

基于 LS-SVM 逆模型的青霉素发酵软测量方法^{*}

张 瑶, 孙玉坤, 黄永红, 嵇小辅

(江苏大学 电气信息工程学院, 江苏 镇江 212013)

摘 要: 针对青霉素发酵过程中的某些关键生物参数(如菌体浓度、基质浓度、产物浓度)难以实时在线测量的问题,提出一种基于最小二乘支持向量机(LS-SVM)逆模型的软测量方法。该方法用具有高斯核函数的 LS-SVM,离线建立被测对象的静态非线性逆模型。由静态非线性逆模型外加若干表征非线性动态特征微分器,构成了非线性系统的逆系统,将此逆系统串联在原发酵系统之后,得到“线性化”的伪线性系统。仿真结果表明,该方法能够对青霉素发酵过程中不可在线测量的关键变量进行预测,且达到了较高的测量精度。

关键词: 支持向量机; 逆系统; 青霉素; 软测量

中图分类号: TP274

文献标识码: A

Soft-sensor of penicillin fermentation based on LS-SVM inverse system

ZHANG Yao, SUN Yu Kun, HUANG Yong Hong, JI Xiao Fu

(School of Electrical and Information Engineering, Jiangsu University, Zhenjiang 212013, China)

Abstract: A soft sensor based on the least-square support vector machine inverse system is proposed to measure the important parameters of penicillin fermentation process, such as matrix concentration, biomass concentration and production concentration. This method is that the inverse system combines with the least-squares support vector machine. The mathematical model of fermentation process is given first, and then the reversibility of system is testified. The state nonlinear inverse model of the plant is off-line built by LS-SVM with a Gaussian kernel. The state nonlinear inverse model and a number of differentiators constitute the non-linear system of inverse system. Based on the theory of inverse system method, the least-square support vector machine inverse model is cascaded after the fermentation system to be linear pseudo-linear system. The simulation example shows that the method could measure the important parameters which could not be measured online during the course of penicillin fermentation with a high precision.

Key words: SVM; inverse system; penicillin; soft-sensor

青霉素发酵是一个具有高度非线性、时变性和迟滞性的过程^[1],其内在机理非常复杂。传统的测量方法难以对发酵过程中的一些关键生物量参数在线测量,这使得对整个发酵过程进行优化控制变得非常困难。在此情况下,采用软测量方法^[2]测量发酵过程中的生物参数是解决上述问题的有效途径。

逆系统方法^[3]已经在一般形式的非线性系统上建立起比较完整的设计理论,然而传统逆系统方法需要被控非线性系统的数学模型必须精确可知,而这在发酵工业中很难满足。因此,在仅知道输入、输出数据的情况下,如何辨识发酵过程逆系统的结构,对逆系统在生物发酵

过程中的应用和推广起着至关重要的作用。

支持向量机用于线性、非线性系统的辨识与控制取得了很大的进展^[4],它可以逼近任意一类非线性函数,这为 SVM 进行系统辨识和控制提供了理论根据。与神经网络相比,SVM 在经验风险最小化的基础上同时采用了结构化风险最小化准则,较好地解决了小样本、非线性、高维数和局部极小点等实际问题,具有很强的泛化能力。近年来,Suykens 等人提出了最小二乘支持向量机(LS-SVM)^[5],LS-SVM 是引入最小二乘系统到 SVM,采用二次规划解决函数估计问题,而且 LS-SVM 的数值稳定性和容量控制策略,使得核函数矩阵在非正定的情况下也能取得良好的效果,尤其适合像生化反应这种未能完全揭示输入样本特性的情况。

^{*} 基金项目: 国家 863 资助项目(2007AA04Z179)、教育部高等学校博士学科专项科研基金(20070299010)、江苏大学高级人才专项基金(07JG037)

