

DOI: 10.7652/xjtuxb201307023

采用非线性粒子群算法的同步糖化发酵参数辨识

仲兆平, 严青, 邓学群, 艾特玲

(东南大学能源热转换及其过程测控教育部重点实验室, 210096, 南京)

摘要: 为进一步优化同步糖化发酵(SSF)工艺,在经典发酵动力学的基础上,总结出SSF工艺中的还原糖变化方程,并采用自适应粒子群优化(PSO)算法进行菌体生长、产物生成以及还原糖消耗的模型参数辨识。通过比较分析线性和非线性动态变化惯性权重的自适应PSO算法在动力学参数辨识过程中的优劣,确定了非线性方法的快速收敛特性。结果表明:模型的拟合值与实验数据比较接近,即利用这些模型来反映此SSF过程的机理具有一定的准确性和可靠性;通过非线性动态变化惯性权重的自适应PSO算法进行参数辨识具有一定的可行性和推广性,也为模型参数辨识提供了一种新思路。

关键词: 粒子群优化算法;同步糖化发酵;非线性变化惯性权重;发酵动力学方程;参数辨识

中图分类号: X705 **文献标志码:** A **文章编号:** 0253-987X(2013)07-0124-05

Parameter Identification of SSF Process with Non-Linear Adaptive PSO Algorithm

ZHONG Zhaoping, YAN Qing, DENG Xuequn, AI Teling

(Key Laboratory of Energy Thermal Conversion and Control of Ministry of Education, Southeast University, Nanjing 210096, China)

Abstract: To further optimize the simultaneous saccharification and fermentation (SSF) process, the adaptive particle swarm optimization (PSO) algorithm was applied to the parameter identification for the dynamic models of cell growth, product synthesis and sugar consumption. The model equation of reducing sugar consumption was presented based on the kinetics of fermentation. The adaptive PSO algorithm with non-linear changed inertia weight was found to be more effective in convergence compared with the linear method. The results show that the values simulated fit the experimental data well, indicating specific accuracy and feasibility of the employed models in reflecting the mechanisms of the SSF technology. It appears that the present adaptive PSO method with non-linear changed inertia weight may effectively be used in the model parameter estimation.

Keywords: particle swarm optimization; simultaneous saccharification and fermentation; non-linear changed inertia weight; kinetic equations of fermentation; parameter identification

燃料乙醇的发酵工艺包括酵母菌的生长、还原糖的消耗以及乙醇产物的生成,因此为进一步提高乙醇的产率,就需要合理地控制操作条件,最有效的方法是要建立契合的发酵过程模型进行发酵过程优

化控制。发酵过程模型根据微生物代谢机理和经验初步建立,经过后续实践验证,并通过对模型中的参数加以不断修正,从而使得该模型能更好地反映发酵过程的本质^[1]。参数修正需要应用计算机软件基

收稿日期: 2012-12-04。 作者简介: 仲兆平(1965—),男,教授,博士生导师。 基金项目: 国家重点基础研究发展计划资助项目(2013CB228106,2011CB201505)。

网络出版时间: 2013-04-22

网络出版地址: <http://www.cnki.net/kcms/detail/61.1069.T.20130422.0925.007.html>

于发酵动力学模型和实验数据进行参数拟合,以确定未知参数,从而进一步优化发酵过程。

近年来,国内外逐渐兴起利用人工智能的方法进行参数优化,如神经网络、支持向量机、遗传算法(GA)以及粒子群优化算法(PSO)等。如 Liu 等人利用神经网络和量子行为粒子群算法进行了链球菌发酵生成透明质酸过程的参数优化^[2]。Skolpap 等人也分别采用遗传算法和粒子群算法进行 α -淀粉酶和蛋白酶的生产过程的优化^[3]。值得注意的是,神经网络虽然能够以任意精度逼近线性函数,但是在实际工程应用中,如何选择合适的网络结构是当今遇到的困难之一^[4]。遗传算法和粒子群优化算法均是基于群体的优化工具,通过系统初始化一组随机数据,进行多次迭代搜索最优值。与遗传算法相比,粒子群优化算法不仅可以避免早熟现象,而且思想简单、易于实现,无需进行复杂的交叉、变异等操作,调整的参数少、易于达到全局搜索与局部搜索平衡,比较适合科学研究和工程应用^[5-6]。因此,PSO 一经提出后,即引起了智能优化领域的广泛关注,且在短短的几年时间里取得了大量的研究成果并逐步得到推广。目前,PSO 也广泛地应用于微生物发酵过程如氨基酸、丁二酸生产等方面的优化模拟,但是对乙醇发酵尤其是第二代燃料乙醇的同步糖化发酵(SSF)方面的研究尚鲜有报道。

