

模式识别在锌酵母发酵工艺 优化控制中的应用

陈 敏 刘万卉 王静馨

(烟台大学化工系 烟台 264005)

发酵过程是一个复杂的多元体系。对其工艺条件优化和控制的数学定量化程度还较低^[1,2]。本文尝试将模糊集和模式识别的理论和方法引入发酵过程研究。以锌酵母发酵工艺条件优化为目的,获得了酵母产量高、糖转化率高及残糖浓度低等诸因素综合考虑的优化控制区。

1 材料与方法

1.1 材料和分析方法

菌种、发酵培养基、发酵设备及分析方法见文献 [3]。

1.2 发酵工艺条件

在前期工作的基础上,选择 Q 、 S_0 、 X_0 、 T 、 pH 、 S_F 作为待优化工艺条件,将这些参数按不同组合条件进行试验。具体数据列于表 1。总发酵时间 13h。

2 模式识别优化工艺参数的方法与结果

2.1 目标函数

对发酵过程以高产低耗为目的的优化控制是一个多目标问题。确定优化目标为满足锌含量前提下实现酵母产量高、糖转化率高、残糖浓度低。采用模糊综合评价^[4]为优化目标函数,将多目标转化为单目标优化问题。评价指标集选取锌酵母最终浓度 (X_f)、糖转化率 $Y = X_f V_f / (S_0 V_0 + S_F V_F - S_f V_f)$ 和残糖浓度 (S_f)。

采用模糊综合评价首先要确定评价集中各指标的隶属函数。确定隶属函数有多种方法,对 X_f 经分析采用降半梯形分布^[4],其上、下限根据实验数据分布选为 12 和 7。其形式为:

$$r(X_f) = \begin{cases} 1 & X_f \geq 12 \\ \frac{X_f - 7}{12 - 7} & 12 < X_f < 7 \\ 0 & X_f \leq 7 \end{cases} \quad (1)$$

糖转化率 Y 的隶属函数是根据以葡萄糖为底物酵母菌好氧发酵,菌体对糖的理论转化率约为 0.5^[5,6] 而确定的,当达到理论值时定义隶属函数为 1,小于 0.5 时,取其与理论值的比值为隶属度值:

$$r(Y) = \begin{cases} 1 & Y \geq 0.5 \\ \frac{Y}{0.5} & Y < 0.5 \end{cases} \quad (2)$$

残糖 S_f 的隶属度亦根据糖转化率为 0.5,若糖全部残存则隶属度为零。再依据发酵液的糖量衡算,最大残存定为 15,则 S_f 隶属函数定为:

$$r(S_f) = \begin{cases} 1 & S_f = 0 \\ 1 - \frac{S_f}{15} & 1.5 > S_f > 0 \\ 0 & S_f > 15 \end{cases} \quad (3)$$

用 R 表示隶属度矩阵, $R = (r_{ij})_{m \times n}$, 式中 i 为评价集中指标数, $i = 1, \dots, m$; j 为试验组数, $j = 1, \dots,$

n 。(本研究 $m = 3, j = 16$)。指标权重子集为: $\underline{A} = (a_i)_{m \times 1}$ (4)

模糊运算 $\underline{B} = \underline{A} \cdot \underline{R}$ 选择 $M(\cdot, \oplus)^{(7)}$, $b_j = \sum_{i=1}^m a_i r_{ij}$, 得到模糊综合评价值 b_j , 以此作为优化目标值, 按 b_j 将样本划分为优与非优类别。指标权重子集 \underline{A} 的确定采用下述方法: 首先对一批样本确定属于优或非优类。具体方法为先确定评价集中单指标优类标准, 评价集中各指标均为优的样本为优类, 其余均为非优类。将这一批样本作为“学习”集样本。然后以 \underline{A} 为等权, 即 $a_1 = \dots = a_m$ 。由 $\underline{B} = \underline{A} \cdot \underline{R}$ 计算 b_j , 凡 $b_j \geq 0.5$ 为优类。若计算的 b_j 与已知类型不符, 说明权重不合理。改变权重分配, 并使满足 $\sum_{i=1}^m a_m = 1$, 直到计算结果与已知类型相符, 取此时权重作为权重子集。经上述计算得到:

$$\underline{A} = (a_i)_{3 \times 1} = (0.5/X_f, 0.3/Y, 0.2/S_f) \quad (5)$$

为消除数据量纲和数量级差异的影响, 对数据按作极差标准化处理⁽⁸⁾。

3.2 模式分析

待优化的工艺参数试验数据及试验结果、计算的模糊综合评价值 b_j 列于表 1。将全体样本按模糊综合评价价值划分为优类与非优类, 根据隶属度最大原则确定每个样品所属的类型, 得到样品 1、2、4、5、7、11、12、13、15、16 为优类, 其余为非优类。