本文将逆系统方法与最小二乘支持向量机结合,提出一种基于最小二乘支持向量机逆模型的软测量方法。该方法将逆系统函数的自变量作为支持向量机的输入,建立软测量模型。其中最小二乘向量机函数用于逼近逆系统的非线性函数,微分器表征非线性系统的动态特性。在实验室对青霉素发酵过程的关键参数进行预测估计,仿真结果表明,该方法对青霉素发酵过程中的关键变量有较好的逼近精度和良好的泛化能力。

1 数学模型和可逆性分析

本文采用青霉素发酵过程动力学模型^[6]:

$$\begin{cases} \frac{dX}{dt} = \mu X - \frac{X}{V} \frac{dV}{dt} \\ \frac{dS}{dt} = -\frac{\mu}{Y_{x/s}} X - \frac{\mu_{pp}}{Y_{p/s}} X - m_x X + \frac{F_s}{V} - \frac{S}{V} \frac{dV}{dt} \\ \frac{dP}{dt} = \mu_{pp} X - KP - \frac{P}{V} \frac{dV}{dt} \\ \frac{dC_L}{dt} = -\frac{\mu}{Y_{x/o}} X - \frac{\mu_{pp}}{Y_{p/o}} X - m_o X + K_{La}(C_L^* - C_L) - \frac{C_L}{V} \frac{dV}{dt} \\ \frac{dC_{CO_2}}{dt} = \alpha_1 \frac{dX}{dt} + \alpha_2 X + \alpha_3 \\ \frac{d[H^+]}{dt} = \gamma(\mu X - \frac{FX}{V}) + [\frac{-B + \sqrt{(B^2 + 4 \times 10^{-14})}}{2}] \frac{1}{\Delta t} \\ \frac{dV}{dt} = F \end{cases} \quad (1)$$

状态向量为:

$$\begin{aligned} \mathbf{x} &= (x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6, x_7)^T \\ &= (X, S, P, C_L, C_{CO_2}, [H^+], V)^T \end{aligned}$$

输入向量为 $\dot{V}=u$, u 为补料速率。式(1)中 7 个状态变量 $x_1 \sim x_7$ 分别是:菌体细胞浓度 $X(x_1)$ 、基质总糖浓度 $S(x_2)$ 、产物浓度 $P(x_3)$ 、溶氧浓度 $C_L(x_4)$ 、二氧化碳浓度 $C_{CO_2}(x_5)$ 、氢离子浓度 $[H^+](x_6)$ 、发酵液体积 $V(x_7)$, 其中 x_1 、 x_2 、 x_3 为不直接可测量, x_4 、 x_5 、 x_6 、 x_7 为直接可测量; μ 、 μ_{pp} 、 K_{La} 、 B 是状态变量 x 的函数, μ 为比生长率, μ_{pp} 为青霉素生成比率, K_{La} 为转移系数, 其中:

$$\begin{aligned} \mu &= \left[\frac{\mu_{\max}}{1 + [K_1/[H^+]] + [[H^+]/K_2]} \right] \frac{S}{K_X X + S} \frac{C_L}{K_{OX} X + C_L} \\ \mu_{pp} &= \mu_p \frac{S}{(K_p + S + S^2/K_1)} \frac{C_L^p}{K_{OP} X + C_L^p} \\ B &= \frac{[10^{-14}/[H^+] - [H^+]]V - C_{a/b}(F_a + F_b)\Delta t}{V + (F_a + F_b)\Delta t} \\ K_{La} &= \alpha \sqrt{f_g} \left(\frac{P_w}{V} \right)^\beta \end{aligned}$$

其他的量视为常数, 其中, γ 为比例常数, F 为添加补料速率, m_o 为氧维持系数, $\mu_{\max}$ 为最大比生长速率, m_x 为基质维持系数, k_{α} 、 k_{ϕ} 为氧限制常数, F_a 为酸流入速率, F_b 为基质流入速率, k 为产物水解常数, μ_p 为产物生产比率, k_p 为限制常数, F_{sf} 为葡萄糖溶液流入速率, α 、 β 、 k_1 、 k_2 为常数, p_w 搅拌输入功率, f_g 为氧流入速率, $Y_{x/s}$ 、