本文立足于玉米芯燃料乙醇的 SSF 工艺,提出发酵过程中还原糖变化过程的动力学方程,利用一种非线性动态惯性权重的自适应 PSO 算法对该过程进行参数辨识和优化,并与线性变化惯性权重的自适应 PSO 算法进行比较,再利用所得参数进行 SSF 过程仿真。

1 自适应 PSO 算法

在标准 PSO 算法中,惯性权重 w 的作用主要表现在两个方面,其一是用来控制历史搜索速度对当前速度的影响,另一个是协调全局最优和局部最优之间的平衡。因为当 w 取值较大时,搜索速度和范围加大,可增加粒子群的多样性,而当 w 取值较小时,搜索范围变小,不仅加强了局部搜索的能力,也加速了收敛^[7]。因此,可通过合理设置惯性权重的变化方式来兼顾 PSO 的全局和局部搜索能力,以利于快速地寻到最优解。实际优化计算中常采用的 w 的最大、最小值分别为 $w_{\max} = 0.9$ 、 $w_{\min} = 0.4$,其惯性权重的变化方式也常为线性递减法,具体表达式如下^[8]

$$w = w_{\max} - \frac{L(w_{\max} - w_{\min})}{L_{\max}} \quad (1)$$

但是,这种变化方式却存在着多种缺陷。首先,若在迭代初期即搜寻到较优点,则希望能迅速地达到收敛,而 w 的线性递减则减缓了搜索速度,从而错过了这一可能全局最优点;其次,在迭代后期,由于搜索速度减慢,导致全局搜索能力下降,粒子群的多样性减弱,则易陷入局部最优。此外,线性递减法需要通过反复试验来确定 w 的最大、最小值以及最大迭代次数,且对于不同的实例其最佳值也会相应地不同。因此,为了克服经典 PSO 算法中存在的问题,并致力于搜索全局最优值,本文采用一种非线性变化的动态惯性权重设置方式,使 w 随着迭代步数和适应度值自动发生变化,即自适应 PSO 算法,其具体表达式如下

$$w = \begin{cases} w_{\min} - \frac{(w_{\max} - w_{\min})(f - f_{\min})}{f_{\text{avg}} - f_{\min}}, & f \leq f_{\text{avg}} \\ w_{\max} + \frac{(w_{\max} - w_{\min})(f - f_{\text{avg}})}{f_{\max} - f_{\min}}, & f > f_{\text{avg}} \end{cases} \quad (2)$$

式中: f 为微粒当前的适应度值; f_{avg} 和 $f_{\min}$ 分别为当前所有微粒的平均适应度值和最小适应度值。

2 SSF 过程的动力学模型

2.1 菌体生长动力学模型

在菌体生长动力学的分析过程中,采用比利时数学家 Verhulst 提出的 Logistic 模型,能较好地反映发酵过程中菌体浓度的变化对自身生长的影响,因此较适于拟合发酵过程中的菌体生长^[9],其形式如下

$$\frac{dX}{dt} = k \left(1 - \frac{X}{X_m} \right) X \quad (3)$$

积分得

$$X = X_0 e^{kt} / \left[1 - \frac{X_0 (1 - e^{kt})}{X_m} \right] \quad (4)$$

式中: X_0 、 X_m 分别为菌体的初始和最大质量浓度; X 为 t 时刻菌体的质量浓度; k 为菌体的最大比增长率; t 为发酵时间。

2.2 产物生成动力学模型

发酵产物形成过程非常复杂,相关的描述也很多,根据产物形成速率与细胞生长速率之间的关系,将产物合成动力学模型分为 3 类^[10]:生长偶联型、非生长偶联型和部分生长偶联型。其通用模型可用 Luedeking-Piret 方程表示

$$\frac{dP}{dt} = \alpha \frac{dX}{dt} + \beta X \quad (5)$$

积分得

$$P = P_0 + \alpha(X - X_0) + \beta \left(\frac{X_m}{k} \ln \left[1 - \frac{X_0}{X_m} (1 - e^{kt}) \right] \right) \quad (6)$$

