

基于改进多目标差分进化算法的诺西肽发酵过程优化

牛大鹏^{1,2}, 王福利^{1,2}, 何大阔², 贾明兴²

(1. 东北大学 流程工业综合自动化教育部重点实验室, 辽宁 沈阳 110004;

2. 东北大学 信息科学与工程学院, 辽宁 沈阳 110004)

摘要: 诺西肽发酵存在着产量较低和生产效率不高的问题, 多目标优化是解决此类问题的有效途径. 将差分进化算法引入多目标优化, 构建了改进的多目标差分进化算法(IDEMO). 根据Pareto优劣等级和拥挤距离对种群进行选择操作, 并引入自适应变异算子和混沌迁移算子以改善算法性能. 在诺西肽分批发酵动力学模型的基础上建立了多目标优化的模型, 并利用IDEMO对此优化问题进行了求解, 优化结果表明了算法的有效性.

关键词: 诺西肽发酵; 多目标优化; 差分进化算法; 自适应变异算子; 混沌迁移算子

中图分类号: TP274 **文献标识码:** A

Optimization of nosiheptide fermentation process based on the improved differential evolution algorithm for multi-objective optimization

NIU Da-peng^{1,2}, WANF Fu-li^{1,2}, HE Da-kuo², JIA Ming-xing²

(1. Key Laboratory of Integrated Automation of Process Industry,

Ministry of Education, Northeastern University, Shenyang Liaoning 110004, China;

2. School of Information Science and Engineering, Northeastern University, Shenyang Liaoning 110004, China)

Abstract: Multi-objective optimization is an effective way to solve the problem of low yield and low efficiency in the nosiheptide fermentation process. Based on the differential evolution algorithm, we propose an improved differential evolution algorithm for multi-objective optimization(IDEMO), in which the selection operation is based on the Pareto rank and the crowding distance of each individual in the population. The adaptive mutation operator and the chaotic migration operator are developed to improve the performance of the algorithm. Based on the kinetic models of the nosiheptide batch fermentation process, we develop a multi-objective optimization model(IDEMO) for its optimization. Application results show its effectiveness.

Key words: nosiheptide fermentation; multi-objective optimization; differential evolution algorithm; adaptive mutation operator; chaotic migration operator

1 引言(Introduction)

诺西肽(nosiheptide)是一种理想的非吸收性动物饲料添加剂, 但在目前技术条件下, 其产量较小, 生产效率较低, 多目标优化可用来解决此类问题. 多目标问题通常并不存在各目标都为全局最优的解, 而存在一个Pareto最优解集. 多目标优化将力求找出一组解, 尽可能全面地逼近Pareto解集^[1].

当前, 将进化算法用于多目标优化引起了广泛关注, 典型的有NSGA(nondominated sorting in genetic algorithms)^[2], NSGA-II^[3], SPEA(strength pareto approach)^[4]等. 差分进化算法(differential evolution, DE)^[5]是一种随机的并行直接全局搜索算

法, 已经在多个领域取得了成功应用. 已有研究将DE的功能拓宽, 用于多目标优化^[6]. Robič^[7]提出了DEMO(differential evolution for multi-objective optimization), 将DE应用于多目标优化, 算法具有较快的收敛速度, 但容易过早收敛.

本文将自适应变异算子和混沌迁移算子引入多目标差分进化算法中, 利用前者提高算法搜索效率, 利用后者提高种群多样性以避免算法陷入局部最优, 构建了改进的多目标差分进化算法(improved differential evolution algorithm for multi-objective optimization, IDEMO). 在诺西肽分批发酵动力学模型的基础上建立了以最终产物浓度最大和发酵时间最

短为目标的多目标优化模型, 并利用IDEMO进行了求解.