$Y_{p/s}$ 、 $Y_{p/o}$ 、 $Y_{x/o}$ 为得率常数, C_L^* 为溶解氧浓度在饱和状态, α_1 为 CO_2 比生长相关系数, α_2 为 CO_2 比维持能量相关系数, α_3 为 CO_2 比青霉素生产相关系数。

设想在青霉素发酵系统中存在这样一个子系统: 以难以直接测量的量 x_1 、 x_2 、 x_3 为输入, 直接可测量的量 $x_4 \sim x_7$ 为输出, 而 u 为该子系统的参变量。这样的子系统可作为青霉素发酵系统中的软传感器。选取式(1)中 7 个微分方程中的 3 个作为软传感器的状态方程, 为了避免含有不直接可测量的导数的方程, 选其中的第 4、第 6、第 7 个方程作为软传感器的状态方程。记不直接可测量为 $\hat{x}$, 可测量为 z :

$$\hat{\mathbf{x}} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} \quad \mathbf{z} = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_7 \\ x_4 \\ x_6 \end{pmatrix} \quad (2)$$

具体过程如下:

第 1 步: 由第 1 个直接可测量 $z_1 = x_7$, 可得:

$$\begin{aligned} \bar{r}_{10} &= \text{rank}(\partial z_1 / \partial \mathbf{x}) \\ &= \text{rank}[0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 1] = 1. \end{aligned}$$

对 z_1 求导, 得 $\dot{z}_1 = \dot{x}_7 = u$, 则:

$$\begin{aligned} \bar{r}_{11} &= \text{rank}(\partial(z_1, \dot{z}_1) / \partial \mathbf{x}) \\ &= \text{rank} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} = 1 = \bar{r}_{10} \end{aligned}$$

根据参考文献[7]的构造软传感器的辅助算法, 停止

z_1 对求导。由于 $r_1 = \text{rank}(\partial \dot{z}_1 / \partial \hat{\mathbf{x}}) = \text{rank}[0 \ 0 \ 0] = 0$, 所以无法构成 Z_1 , 即 Z_1 实际上是一个空集。

第 2 步: 再考虑第 2 个直接可测量 $z_2 = x_4$, 可得

$$\begin{aligned} \bar{r}_{20} &= \text{rank}(\partial z_2 / \partial \mathbf{x}) \\ &= \text{rank}[0 \ 0 \ 0 \ 1 \ 0 \ 0 \ 0] = 1 \end{aligned}$$

对 z_2 求导得:

$$\dot{z}_2 = \dot{x}_4 = \eta x_1 + K_{La}(x_4^* - x_4) - \frac{x_4}{x_7} u \quad (3)$$

式中, $\eta = -\left(\frac{\mu}{Y_{x/o}} + \frac{\mu_{pp}}{Y_{p/o}} + m_o\right)$, 则:

$$\begin{aligned} \bar{r}_{21} &= \text{rank}(\partial(z_2, \dot{z}_2) / \partial \mathbf{x}) \\ &= \text{rank} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \partial \dot{z}_2 / \partial x_1 & \partial \dot{z}_2 / \partial x_2 & \partial \dot{z}_2 / \partial x_3 & \partial \dot{z}_2 / \partial x_4 & \partial \dot{z}_2 / \partial x_5 & \partial \dot{z}_2 / \partial x_6 & \partial \dot{z}_2 / \partial x_7 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