式中: α 为与菌体生长相关联的产物生成系数; β 为与菌体量相关联的产物生成系数; P 、 P_0 分别为 t 时刻生成产物的质量浓度和生成产物的最大质量浓度。

当 $\alpha=0$ 、 $\beta \neq 0$ 时, 产物形成与菌体生长无关; 当 $\alpha \neq 0$ 、 $\beta \neq 0$ 时, 产物形成与菌体生长部分偶联; 当 $\alpha \neq 0$ 、 $\beta=0$ 时, 产物形成与菌体生长相互偶联。

2.3 还原糖变化动力学模型

在 SSF 工艺中, 由于糖化和发酵同时进行, 因此还原糖的变化过程应是这两个过程的综合。根据余洪波等人的研究, 纤维素酶解过程的动力学方程为^[11]

$$S' = \frac{S_m t}{K + t} \quad (7)$$

其中

$$K = \frac{1}{0.9 S_m C_s K_{cat}} \quad (8)$$

式中: C_s 为玉米芯的初始质量浓度; S' 、 S_m 分别为还原糖 t 时刻的质量浓度和酶解过程中的最大质量浓度; K_{cat} 为二级反应常数; K 为达到最大还原糖产量一半时所需的酶解时间; 纤维素分子和葡萄糖的转化系数为 0.9。

在酵母菌的发酵过程中, 还原糖的消耗分为菌体自身繁殖、菌体代谢生长以及产物生成 3 个方面, 因此可采用如下的动力学方程

$$-\frac{dS}{dt} = \frac{1}{Y_{X/S}} \frac{dX}{dt} + wX + \frac{1}{Y_{P/S}} \frac{dP}{dt} \quad (9)$$

令 $\frac{1}{Y_{X/S}} = m$; $\frac{1}{Y_{P/S}} = n$, 上式积分得

$$S_0 - S = (m + n\alpha)(X - X_0) + (\omega + n\beta) \frac{X_m}{k} \ln \frac{X_m - X_0 + X_0 e^{kt}}{X_m} \quad (10)$$

式中: m 为与菌体自身繁殖有关的系数; n 为与产物生成有关的系数; S_0 、 S 分别为还原糖的发酵初始质量浓度和 t 时刻的质量浓度。

根据 SSF 实验, 在发酵系统接入酵母菌之前玉米芯经历了 24 h 的预酶解过程, 在这一阶段, 一部分纤维素成分水解为还原性糖, 从而有利于新接入酵母菌的生长。预酶解之后, 玉米芯的继续酶解和乙醇发酵同时进行, 将其动力学方程进行综合得

$$S_e = \frac{S_m(t+24)}{K+t+24} + (m + n\alpha)(X - X_0) +$$

$$(\omega + n\beta) \frac{X_m}{k} \ln \frac{X_m - X_0 + X_0 e^{kt}}{X_m} \quad (11)$$

式中: S_e 为 t 时刻发酵系统中的净还原糖的质量浓度; 预酶解时间为 24 h。

3 基于线性和非线性动态变化惯性权重的 PSO 参数辨识

3.1 基于线性和非线性动态变化惯性权重的 PSO 参数辨识方法

利用线性和非线性动态变化惯性权重的 PSO 算法进行参数辨识时, 先要根据动力学方程确定未知参数。在 Matlab 软件中编写程序, 设置粒子种群大小为 40, 粒子维数为 2, $w_{\max} = 0.9$, $w_{\min} = 0.4$, w 的线性和非线性动态变化分别如式(1)、(2)所示, 学习因子 $c_1 = c_2 = 2$, 迭代步数为 100。构造适应度函数为实验值和模型计算值之间的误差平方总和, 即

$$f = \sum (f(i) - f_i)^2 \quad (12)$$

式中: $f(i)$ 为实验值; f_i 为模型拟合值。

若上述适应度函数值越小, 说明实验值和模型拟合值吻合程度越高, 该动力学模型的准确性和推广性也越好。该 PSO 算法寻优的流程如下:

