

文章编号: 1671-9352(2024)01-0124-08 DOI: 10.6040/j.issn.1671-9352.0.2022.542

# 1,3-丙二醇间歇发酵中的时滞最优控制

王晓<sup>1</sup>, 刘重阳<sup>2\*</sup>, 胡电中<sup>3</sup>, 刘刚<sup>3</sup>

(1. 山东工商学院信息与电子工程学院, 山东烟台 264005; 2. 山东工商学院数学与信息科学学院, 山东烟台 264005; 3. 烟台海颐软件股份有限公司, 山东烟台 264000)

**摘要:** 在甘油通过间歇发酵转化为1,3-丙二醇的生产过程中, 微生物和甘油的初始浓度会影响产物的生产效率。为了最大化1,3-丙二醇生产效率, 提出了一个含有约束的时滞最优控制模型。对于该时滞最优控制问题, 首先, 通过时域变换将其转化为一个等价的最优控制问题; 然后, 使用罚函数方法来处理其中的约束条件; 最后, 构造了一种模拟退火与遗传混合算法对其进行求解。数值结果表明, 终端时刻1,3-丙二醇的生产效率比已有结果提高了21.12%。

**关键词:** 非线性时滞系统; 最优控制; 间歇发酵; 模拟退火算法; 遗传算法

**中图分类号:** O232 **文献标志码:** A

**引用格式:** 王晓, 刘重阳, 胡电中, 等. 1,3-丙二醇间歇发酵中的时滞最优控制[J]. 山东大学学报(理学版), 2024, 59(1): 124-131, 138.

## Delay optimal control of 1,3-propanediol batch fermentation

WANG Xiao<sup>1</sup>, LIU Chongyang<sup>2\*</sup>, HU Dianzhong<sup>3</sup>, LIU Gang<sup>3</sup>

(1. School of Information and Electronical Engineering, Shandong Technology and Business University, Yantai 264005, Shandong, China; 2. School of Mathematics and Information Science, Shandong Technology and Business University, Yantai 264005, Shandong, China; 3. Yantai Haiyi Software Co., Ltd., Yantai 264000, Shandong, China)

**Abstract:** In the batch process of glycerol bioconversion to 1,3-propanediol, the initial biomass and glycerol concentration will affect the productivity of 1,3-propanediol. This paper proposes a constrained delay optimal control model to maximize the productivity of 1,3-propanediol. For this problem, the time-scaling transformation is applied to convert it to an optimal control problem with fixed terminal time. Then, the penalty method is used to deal with the constraints in the optimal control problem. Finally, a hybrid algorithm of simulated annealing and genetic algorithm is developed to solve the resulting problem. Numerical results indicate that the productivity of 1,3-propanediol increases by 21.12% compared with the previous result.

**Key words:** nonlinear time-delay system; optimal control; batch fermentation; simulated annealing algorithm; genetic algorithm

## 0 引言

1,3-丙二醇是一种重要的有机化工原料, 广泛应用于润滑剂、药品和化妆品等制造业中<sup>[1]</sup>。1,3-丙二醇可通过化学合成或微生物发酵法得到。微生物发酵的方法操作简单, 绿色环保且反应条件温和<sup>[2]</sup>。微生物发酵法生产1,3-丙二醇的操作方式有3种, 即间歇方式、批式流加方式和连续方式。其中间歇发酵是批式流加发酵和连续发酵的基础, 具有不易染菌、操作成本较低和操作过程简易等优点。

近年来, 国内外学者非常重视微生物间歇生产1,3-丙二醇方面的研究。2004年, 高彩霞等<sup>[3]</sup>建立了间歇发酵过程的参数辨识模型并研究了相应的最优控制问题。2009年, 王磊等<sup>[4]</sup>研究了间歇发酵中改进的多阶段系统的参数辨识问题。2014年, Cheng等<sup>[5]</sup>研究了1,3-丙二醇间歇生产过程的最优控制问题; 然而, 上

收稿日期: 2022-10-10; 网络出版时间: 2023-02-16 16:13:26

网络出版地址: <https://link.cnki.net/urlid/37.1389.N.20230216.0938.010>

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(12271307)

第一作者简介: 王晓(1997—), 男, 硕士研究生, 研究方向为最优控制理论、算法及应用。E-mail: 13854812465@163.com

\* 通信作者简介: 刘重阳(1977—), 男, 教授, 博士, 研究方向为最优控制理论、算法及应用。E-mail: chongyangliu@aliyun.com

述非线性系统中均未考虑时滞影响。2013年,刘重阳<sup>[6]</sup>提出了一个非线性时滞系统来描述发酵过程,并建立了一个受连续状态约束和参数约束的参数辨识模型。基于文献[6],2014年,Yu<sup>[7]</sup>研究了间歇过程的非线性时滞最优控制问题;上述最优控制问题中均未考虑甘油的消耗速率。

