

基于 IGA-SVM 的发酵过程建模及优化控制

王鲜芳^{1,2}, 潘 丰¹

WANG Xian-fang^{1,2}, PAN Feng¹

1. 江南大学 通信与控制工程学院, 江苏 无锡 214122

2. 河南科技学院 信息工程系, 河南 新乡 453003

1. School of Communication and Control Engineering, Jiangnan University, Wuxi, Jiangsu 214122, China

2. Department of Information Engineering, Henan Institute of Science and Technology, Xinxiang, Henan 453003, China

E-mail: xfwang11@yahoo.com.cn

WANG Xian-fang, PAN Feng. Modelling and Optimized Controlling of fermentation process based on IGA-SVM. *Computer Engineering and Applications*, 2008, 44(28): 187-189.

Abstract: Utilizing the global search ability of Immune Genetic Algorithm (IGA) and the high generalization ability of Support Vector Machine (SVM), selecting the appropriate state variables, a dynamic time-varying model has been built. Some biochemical state variables which can not be measured on-line would be pre-estimated by using this method, and some operational variables would be optimized. It is proved that the method is efficiency through the practical application of glutamic acid fermentation process.

Key words: Immune Genetic Algorithm (IGA); Support Vector Machine (SVM); state variables; intelligence control

摘 要: 利用免疫遗传算法 (IGA, Immune Genetic Algorithm) 的全局搜索功能和支持向量机 (SVM, Support Vector Machine) 泛化能力强的特点, 选择合适的状态变量, 对发酵过程建立动态时变模型。利用该模型和算法对一些不能在线测量的生化状态变量进行在线预估, 并对一些关键的操作变量进行了优化。通过对谷氨酸发酵过程的实际应用, 验证了该方法的有效性。

关键词: 免疫遗传算法; 支持向量机; 状态变量; 智能控制

DOI: 10.3778/j.issn.1002-8331.2008.28.062 文章编号: 1002-8331(2008)28-0187-03 文献标识码: A 中图分类号: TP39

1 引言

随着生物行业的迅速发展和进步, 对于发酵过程进行控制和动态优化的迫切要求也越来越强烈。但是, 与其他行业过程不同, 发酵过程有着以下主要特征^[1]: (1) 动力学模型呈高度的非线性, 难以在实际过程中直接应用。(2) 强烈的时变性特征, 即过程的动力学特征随发酵时间或批次的变化而变化, 因此, 传统的、以动力学模型为基础的控制已经难以满足要求。(3) 能够在线测量的状态参数极其有限。(4) 产品质量波动大, 错误和故障不易早期发现, 一旦发现, 发酵过程已不可逆转, 则造成原料的浪费和设备的空转。

近年来, 基于结构风险最小化原则的支持向量机^[2] (Support Vector Machine, SVM) 用于非线性过程建模越来越受到人们的重视^[3-4], 它是一种专门研究小样本情况下机器学习规律的理论, 克服了以往神经网络等建模方法的易陷入局部最优、泛化能力差等缺点。但是这些优点的实现依赖于参数的正确选择, 如果选择不当也会极大影响建模效果。目前参数的选择大多数是凭经验选取, 过分依赖于使用者的水平, 这在很大程度上限制了它的应用。

免疫遗传算法 (Immune Genetic Algorithm, IGA) 是免疫算法 (IA) 和遗传算法 (GA) 的优化结合。它既利用免疫算法可以有效地使用多种机制求解多目标函数最优解的复杂自适应特性, 又保留了遗传算法的搜索特性, 克服遗传算法局部搜索效率较差的缺点, 在很大程度上避免未成熟收敛, 改善了算法的收敛性^[5-6]。

本文利用改进的免疫遗传算法来自动地获得支持向量机的最佳参数, 采用优化的支持向量机对发酵过程进行建模, 这样不但提高了模型的泛化能力, 避免了基本遗传算法过早收敛和易局部收敛的问题, 而且实现了 SVM 参数的自动选择, 以及不能实时测量变量的在线预估, 从而达到实时控制的目的。

2 SVM 及参数选择问题

目前, 在建模方面应用比较多的是最小二乘支持向量机 (LS-SVM, Least Square SVM), 该方法由 Suykens^[7] 提出, 用如下形式的函数对未知函数进行估计:

$$y(x) = w^T \phi(x) + b \quad (1)$$

其中, $x \in R^n$, $y \in R$, 非线性函数 $\phi(\cdot): R^n \rightarrow R$ 将输入空间映射

基金项目: 国家高技术研究发展计划 (863) (the National High-Tech Research and Development Plan of China under Grant No. 2006AA020301)。

作者简介: 王鲜芳 (1969-), 女, 博士生, 副教授, 主要研究方向: 工业过程的建模与优化控制等; 潘丰 (1963-), 男, 教授, 博士生导师, 主要研究方向: 工业过程智能控制。