2 多目标优化问题描述(Multi-objective optimization problem description)

考虑如下多目标优化问题^[1]:

$$\begin{cases} \min \mathbf{J} = [J_1, \dots, J_i, \dots, J_n], \\ J_i = \psi_i(\mathbf{Z}(t_f), t_f) + \int_0^{t_f} \phi_i(\mathbf{Z}, \mathbf{X}, t) dt, \\ \text{s.t. } \frac{d\mathbf{Z}}{dt} = f(\mathbf{Z}, \mathbf{X}, t), \mathbf{Z}(0) = \mathbf{Z}_0, 0 \leq t \leq t_f, \\ \mathbf{X} = (x_1, \dots, x_j, \dots, x_m), \\ x_{j\min} \leq x_j \leq x_{j\max}, j = 1, \dots, m. \end{cases} \quad (1)$$

式中: $\mathbf{J} \in \mathbb{R}^n$ 为目标向量, J_i 为第 i 个优化目标, $\psi_i(\mathbf{Z}(t_f), t_f)$ 和 $\int_0^{t_f} \phi_i(\mathbf{Z}, \mathbf{X}, t) dt$ 分别为其终端花费项和积分花费项, $\mathbf{Z}$ 为状态向量, t_f 是终端时间, $\mathbf{X}$ 为决策向量, x_j 为 $\mathbf{X}$ 的第 j 个分量, 即第 j 个决策变量, $x_{j\min}$ 和 $x_{j\max}$ 分别为其最小值和最大值.

3 改进多目标差分进化算法(IDEMO)

3.1 DEMO操作步骤(Steps of DEMO)

Step 1 参数设置和种群初始化. 选定种群规模 N_P , 确定变异率 F , 最大进化代数 $G_{\max}$ 和交叉概率因子 $C_R \in [0, 1]$, 令进化代数 $G = 0$, 随机初始化种群 $P^G = 0$ 中的个体 $\mathbf{X}_i^0 (i = 1, 2, \dots, N_P)$.

Step 2 变异操作. 按式(2)生成变异个体 $\hat{\mathbf{X}}_i^{G+1}$:

$$\hat{\mathbf{X}}_i^{G+1} = \mathbf{X}_i^G + F(\mathbf{X}_{r_1}^G - \mathbf{X}_{r_2}^G). \quad (2)$$

式中: $\mathbf{X}_i^G$ 为父代个体, $\mathbf{X}_{r_1}^G$ 和 $\mathbf{X}_{r_2}^G$ 为与 $\mathbf{X}_i^G$ 不同的2个互不相同的个体.

Step 3 交叉操作. 据式(3)在父代个体 $\mathbf{X}_i^G$ 与变异个体 $\hat{\mathbf{X}}_i^{G+1}$ 之间进行交叉操作, 产生试验个体 $\mathbf{X}_T$:

$$x_{jT} = \begin{cases} \hat{x}_{ji}^{G+1}, \text{rand}(\cdot) \leq C_R, \\ x_{ji}^G, \text{其他}. \end{cases} \quad (3)$$

式中: $\text{rand}(\cdot)$ 为 $[0, 1]$ 之间的均匀随机, $j = 1, 2, \dots, m$, m 为变量的维数.

Step 4 选择操作. 将生成的所有试验个体与父代个体一起组成新的种群 Q^G (种群规模为 $2N_P$), 并将 Q^G 中的每个个体代入式(1)中的等式约束(在实际问题中, 相当于过程的动态模型)进行求解, 求得目标向量的值. 根据个体的优劣水平对种群进行排序, 具体实现方法为: 给种群中的所有非劣最优解赋予相同的优劣等级为1; 然后找出剩余个体中的非劣最优解, 并赋予其等级为2; 重复此过程, 直到种群中所有个体都被赋予相应的级别为止. 为了维持种群的多样性, 保证生成均匀分布的Pareto最优解, 计算种群中的每一个体与同级别相邻两个个体之间的拥挤

距离, 等级值越大、拥挤距离越小的个体在种群中的排序越靠后, 从排完序的种群中选择前 N_P 个个体组成子代种群 P^{G+1} . 拥挤距离记为 $\sigma(i)$, 其计算方法见文献[3].