$= 2 = \bar{r}_{20} + 1$ 。依据辅助算法, 需对 $\dot{z}_2$ 进一步求导, 计算得:

$$\ddot{z}_2 = g_1(x) + g_2(x_4, x_7, u, \dot{u}) \quad (4)$$

式中, $g_1(x) = \eta + \left(\frac{\partial \eta}{\partial x_1} + \frac{\partial \eta}{\partial x_2} + \frac{\partial \eta}{\partial x_4}\right) x_1$

$$g_2(x_4, x_7, u, \dot{u}) = -\left(\frac{\partial K_{La}}{\partial x_7} + \frac{\dot{u} x_7 - u^2}{x_7^2}\right) x_4 + \frac{\partial K_{La}}{\partial x_7} x_4^* - K_{La} - \frac{u}{x_7}$$

由于在实际应用中, 通常要求导数的阶数不能太高, 一般不高于 2 阶, 所以此处对 z_2 只求至 2 阶导数。

令 $r_2 = \text{rank}(\partial(Z_1, (\dot{z}_2, \ddot{z}_2)) / \partial \hat{\mathbf{x}})$

$$= \begin{bmatrix} \partial \dot{z}_2 / \partial x_1 & \partial \dot{z}_2 / \partial x_2 & \partial \dot{z}_2 / \partial x_3 \\ \partial \ddot{z}_2 / \partial x_1 & \partial \ddot{z}_2 / \partial x_2 & \partial \ddot{z}_2 / \partial x_3 \end{bmatrix}$$

通过在有理函数域上计算可得 $r_2=2$, 所以从向量 $(\dot{z}_2, \ddot{z}_2)$ 得到 2 个分量与 Z_1 (Z_1 为空集) 组成新的函数无关的向量, 记为 $Z_2(\dot{z}_2, \ddot{z}_2)^T$ 。又因 $r_2 < 3$, 算法进行下一步。

第 3 步: 再对 z_3 求导, 可得:

$$\dot{z}_3 = \dot{x}_6 = \gamma(\mu - \frac{u}{x_7})x_1 + [\frac{-B + \sqrt{(B^2 + 4 \times 10^{-14})}}{2}] \frac{1}{\Delta t} \quad (5)$$

由于该被测对象的不直接可测量只有 3 个, 为了尽量避免引入更高阶导数, 首先判断能否从 Z_2 和 $\dot{z}_3$ 中得到 3 个函数无关的分量组成 $Z_3 = (\ddot{z}_2, \dot{z}_2, \dot{z}_3)^T$, 即是否满足:

$$\text{rank}(\partial(\ddot{z}_2, \dot{z}_2, \dot{z}_3)^T / \partial(x_1, x_2, x_3)) = 3 \quad (6)$$

如果条件满足, 则停止对 z_3 继续求导, 整个建模算法结束, 建模成功。

根据式(4), 有 $\partial \ddot{z}_2 / \partial x_i = \partial g_1(x) / \partial x_i$ ($i=1, 2, 3$)

令 $J = \partial(\ddot{z}_2, \dot{z}_2, \dot{z}_3)^T / \partial(x_1, x_2, x_3)$,

$$J = \begin{bmatrix} \frac{\partial \ddot{z}_2}{\partial x_1} & \frac{\partial \ddot{z}_2}{\partial x_2} & \frac{\partial \ddot{z}_2}{\partial x_3} \\ \frac{\partial \dot{z}_2}{\partial x_1} & \frac{\partial \dot{z}_2}{\partial x_2} & \frac{\partial \dot{z}_2}{\partial x_3} \\ \frac{\partial \dot{z}_3}{\partial x_1} & \frac{\partial \dot{z}_3}{\partial x_2} & \frac{\partial \dot{z}_3}{\partial x_3} \end{bmatrix} \quad (7)$$

$$= \begin{bmatrix} \frac{\partial g_1(x)}{\partial x_1} & \frac{\partial g_1(x)}{\partial x_2} & \frac{\partial g_1(x)}{\partial x_3} \\ x_1 \frac{\partial \eta}{\partial x_1} + \eta & x_1 \frac{\partial \eta}{\partial x_2} & x_1 \frac{\partial \eta}{\partial x_3} \\ x_1 \frac{\partial \psi}{\partial x_1} + \psi & x_1 \frac{\partial \psi}{\partial x_2} & x_1 \frac{\partial \psi}{\partial x_3} \end{bmatrix}$$

