

谷氨酸流加发酵过程的神经网络优化研究

苗志奇 赵凌云 元英进*

(天津大学生化工程系 天津 300072)

摘 要 采用神经网络的方法,将模拟网络与优化网络结合组成双网系统,用于谷氨酸流加生产过程的模拟与优化分析。模拟网络中设置瓶颈结构,以加强网络的数据过滤与压缩能力,滤除工业数据中的噪音。利用训练算法本身,优化网络方便地实现了单变量、多变量优化,获得令人满意的结果。

关键词 神经网络,谷氨酸生产,优化,流加发酵

学科分类号 Q939.97

发酵过程是生化工程中一种常见的复杂过程,它具有高度非线性、时变性和不确定性等特点,同时生化过程影响因素众多,数据准确性较差,因此,采用经典的机理模型关系式描述发酵过程存在相当困难。而人工神经网络作为一种全新的系统分析工具,具有自适应能力和自学习能力,通过网络训练,可以相当准确地模拟系统行为;因而被广泛应用于生物工程的各个复杂过程,如发酵过程和细胞培养过程等。

近年来,将神经网络技术应用于生化过程的模拟与预测研究已成为一种趋势,而将该技术用于过程优化的研究却没有涉及。1992年,美国率先将神经网络用于优化、控制电炉炼钢,收效明显,被评为该年度六大杰出工程贡献之一^[4],展示了神经网络用于优化研究的极大优势。本文利用神经网络技术,对生化工程中的发酵过程——谷氨酸流加生产过程进行了模拟、优化研究。

1 数据来源

本文数据取自天津味精厂的谷氨酸流加生产批报数据。

2 网络模型

整个网络由模拟、优化两个子网络结合构成。利用模拟子网络作为发酵过程的数学模型,以获得过程初始条件与操作变量(各时刻流加量)对谷氨酸产量的影响;以模拟子网络为基础,优化子网络可以进行单变量优化与多变量优化。

2.1 模拟子网络

为减少生化数据,特别是工业批报数据中的误差对模拟结果的影响,在模拟子网络中

国家自然科学基金项目,批准号 29476248。

* 通讯联系人,天津大学化工系 300072。

收稿日期:1996-03-27,修回日期:1997-10-13。

引入具有数据压缩、过滤作用的瓶颈结构^[4]。若将网络各层处理单元的输出看作矢量,则数据通过瓶颈结构时,实现了由高维矢量到低维矢量,再到高维矢量的转换,如式(1)~(2)所示。信号中无本质联系的部分,如偶然误差、环境噪音,将在转换中丢失,因此减少了其对网络输出结果的影响。经过实验,以相同训练误差时预测误差最小为目标,选择瓶颈层处理单元数目为 3。

$$\bar{O}_{hl}^{27} = f(\bar{I}_{hl}^{27}) = f(\bar{W}_{nec,hl}^{27 \times 3} * \bar{O}_{nec}^3) \tag{1}$$

$$\bar{O}_{nec}^3 = f(\bar{I}_{nec}^3) = f(\bar{W}_{in,hl}^{3 \times 23} * \bar{O}_{in}^{23}) = f(\bar{W}_{in,hl}^{3 \times 23} * \bar{I}_{in}^{23}) \tag{2}$$

网络输入变量由发酵过程的初始状态参数(pH 值、糖浓度、OD 值、尿素浓度),操作参数(18 个固定时刻的尿素流加量)和发酵时间共 23 个参数组成,所以压缩比为 3/23。网络输出变量选为谷氨酸的浓度。两个中间隐含层的处理单元数目分别为 27,13。

2.2 优化子网络

优化子网络采用两层的对应线性联结网络,如图 2 所示。由于优化目标选为过程结束时的谷氨酸浓度,时间不能作为优化变量,所以每层节点数均为 22 个。优化子网络的权重分为三类:第一类指 BIAS(阈值)与优化子网络输出层间的联结权重,提供优化过程的起始值,由工业数据中产物终浓度较高的数据记录决定,称为优化初始权重;第二类指 BIAS 与优化子网络输入层间的联结权重,在优化时保持恒定,称为固定权重。由固定权重提供优化子网络的输入信号。本文中固定权重都取为 1;第三类指优化子网络中输入层节点与输出层节点间的对应联结权重,由于这些权重的调整使得优化得以实现,所以称其为优化权重。

优化子网络的输出信号及其调整可表示如式 3-7 所示:

$$O_i = W_i^* \text{const} + V_i \tag{3}$$

$$\Delta O_i = \Delta W_i^* \text{const} \tag{4}$$

$$W_i^{t+1} = W_i^t + \Delta W_i \tag{5}$$

$$O_i^{t+1} = O_i^t + \Delta W_i^* \text{const} \tag{6}$$

$$\Delta W_i^t = \alpha * \Delta W_i^{t-1} - (1 - \alpha - \beta) * \frac{\partial (y - \bar{y})^2}{\partial W_i^t} + \beta * \Delta W_i^t \tag{7}$$