Step 5 终止条件判断. 令 $G + 1 \rightarrow G$, 若 $G < G_{\max}$, 则返至Step 2, 否则将生成的子代种群中优劣等级为1的所有个体构成多目标优化问题的非劣最优解集, 输出并结束运行.

3.2 自适应变异算子(Adaptive mutation operator)

DEMO算法中, 变异率 F 用以对差分向量进行放大或缩小控制. 为克服变异率 F 不易确定的缺点, 将文献[8]中的自适应变异算子应用于多目标差分进化算法. 该算子能根据算法的进化情况, 自适应地确定变异率, 使算法在进化初期有较大的变异率以保持种群的多样性, 避免陷入局部最优; 在后期逐步降低变异率, 保留优良信息, 提高算法搜索效率. 在IDEMO中, 利用下式确定变异率 F :

$$F = F_0 \times 2^{e^{\frac{G - G_{\max}}{G_{\max}}}}. \quad (4)$$

式中: F_0 是变异常数, $G_{\max}$ 是最大进化代数, G 为当前进化代数 ($G = 0, 1, \dots, G_{\max} - 1$).

3.3 混沌迁移算子(Chaotic migration operator)

差分进化算法在解决复杂多目标优化问题时, 易陷入局部最优. 本文利用混沌信号的随机性和遍历性构造混沌迁移算子, 以引导算法跳出局部最优. 将一维Logistic映射混沌模型^[9]引入IDEMO中, 即

$$r_{k+1} = \mu r_k (1 - r_k). \quad (5)$$

式中: $r_k \in (0, 1)$, μ 为控制参数, 当 $\mu \in (3.56, 4.0)$ 时, 式(5)进入混沌状态.

进行混沌迁移时, 首先随机产生一个 m 维、每个分量都在 $(0, 1)$ 上的向量 $\mathbf{r}_1 = (r_{11}, r_{21}, \dots, r_{m1})$, 按下式确定向量 $\mathbf{r}_{i+1} = (r_{1,i+1}, r_{2,i+1}, \dots, r_{m,i+1})$ 的各个分量 $r_{j,i+1}$, 即

$$r_{j,i+1} = \mu r_{ji} (1 - r_{ji}). \quad (6)$$

式中: $j = 1, 2, \dots, m$, $i = 1, 2, \dots, N_P - 1$, 取 $\mu = 3.6$.

将混沌序列映射到区间 $(-1, 1)$, 即

$$l_{ji} = 2r_{ji} - 1. \quad (7)$$

将产生的混沌序列用于迁移操作. 保留当前种群中优劣等级为1的所有个体, 并在排名最前的个体 $\mathbf{X}_1^G = (x_{11}^G, x_{21}^G, \dots, x_{m1}^G)$ 的基础上进行迁移操作, 产生新个体替换种群中优劣等级大于1的个体, 即

$$x_{ji} = \begin{cases} x_{j1} + l_{ji}(x_{j\max} - x_{j1}), & 0 < l_{ji} < 1, \\ x_{j1} + l_{ji}(x_{j1} - x_{j\min}), & -1 < l_{ji} \leq 0. \end{cases} \quad (8)$$

式中: $j = 1, 2, \dots, m$, $i = N_{\text{rank}2}, \dots, N_P$, $N_{\text{rank}2}$ 为优劣等级为2的个体的起始序号, N_P 为种群规模。

需要说明的是, 只有在进化初期(本文取 $G \leq G_{\text{max}}/3$ 时为进化初期)且种群多样性较低时才进行迁移操作。IDEMO在完成选择操作后, 首先判断当前种群是否满足迁移条件, 若满足则进行混沌迁移操作, 否则进行终止条件判断。

4 诺西肽发酵多目标优化(Multi-objective optimization of nosiheptide fermentation)

4.1 优化模型(Optimization model)