收稿日期: 2008-04-10

修回日期: 2008-05-19

为高维特征空间。

给定训练集 $\{x_k, y_k\}_{k=1}^N$, LS-SVM 定义如下优化问题:

$$\min_{w, b, \xi} J(w, \xi) = \frac{1}{2} w^T w + \gamma \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \xi_i^2 \quad \gamma > 0, \text{ 为正则化参数} \quad (2)$$

满足约束:

$$y_i = w^T \cdot \phi(x_i) + b + \xi_i \quad i=1, \dots, l \quad (3)$$

相应的 Lagrangian 函数为:

$$L = J - \sum_{i=1}^l \alpha_i [w^T \phi(x_i) + b + \xi_i - y_i] \quad i=1, \dots, l \quad (4)$$

此优化问题有如下的解析解:

$$\begin{bmatrix} b \\ a \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & I^T \\ I & \Omega + \gamma^{-1} I \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 0 \\ y \end{bmatrix} \quad (5)$$

其中, $y = [y_1, y_2, \dots, y_n]^T$, $I = [1, \dots, 1]^T$, $\alpha = [\alpha_1, \dots, \alpha_N]^T$, Ω 是一个方阵, 其第 k 列 l 行的元素是 $\Omega_{kl} = \phi(x_k)^T \phi(x_l) = K(x_k, x_l)$; $K(\cdot, \cdot)$ 是核函数。实际建模中选用比较多的是 RBF 核函数:

$$K(x, x_i) = \exp\left(-\frac{\|x - x_i\|^2}{2\sigma^2}\right)$$

这里 δ 为宽度系数。由式(4)求出 ω , 就可以得到训练数据集的软测量模型:

$$y(x) = \sum_{i=1}^N \alpha_i K(x, x_i) + b \quad (6)$$

从以上推导可以看出, 等式约束在将求解优化问题转化为求解线性方程的过程中起到了重要作用, 优化问题用线性方程求解显然可以大大减少算法的复杂度。

在以上模型中, 重要的参数有两个: 正则化参数 γ 和核函数参数 δ 。这些参数的取值对模型的预测能力有着重要的影响。正则化参数 γ 表示对经验误差的惩罚程度, 取值小, 表示对经验误差的惩罚小。学习机器的复杂度小, 而经验风险值较大; 反之亦然。前者称为“欠学习”现象, 而后者则为“过学习”。每个数据子空间至少存在一个合适的 γ 使得推广能力最好。对于核函数参数 δ , 数值过小, 则支持向量机影响过小; 过大则影响过于强烈, 两者都会影响模型的精度^[9]。目前还没有统一的方法来决定这些参数的最佳取值。一般的方法是凭经验试凑, 通过不断实验来得到满意的结果。为了得到理想的预测模型和控制效果, 必须优化调整这些参数。

3 改进的免疫遗传算法(IGA)优化 SVM 参数

本文在文献[9]的基础上, 参考文献[10]的原理, 选用 k -fold 交叉验证误差作为 LSSVM 参数选择的目标值, 利用免疫遗传算法对核参数 δ 和正则化参数 γ 进行优选。具体实现步骤如下:

(1) 抗原识别。选择待求解问题的目标函数核参数 δ 和正则化参数 γ 作为抗原。

(2) 产生初始抗体种群。将待优化参数的组合作为抗体。根据对象先验知识, 将问题的初始解作为初始记忆细胞, 与随机产生的抗体共同构成初始种群。

(3) 计算亲和力。计算每个抗体的抗原亲和力 $(A_g)_i$ 以及与其他抗体之间的亲和力 $(A_b)_{ij}$ 。公式分别如下:

$$(A_g)_i = \frac{1}{1+t_i} \quad (7)$$

$$(A_b)_{ij} = \frac{1}{1+H(2)} \quad (8)$$

式中 t_i 为抗体 i 与抗原之间的匹配程度, 如果 $t_i=0, (A_g)_i=1$, 说明抗体与抗原完全匹配, 即这个抗体为最优解。 $H(2)$ 为抗体 i 和抗体 j 两者之间平均信息的熵。

(4) 更新记忆细胞。将初始种群按 $(A_g)_i$ 的降序排列, 将高抗原亲和力的抗体加入到记忆细胞, 因为记忆细胞数目有限, 所以新加入的抗体将取代记忆细胞中与其亲和力最高的原有抗体。

