

基于RBF神经网络的发酵过程菌体浓度的软测量*

强明辉^{1,2}, 邹有锋¹

(¹兰州理工大学电气工程与信息工程学院 甘肃兰州, 730050)

(²兰州理工大学甘肃省工业过程先进控制重点实验室 甘肃兰州, 730050)

摘要: 针对微生物发酵过程中菌体细胞浓度难以实时在线检测的问题, 从生物细胞代谢角度分析了发酵过程中生物代谢参数的相关性, 找出了能够表示生物变量大小的代谢参数, 然后将这些参数作为输入变量, 建立了菌体细胞浓度软测量的RBF神经网络模型, 为复杂系统中生物量参数的检测提供了一条有效途径。仿真结果表明, 该软测量方法具有较高的精度, 能很好地应用于生物发酵过程。

关键词: RBF网络; 软测量; 模型; 菌体浓度

Abstract: In the light of that the on line detection of cell concentration in microbe-fermentation process is difficult to accomplish, Analysis the parameters correlation in fermentation process and found out the parameters that can express the magnitude of biomass in fermentation process, then with these parameters as importing variables, a soft-sensing model of cell concentration based on RBF(Radial Basis Function) neural network is built up. It can solve the problem of on-line biomass parameter estimation in the complicated system. The simulating results demonstrate that the estimation accuracy is well, and will be useful in microbe-fermentation process.

Key words: RBF neural network; soft-sensing; model; cell concentration

中图分类号: TP273.4

文献标识码: B

文章编号: 1001-9227(2012)02-0178-03

0 引言

微生物发酵过程是一种常见的复杂反应过程, 它具有高度非线性、时变性和不确定性等特点。发酵过程影响因素众多, 机理十分复杂, 采用经典的机理模型关系式很难描述发酵过程, 菌体浓度、基质总糖浓度、产物浓度等生物量参数检测非常重要, 由于技术或成本等原因, 一般需经过实验室离线分析才能得到。但离线分析的方法采样间隔时间长、数据滞后大, 难以满足发酵过程监测和控制的要求^[1]。采用软测量技术, 通过建立可在线测量与预估变量之间关系的模型, 可以实现对生物变量的在线估计, 从而更好地满足发酵过程监测与控制的要求。

1 生物发酵过程生物量软测量技术应用研究的概况

文章通过对谷氨酸发酵过程的研究, 构建了基于RBF神经网络的谷氨酸发酵菌体浓度软测量模型。经过仿真实验并与实验分析结果比较, 基本可以反映谷氨酸发酵过程中的菌体浓度。

1.1 RBF神经网络

RBF(Radial Basis Function, 径向基函数, 简称RBF)神经网络是一种单隐层前馈网络, 它具有广泛的非线性适应能力, 使用的学习算法有Moody和Darken算法、局部训练算法、正交优选算法、聚类法和Givens变换联合算法。RBF网络的学习算法速度快, 能避免局部极小值问题^[2], RBF网络拓扑结构如图1所示。

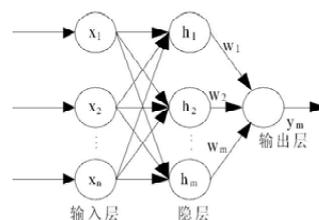


图1 多输入单输出的RBF神经网络结构

其中, 输入层节点只传递输入信号到隐层。隐层的基函数为非线性的, 它对输入信号产生一个局部化的响应, 即每一个隐节点有一个参数矢量称之为中心。该中心用来与网络输入矢量相比较以产生径向对称响应, 仅当输入落在一个很小的指定区域中时, 隐节点才做出有意义的非零响应, 响应值在 $[0, 1]$ 之间, 输入与基函数中心的距离越近, 隐节点响应越大。输出单元是线性的, 即输出单元对隐节点输出进行线性加权组合。由此可见, 整个网络是通过非线性基函数的线性组合, 实现从 $R_n - R_m$ 的非线性变换^[3]。

RBF神经网络常用的非线性基函数为高斯函数:

$$h_j(X) = \exp\left(-\frac{\|X - C_j\|^2}{2b_j^2}\right), j = 1, 2, \dots, m \quad (1)$$