针对微生物间歇发酵过程,本文提出了一个含控制的时滞微分方程系统来描述这一过程。为了最大化1,3-丙二醇的生产效率,建立了一个含有甘油消耗率和连续状态不等式约束的最优控制模型。通过时域变换技术将其转化为一个等价的最优控制问题;然后,引入罚函数来处理甘油消耗速率和连续状态不等式约束;进一步,构造了一种模拟退火与遗传混合算法来求解转化后的问题;最后,通过数值求解得到最优的结果。

## 1 间歇发酵动力学系统

在间歇发酵开始前,需向发酵罐内添加底物和微生物菌种,并在指定条件下搅拌均匀,同时,微生物在生成产物之前必须经历生长过程,因此,发酵过程中存在时滞<sup>[8]</sup>。根据发酵过程,作出如下假设:

(H1) 在发酵过程中,不向发酵罐添加或取出微生物、底物和产物。

(H2) 发酵罐里的所有物质浓度分布均匀。

(H3) 发酵时刻  $t$  的物质浓度由  $t-\tau$  时刻的生物量决定,这里,  $\tau$  是一个给定的时滞参数。

基于假设(H1)–(H3),微生物间歇发酵过程的物量平衡方程可表示为如下时滞微分方程组<sup>[8]</sup>:

$$\begin{cases} \dot{x}_1(t) = \mu(t)x_1(t-\tau), \\ \dot{x}_2(t) = -q_2(t)x_1(t-\tau), \quad t \in (0, t_f], \\ \dot{x}_i(t) = q_i(t)x_1(t-\tau), \quad i = 3, 4, 5, \end{cases} \quad (1)$$

$$\mathbf{x}(t) = \boldsymbol{\phi}(t, \boldsymbol{\xi}), \quad t \leq 0, \quad (2)$$

其中,  $\mathbf{x}(t) := [x_1(t), x_2(t), x_3(t), x_4(t), x_5(t)]^T$  为状态向量,其分量分别表示生物量( $\text{g} \cdot \text{L}^{-1}$ )、甘油浓度( $\text{mmol} \cdot \text{L}^{-1}$ )、1,3-丙二醇的浓度( $\text{mmol} \cdot \text{L}^{-1}$ )、乙酸的浓度( $\text{mmol} \cdot \text{L}^{-1}$ )和乙醇的浓度( $\text{mmol} \cdot \text{L}^{-1}$ );  $t_f$  是终端时刻;  $\boldsymbol{\xi} := [\xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4, \xi_5]^T$  是初始状态,  $\boldsymbol{\phi}: \mathbf{R} \times \mathbf{R}^5 \rightarrow \mathbf{R}^5$  是一个给定的历史函数。此外,细胞比生长速率  $\mu(t)$ 、底物的比消耗速率  $q_2(t)$  和产物的比生成速率  $q_i(t)$ ,  $i = 3, 4, 5$ , 可表示为

$$\mu(t) = \mu_m \frac{x_2(t)}{x_2(t) + k_1} \prod_{i=2}^5 \left( 1 - \frac{x_i(t)}{x_i^*} \right), \quad (3)$$

$$q_2(t) = m_2(t) + \frac{\mu(t)}{Y_2}, \quad (4)$$

$$q_i(t) = m_i + \mu(t)Y_i, \quad i = 3, 4, 5, \quad (5)$$

式中:  $k_1$  ( $\text{mmol} \cdot \text{L}^{-1}$ ) 为 Monod 饱和常数;  $\mu_m$  ( $\text{h}^{-1}$ ) 是最大比生长率;  $m_2$  ( $\text{mmol} \cdot \text{g}^{-1} \cdot \text{h}^{-1}$ ) 是底物限制条件下底物消耗的维持期;  $m_i$ ,  $i = 3, 4, 5$ , ( $\text{mmol} \cdot \text{g}^{-1} \cdot \text{h}^{-1}$ ) 为底物限制条件下产物生长的维持期;  $Y_2$  ( $\text{mmol} \cdot \text{g}^{-1}$ ) 是最大生长速率;  $Y_i$ ,  $i = 3, 4, 5$ , ( $\text{mmol} \cdot \text{g}^{-1}$ ) 为产物的最大产量。在温度  $37^\circ\text{C}$  和 pH 为 7.0 的条件下,式(3)–(5)中的参数值列在表1中。

在系统(1)中,初始的生物量、甘油浓度和终端时刻是优化变量。设  $\mathbf{u} = (u_1, u_2)^T \in \mathbf{R}^2$  为生物量和甘油的初始向量。定义生物量和底物的初始浓度的取值范围为

$$U_{\text{ad}} := [u_1^a, u_1^b] \times [u_2^a, u_2^b],$$

其中:  $u_i^a$  是第  $i$  个物质初始浓度的下界;  $u_i^b$  是第  $i$  个物质初始浓度的上界。另外,定义终端时刻的取值范围为

$$T_{\text{ad}} := \{t_f \in \mathbf{R} : t_a \leq t_f \leq t_b\}, \quad (6)$$

其中  $t_a$  和  $t_b$  分别是  $t_f$  的下界与上界。

在发酵过程中,为了保证细胞正常生长,应将生物量、底物和产物浓度控制在一定的范围里,因此,令  $S_0$  为生物量、底物和产物的浓度范围集合,则

$$\mathbf{x}(t) \in S_0 := \prod_{i=1}^5 [x_{*i}, x_i^*], \quad t \in [0, t_f], \quad (7)$$