式中 $\psi = \gamma(\mu - \frac{u}{x_7})$ 。

将 η, ψ 代入, 并对 J 求行列式, 在有理函数域上计算得:

$$|J| = g_2(x, u)x_1^2 + g_3(x, u)x_1 \neq 0$$

式中:

$$g_2(x, u) = \frac{\partial g_1}{\partial x_2} \frac{\partial \eta}{\partial x_3} \frac{\partial \psi}{\partial x_1} - \frac{\partial g_1}{\partial x_1} \frac{\partial \eta}{\partial x_3} \frac{\partial \psi}{\partial x_2} + \frac{\partial g_1}{\partial x_3} \frac{\partial \eta}{\partial x_1} \frac{\partial \psi}{\partial x_2}$$

$$g_3(x, u) = \frac{\partial g_1}{\partial x_3} \frac{\partial \psi}{\partial x_2} \eta - \frac{\partial g_1}{\partial x_3} \frac{\partial \eta}{\partial x_2} \psi$$

由此可见, $\text{rank}(\partial(\ddot{z}_2, \dot{z}_2, \dot{z}_3)^T / \partial(x_1, x_2, x_3)) = \text{rank}(J) = 3$, 式(6)满足。因此 $(\ddot{z}_2, \dot{z}_2, \dot{z}_3)$ 即可构成 Z_3 , 并且使得 $r_3 = \text{rank}(\partial Z_3 / \partial \hat{x}) = 3$ 。此时整个算法结束, 建模成功。

式(3)、(4)、(5)就是所要构造的软传感器模型:

$$Z_3 = \begin{bmatrix} \dot{z}_2 \\ \ddot{z}_2 \\ \dot{z}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \eta x_1 + K_{Ld}(x_4^* - x_4) - \frac{x_4}{x_7} u \\ g_1(x) + g_2(x_4, x_7, u, \dot{u}) \\ \psi x_1 + [\frac{-B + \sqrt{(B^2 + 4 \times 10^{-14})}}{2}] \frac{1}{\Delta t} \end{bmatrix} \quad (8)$$

$$= \begin{bmatrix} f_{z_1}(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6, x_7, u, \dot{u}) \\ f_{z_2}(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6, x_7, u, \dot{u}) \\ f_{z_3}(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6, x_7, u, \dot{u}) \end{bmatrix}$$

为了更好地表达式(8)所述的软传感器子系统, 可以得到一个等价的状态方程描述。可令状态为:

$$\begin{cases} \xi_1 = z_2 = x_4 \\ \xi_2 = \dot{z}_2 = \dot{x}_4 \\ \xi_3 = z_3 = x_6 \end{cases} \quad (9)$$

代入式(8)得:

$$\begin{bmatrix} \dot{\xi}_1 \\ \dot{\xi}_2 \\ \dot{\xi}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_{z_1}(x_1, x_2, x_3, \xi_1, \xi_3, x_7, u, \dot{u}) \\ f_{z_2}(x_1, x_2, x_3, \xi_1, \xi_3, x_7, u, \dot{u}) \\ f_{z_3}(x_1, x_2, x_3, \xi_1, \xi_3, x_7, u, \dot{u}) \end{bmatrix} \quad (10)$$

根据式(8)中的第一个方程解出 x_7 , 并把式(9)代入其中可得:

$$x_7 = \frac{u \cdot \xi_1}{\eta x_1 + K_{Ld}(\xi_1^* - \xi_1) - \xi_2} \quad (11)$$

$$\begin{bmatrix} \dot{\xi}_1 \\ \dot{\xi}_2 \\ \dot{\xi}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \xi_2 \\ f_{z_2}(x_1, x_2, x_3, \xi_1, \xi_3, x_7, u, \dot{u}) \\ f_{z_3}(x_1, x_2, x_3, \xi_1, \xi_3, x_7, u, \dot{u}) \end{bmatrix} \quad (12)$$