诺西肽分批发酵动力学模型由式(9)~(12)表示。本文在该模型基础上建立诺西肽发酵过程的多目标优化模型, 并采用IDEMO求解。

$$\frac{dX}{dt} = A_g \cdot \exp\left[\frac{-E_g}{R(273+T)}\right] \cdot \frac{S}{K_S X + S} \cdot \frac{C_O}{K_O X + C_O} \cdot \left(1 - \frac{X}{X_{\text{max}}}\right) X - A_d \cdot \exp\left[\frac{-E_d}{R(273+T)}\right] \cdot \frac{K_d}{K_d + C_O}, \quad (9)$$

$$\frac{dS}{dt} = -m_s \cdot X - \frac{1}{Y_{X/S}} \cdot \frac{dX}{dt} - \frac{1}{Y_{P/S}} \cdot \frac{dP}{dt}, \quad (10)$$

$$\frac{dC_O}{dt} = 0.1322 \cdot \frac{P_0^{0.36} \cdot n^{0.18} \cdot d^{0.56} \cdot Q^{0.3992}}{V^{0.4} \cdot D} \cdot \frac{(C^* - C_O) - m_o \cdot X - \frac{1}{Y_{X/O}} \cdot \frac{dX}{dt} - \frac{1}{Y_{P/O}} \cdot \frac{dP}{dt}}, \quad (11)$$

$$\frac{dP}{dt} = \beta X - KP. \quad (12)$$

式中: X , S , C_O 和 P 为过程状态变量, 分别表示菌体、基质、溶解氧和产物的浓度, T , n 和 Q 分别为发酵温度、搅拌转速和通气量。参数含义见表1。

为了同时考虑最小化生产时间和最大化发酵产量这两个相互冲突的目标, 本文构建了如式(13)所示的多目标优化模型。

$$\begin{cases} \min t_f, \\ \max P(t_f). \end{cases} \quad (13)$$

式中: t_f 为发酵结束时刻, $P(t_f)$ 为对应产物浓度。

根据诺西肽发酵工艺特点及实验经验选取温度、搅拌转速、通气量、发酵结束时间以及菌体浓度、基质浓度和溶解氧浓度的初始值作为决策变量。假设产物浓度初始值为 $P(0) = 0 \text{ g/L}$ 。诺西肽分批发酵过程对菌体浓度、基质浓度和溶解氧浓度的初始值 $X(0)$, $S(0)$ 和 $C_O(0)$ 有如下限制:

$$0 \leq X(0) \leq 5 \text{ g/L}, \quad (14)$$

$$20 \leq S(0) \leq 100 \text{ g/L}, \quad (15)$$

$$0 \leq C_O(0) \leq C^* \cdot 100\%. \quad (16)$$

表1 参数含义及取值

Table 1 Meanings and values of parameters

符号	含义	取值
A_g	生长 Arrhenius 常数	0.1224
E_g	生长活化能	60 kJ/mol
R	通用气体常数	8.314 J/(mol · K ⁻¹)
K_S	基质饱和常数	0.1828 g/L
K_O	溶解氧 Contois 饱和常数	0.0352 g/L
X_{max}	最大菌体浓度	0.8722 g/L
A_d	死亡 Arrhenius 常数	0.0019
E_d	死亡活化能	340 kJ/mol
K_d	Monod 常数	0.0368
m_s	维持因子	0.0624 (g · g ⁻¹)/h
$Y_{X/S}$	菌体对基质的得率系数	0.2542 g/g
$Y_{P/S}$	产物对基质的得率系数	0.6809 g/g
P_0	非通气下的搅拌功率	1500 W
d	搅拌器直径	0.01 m
V	发酵液体积	0.05 m ³
D	发酵罐直径	0.5 m
C^*	氧饱和浓度	0.03712 g/L
m_o	呼吸强度	0.467 (g · g ⁻¹)/h
$Y_{X/O}$	菌体对溶解氧的得率系数	0.0284 g/g
$Y_{P/O}$	产物对溶解氧的得率系数	0.0914 g/g
β	产物合成常数	0.0512 g/(g · h)
K	水解速率常数	0.0004 h ⁻¹