其中  $x_{*i}$  和  $x_i^*$ ,  $i=1,2,3,4,5$ , 为生物量、底物和产物的临界浓度, 它的值列在表 1 中。

表 1 系统(1)中的参数值及临界浓度

Table 1 Parameter values and critical concentrations in System (1)

$i$	$m_i$	$Y_i$	$x_{*i}$	$x_i^*$	$k_i$	$\mu_m$
1	—	—	0.01	6	69.927 3	0.994
2	9.34	0.008 51	0	2 039	—	—
3	7.3	76	0	939.5	—	—
4	-0.368	35.54	0	1 026	—	—
5	-0.45	14.78	0	360.9	—	—

注:“—”表示未测得该值。

令

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}(t), \mathbf{x}(t-\tau)) := \begin{pmatrix} \mu(t)x_1(t-\tau) \\ -q_2(t)x_1(t-\tau) \\ q_3(t)x_1(t-\tau) \\ q_4(t)x_1(t-\tau) \\ q_5(t)x_1(t-\tau) \end{pmatrix}. \quad (8)$$

这样, 系统(1)可表示为

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{f}(\mathbf{x}(t), \mathbf{x}(t-\tau)), & t \in (0, t_f], \\ \mathbf{x}(t) = \boldsymbol{\phi}(t, \boldsymbol{\zeta}), & t \leq 0. \end{cases} \quad (9)$$

根据时滞微分方程理论<sup>[9]</sup>, 可得如下性质。

**定理** 对于任意  $(\mathbf{u}, t_f) \in U_{ad} \times T_{ad}$ , 系统(9)在  $(-\infty, t_f)$  上存在唯一的连续解  $\mathbf{x}(\cdot | \mathbf{u}, t_f)$ , 且  $\mathbf{x}(\cdot | \mathbf{u}, t_f)$  在  $(-\infty, t_f)$  上是一致有界的。

## 2 最优控制问题

微生物间歇发酵最优控制的目的是获得尽可能多的 1,3-丙二醇, 同时, 期望降低甘油的消耗率, 因此, 本文选取的最优控制目标为

$$J(\mathbf{u}, t_f) = \frac{x_3(t_f | \mathbf{u}, t_f)}{t_f}. \quad (10)$$

为了降低甘油的消耗率, 将单位时间的甘油消耗作为一个约束, 即

$$\frac{x_2(0 | \mathbf{u}, t_f) - x_2(t_f | \mathbf{u}, t_f)}{t_f} \leq l_m, \quad (11)$$

其中  $l_m$  是允许的单位时间甘油消耗率的最大值。基于式(10)和(11), 本文提出如下最优控制问题(OCP):

$$\begin{aligned} (\text{OCP}) \quad \max J(\mathbf{u}, t_f) &= \frac{x_3(t_f | \mathbf{u}, t_f)}{t_f} \\ \text{s.t.} \quad &\frac{x_2(0 | \mathbf{u}, t_f) - x_2(t_f | \mathbf{u}, t_f)}{t_f} \leq l_m; \\ &\mathbf{x}(t | \mathbf{u}, t_f) \in S_0, \quad t \in [0, t_f]; \\ &\mathbf{u} \in U_{ad}; \\ &t_f \in T_{ad}. \end{aligned}$$

在问题(OCP)中, 系统的终端时刻  $t_f$  是一个优化变量, 会对求解问题(OCP)产生数值上的困难。为克服这一困难, 通过以下时域变换

$$t = t_f s, \quad (12)$$

将可变时间区间  $[0, t_f]$  映射成固定的时间区间  $[0, 1]$ 。

令  $\tilde{x}(s) = x(t(s))$ ,  $\tilde{\tau} = \frac{\tau}{t_f}$ ,  $\tilde{f}(\tilde{x}(s), \tilde{x}(s-\tilde{\tau}), t_f) := t_f f(\tilde{x}(s), \tilde{x}(s-\tilde{\tau}))$ ,  $\tilde{\phi}(s, \zeta) = \phi(t(s), \zeta)$ 。则系统 (9) 可转化为

$$\begin{cases} \dot{\tilde{x}}(s) = \tilde{f}(\tilde{x}(s), \tilde{x}(s-\tilde{\tau}), t_f), & s \in (0, 1], \\ \tilde{x}(s) = \tilde{\phi}(s, \zeta), & s \leq 0. \end{cases} \quad (13)$$

令  $\tilde{x}(\cdot | u, t_f)$  表示系统 (13) 在  $(-\infty, 1]$  上连续解, 这样, 状态约束 (7) 可转化为

$$\tilde{x}(s | u, t_f) \in S_0, \quad s \in [0, 1]. \quad (14)$$

同样地, 约束 (11) 可转化为

$$\frac{\tilde{x}_2(0 | u, t_f) - \tilde{x}_2(1 | u, t_f)}{t_f} \leq l_m. \quad (15)$$