在实际应用中,优化子网络与模拟子网络合二为一,结合成一个复合网络,以完成整个优化过程。因此整个复合网络的运行可分为训练、预测、优化三个阶段,前两个阶段由模拟网络单独完成。在优化阶段,固定模拟网络中的所有权重,利用优化算法调整优化权重,实现优化过程。

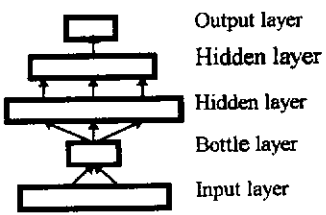


图 1 模拟子网络结构示意图
Fig. 1 Framework of simulation sub-network

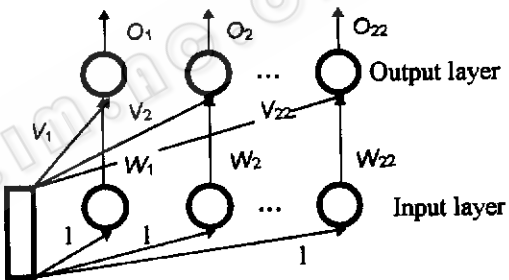


图 2 优化子网络结构图
Fig. 2 Topology of the optimization network

但对于神经网络优化问题,有一个更方便的优化算法,即训练算法本身。与常规优化算法不同,训练算法需要训练样本,在这里不妨称为优化样本。上述优化子网络的特殊结构恰好可提供这个样本。由优化初始权重决定优化样本的输入信号,输出信号定为优化目标的期望值。本文中将有记录中谷氨酸最高浓度的二倍作为优化样本的输出信号。训练算法用优化样本来训练网络,调整优化子网络的优化权重,进而改变模拟网络的输入信号,使整个复合网络的输出信号向着优化期望值靠近。当复合网络的输出信号不再变化时,优化过程终止。此时对应的模拟网络输入信号即为最优输入信号,对应模拟网络输出信号为过程最优值。

3 结果与讨论

3.1 模拟结果

当网络经过五万次训练后,训练误差达到 1%。取未经网络训练的几组数据进行预测,结果显示了较高的预测精度,预测值与测量值的对照如图 3 所示。

3.2 单变量优化与因素分析

在进行优化时,规定优化权重中只有一个可调,而固定其余优化权重,则此时的优化称为单变量优化。研究该可调优化权重变化时,模拟网络输出信号的变化,称为因素分析。通过因素分析,可了解对应的过程影响因素对过程状态的贡献。为描述方便起见,各参数都采用无因次的相对量来表示,具体计量式如下:

$$\text{相对量} = \frac{\text{绝对量数值} - \text{对应参数变化范围下限}}{\text{对应参数变化范围上限} - \text{对应参数变化范围下限}}$$

(8)

本文分别分析了 OD₆₀₀ 初值、尿素初浓度、pH 初值、葡萄糖初浓度对最终谷氨酸浓度的影响。各参数的变化范围如表 1 所示,分析结果列于图 4。从图 4 中可看出尿素与葡萄糖均有底物抑制现象,若碳氮比在 5~15 范围内,则尿素的抑制出现的更早,抑制作用也更强,这也是选择尿素作为流加物的原因。pH 初值在 6.4 附近菌体生长最快,谷氨酸产量最高,而且发酵过程中 pH 值一直不断下降。

3.3 多变量优化

在实际工业生产中,发酵过程的初始状态参数基本确定,优化变量只能是操作变量,在本文中,由于温度、压力、通气量基本恒定不作为模型变量,所以操作变量特指各时刻尿素流加量。选择一数据记录构造优化样本,其中初始状态参数:pH = 6.4, Urea = .052, OD = 0.07, Glucose = 14.0。

在发酵过程中,尿素作为氮源消耗。只有不断的流加尿素,才能将发酵液中尿素浓度

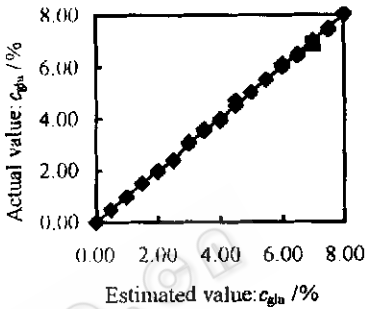


图 3 谷氨酸浓度预测精度分析
Fig.3 Accuracy of estimated value of glutamic acid concentration

表 1 因素分析中各参数变化范围
Table 1 Variation range of variants during element analysis

Variant	Lower limit	Upper limit
Initial OD	0.02	0.14
Initial concentration of urea %	0.18	0.58
Initial pH	5.3	9.3
Initial concentration of glucose %	2	27