表 1 特征变量、目标分量和模糊综合评价值

i	Q	S_0	X_0	T	pH	S_f	X_f	Y	S_f	b_j
1	348	24.0	1.25	27	4.4	96.3	9.79	0.32	9.3	0.54
2	312	22.8	0.97	27	4.8	93.6	10.07	0.32	7.0	0.61
3	309	25.0	2.08	29	4.3	82.1	8.39	0.24	6.8	0.39
4	293	20.8	1.42	29	4.4	99.0	9.57	0.33	5.8	0.58
5	315	24.5	1.33	29	4.6	106.1	9.90	0.28	5.3	0.58
6	328	26.0	2.02	29	4.9	86.4	9.34	0.26	8.0	0.48
7	254	24.5	1.53	29	5.0	92.6	9.90	0.26	3.3	0.60
8	301	27.0	2.54	31	4.4	82.8	7.84	0.24	6.3	0.34
9	296	25.8	1.39	31	4.6	74.9	9.15	0.24	6.0	0.48
10	301	27.5	1.55	31	4.8	84.2	9.23	0.23	6.3	0.48
11	312	23.0	1.67	30	4.7	97.5	9.62	0.25	7.0	0.52
12	301	24.0	2.09	26	4.6	88.2	9.82	0.29	6.3	0.57
13	273	20.8	1.42	25	5.0	90.0	9.26	0.30	4.5	0.55
14	332	29.5	1.44	33	4.5	89.7	8.84	0.21	8.3	0.40
15	262	23.0	1.14	27	4.8	96.7	9.98	0.26	3.8	0.58
16	293	22.8	1.35	29	4.6	91.8	9.87	0.24	5.8	0.55

对全体样本作主成份分析, 得到相应的特征值和特征向量, 如表 2 所示。

表 2 对全部样本的主成份分析

No.	Eigenvalue	Eigenvectors					
		x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6
1	$\lambda_1 = 47.3018$	-1.8683	-3.1496	0.6534	-3.4624	3.4870	-3.0524
2	$\lambda_2 = 18.2158$	-1.4701	1.0698	-3.6455	0.1236	-0.1227	-1.2610
3	$\lambda_3 = 12.2809$	3.0093	0.1721	-0.6492	-0.1091	0.6595	-1.5255
4	$\lambda_4 = 5.7091$	0.0716	-1.9111	-0.4254	-0.7986	-1.0711	-0.2924
5	$\lambda_5 = 4.1542$	0.5327	-0.3554	-0.7194	-1.4049	-0.3717	1.0557
6	$\lambda_6 = 2.3383$	0.0618	-0.3567	-0.4044	0.6108	1.0513	0.7519

$$x_1 = Q, x_2 = S_0, x_3 = x_0, x_4 = T, x_5 = \text{pH}, x_6 = S_f$$

以第一、二主分量 V_1, V_2 为坐标轴构成一个模式空间, 计算分类信息如图 1 所示。

由图 1 可见, 以模糊综合评价值 b_j 为优化目标, 在主分量 $V_1 \sim V_2$ 构成的模式空间中, 优类与非优类获得了明显的分类趋势, 并清楚地显示了目标值为优的操作区域。

3.3 工艺参数优化值预报

二维映射平面上的一个映射点, 可对映高维空间中的无限个点。如何从二维空间的优化操作区域回复到高维空间, 从而予极优化操作条件, 是模式识别用于优化控制需解决的一个重要问题。用表 2 对全体样本的 PCA 线性映射结果, 结合优类样本的信息来实现从低维到高维的回复。具体方法如下: (1) 将优类样本中心(优类高维特征变量均值)向 $V_1 \sim V_2$ 平面映射, 得到对应的坐标 $V_1 = \zeta, V_2 = \eta$ (2) 对优类样本作 PCA 分析, 以优类样本中心为原点, 得优类主分量 Z_1, \dots, Z_m (以特征值大小为序)。优类样本分布在 $Z_1 \sim Z_2$ 平面附近⁽⁹⁾。取垂线与 $Z_1 \sim Z_2$ 平面交点为予极优化点。计算优化点对应的 X_i 的方程为:

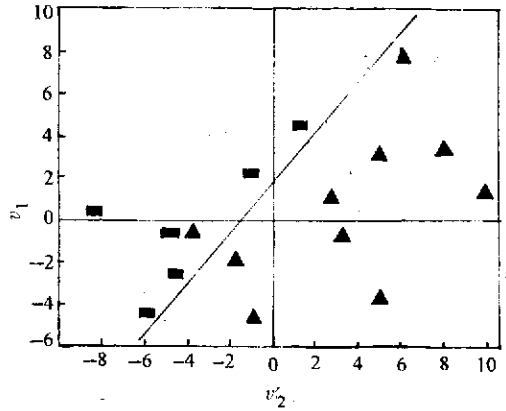


图 1 全体样本 $V_1 \sim V_2$ 二维映射图
▲ 优化, □ 非优化

$$\begin{cases} V_1(X_1, \dots, X_m) = \zeta \\ V_2(X_1, \dots, X_m) = \eta \\ Z_3(X_1, \dots, X_m) = 0 \\ \dots \\ Z_m(X_1, \dots, X_m) = 0 \end{cases} \quad (6)$$