(5) 抗体的促进或抑制。依据式(9)计算抗体浓度 C_i :

$$C_i = \frac{m_i}{N} \quad (9)$$

式中, m_i 为与抗体 i 的亲和力大于 θ 的抗体数; θ 为亲和力常数, 一般取 $0.9 \leq \theta \leq 1$ 。根据抗体浓度进行免疫调节, 增进抗体的多样性。选择抗体的标准由抗体亲和力和浓度抑制因子两个部分组成:

$$S_i = \lambda (A_g)_i + (1 + \lambda)^{-\eta C_i} \quad (10)$$

式中, C_i 为抗体浓度; λ 和 η 为加权系数。

(6) 产生新抗体。对抗体种群中经过选择的抗体进行交叉和变异操作得到新种群, 与更新后的记忆细胞精英抗体共同构成新一代种群, 即得到新的 LS-SVM 参数。

(7) 判别终止条件。采用限定迭代次数的终止条件。若满足条件则停止计算, 否则重复执行(3)~(6)。

(8) 得到最优的 LSSVM 参数。

4 谷氨酸发酵过程建模及优化控制

4.1 谷氨酸发酵过程的建模

谷氨酸发酵是一种非常复杂的生化反应过程, 具有高度的非线性, 由于缺乏可靠的生物传感器, 菌体浓度、残糖浓度和谷氨酸浓度等生化变量不能进行在线测量, 采用软测量对其进行预测具有重要的意义。首先确定输入变量和输出变量, 输入变量为 t 时刻的葡萄糖浓度 $S(t)$ 、菌体浓度 $X(t)$ 、谷氨酸浓度 $P(t)$ 以及时间 t , 限于篇幅, 本文仅以下一时刻的谷氨酸浓度 $P(t+1)$ 作为输出预测变量。然后利用样本数据进行训练, 采用免疫遗传算法优选 SVM 参数, 最后得到基于 IGA-SVM 的预测模型, 从而实现对输出变量的预测。

4.2 谷氨酸发酵过程 R、Q 的优化控制

谷氨酸发酵属于有氧发酵, 生产过程中的溶氧量对于系统运行的好坏具有举足轻重的影响, 所以本文也对该过程实施优化控制, 选择与溶氧量密切相关的通风量 Q (m^3/h) 和搅拌速度 R (rpm) 作为优化操作变量, 利用基于优化的 SVM 算法建立状态预估模型, 根据 t 时刻获得的葡萄糖浓度 $S(t)$ 、菌体浓度 $X(t)$ 、产物浓度 $P(t)$, 采用基于上述改进的免疫遗传算法(IGA)优化计算来确定 t 时刻的最优通风量操作值 $Q(t)$ 和搅拌速度 $R(t)$, 从而使得 t 时刻的产物浓度 $P(t)$ 达到最大。该优化问题可描述为:

$$\text{目标函数: } P(t) = \max[f(S(t), X(t), P(t), t, Q(t), R(t))]$$

$$\text{约束条件: } Q(t) \in [Q(t)_{\min}, Q(t)_{\max}], R(t) \in [R(t)_{\min}, R(t)_{\max}]$$

上述预测和优化的实现原理框图如图 1 所示。

5 试验、结果及其分析

5.1 谷氨酸浓度的预测

基于以上所述的优化体系结构和软测量模型, 选取了谷氨

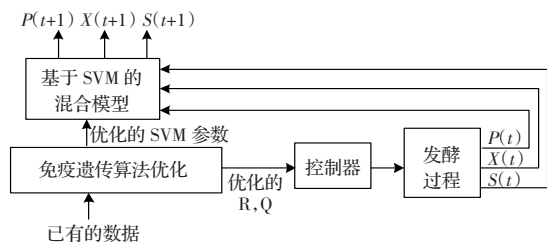


图1 基于 IGS-SVM 的谷氨酸发酵预测及优化控制结构框图

酸生产过程中的 5 批共 140 组作为研究对象。在使用改进的免疫遗传算法支持向量机(IGA-SVM)的情况下,适应度函数为求取谷氨酸的最大生成量。首先利用 3 批正常的的数据训练 SVM,通过训练,参数的选取如下:迭代步数为 100,取抗体种群规模 $N=50$;记忆细胞数量取 5;交叉概率 $P_c=0.9$;变异概率 $P_m=0.01$;在目标函数计算中加权系数 α, β, γ 和 ω 分别取为 0.01、0.5、0.01 和 0.8;在抗体浓度计算中,取亲和力和常数 $\theta=0.90$;加权系数 λ 和 η 分别取为 0.7 和 1.25,得出的优化的核参数 $\delta=0.6$ 和惩罚系数 $C=275$,分别对谷氨酸发酵过程建立预测模型。

为了便于比较,在相同的条件下也使用遗传算法支持向量机(GA-SVM)下进行了试验,取交叉概率为 $P_c=0.9$,变异概率为 $P_m=0.01$,迭代步数为 100。然后对实际过程进行在线预测,对谷氨酸浓度的实时预测结果如表 1 所示。