(1) 把待优化的参数作为一个粒子, 设置粒子群的初始条件, 如种群规模、惯性权重、学习因子等;

(2) 初始化群体中粒子的初始位置和初始速度, 调节位置和速度的范围一致;

(3) 计算每个粒子的适应度值, 将当前各微粒的位置、速度和适应度值存储于个体最优解(pbest)中;

(4) 初始化一个最优矩阵, 存储所有 pbest 中最优个体的位置、速度和适应度值, 即全局最优解(gbest);

(5) 根据线性和非线性变化公式改变惯性权重, 并按照式(13)更新各微粒的位置和速度

$$\left. \begin{aligned} v_{id}^{k+1} &= \omega v_{id}^k + c_1 \text{rand}_1^k (\text{pbest}_{id}^k - x_{id}^k) + \\ &c_2 \text{rand}_2^k (\text{gbest}^k - x_{id}^k) \\ x_{id}^{k+1} &= x_{id}^k + v_{id}^{k+1} \end{aligned} \right\} \quad (13)$$

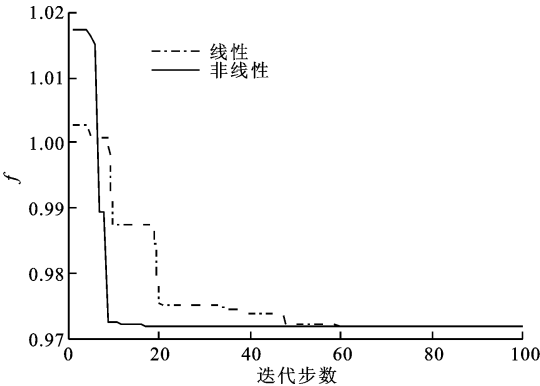
(6) 对每个微粒, 将当前适应度值与 pbest 相比较, 若当前值更优, 则将其替代 pbest;

(7) 将当前所有微粒 pbest 中的最优值与 gbest 相比较, 若当前值更优时, 则将其替代 gbest;

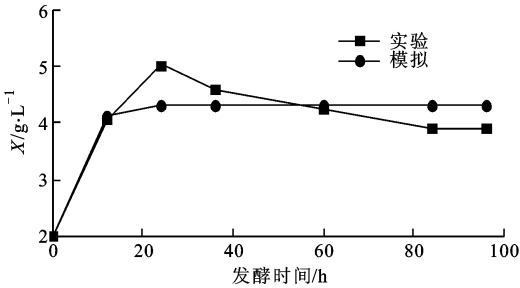
(8) 根据该优化模拟指标, 判断是否已达到结束条件, 若达到最大迭代次数或最优解基本不再变化, 则终止迭代, 返回当前的 gbest, 将其对应微粒的位置作为要辨识的参数, 否则返回步骤(5), 继续进行寻优。

3.2 基于非线性动态变化惯性权重的 PSO 算法
对 SSF 工艺动力学方程的参数辨识

根据发酵过程的动力学方程,按照 3.1 节中的非线性动态变化惯性权重的 PSO 方法进行参数辨识,并与线性变化的参数辨识过程比较,在优化过程中通过不断调整粒子的位置范围以获得最优的适应度值。通过 PSO 寻优获得的参数结果如表 1 所示,将这些参数代入各动力学模型中,计算出不同发酵时间时各变量的模型拟合值,并与实验值相互比较。不同动力学方程的参数辨识曲线和不同发酵时间菌体质量浓度 X 、乙醇质量浓度 P 以及还原糖质量浓度 S_e 的拟合结果与实验数据的对比情况如图 1~图 3 所示。