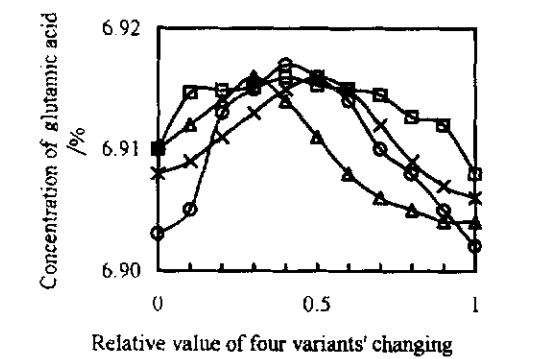


图 4 四种因素对最终谷氨酸浓度的影响
Fig. 4 The effects of four factors on the terminal concentration of glutamic acid
× Initial concentration of glucose, △ Initial pH,
○ Initial concentration of urea, □ Initial OD

保持在最适水平。从优化结果(图 5)可看出,在适应期与稳定期,由于氮源消耗量较少,无需补加,所以流加量为零。在对数生长期,氮源消耗量较大,所以出现较大的流加量,而且在对数期的前半段对氮源需求旺盛,后期需求相对减少。

按照优化后的流加量进行流加,32、36h 谷氨酸浓度对照结果列于表 2。结果显示优化值比原数据提高产量 12%。

神经网络应用于发酵过程的模拟、优化方面,较经典方法具有相当优势。特别是优化子网络的引入,利用训练算法进行优化,提供了一种全新的优化思路。本文将神经网络用于因素分析与多变量优化,取得了满意结果。

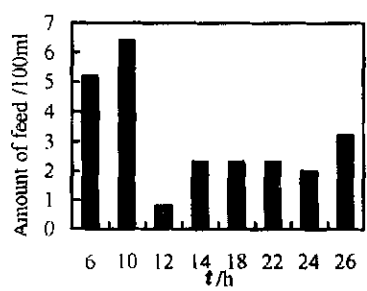


图 5 不同时刻的最优流加量
Fig. 5 Optimized feed rate at different time

表 2 优化操作前后结果比较
Table 2 Comparison between data before and after optimization

t/h	Industrial data $c_{glu}/\%$	Optimized results $c_{glu}/\%$
32	6.94	7.76
36	7.02	7.90

参 考 文 献

1 蔡煜东,陈常庆,周 斌.生物工程学报,1995,11(1):90~92
2 Shimizu H, Miura K, Shioya S *et al.* Biotechnology and Bioengineering, 1995, 47: 165~173
3 Estler M U. Bioprocess Engineering, 1995, 12: 205~207
4 刘裔安.人工智能在化学工程中的应用,北京:中国石化出版社,1995

符号说明

- BIAS 阈值
 c_{glu} concentration of glutamic acid
const 常数
 f 转换函数
glucose 糖浓度(%)
 I_{in}^{23} 23 维的输入层输入矢量
 I_{nec}^3 3 维的瓶颈层输入矢量
- \bar{J}_{in}^{27} 27 维的第一隐含层输入矢量
 \bar{O}_{in}^{23} 23 维的输入层输入矢量
 \bar{O}_{nec}^3 3 维的瓶颈层输入矢量
 \bar{O}_{in}^{27} 27 维的第一隐含层输入矢量
 O_i 优化网络第 i 个输出值
 O_i^t 第 t 次训练时优化网络第 i 个输出值
 O_i^{t+1} 第 $t+1$ 次训练时优化网络第 i 个输出值

$\bar{W}_{in, sec}^{3 \times 23}$ 3 * 23 的输入层与瓶颈层间的联结权重矩阵

$\bar{W}_{nec, hi}^{27 \times 3}$ 3 * 23 的瓶颈层与第一隐含层间的联结权重矩阵

W_i 优化网络第 i 个优化权重

W_i^t 第 t 次训练优化网络第 i 个优化权重

W_i^{t-1} 第 $t-1$ 次训练优化网络第 i 个优化权重

W_i^{t+1} 第 $t+1$ 次训练优化网络第 i 个优化权重

Δ 差值

α, β 常数

ΔW_i^t 除梯度法外其余训练算法给出的第 i 个优化权重的调整量

y 网络输出值

\bar{y} 优化目标值

OD 光密度

V_i 第 i 个优化中心权重

W_i 第 i 个优化权重

Urea 尿素浓度(%)

A Neural Network for the Optimization of Fed-batch Fermentation of Glutamic Acid

Miao Zhiqi Zhao Lingyun Yuan Yingjin

(Department of Biochemical Engineering, Tianjin University, Tianjin 300072)

Abstract A neural network system, which composed of a simulation sub-network and an optimization sub-network, was developed to predict and optimize the industrial glutamic acid production of Fed-batch fermentation process. A data-compression and filtering network was incorporated into the simulation sub-network to extract "Noise-free" patterns in the input signals. The optimization sub-network can optimize the fermentation process over the single variable or the entire set of variables with training algorithm.

Key words Neural network, glutamic acid production, optimization, fed-batch fermentation