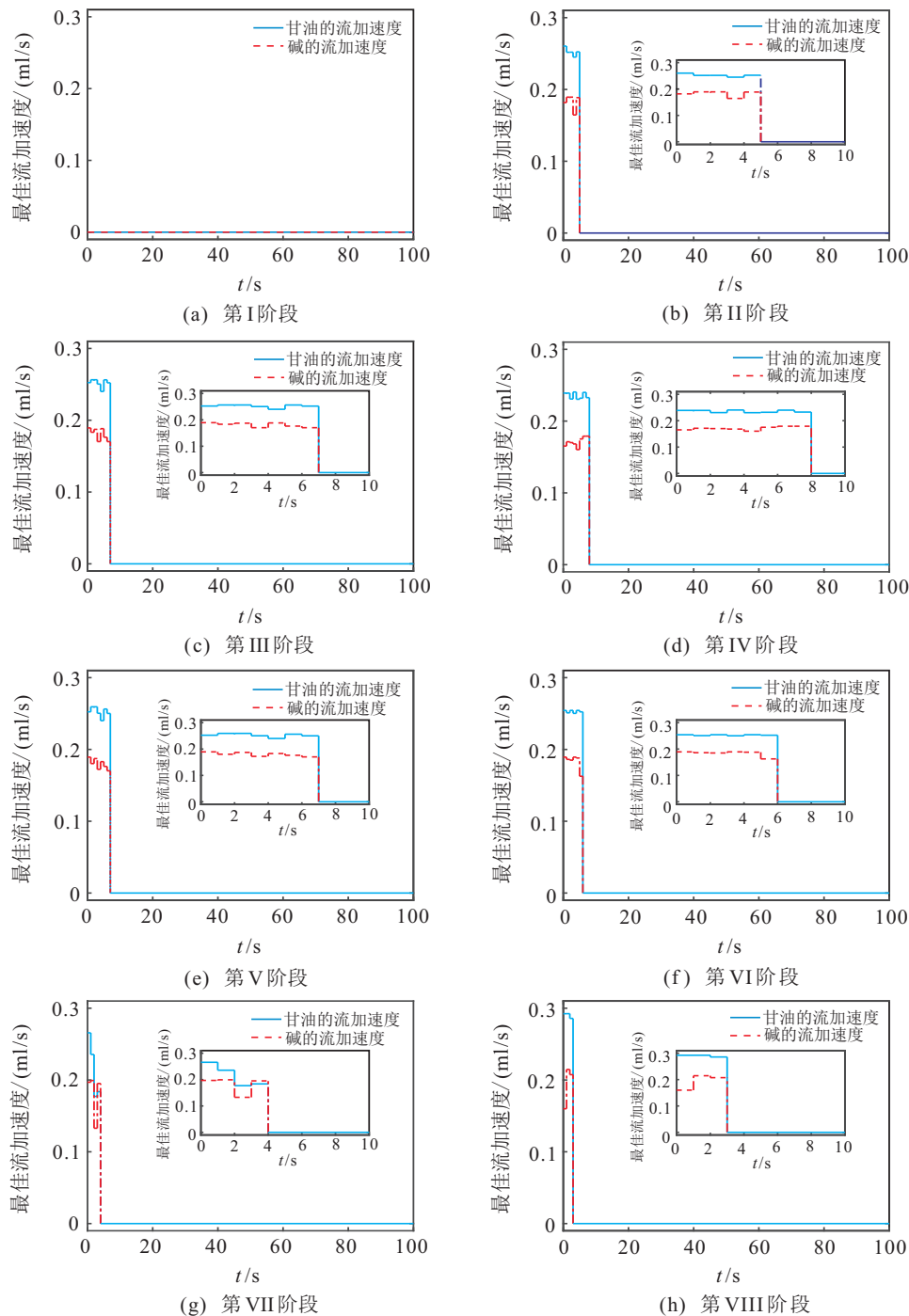


图2 批式流加发酵过程中甘油和碱的最优流加速度

应用控制参数化方法及 ImPSO 算法, 本文得到最优终端时刻 $T = 17.6537\text{h}$. 根据批式流加过程, 该终端时刻位于第 VIII 个阶段, 即 IX、X 阶段对优化结果不产生影响, 故本文仅绘制了前 8 阶段甘油和碱的最优流加策略. 甘油和碱在 I~VIII 阶段的最优流加策略如图 2 所示. 特别地, 为了更清晰地显示计算结果, 图 2 中小图绘制每个阶段前 10s 甘油和碱的最优流加策略. 这里, 实线表示甘油的最优流速, 虚线表示碱的最优流速. 应用所得的最优流加速度与最优终端时刻, 图 3~图 6 分别给出了生物量浓度、甘油浓度、1, 3-PD 浓度和发酵液体积随发酵时间的变化情况.