(a) 菌体生长模型参数辨识曲线



(b) 菌体生长的实验数据和模型拟合结果对比情况

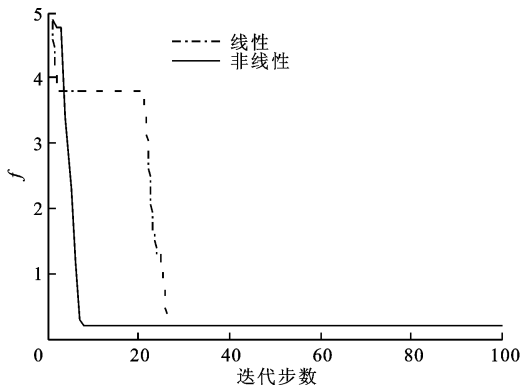
图 1 菌体生长模型

表 1 非线性动态变化惯性权重的 PSO 算法获得的优化参数

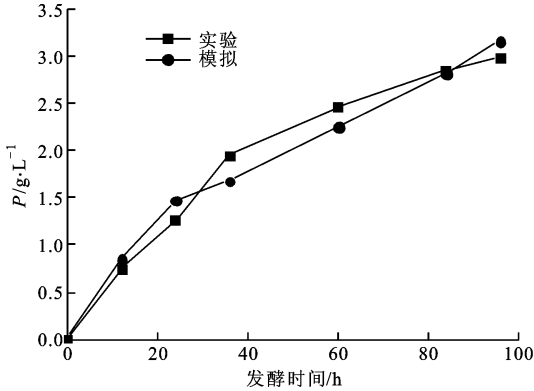
参数	S_m	K	X_m	k	α
优化解	26.574 8	38.192 9	4.322 6	0.269 1	0.288 3

参数	β	m	n	ω
优化解	0.006 5	2.433 1	0.980 8	0.029 6

由图 1~图 3 可知,实验和模型拟合曲线趋势基本一致,即实验数据与模拟数据比较接近,其中图 3 表明本文提出的发酵过程中的还原糖变化动力学

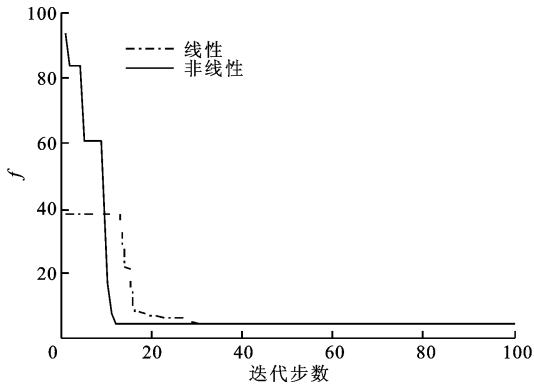


(a) 乙醇生成模型参数辨识曲线

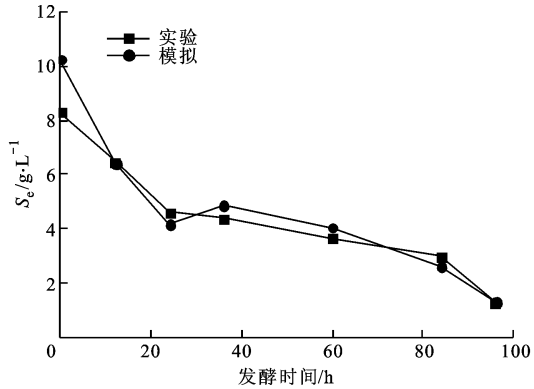


(b) 乙醇生成的实验数据和模型拟合结果对比情况

图 2 乙醇生成模型



(a) 还原糖消耗模型参数辨识曲线



(b) 还原糖消耗的实验数据和模型拟合结果对比情况

图 3 还原糖消耗模型

方程具有一定的准确性和可靠性。

通过与线性变化惯性权重的 PSO 算法相比,利用非线性变化惯性权重的 PSO 算法进行参数辨识的收敛速度更快,在效率上和精度上都具有更优的性能,有效避免了局部最优问题,具有一定的可行性和推广性,从而为模型参数估计提供了一种新思路。