从而, 问题 (OCP) 转化为等价的最优控制问题 (EOCP):

$$\begin{aligned} \text{(EOCP)} \quad & \max \tilde{J}(u, t_f) = \frac{\tilde{x}_3(1 | u, t_f)}{t_f}. \\ \text{s.t.} \quad & \frac{\tilde{x}_2(0 | u, t_f) - \tilde{x}_2(1 | u, t_f)}{t_f} \leq l_m; \\ & \tilde{x}(s | u, t_f) \in S_0, \quad s \in [0, 1]; \\ & u \in U_{ad}; \\ & t_f \in T_{ad}. \end{aligned} \quad (16)$$

值得注意的是, 问题 (EOCP) 是一个包含约束 (14)、(15) 的参数优化问题。特别地, 约束 (14) 是一个路径约束, 需要在时间范围内要求每一个点都在指定的范围内, 因此是一个无限维约束。为了克服这一困难, 引入罚函数方法来处理约束。

设

$$\begin{aligned} \varphi_i(\tilde{x}(s | u, t_f)) &:= \tilde{x}_i(s | u, t_f) - x_i^*, \\ \varphi_{i+5}(\tilde{x}(s | u, t_f)) &:= x_{*i} - \tilde{x}_i(s | u, t_f), \quad i = 1, 2, 3, 4, 5, \end{aligned}$$

则约束 (14) 可以等价于

$$\varphi_l(\tilde{x}(s | u, t_f)) \leq 0, \quad l = 1, 2, \dots, 10. \quad (17)$$

由此定义如下约束违反函数:

$$\Delta(u, t_f) := \sum_{l=1}^{10} \int_0^1 [\max\{\varphi_l(\tilde{x}(s | u, t_f)), 0\}]^2 ds. \quad (18)$$

对约束 (15), 令

$$P(u, t_f) = \max\left\{\frac{\tilde{x}_2(0 | u, t_f) - \tilde{x}_2(1 | u, t_f)}{t_f} - l_m, 0\right\}.$$

这样, 当约束 (14) 成立时,  $\Delta(u, t_f) = 0$ , 且当 (15) 成立时,  $P(u, t_f) = 0$ 。将  $\Delta(u, t_f)$  和  $P(u, t_f)$  罚到目标函数 (16) 上, 则问题 (EOCP) 可转化为以下罚形式:

$$\begin{aligned} \text{(EOCP}_{\sigma}) \quad & \max \hat{J}(u, t_f) = \frac{\tilde{x}_3(1 | u, t_f)}{t_f} - \sigma_1 \Delta(u, t_f) - \sigma_2 P(u, t_f). \\ \text{s.t.} \quad & u \in U_{ad}; \\ & t_f \in T_{ad}, \end{aligned}$$

其中  $\sigma_1$  和  $\sigma_2$  为罚因子。

### 3 数值算法

模拟退火算法是一种随机寻优算法, 提出于 20 世纪 50 年代<sup>[10]</sup>, 是从物理退火原理得到启发<sup>[11]</sup>, 目前,

该算法广泛应用到机器学习、图像恢复、生产调度等领域<sup>[10]</sup>,但是该算法是一种单点迭代算法。在单点迭代算法中,单个个体无法进行个体之间的信息交换并根据其他个体的信息改变移动的方向,因此,在求解多峰的问题时,单点迭代无法避免陷入局部最优解的可能性,为此,可引入多点迭代的算法来克服这一缺陷。遗传算法是一种模拟自然进化过程的多点迭代搜索算法<sup>[12]</sup>,通过选择、变异和交叉算子改变种群内的个体,从而完成求解优化问题的全局搜索。在模拟退火算法的基础上,结合多点迭代的遗传算法,提出一种模拟退火与遗传混合算法。

遗传算法的编码方式有二进制编码和实数编码。相对于二进制编码,实数编码求解问题精度较高,故选择实数编码来求解最优控制问题。在算法中,每一个个体的表现形式为

$$\mathbf{K}_i = [k_{i1}, k_{i2}, \dots, k_{in}]^T, \quad i = 1, 2, \dots, M,$$

其中,  $\mathbf{K}_i (i = 1, 2, \dots, M)$  表示编号为  $i$  的个体,  $k_{ij} (i = 1, 2, \dots, M, j = 1, 2, \dots, n)$  表示第  $i$  个个体染色体上的第  $j$  个基因,  $n$  是优化变量的个数,  $M$  为种群规模。

对于选择算子,精英保留策略是将当前收敛效果的最佳个体不参与交叉和变异直接替换下一代中适应度值最低的个体<sup>[13]</sup>。该方法有一定的概率出现“早熟”现象,从而导致种群中有多个个体收敛位置相似的封闭竞争问题,降低遗传算法的搜索功能。为了避免此类问题,对精英保留策略进行如下改进:间隔几代进行一次精英保留策略,随机选取一个非最优个体进行替换,适应度最高的个体位置由算法程序记录且正常参与交叉和变异。