诺西肽发酵过程对温度 T , 搅拌转速 n 和通气量 Q 的范围有如下要求:

$$27^\circ \leq T \leq 32^\circ, \quad (17)$$

$$100 \text{ r/min} \leq n \leq 400 \text{ r/min}, \quad (18)$$

$$2.4 \text{ m}^3/\text{h} \leq Q \leq 3.2 \text{ m}^3/\text{h}. \quad (19)$$

4.2 结果与讨论(Result and discussion)

采用IDEMO求解上述多目标优化模型。将整个发酵过程划分为若干等长的时间段, 并假定每个时间段内的温度、搅拌转速和通气量维持不变, 则

$$d = \frac{t_f}{N_u}. \quad (20)$$

式中: d 为每个时间段的长度, N_u 为发酵过程等分成的时间段数。

由于本文采用离散化方法求解式(13)所示的优化问题, 如何确定决策变量等分离散化的段数尤为关键。若分段过多, 则采用IDEMO求解时, 进化个体的基因长度过大, 将增加优化的难度, 使算法不易求得最优解, 而且过于频繁的调节过程变量将给发酵微生物的生长带来不利影响; 若分段过少, 则无法达

到优化效果. 本文结合诺西肽分批发酵过程机理和多次试验选取时间段数 $N_u = 10$, 此时 $d = t_f/10$.

本文中, 发酵末端时间 t_f 既是优化目标之一, 又是决策变量, 在进行优化计算时需要注意. 本文在利用IDEMO求解多目标模型时, 对 t_f 的处理方法是, 将 t_f 作为进化个体的最后一位基因, 对个体和种群进行变异和交叉操作, 进行选择操作之前求取个体对应的适应值时, 最后一位基因的值即为第一个目标值 t_f , 将整个个体对应的所有决策变量值带入到发酵动力学模型中, 即可求得发酵结束时刻对应的产物浓度, 即为第二个优化目标的值.

IDEMO的参数设置: 基因个数为 $3 \times N_u + 4 = 34$, 群体规模 $N_p = 100$, 变异常数 $F_0 = 0.6$, 交叉概率因子 $C_R = 0.5$, 最大进化代数 $G_{\max} = 300$.

作为比较, 本文还利用NSGA-II算法, 求解式(13)所示的多目标优化问题. NSGA-II的群体规模和最大进化代数与IDEMO相同. 图1显示了IDEMO和NSGA-II所求得的多目标优化问题的Pareto最优前沿. 图中横坐标为发酵结束时刻, 纵坐标为发酵结束时的产物浓度. 可见, 相同发酵终端时间所对应的产物浓度IDEMO高于NSGA-II, 而且利用IDEMO所求得的Pareto最优前沿在解的均匀性上要优于NSGA-II, 这说明IDEMO的优化效果更好.

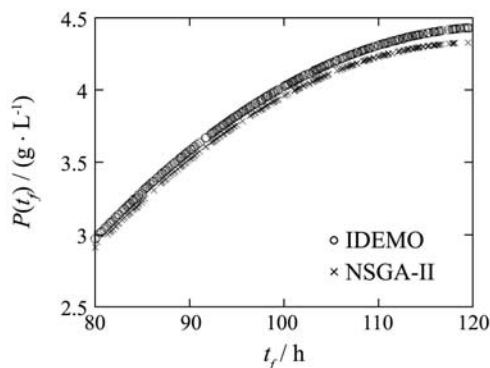


图1 多目标优化问题的Pareto最优前沿

Fig. 1 Pareto-optimal front for the multi-objective problem

为说明优化效果, 令温度、搅拌转速和通气量在发酵过程中保持恒值, 根据诺西肽发酵实验经验对决策变量进行取值, 取 $T = 28^\circ$, $n = 300$ r/min, $Q = 3.0$ m³/h, $t_f = 96$ h, $X(0) = 0.5$ g/L, $S(0) = 80$ g/L, $C_O(0) = C^* \cdot 100\%$. 代入诺西肽发酵动力学模型得到的发酵最终产物浓度为3.42 g/L. 可见, 进行优化后在相同发酵时间内($t_f = 96$ h), 诺西肽发酵最终产物浓度提高了12.9%. 这也说明了本文优化算法的有效性.