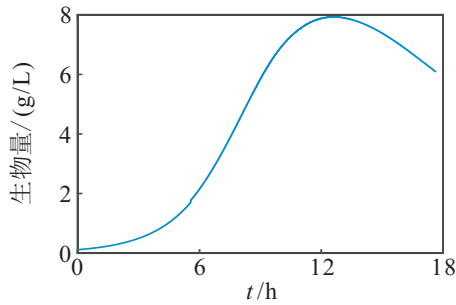


图 3 生物量浓度随发酵时间的变化情况

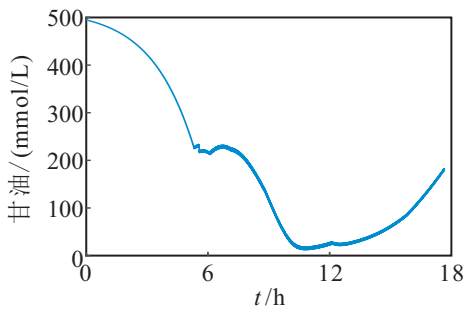


图 4 甘油浓度随发酵时间的变化情况

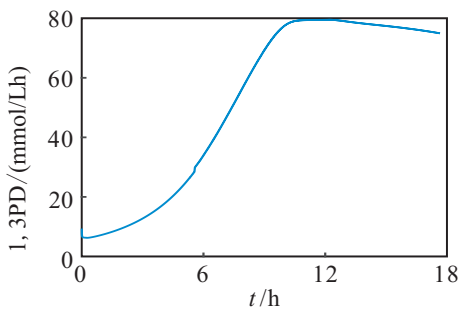


图 5 1, 3-PD 浓度随发酵时间的变化情况

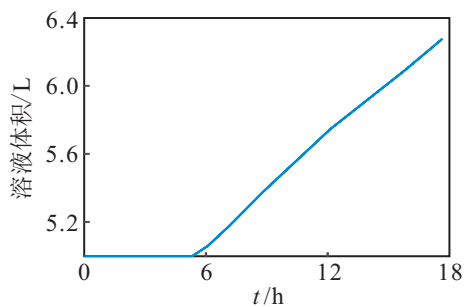


图 6 发酵液体积随发酵时间变化情况

应用所得的最优策略, 本文得到终端时刻 1, 3-PD 单位时间产量为 470.483mmol/h . 本文与文献 [19] 中的实验结果 238.33mmol/h 相比提高了约 97.4%. 这里, 文献 [19] 中流加策略为甘油和碱分开流加, 并且它们的流加速度为常值. 本文结果也比文献 [20] 中的结果 297.786mmol/h 提高了约 58%. 这里, 文献 [20] 中运用差分演化算法 (differential evolution algorithm) 对甘油的流加速度进行优化, 同时, 通过经验比例系数得到碱的流加速度. 图 7 给出了 1, 3-PD 单位时间产量随发酵时间的变化情况. 由图 7 可以看出, 终端时刻 1, 3-PD 单位时间的产量确实比文献 [20] 中结果有明显提高. 图 8 给出了本文中算法以及文献 [20] 中算法的迭代结果, 由图 8 可看出, 在相同的迭代步数情况下, 本文设计的粒子群算法比文献 [20] 的算法能找到更好的目标函数值.

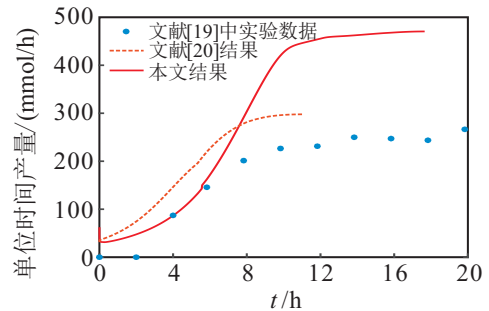


图 7 1, 3-PD 单位时间产量随发酵时间的变化情况

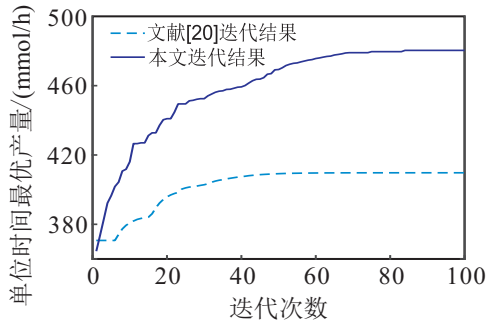


图 8 算法迭代结果

5 结论

本文提出一个含有多个控制变量的时滞微分系统来描述 1, 3-PD 批式流加生产过程. 以终端时刻 1, 3-PD 的单位时间产量为性能指标, 建立了时滞最优控制模型. 应用控制参数化、时间尺度转化和约束转化技术, 将时滞最优控制问题转化为一系列非线性规划问题. 同时, 本文提出一种改进的粒子群优化方法求解相应的非线性规划问题. 数值结果表明: 与文献 [20] 中结果相比, 终端时刻 1, 3-PD 单位时间产量有显著增加.