解此方程组, 并将数据经标准化逆运算, 即可得到在二维空间中的优化操作区对应的高维特征空间点。对优类样本作 PCA 分析, 结果如表 3。

表 3 优类样本主成份分析

No.	Eigenvalue	Eigenvectors					
		x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6
1	$\lambda_1 = 24.7758$	0.5923	-2.3104	-1.0134	-2.0720	2.6086	-2.6386
2	$\lambda_2 = 15.7215$	2.6498	-1.7411	1.8175	1.5154	-0.2203	0.0212
3	$\lambda_3 = 8.2349$	0.9347	0.1420	-2.0723	0.8482	-1.1870	-0.9582
4	$\lambda_4 = 2.8989$	0.7736	0.0899	-0.0504	-1.2833	-0.6181	0.5109
5	$\lambda_5 = 1.6840$	-0.0361	-0.5684	-0.6052	0.1706	0.3378	0.9220
6	$\lambda_6 = 0.6849$	-0.3927	-0.5185	0.0799	-0.0758	-0.4914	-0.0911

求解 X_i 的方程如下:

$$\begin{bmatrix} -1.868 & -3.150 & 0.653 & -3.462 & 3.487 & 3.052 \\ -1.470 & 1.070 & -3.646 & 0.124 & -0.123 & -1.261 \\ 0.935 & 0.142 & -2.072 & 0.848 & -1.187 & -0.950 \\ 0.744 & 0.090 & -0.050 & -1.283 & -0.618 & 0.511 \\ -0.036 & -0.568 & -0.605 & 0.171 & 0.338 & 0.922 \\ -0.393 & -0.519 & 0.080 & -0.076 & -0.491 & -0.091 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \\ X_4 \\ X_5 \\ X_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2.592 \\ 0.174 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

解此方程组并对数据进行标准化逆处理, 得到各参数优化点值如表 4。

表 4 工艺参数和优化值

优化值	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6
标准	-2.5339	-0.5334	0.0668	0.1034	-0.0156	0.0305
原始值	237	23.3	1.601	29.1	4.64	91.0

将优化操作条件用于发酵过程, 经 6 批验证性试验, 其酵母产量平均值和残糖平均值分别比优化前 10 个样本提高 11.7% 和下降 4.3%。经方差分析, 差异显著。本方法在试验操作中可循环使用, 新的样本与原样本一起作映射, 再求解新的优化点, 逐步实现操作条件最佳化。在生产实践中, 采用生产批报数据, 可进行在线优化控制。

符 号 说 明

A —— 指标权重矩阵	T —— 发酵温度 / $^{\circ}\text{C}$
B —— 综合评价矩阵	V —— 全体样本主成份分析主分量
b —— 模糊综合评价值	X_0 —— 菌体初始浓度 / $\text{g} \cdot \text{L}^{-1}$
Q —— 通气量 / $\text{L} \cdot \text{h}^{-1}$	X_f —— 菌体最终浓度 / $\text{g} \cdot \text{L}^{-1}$
R —— 隶属度矩阵	Z —— 优类样本主成份分析主分量
S_f —— 残糖浓度 / $\text{g} \cdot \text{L}^{-1}$	λ —— 特征值
S_F —— 流加糖浓度 / $\text{g} \cdot \text{L}^{-1}$	

参 考 文 献

- [1] 王骥程. 全国首届生化过程模型化与控制学术讨论论文集. 上海: 华东化工学院出版社, 1989, pp. 4~10.
- [2] 蒋慰孙. 全国首届生化过程模型化与控制学术讨论论文集. 上海: 华东化工学院出版社, 1989, pp. 2~3
- [3] 陈 敏, 刘万卉, 王静馨. 生物工程学报, 1995, 11 (2): 188~189.
- [4] 贺仲雄. 模糊数学及其应用. 天津: 天津科学技术出版社. 1985; pp. 190.
- [5] 水下祝郎. 发酵工业. 北京: 轻工业出版社. 1985; pp. 98.
- [6] 山根恒夫. 生物反应工程. 西安: 西北大学出版社, 1982; pp. 183.
- [7] 蔺 垆. 实用模糊数学. 重庆: 科学技术出版社. 1989; pp. 188.
- [8] 陈守煜, 陈晓冰. 化工学报, 1991, 6: 660~661.
- [9] Sammon J.W. IEEE Trans Comput; 1976 C-19: pp. 826.

Application of Pattern Recognition on Optimum Control of Zinc Yeast Fermentation Process

Chen Min Liu Wanhui Wang Jingxin

(Yantai University, Yantai 264005)

Abstract Pattern recognition method is applied in zinc yeast fermentation process. The technological parameters are used as feature variables to construct the pattern space. All samples are divided into two classes according to the fuzzy comprehensive evaluation. The feature extraction is adopted to reduce the dimensionality numbers of the pattern space of technological parameters in order to find out the key factors influencing the objective function. An optimum operation conditions are obtained.

Key words Zinc yeast, fermentation, optimization, pattern recognition