5 结论(Conclusions)

将差分进化算法应用于多目标优化问题, 构建了

改进的多目标差分进化算法IDEMO. 采用Pareto 优劣等级和拥挤距离判断种群中个体的优劣程度进行选择操作, 并引入自适应变异算子和混沌迁移算子来提高算法性能. 在诺西肽分批发酵动力学模型的基础上建立了优化目标为最终产物浓度最大和发酵时间最短的多目标优化模型, 将IDEMO用于此优化问题的求解. 在诺西肽发酵结束时间相同的情况下, 优化后的最终产物浓度比优化前得到了提高, 说明了本文算法在发酵过程多目标优化中的有效性.

参考文献(References):

- [1] 贺益君, 俞欢军, 成飙, 等. 多目标粒子群算法用于补料分批生化反应器动态多目标优化[J]. 化工学报, 2007, 58(5): 1262 – 1270. (HE Yijun, YU Huanjun, CHENG Biao, et al. Multi-objective particle swarm optimization approach to solution of fed-batch bioreactor dynamic multi-objective optimization[J]. *Journal of Chemical Industry and Engineering*, 2007, 58(5): 1262 – 1270.)
- [2] SRINIVAS N, DEB K. Multiobjective optimization using nondominated sorting in genetic algorithms[J]. *Evolutionary Computation*, 1994, 2(3): 221 – 248.
- [3] DEB K, PRATAP A, AGARWAL S, et al. A fast and elitist multiobjective genetic algorithm: NSGA-II[J]. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 2002, 6(2): 182 – 197.
- [4] ZITZLER E, THIELE L. Multiobjective evolutionary algorithms: A comparative case study and the strength Pareto approach[J]. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 1999, 3(4): 257 – 271.
- [5] RAINER S, PRICE K. Differential evolution – a simple and efficient heuristic for global optimization over continuous spaces[J]. *Journal of Global Optimization*, 1997, 11(4): 341 – 359.
- [6] MADAVAN N K. Multiobjective optimization using a pareto differential evolution approach[C] // *Congress on Evolutionary Computation (CEC' 2002)*. Piscataway, New Jersey: IEEE Service Center, 2002(2): 1145 – 1150.
- [7] ROBIČ T, FILIPIČ B. DEMO: Differential evolution for multiobjective optimization[C] // *Lecture Notes in Computer Science*. Berlin: Springer, 2005: 520 – 533.
- [8] 颜学峰, 余娟, 钱锋. 自适应变异差分进化算法估计软测量参数[J]. 控制理论与应用, 2006, 23(5): 744 – 748. (YAN Xuefeng, YU Juan, QIAN Feng. Adaptive mutation differential evolution algorithm and its application to estimate soft sensor parameters[J]. *Control Theory & Applications*, 2006, 23(5): 744 – 748.)
- [9] COELHO L S, MARIANI V C. Combining of chaotic differential evolution and quadratic programming for economic dispatch optimization with valve-point effect[J]. *IEEE Transactions on Power Systems*, 2006, 21(2): 989 – 996.

作者简介:

牛大鹏 (1980—), 男, 助教, 博士研究生, 从事发酵过程建模与优化研究, E-mail: niudapeng@ise.neu.edu.cn;

王福利 (1957—), 男, 教授, 博士生导师, 工学博士, 从事复杂工业过程建模、控制与优化的研究, E-mail: wangfuli@ise.neu.edu.cn;

何大阔 (1975—), 男, 副教授, 工学博士, 从事复杂工业过程建模、控制与优化的研究, E-mail: hedakuo@ise.neu.edu.cn;

贾明兴 (1972—), 男, 副教授, 工学博士, 从事复杂工业系统建模、监测与控制的研究, E-mail: jiamingxing@ise.neu.edu.cn.