表 1 某批次谷氨酸浓度的预测结果比较

时间/h	测量值/(g/L)	IGA-SVM	
		GA-SVM 预估值/(g/L)	IGA-SVM 预估值/(g/L)
2	0.13	-0.091 2	0.125 0
4	0.22	0.246 0	0.231 2
6	0.34	0.591 5	0.332 1
8	1.60	1.049 5	1.325 0
10	3.00	2.578 8	2.784 1
12	4.50	4.156 5	4.325 1
14	5.60	5.550 4	5.560 1
16	6.80	6.606 7	6.623 5
18	7.60	7.645 7	7.620 0
20	8.40	8.384 5	8.372 1
22	9.10	9.149 6	9.102 5
24	10.20	9.802 9	9.932 6
26	11.10	10.798 5	10.963 5
28	12.05	11.623 8	11.854 2

两者的预测精度误差如下图 2 所示,从图 2 可以看出,IGA-SVM 的预测精度明显好于 GA-SVM,采用 GA 算法的 SVM 预测平均误差为 0.181 9 g/L,采用 IGA 算法的预测平均误差为 0.120 6 g/L。

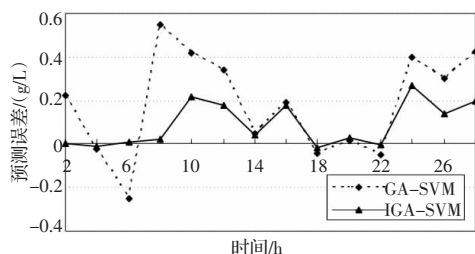


图2 采用 GA-SVM 和 IGA-SVM 谷氨酸浓度预测误差的比较

5.2 IGA 优化 R、Q

为了验证在第 4 章中所设计的优化策略,在相同的条件下,进行了两次试验,一次未采用优化策略, R, Q 采用定值控制;另外一次采用 IGA 优化 R, Q ,其中操作变量通风量 $Q(\text{m}^3/\text{h})$ 和搅拌速度 $R(\text{rpm})$ 的每一次优化初始个数为 20 个,取值范围为 $Q \in [0.9Q(t), 1.1Q(t)]$, $R \in [0.85R(t), 1.15R(t)]$,适应度函数为求取谷氨酸的最大生成量。所得出的结果如表 2 和图 3 所示。从表 2 和图 3 可以看出,实施优化控制后的谷氨酸浓度有了较大的提高。

表 2 谷氨酸浓度的优化控制结果比较

时间/h	原控制		优化控制		
	谷氨酸浓度/(g/L)	后谷氨酸浓度/(g/L)	谷氨酸浓度/(g/L)	后谷氨酸浓度/(g/L)	
2	0	0.13	16	4.90	6.80
4	0	0.22	18	6.00	7.60
6	0.15	0.34	20	6.80	8.40
8	0.30	1.60	22	7.30	9.10
10	1.30	3.00	24	8.00	10.20
12	2.30	4.50	26	8.80	11.10
14	3.50	5.60	28	9.30	12.05

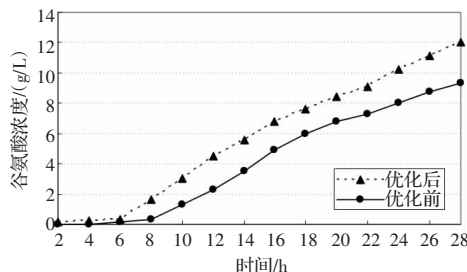


图3 采用 IGA-SVM 优化控制前后谷氨酸浓度比较

6 结论

本文以谷氨酸发酵过程为例,采用改进的免疫遗传算法优化支持向量机参数,克服了传统遗传算法存在过早收敛、难以保持个体多样性等缺陷,能够保证更快更稳地搜索到最优 SVM 参数。以菌体浓度 X 、基质浓度 S 、产物浓度 P 和时间为状态变量,对发酵过程建立动态时变模型,并利用该模型对一些不能在线测量的生化状态变量进行在线预估,并且通过对操作变量 R, Q 的优化使产物浓度达到最大。通过谷氨酸发酵过程的实际应用,验证了该建模和优化方法的有效性,具有一定的实际应用价值。

参考文献:

- [1] 史仲平,潘丰.发酵过程解析、控制与检测技术[M].北京:化学工业出版社,2005.
- [2] Vapnik V, Golowich S, Smola A. Support vector machine for function approximation, regression estimation, and signal processing[M]// Mozer M, Petsche T. Neural Information Processing Systems.[S.l.]: MIT Press, 1997, 9: 1-200.
- [3] 高学金,王普.基于支持向量机的青霉素发酵过程建模[J].系统仿真学报,2006(7):2052-2055.
- [4] 刘毅,王海清.采用最小二乘支持向量机的青霉素发酵过程建模研究[J].生物工程学报,2006(1):144-148.