对于交叉算子,采用均匀交叉策略。相应地,若  $r_{ij}^1 \geq P_c$ , 基于实数编码的交叉算子执行方式为

$$\begin{cases} k_{id}^{\text{new}} = k_{ld}, \\ k_{ld}^{\text{new}} = k_{id}, \end{cases} \quad (19)$$

其中,  $i = 1, 2, \dots, M, l = 1, 2, \dots, M$  且  $i \neq l$ ,  $P_c$  为交叉率,  $d$  是发生交换的位置。  $k_{id}$  与  $k_{ld}$  是进行交叉的 2 个父代个体,  $k_{id}^{\text{new}}$  与  $k_{ld}^{\text{new}}$  是交叉产生的子代个体,  $r_{ij}^1$  是  $[0, 1]$  上的随机数。

同样,针对不同个体,令每个个体都有一个独立的温度

$$\mathbf{T} = [T_1, T_2, \dots, T_M]^T,$$

其中:  $\mathbf{T}$  代表所有个体当前温度的集合;  $T_i$  表示第  $i$  个个体的温度。

在模拟退火算法的每个迭代过程中,需经过多次随机的扰动产生当前位置邻域的解并通过 Metropolis 法则判断是否保留当前解。在模拟退火与遗传混合算法中,将这一过程作为遗传算法的变异算子,其中,扰动机制由下式表示:

$$k_{ij}^{\text{new}} = k_{ij} + r_{ij}^2 \times \xi \times S_{ij}, \quad (20)$$

其中:  $\xi \sim N(0, 1)$ ;  $r_{ij}^2$  是  $[0, 1]$  上的随机数;  $S_{ij}$  是步长因子;  $k_{ij}^{\text{new}}$  是第  $i$  个个体的第  $j$  个优化变量更新后的值。每一次扰动的步长  $S_{ij}$  为

$$S_{ij} = \begin{cases} T_i / T_{\max} \cdot (\max(j) - \min(j)), & r_{ij}^3 \leq P_m, \\ \text{best}(j) - k_{ij}, & \text{否则}, \end{cases} \quad (21)$$

这里:  $i = 1, 2, \dots, M, j = 1, 2, \dots, n$ ;  $T_{\max}$  是温度的最大值;  $\max(j)$  和  $\min(j)$  分别表示第  $j$  个优化变量取值范围的上界与下界;  $\text{best}(j)$  表示截止当前迭代步整个种群中最优解的第  $j$  个分量值;  $r_{ij}^3$  是  $[0, 1]$  上的随机数。当  $T_i \leq T_m$  时,  $P_m = 0$ ; 在  $T_i > T_m$  时,  $P_m \in [0, 1]$  是一个给定的扰动概率系数。另外,将每次扰动产生的新解通过 Metropolis 准则进行判断。这里, Metropolis 准则的判断方式如下:

$$P_i = \begin{cases} 1, & E(\mathbf{K}_i^{\text{new}}) \geq E(\mathbf{K}_i), \\ e^{-\frac{E(\mathbf{K}_i^{\text{new}}) - E(\mathbf{K}_i)}{aT_i}}, & E(\mathbf{K}_i^{\text{new}}) < E(\mathbf{K}_i), \end{cases} \quad (22)$$

其中,  $P_i$  是第  $i$  个个体在每一次随机扰动后接受得到的新解概率;  $E(\mathbf{K}_i)$  表示第  $i$  个个体  $\mathbf{K}_i$  的适应度,  $E$  的值越大,适应度越高;  $a$  是 Metropolis 准则系数。

当个体收敛至全局最小值点的邻域时,为了能够提高在这个位置的收敛精度,可以仅保留最优的解。在本算法中设置冷却温度为  $T_c$ , 当到达一定的温度时,不再通过 Metropolis 准则判断新解,仅保留比当前解更好的结果。基于上述讨论,本文提出的模拟退火与遗传混合算法主要步骤如下:

**步骤 1** 设置温度的最大值  $T_{\max}$ , 最小值  $T_{\min}$  和中间温度  $T_0, T_m, T_c$ , 降温系数  $\eta_{\max}, \eta_{\min}$ , 种群规模  $M$ , 循环内迭代次数  $\text{iter1}, \text{iter2}$ , 扰动概率系数  $P_m$ , 精英选择执行间隔  $\text{iter3}$ 。当前温度向量  $\mathbf{T}$  中每个分量的当前温

度均等于  $T_{max}$ 。

步骤 2 随机产生所有个体的初始位置  $K_1, K_2, \dots, K_M$ 。

步骤 3 若  $T_i > T_{min}$ , 则执行如下步骤:

步骤 3.1 若距离上一次进行选择操作间隔了  $iter3$  代, 进行一次精英选择策略进行选择操作。

步骤 3.2 随机将种群内所有个体每 2 个分成一组, 在每一组的 2 个个体之间进行交叉。若种群规模为奇数, 不对多出来的个体进行交叉。

步骤 3.3 当  $T_i > T_0$  时,  $iter = iter1$ , 否则令  $iter = iter2$ , 并执行如下步骤  $iter$  次:

步骤 3.3.1 通过公式 (20) 计算扰动产生新的个体。

步骤 3.3.2 进行变量越界处理。若  $k_{ij}^{new} > \max(j)$ , 令  $k_{ij}^{new} = \max(j) - \text{mod}((k_{ij}^{new} - \max(j)), (\max(j) - \min(j)))$ ; 若  $k_{ij}^{new} < \min(j)$ , 令  $k_{ij}^{new} = \min(j) + \text{mod}((\min(j) - k_{ij}^{new}), (\max(j) - \min(j)))$ 。这里,  $\text{mod}(a, b)$  为取余函数且  $a \geq 0, b > 0$ , 其返回值为  $a - bc$ , 其中  $c$  是使得  $bc \leq a$  的最大整数。

步骤 3.3.3 若  $T_i < T_c$  时, 以 Metropolis 准则 (22) 为依据, 判断是否保留该个体当前的新解。若  $T_i \geq T_c$ , 仅保留比当前解适应度高的解。

步骤 3.4 按照当前每个个体的适应度执行退火操作。令  $Q$  为每个个体按照适应度进行排序后的序号, 即  $Q = 1$  对应适应度最高的个体, 随着  $Q$  的增加适应度逐渐降低。对每个个体的温度执行  $T_Q = T_0 \times (\eta_{min} + (\eta_{max} - \eta_{min})Q/M)$ 。

步骤 4 输出当前最优个体的寻优结果, 算法终止。

### 4 数值结果

#### 4.1 算法实验结果

这里选取 Schaffer 函数和 Alpine 函数对所提出模拟退火与遗传混合算法的有效性进行测试, 2 个测试函数列在表 2 中。特别地, 测试函数  $f_2$  的维数设为 30。

表 2 测试函数信息表  
Table 2 Information of test functions

函数	函数表达式	搜索空间
Schaffer	$f_1(x_1, x_2) = (x_1^2 + x_2^2)^{0.25} [\sin^2(50(x_1^2 + x_2^2)^{0.1}) + 1]$	$[-100, 100]$
Alpine	$f_2(x) = \sum_{i=1}^n  x_i \sin(x_i) + 0.1x_i $	$[-10, 10]$

另外, 在 MATLAB 2017a 环境下进行仿真验证。算法的种群规模统一设置为 60, 最高温度为  $10^4$ , 最低温度为 1,  $T_0, T_m$  和  $T_c$  分别取值为 80、60 和 130, 降温系数  $\eta_{min}$  和  $\eta_{max}$  分别取值为 0.97 和 0.99; 每个温度下迭代次数  $iter1$  和  $iter2$  分别取值为 200 和 2 000; 交叉率设为 0.4, 扰动概率系数  $P_m$  为 0.8。选精英选择策略间隔代数  $iter3$  为 5。这里将容许误差值为  $10^{-20}$ , 每个测试函数分别运行 60 次, 记录算法的求解结果。表 3 列出了模拟退火与遗传混合算法运行结果与文献 [14] 中 SA 算法, GA 算法和 GAGE 算法的运行结果, 通过表 3 可以看出, 本文所提出的算法具有更好的寻优能力和收敛效果。

表 3 4 种优化算法的运行结果对比  
Table 3 Comparison of four optimization algorithms

算法	准则	SA <sup>[14]</sup>	GA <sup>[14]</sup>	GAEA <sup>[14]</sup>	本文算法
$f_1$	平均值	0.222 0	0.068 1	$8.49 \times 10^{-8}$	0
	最差解	0.515 3	0.240 0	$1.57 \times 10^{-7}$	0
	最优解	0.042 1	0.015 2	$1.21 \times 10^{-8}$	0
	最优解次数	1	2	11	60
$f_2$	平均值	$1.9 \times 10^{-4}$	$5.67 \times 10^{-16}$	$2.34 \times 10^{-16}$	$1.654 \times 10^{-16}$
	最差解	$7.74 \times 10^{-4}$	$9.43 \times 10^{-5}$	$3.89 \times 10^{-15}$	$1.221 \times 10^{-15}$
	最优解	$2.21 \times 10^{-7}$	$2.30 \times 10^{-7}$	0	0
	最优解次数	4	5	12	38

## 4.2 求解问题(EOCP <sub>$\sigma$</sub> )

经过上述数值实验,利用模拟退火与遗传混合算法来求解最优控制问题(EOCP <sub>$\sigma$</sub> )。这里,初始生物量和甘油浓度的取值范围分别为  $u_1 \in [0.01, 0.6]$ ,  $u_2 \in [200, 1700]$ ;终端时刻的取值范围  $t_f \in [2, 10]$ <sup>[5]</sup>;系统时滞  $\tau$  取值为 0.058 9 h。利用 4 阶龙格-库塔算法及拉格朗日插值方法对系统(13)求解。在问题(EOCP <sub>$\sigma$</sub> )中,最大消耗速率  $l_m$  取 95,罚因子  $\sigma_1$  和  $\sigma_2$  均为 10 000。 $T_c$  为 100。在模拟退火与遗传混合算法中,最高温度  $T_{max}$  为  $10^3$ ,最低温度为 1,每个温度下迭代次数 iter2 为 1 000,其他参数:种群规模  $M$ ,迭代次数 iter1、iter3、 $P_m$ 、 $T_0$  和  $T_M$  取值与数值例子中一样。通过计算,本文得到的生物量和甘油初始浓度分别为  $0.506 \text{ g} \cdot \text{L}^{-1}$  和  $335.263 6 \text{ mmol} \cdot \text{L}^{-1}$ ,最优终端时刻为 3.267 h。这比文献[5]中的最优终端时刻 4.66 h 减少了 29.89%,比实验数据<sup>[15]</sup>中终端时刻 6.5 h 减少了 49.74%。