式中, $h_j(X)$ 为隐层第 j 个单元输出, $X = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ 为输入矢量, C_j 为隐层第 j 个径向基函数的中心, b 为径向基函数的宽度, 用于控制函数的局部性程度。RBF网络的输出可表示为:

$$y_m(k) = w_1 h_1 + w_2 h_2 + \dots + w_m h_m, \text{ 即 } Y = WH.$$

1.2 RBF网络的训练

在RBF神经网络的训练过程中, 对隐层和输出层采用了不同的学习算法。隐层采用聚类算法对学习样本进行聚

收稿日期: 2011-11-28

作者简介: 强明辉(1960-), 男, 教授级高工, 主要研究方向为工业过程控制、控制理论与控制工程。

类,确定神经元的中心点 c_j 以及半径 b_j 。隐层到输出层的权值调整采用正交最小二乘算法(OLS算法)。整个训练过程分为非监督学习和监督学习两个阶段。非监督学习阶段采用K-均值聚类法对输入向量进行聚类,找出聚类中心 c_j 及参数 b_j ,后进入监督学习阶段。当 c_j 及 b_j 确定后,RBF神经网络从输入到输出就成了一个线性方程组,因此监督学习阶段可采用最小二乘法求解RBF神经网络的输出权值 w_j 。根据训练样本反复训练RBF网络,调整 w_j 、 c_j ,当网络的最终输出误差满足精度要求时训练停止^[4-5]。

2 菌体细胞浓度软测量建模

微生物发酵过程是复杂的物理化学过程,由于菌体细胞的生长受多种因素的影响,生化反应的机理相当复杂,因此难以精确建模。前向神经网络在非线性不确定系统建模中有一定的优势。RBF网络同标准的BP网络相比,不但理论上是前向网络中最优的网络,而且学习方法也避免了局部最优的问题。利用RBF网络对菌体细胞浓度进行软测量建模应从以下几步进行:

(1) 确定网络的输入变量(辅助变量)

软测量技术建模的关键是输入变量的选取。生物发酵参数可分为物理参数、化学参数和生物量参数。发酵罐温度、发酵罐压力、搅拌转速、通气流量、料液流量、加料速率等物理参数对发酵过程产生重要的影响,是发酵成败的关键,然而它们与生物变量之间却没有数量关系,不宜作为软测量的输入变量;而PH值、溶解氧浓度(DO)等参数受现场控制因素影响较大,亦不宜作为输入变量。根据发酵动力学原理,耗氧速率(OUR)是菌体代谢活性的真实反映,与培养时间和菌体浓度有关;而二氧化碳释放率(CER)是能够反映菌体代谢状况的另一重要因素^[6]。它们的表达式分别如下:

$$OUR = Q_{O_2} X = \frac{F_{in}}{V} \left[C_{O_2in} - \frac{C_{inert} \cdot C_{O_2out}}{1 - (C_{O_2out} + C_{CO_2out})} \right] \cdot f \quad (2)$$

$$CER = Q_{CO_2} X = \frac{F_m}{V} \left[\frac{C_{inert} \cdot C_{CO_2out}}{1 - (C_{O_2out} + C_{CO_2out})} - C_{CO_2in} \right] \cdot f \quad (3)$$

$$f = \frac{273}{273 + t_{in}} \cdot P_{in} \cdot \frac{1}{1 + h} \times 10^{-5} \quad (4)$$

式中, F_{in} 为进气流量,单位为mol; C_{inert} 、 C_{O_2in} 分别为气中惰性气体和氧的浓度,通常分别取为79.12%和20.85%; C_{O_2out} 、 C_{CO_2out} 分别为排气中氧及二氧化碳的浓度,单位为%(体积分数); V 为发酵体积,单位为L; P_{in} 为进气的绝对压强,单位为Pa; t_{in} 为进气的温度,单位为 $^{\circ}C$;h为进气的相对湿度,单位为%; Q_{O_2} 为菌体的呼吸强度,单位为mol O_2 /(g·h); X 为菌体干重,单位为g/L; C_{CO_2in} 为进气中二氧化碳的浓度,通常取0.03%; Q_{CO_2} 为二氧化碳释放率,单位mol CO_2 /(g·h)。

因此,只需连续测量排气中氧和二氧化碳浓度,就可以计算菌体细胞不同时间的OUR和CER,从而实现OUR和CER的在线测量。综上所述,选择排气中的 O_2 含量和排气 CO_2 含量为辅助变量。