参考文献(References)

- [1] Saxena R K, Anand P, Saran S, et al. Microbial production of 1,3-propanediol: Recent developments and emerging opportunities[J]. *Biotechnology Advances*, 2009, 27(6): 895-913.
- [2] Kurian J V. A new polymer platform for the future sorona from corn derived 1,3-propanediol[J]. *Journal of Polymers and the Environment*, 2005, 13(2): 159-167.
- [3] Kumar V, Durgapal M, Sankaranarayanan M, et al. Effects of mutation of 2,3-butanediol formation pathway on glycerol metabolism and 1,3-propanediol production by *Klebsiella pneumoniae* J2B[J]. *Bioresource Technology*, 2016, 214(4): 432-440.
- [4] 蔡文涛, 修志龙. 甘油歧化生产1,3-丙二醇过程的代谢和基因调控机理研究进展[J]. *中国生物工程杂志*, 2003, 23(2): 64-68.
(Qi W T, Xiu Z L. Progress in metabolism and gene regulation mechanism during production of 1,3-propanediol by disproportionation of glycerol[J]. *Journal of Chinese Biotechnology*, 2003, 23(2): 64-68.)
- [5] 袁金龙, 冯殊伦, 冯恩民. 甘油间歇发酵酶催化非线性动力系统的强稳定[J]. *控制与决策*, 2014, 29(8): 1505-1508.
(Yuan J L, Feng S L, Feng E M. Strong stability of enzyme-catalytic nonlinear dynamic system in batch fermentation of glycerol[J]. *Control and Decision*, 2014, 29(8): 1505-1508.)
- [6] Liu C Y, Gong Z H. Optimal control of switched systems arising in fermentation processes[M]. Berlin: Springer-Verlag, 2014.
- [7] Bao B, Yin H C, Feng E M. Computation of impulsive optimal control for 1,3-PD fed-batch culture[J]. *Journal of Process Control*, 2015, 34(10): 49-55.
- [8] Liu C Y, Gong Z H, Feng E M. Modelling and optimal control for nonlinear multistage dynamical system of microbial fed-batch culture[J]. *Journal of Industrial and Management Optimization*, 2009, 5(4): 835-850.
- [9] Ye J X, Xu H L, Feng E M, et al. Optimization of a fed-batch bioreactor for 1,3-propanediol production using hybrid nonlinear optimal control[J]. *Journal of Process Control*, 2014, 24(10): 1556-1569.
- [10] Xiu Z L, Song B H, Sun L H, et al. Theoretical analysis of effects of metabolic overflow and time delay on the performance and dynamic behavior of a two-stage fermentation process[J]. *Biochemical Engineering Journal*, 2002, 11(2/3): 101-109.
- [11] Liu C Y. Optimal control of a switched autonomous system with time delay arising in fed-batch processes[J]. *IMA Journal of Applied Mathematics*, 2015, 80(2): 569-584.
- [12] 修志龙, 曾安平, 安利佳. 甘油生物转化为1,3-丙二醇过程的动力学数学模拟和多稳态研究[J]. *大连理工大学学报*, 2000, 44(4): 428-433.
(Xiu Z L, Zeng A P, An L J. Mathematical modelling of kinetics and research on multiplicity of glycerol bioconversion to 1,3-propanediol[J]. *Journal of Dalian University of Technology*, 2000, 44(4): 428-433.)
- [13] Hale J K, Verduyn L S M. Introduction to functional-differential equations[M]. Berlin: Springer, 1993.
- [14] Teo K L, Goh G J, Wong K H. A unified computational approach to optimal control problems[M]. Essex: Longman Scientific & Technical, 1991.
- [15] Bryson A, Ho Y C. Applied optimal control[M]. New York: Halsted Press, 1975.
- [16] Kennedy J, Eberhart R C. Particle swarm optimization[C]. *Proceedings of the 1995 IEEE International Conference on Neural Networks*. Perth, 1995, 4: 1942-1948.
- [17] 窦全胜, 陈姝颖. 演化计算方法及应用[M]. 北京: 电子工业出版社, 2016.
(Dou Q S, Chen S Y. Evolutionary calculation method and its application[M]. Beijing: Publishing House of Electronics Industry, 2016.)
- [18] Mu Y, Zhang D J, Teng H, et al. Microbial production of 1,3-propanediol by *Klebsiella pneumoniae* using crude glycerol from biodiesel preparation[J]. *Biotechnology Letters*, 2006, 28(21): 1755-1759.
- [19] Liu C Y, Gong Z H, Feng E M. Optimal control for a nonlinear time-delay system in fed-batch fermentation[J]. *Pacific Journal of Optimization*, 2013, 9(4): 595-612.
- [20] Liu C Y, Gong Z H, Hou Z Y, et al. Optimal control of a fed-batch fermentation involving multiple feeds[J]. *Journal of Applied Mathematics*, 2012, 245315: 1-13.

作者简介

刘重阳(1977—),男,教授,从事最优控制理论等研究, E-mail: liu_chongyang@yahoo.com;

韩美佳(1994—),女,硕士生,从事最优控制理论的研究, E-mail: g_shanmeijia@163.com.

(责任编辑: 孙艺红)