通过所得的最优控制策略,计算得到终端时刻 1,3-丙二醇生产效率为  $62.86 \text{ mmol} \cdot \text{L}^{-1} \cdot \text{h}^{-1}$ ,这与文献[5]中的结果( $51.9 \text{ mmol} \cdot \text{L}^{-1} \cdot \text{h}^{-1}$ )相比提高了 21.12%。图 1 所示为 1,3-丙二醇生产效率随时间变化的曲线。为了比较,文献[5]中的结果及文献[15]的实验数据也画在图 1 中。由图 1 可以看出终端时刻 1,3-丙二醇的生产效率相比文献[5]中的结果有明显的提高。同时,计算得到的甘油消耗速率为  $94.36 \text{ mmol} \cdot \text{L}^{-1} \cdot \text{h}^{-1}$ ,这与文献[5]中的甘油消耗速率  $100.8 \text{ mmol} \cdot \text{L}^{-1} \cdot \text{h}^{-1}$  相比降低了 6.39%,因此,应用所得的最优控制策略可以提高 1,3-丙二醇的生产效率,且可以降低甘油的消耗速率,对生产 1,3-丙二醇具有重要的指导意义。图 2 给出了生物量、底物和产物的浓度随时间变化的曲线。

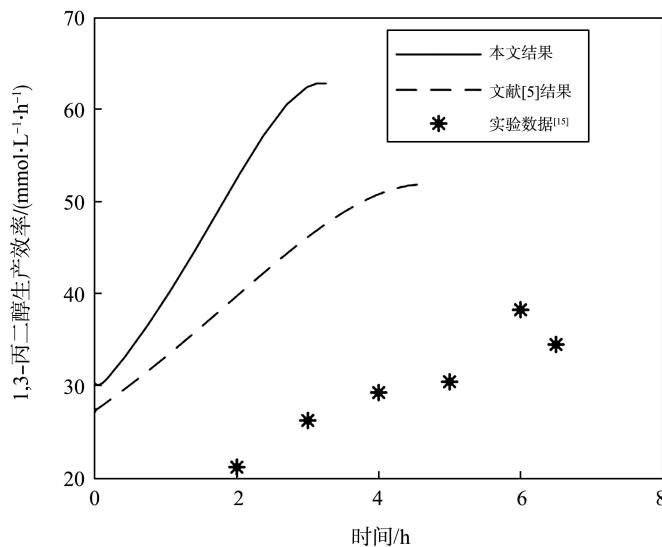
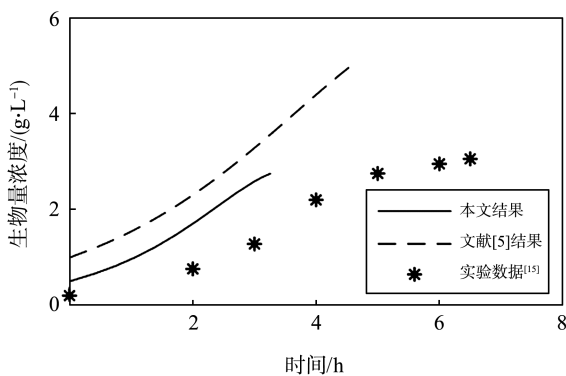
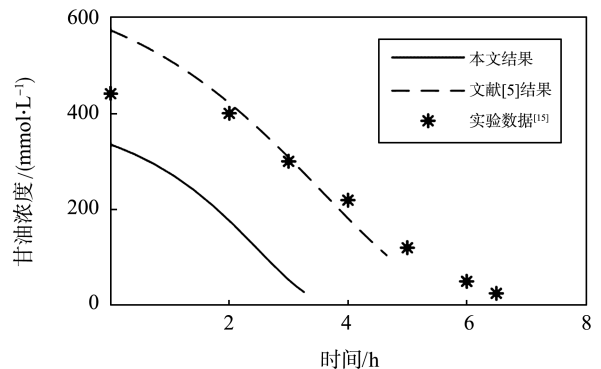


图 1 1,3-丙二醇生产效率变化(注: $t=0$ 时,1,3-丙二醇生产效率不存在,图中的时刻点从  $t=2.65 \times 10^{-6}$  开始)  
Fig.1 Change of 1,3-propanediol productivity(Annotation: the productivity of 1,3-PD does not exist at time  $t=0$ , and the first time point starts from  $t=2.65 \times 10^{-6}$ )