(2) 构建网络模型

根据分析,菌体浓度与发酵时间 t 、OUR和CER密切相关,且OUR和CER都能反映菌体浓度的大小。为降低神经网络输入变量之间的相关性,同时又能充分利用发酵过程中多个传感器信息之间的相关性和冗余性,利用数据融合的理论,首先单独建立两个神经网络,然后将它们的输出进行融合,增加测量的准确性。图2为构建RBF神经网络模型。根据输入数据情况将网络输入节点定为5个,输出节点为1个,隐层节点数目根据训练情况确定,隐层神经元的传递函数选为高斯函数。

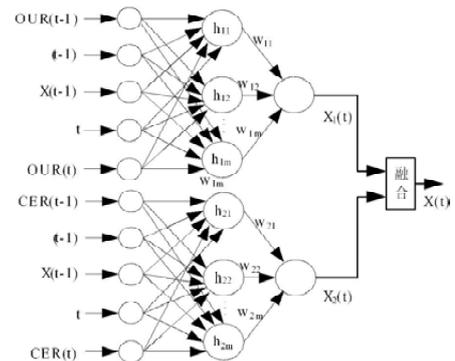


图2 RBF神经网络模型

(3) 生成样本

将采集或生成的各输入变量和输出变量(主导变量)的数据,经过除噪滤波、显著误差检测及数据校正等预处理后,生成训练样本和测试样本。

(4) 网络学习

采用上述RBF网络学习算法进行离线训练,确定在满足精度要求下径向基函数中心、基函数宽度及网络的权值。

(5) 测试模型

网络训练完成后,利用测试样本,对网络进行检验。

(6) 在线估计

若测试结果满足实际系统的误差要求,则把训练好的网络模型投入到发酵过程在线测试中,实现菌体细胞浓度的在线估计。

3 仿真实验

发酵过程菌体细胞浓度软测量建模实验依托某味精厂谷氨酸发酵系统为平台。该系统带有顺磁氧分析仪和红外二氧化碳分析仪,可以在线检测进、出口气体中氧气和二氧化碳含量,还有722可见光光度计对发酵液作光密度OD值检测,离线测算出菌体浓度。对出口气体组成 $O_2\%$ 、 $CO_2\%$ 进行数据预处理后转换成OUR和CER数值并生成样本作为RBF网络的输入变量,待测OD值作为网络的输出变量(由OD值可根据相关仪器及其测试参数设置直接算出菌体浓度)。训练样本以该厂发酵车间10个发酵罐连续4个发酵周期的检测数据形成40组样本(每个发酵周期约34个小时,离线检测OD值21次)。其中30组数据作为训练样本,10组作为测试样本。通过训练发现隐层节点数在31时性能良好,能满足精度要求。经测试预测误差为:

(下转第181页)

的表达方式。需要结合具体问题进行分析。

(2) 禁忌表: 保存最近被禁忌操作的表。

3.3 禁忌人工免疫网络算法实现

禁忌人工免疫算法,增加了禁忌表、记忆表和进化方向表。禁忌表用于存储在迭代过程中一些亲和力没有增加的次数达到设定阈值的细胞,禁忌表记录细胞取值、亲和力和禁忌次数;记忆表存储记忆细胞,记录细胞各变量取值和亲进化方向表用于网络中细胞变异时。禁忌人工免疫网络算法的流程如图1所示。

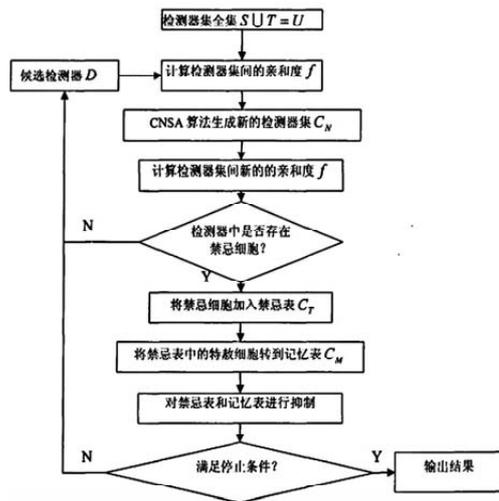


图1 禁忌人工免疫网络算法流程图

(上接第179页)

$$MSE = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [y_i - x(t_i)]^2} = 2.39\%$$