4 结 论

本文根据同步糖化发酵实验的具体特点,结合纤维素酶解过程的动力学方程和经典发酵动力学中的菌体生长、产物生成和还原糖消耗模型,推导出 SSF 工艺中还原糖变化的动力学方程,并比较分析了线性和非线性动态变化惯性权重的自适应 PSO 算法在动力学参数辨识过程中的优劣,确定了非线性方法的快速收敛特性。利用非线性动态变化惯性权重的自适应 PSO 算法对玉米芯 SSF 工艺中的菌体生长、产物生成以及还原糖消耗进行参数辨识,并对模型进行了拟合。结果表明,模型的拟合值与实验数据比较接近,利用这些模型来反映此 SSF 过程的机理具有一定的准确性和可靠性,可为后续类似实验的自动化控制和优化提供依据。

参考文献:

- [1] 邓雪. 玉米秸秆水解成糖发酵乙醇 [D]. 长春: 长春工业大学, 2010.
- [2] LIU L, SUN J, ZHANG D X, et al. Culture conditions optimization of hyaluronic acid production by *Streptococcus zooepidemicus* based on radial basis function neural network and quantum-behaved particle swarm optimization algorithm [J]. *Enzyme and Microbial Technology*, 2009, 44(1): 24-32.
- [3] SKOLPAP W, NUCHPRAYOON S, SCHARER J M, et al. Fed-batch optimization of alpha-amylase and protease-producing *Bacillus subtilis* using genetic algorithm and particle swarm optimization [J]. *Chemical Engineering Science*, 2008, 63(16): 4090-4099.
- [4] 许久峰, 苗国立, 聂金荣, 等. 基于自适应权重 PSO 的模型参数估计算法 [J]. *河南工程学院学报: 自然科学版*, 2010, 22(3): 68-72.
- XU Jiufeng, MIAO Guoli, NIE Jinrong, et al. An algorithm of model parameter estimation based on adaptive weight PSO [J]. *Journal of Henan Institute of Engineering: Natural Science Edition*, 2010, 22(3): 68-72.
- [5] 周驰. 粒子群优化算法应用研究 [D]. 武汉: 华中科技大学, 2007.
- [6] GARLAPATI V K, VUNDAVILLI P R, BANERJEE R. Evaluation of lipase production by genetic algorithm and particle swarm optimization and their comparative study [J]. *Appl Biochem Biotechnol*, 2010, 162(5): 1350-1361.
- [7] 代志凯, 印遇龙, 阮征. 微生物发酵动力学模型及其参数拟合的软件实现 [J]. *计算机与应用化学*, 2011, 28(4): 437-440.
- DAI Zhikai, YIN Yulong, RUAN Zheng. Microbial fermentation kinetic model and its parameters estimation by software [J]. *Computers and Applied Chemistry*, 2011, 28(4): 437-440.
- [8] 吕振肃, 侯志荣. 自适应变异的粒子群优化算法 [J]. *电子学报*, 2004, 3(3): 416-420.
- LÜ Zhensu, HOU Zhirong. Particle swarm optimization with adaptive mutation [J]. *Acta Electronica Sinica*, 2004, 3(3): 416-420.
- [9] 赖智乐. 汽爆玉米秸秆同步糖化发酵产乙醇的工艺研究 [D]. 郑州: 郑州大学, 2010.
- [10] 于雷, 裴晓林, 雷霆. L-乳酸生产菌分批发酵动力学模型 [J]. *食品工业科技*, 2008, 29(5): 100-102.
- YU Lei, PEI Xiaolin, LEI Ting. Dynamic models for L-lactic acid batch fermentation by *Lactobacillus rhamnosus* [J]. *Science and Technology of Food Industry*, 2008, 29(5): 100-102.
- [11] 余洪波, 张晓昱, 柯静, 等. 生物-碱氧化预处理玉米秸秆酶解条件的优化 [J]. *农业工程学报*, 2009, 25(4): 201-205.
- YU Hongbo, ZHANG Xiaoyu, KE Jing, et al. Optimization of enzymatic hydrolysis of corn straw after biological-alkaline/oxidative pretreatment [J]. *Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering*, 2009, 25(4): 201-205.

(编辑 荆树蓉)