式(12)就是软传感器的一个以 (x_1, x_2, x_3) 为输入变量、以 (ξ_1, ξ_2, ξ_3) 为状态变量的状态方程, 同时得到其输出方程为:

$$\begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_7 \\ \xi_1 \\ \xi_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{u \cdot \xi_1}{\eta x_1 + K_{Ld}(\xi_1^* - \xi_1) - \xi_2} \\ \xi_1 \\ \xi_3 \end{bmatrix} \quad (13)$$

由于 $\det(\partial Z_3 / \partial \hat{x})$ 在整个实向量空间上恒不为零, 则此软传感器子系统是全局可逆的, 其逆系统的表达式为:

$$\hat{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \varphi_1(x_4, x_5, x_6, x_7, \dot{x}_4, \ddot{x}_4, \dot{x}_6, \dot{u}) \\ \varphi_2(x_4, x_5, x_6, x_7, \dot{x}_4, \ddot{x}_4, \dot{x}_6, \dot{u}) \\ \varphi_3(x_4, x_5, x_6, x_7, \dot{x}_4, \ddot{x}_4, \dot{x}_6, \dot{u}) \end{bmatrix} \quad (14)$$

2 最小二乘支持向量机

支持向量机回归的思想是通过一个非线性映射 $\varphi(\cdot)$ 将数据映射到高维特征空间 F , 然后在这个空间中建立一个线性回归函数:

$$f(x) = w^T \varphi(x) + b \quad (15)$$

式中, $\varphi(\cdot)$ 为非线性函数, w 为权值, b 为阈值。给定训练样本集 $S = \{(x_1, y_1), L, (x_i, y_i), L, (x_n, y_n)\} \in R^m, i=1, 2, L, n$ 。引入松弛变量 ξ_i 和惩罚因子 c , 输入空间中的函数估计可归结为求解下面的二次规划:

$$\min_{w, b, \xi_i} J(w, \xi) = \frac{1}{2} \|w\|^2 + c \sum_{i=1}^n \xi_i^2$$

$$s.t: y_i = w^T \phi(x_i) + b + \xi_i \quad i=1, \dots, n \quad (16)$$

与传统的 SVM 相比,这一方法中二次规划约束条件为等式,损失函数为二次函数,故称为最小二乘支持向量机。引入 Lagrange 系数 a_i , 定义如下的 Lagrange 函数:

$$L = \frac{1}{2} \|w\|^2 + c \sum_{i=1}^n \xi_i^2 - \sum_{i=1}^n a_i \{w^T \phi(x_i) + b + \xi_i - y_i\} \quad (17)$$

根据 Mercer 条件,存在映射 φ 和核函数 $K(x_i, x_j)$ 且 $K(x_i, x_j) = \varphi(x_i)^T \varphi(x_j)$, 根据 Karush-Kuhn-Tucker 条件,要使 L 对变量 w, b, ξ, a_i 的偏导数等于零,并将得到的等式代入(17)式,可以得到矩阵方程:

$$\begin{bmatrix} 0 & e^T \\ e & \Omega + c^{-1}I \end{bmatrix}_{(n+1)(n+1)} \begin{bmatrix} b \\ a \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ y \end{bmatrix} \quad (18)$$