式中 y_i 是测试集中OD检测的实际值, $x(t_i)$ 是相应测试样本的输入变量通过神经网络输出得到的OD值的估计值, N 是测试集的样本个数,这里取21。模型测试结果如表1。

表1 模型测试结果

发酵时间 取样时间	排气CO2 含量(%)	排气O2 含量(%)	检测 OD值	输出 OD值	预测 偏差
0	2.0	22.1	0.14	0.13	-0.01
1	1.8	21.8	0.24	0.22	-0.02
2	1.6	21.8	0.40	0.42	0.02
3	1.8	20.9	0.51	0.54	0.03
4	3.0	19.8	0.70	0.65	-0.05
5	3.8	18.0	0.80	0.82	0.02
6	7.0	16.0	1.0	1.02	0.02
8	11.0	12.9	1.12	1.10	-0.02
10	12.0	12.4	1.15	1.15	0
12	12.1	11.2	1.17	1.18	0.01
14	11.5	11.3	1.17	1.17	0
16	10.5	11.8	1.16	1.18	0.02
18	11.5	11.1	1.18	1.18	0
20	11.0	11.9	1.20	1.20	0
22	10.8	12.8	1.19	1.20	0.01
24	10.0	13.9	1.16	1.12	-0.04
26	10.02	13.72	1.13	1.18	0.05
28	10.0	13.9	1.11	1.10	-0.01
30	9.5	14.1	1.09	1.13	0.04
32	10.0	13.6	1.10	1.12	0.02
34	7.0	16.1	1.11	1.11	0

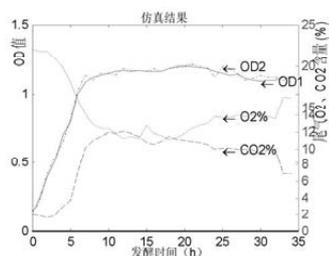


图3 模型仿真结果

对于庞大数量的检测器的搜索策略进行改进,本章介绍搜索的基本原理和搜索算法的一般算法和算法所涉及的收敛性问题,其次,介绍了传统的禁忌搜索算法原理,并提出一种改进了禁忌人工免疫网络搜索算法,其中禁忌表减少搜索所用的时间,根据记忆表可以知道亲和力最高的值(局部极致),可知检测器的发展方向,最后验证该算法的全局的最优收敛性。

参考文献

[1] 莫宏伟,左兴权,毕晓君.人工免疫系统研究进展[J].智能系统学报,2009(4).
 [2] 赵云丰,付冬梅.一种改进的人工免疫网络优化算法及其性能分析[J].自然科学进展,2009,19(4).
 [3] 孙勇智.人工免疫系统模型、算法及其应用研究[D].浙江大学,2004,3-20.
 [4] 姜恩龙,张凤斌,杨洋,刘悦.基于海明匹配的r连续位匹配规则的研究[J].2007,12(5).

模型仿真的输出与测试样本OD值对比如图3,其中OD1代表模型输出的OD估计值,OD2代表测试样本集OD检测实际值。

4 结论

在分析了发酵过程中生物代谢参数的相关性,分别以耗氧速率OUR和二氧化碳释放率CER为主要输入变量建立了两个菌体细胞浓度软测量的RBF神经网络模型,然后将两个模型的输出进行融合,实现了菌体浓度的在线估计。采用离线分析数据,对软测量模型进行了验证,仿真结果表明,利用该模型的估算值与实际离线测算值较一致,可以实时反映发酵过程的菌体浓度,对于生物过程控制具有一定的指导意义。

参考文献

[1] 曲雨水,黄德先,金以慧.基于多神经网络的发酵过程菌丝浓度估计[J].计算机工程与应用,2004,40(10):208-210.
 [2] 王建林,于涛.发酵过程软测量技术的研究进展[M].现代化工,2005,25(6):22-25.
 [3] 张乃尧,阎平凡.神经网络与模糊控制[M].北京:清华大学出版社,1998.
 [4] 刘金琨.智能控制[M].北京:电子工业出版社,2005.
 [5] 徐丽娜.神经网络控制[M].北京:电子工业出版社,2003.
 [6] 贺小贤.生物工艺原理[M].北京:化学工业出版社,2003.