(a) 生物量浓度



(b) 甘油浓度

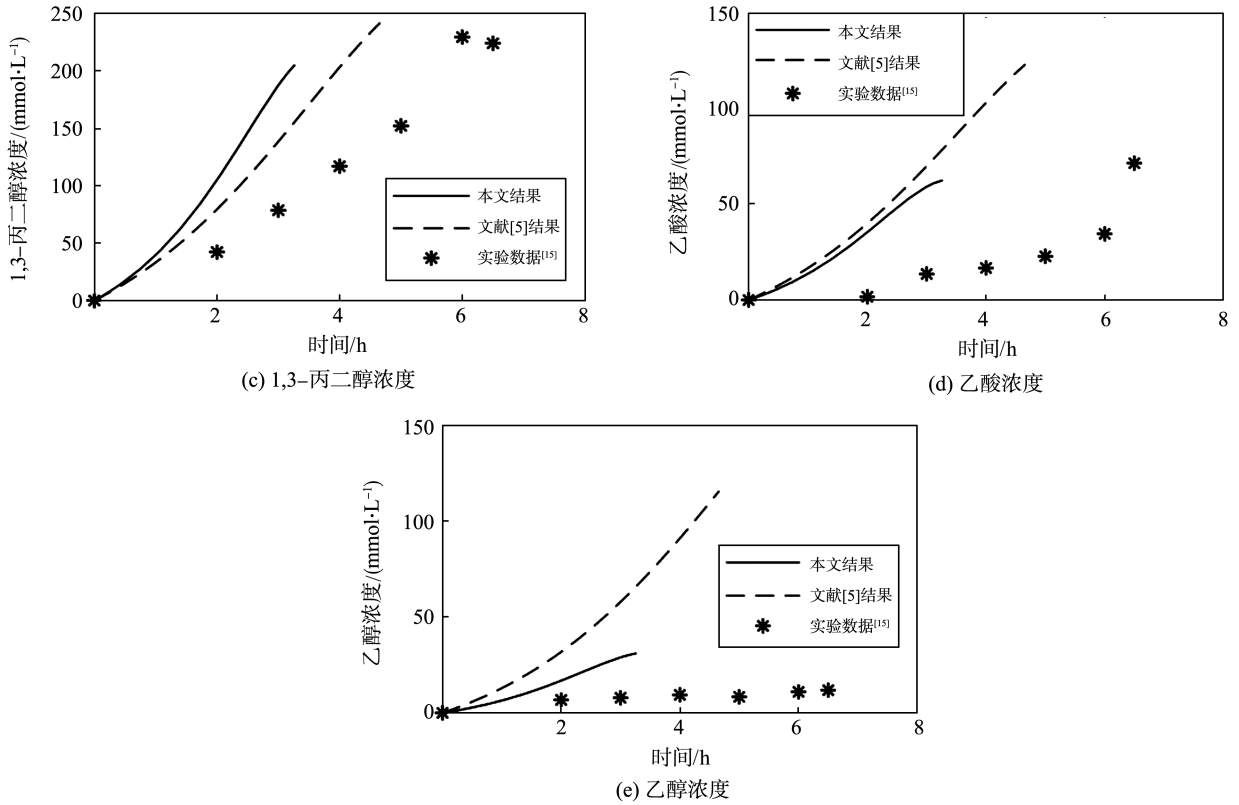


图 2 生物量、底物和产物浓度随时间变化曲线  
Fig.2 Time varying curve of each substance concentration

## 5 结语

本文提出了一个非线性时滞微分系统来描述间歇发酵生产 1,3-丙二醇过程,建立了一个含有甘油消耗率约束的时滞最优控制模型。同时,利用罚函数方法、时域变换法和模拟退火与遗传混合算法来求解该时滞最优控制问题。数值结果表明:与文献[5]相比,终端时刻 1,3-丙二醇的生产效率有显著提高,并且甘油消耗速率有所降低。

### 参考文献:

- [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] 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, 214:432-440.
- [3] 高彩霞,王宗涛,冯恩民,等. 间歇发酵过程的非线性动力系统辨识及最优控制[C]//中国运筹学会第七届学术交流会议论文集:下卷. 北京:中国运筹学会, 2004:1202-1208.  
GAO Caixia, WANG Zongtao, FENG Enmin, et al. Identification and optimization of the nonlinear dynamical system in batch anaerobic cultures[C]//Proceedings of the Seventh National Conference of Operations Research Society of China. Beijing: Operations Research Society of China, 2004:1202-1208.
- [4] WANG Lei, YE Jianxiong, FENG Enmin, et al. An improved model for multistage simulation of glycerol fermentation in batch culture and its parameter identification[J]. *Nonlinear Analysis: Hybrid Systems*, 2009, 3(4):455-462.
- [5] CHENG G M, WANG L, LOXTON R, et al. Robust optimal control of a microbial batch culture process[J]. *Journal of Optimization Theory and Applications*, 2015, 167(1):342-362.
- [6] LIU Chongyang. Modelling and parameter identification for a nonlinear time-delay system in microbial batch fermentation[J]. *Applied Mathematical Modelling*, 2013, 37(10/11):6899-6908.