式中 $e = [1, \dots, 1]^T$, I 为 $n \times n$ 的单位矩阵, $a = [a_1, \dots, a_n]^T$, $y = [y_1, \dots, y_n]^T$, $\Omega_{ij} = K(x_i, x_j) = \varphi(x_i)^T \varphi(x_j)$, $i, j = 1, 2, \dots, n$ 。求解矩阵方程(18),最后得到最小二乘向量机函数估计为:

$$f(x) = \sum_{i=1}^n a_i K(x, x_i) + b \quad (19)$$

3 基于 LS-SVM 逆模型的软测量方法

由于 LS-SVM 有逼近任意非线性函数的能力,所以应用式(19)来逼近青霉素发酵过程的逆系统(式(14))。令拟合因子 $X = (x^{(n-m)}, x^{(n-m-1)}, \dots, x, u, \dots, u^{(m)})$, 基于 d 对训练样本数据 $\{X_i, u_i\}$, $i=1, 2, 3 \dots d$ 。用合适的学习算法对 3 个多输入单输出支持向量机进行离线训练,直到训练误差达到一定的精度为止。同时获得相应的向量系数 a_{ji} 和 b_j , $i=1, 2, 3 \dots d$, $j=1, 2, 3$ 。训练好的逆模型为:

$$\text{逆模型为: } \begin{cases} \hat{x}_1 = f_1(X) = \sum_{i=1}^d a_{1i} K(x_i \cdot X) + b_1 \\ \hat{x}_2 = f_2(X) = \sum_{i=1}^d a_{2i} K(x_i \cdot X) + b_2 \\ \hat{x}_3 = f_3(X) = \sum_{i=1}^d a_{3i} K(x_i \cdot X) + b_3 \end{cases}$$

如图 1 所示,将训练好的逆模型串联在原系统之后,构成复合伪线性系统,即可实现对不可在线测量的关键变量的估计。本文核函数采用高斯核函数,模型的主要结

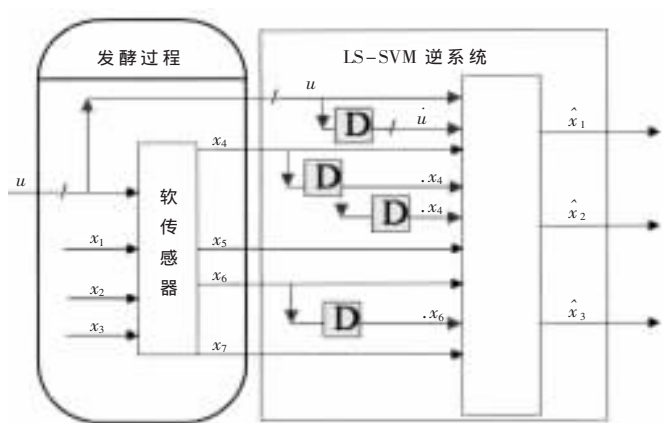


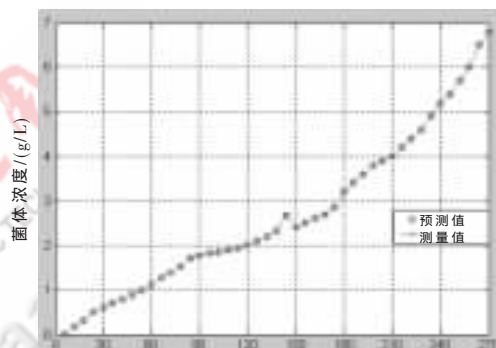
图 1 基于 LS-SVM 的逆模型青霉素发酵软测量模型

构参数为惩罚因子 c , 径向基宽度为 ε 。为了找到最恰当的模型参数,使用 k 折交叉验证法,由最小方差确定模型参数。即先选取初始值 c, ε ,将训练集 280 个样本随机地分为 7 个互不相交的子集,任取其中 5 个样本集合对模型进行训练,用剩余的 2 个子集预测模型的输出,并求得均方差。按此方法连续迭代 7 次,求各次迭代均方差的总和。当某一组模型参数对应的均方差和最小时,迭代停止,此时确定的模型为最优。经计算,当 $c=18\,000$, $\varepsilon=0.15$ 时,模型的均方差 $\sum_{i=1}^7 \left(\frac{y_i^* - y_i}{7} \right)^2 = 0.3044$ 最小。

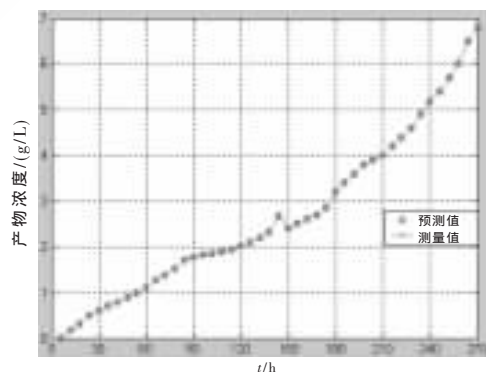
4 实验研究

运用 Matlab 进行仿真,图 2 是菌体浓度、产物浓度、基质浓度的仿真图。

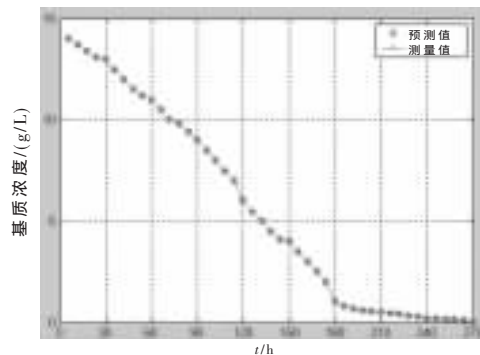
每个发酵周期取一批数据,从建成的数据库中取出 7 批样本数据,每批数据含 40 个样本,前 5 批数据作为



(a) 菌体浓度



(b) 产物浓度



(c) 基质浓度

图 2 LS-SVM 逆的预测值与离线测量值比较

训练集,后2批数据分别作为预测集,采用高精度七点数值算法离线求得相应的导数,并对数据进行数字滤波(滑动平均滤波法)和归一化处理。然后构成输入输出样

本集 $\{\{x_4, \dot{x}_4, \ddot{x}_4, x_5, x_6, \dot{x}_6, x_7, \mathbf{u}, \dot{\mathbf{u}}\}, \{x_1, x_2, x_3\}\}$,前者作为支持向量机的输入,后者作为系统期望的输出,以此样本集

训练3个支持向量机网络,分别用于输出 $\hat{x}_1, \hat{x}_2, \hat{x}_3$ 。

本文提出的基于最小二乘支持向量机逆模型的软测量方法,是利用最小二乘支持向量机拟合多输入单输出的非线性逆系统,具有良好逼近性能,且不需要系统模型的先验知识,只需利用输入、输出数据作为样本集,就能达到理想的辨识效果。仿真实验结果表明,该方法建模精度高、泛化能力强。

参考文献

- [1] YUAN J Q, XUE Y F, HU K L, et al. On-line application oriented optimal scheduling for penicillin fed-batch fermentation[J]. Chemical Engineer and Processing, 2009, 48(2): 651-658.
- [2] 黄凤良. 软测量思想与软测量技术[J]. 计量学报, 2004,

25(3): 284-288.

- [3] 李春文, 冯元琨. 多变量非线性控制的逆系统方法[M]. 北京: 清华大学出版社, 1999.
- [4] SUYKENS J A K. Support vector machines: a nonlinear modeling[J]. European Journal of Control, 2001, 7(2-3): 311-327.
- [5] SUYKENS J A K, VANDEWALLE J. Least squares support vector machine classifiers[J]. Neural Processing Letter, 1999, 9(3): 293-300.
- [6] DAI Xian Zhong, WANG Wan Cheng, DING Yu Han, et al. Assumed inherent sensor inversion based ANN dynamic soft-sensing method and its application in erythromycin fermentation process[J]. Computers and Chemical Engineering, 2006, 30(8): 1203-1225.
- [7] BIROL G, UNDEY C, CINAR A. A modular simulation package for fed-batch fermentation: penicillin production [J]. Computers and Chemical Engineering 2002(26): 1553-1565.

(收稿日期: 2009-02-11)