

3-22-2023

Integrated Soft Sensor Modeling of Fermentation Process Based on Transfer Component Analysis

Yuesheng Zhou

1.School of Internet of Things Engineering, Jiangnan University, Wuxi 214122, China;, 6201924228@stu.jiangnan.edu.cn

Weili Xiong

1.School of Internet of Things Engineering, Jiangnan University, Wuxi 214122, China;2.Key Laboratory of Advanced Process Control for Industry (Ministry of Education), Jiangnan University, Wuxi 214122, China;

Follow this and additional works at: <https://dc-china-simulation.researchcommons.org/journal>



Part of the [Artificial Intelligence and Robotics Commons](#), [Computer Engineering Commons](#), [Numerical Analysis and Scientific Computing Commons](#), [Operations Research](#), [Systems Engineering and Industrial Engineering Commons](#), and the [Systems Science Commons](#)

This Paper is brought to you for free and open access by Journal of System Simulation. It has been accepted for inclusion in Journal of System Simulation by an authorized editor of Journal of System Simulation.

Integrated Soft Sensor Modeling of Fermentation Process Based on Transfer Component Analysis

Abstract

Abstract: The Penicillin fermentation process is an uncertain and multi-stage process. There are different working conditions among different batch fermentation processes, and the distribution of process data is not necessarily the same, which degrades the performance of the traditional soft sensing model.

Combined with the transfer learning strategy and Gaussian mixture model, a multi-model ensemble soft sensor modeling method based on transfer component analysis is proposed. In this method, the transfer component analysis is used to get the shared feature mapping matrix between samples, and adapt the edge probability distribution of labeled dataset and unlabeled dataset; the modeling data are clustered based on Gaussian mixture model, then use partial least squares algorithm to establish an ensemble model to predict dominant variables. The simulation results based on penicillin platform data show that the proposed method can not only improve the accuracy of the soft sensor model of penicillin fermentation process effectively, but also adapt to the prediction of penicillin concentration under variable working conditions.

Keywords

transfer component analysis, ensemble, penicillin fermentation, variable working conditions, soft sensor

Recommended Citation

Yuesheng Zhou, Weili Xiong. Integrated Soft Sensor Modeling of Fermentation Process Based on Transfer Component Analysis[J]. Journal of System Simulation, 2023, 35(3): 623-631.

基于迁移成分分析的发酵过程集成软测量建模

周阅昇¹, 熊伟丽^{1,2}

(1. 江南大学 物联网工程学院, 江苏 无锡 214122; 2. 江南大学 轻工过程先进控制教育部重点实验室, 江苏 无锡 214122)

摘要: 青霉素发酵过程具有不确定性和多阶段等特点, 不同批次发酵过程间存在工况差异, 过程数据的分布不一定相同, 使传统软测量模型性能下降。结合迁移学习策略和高斯混合模型, 提出一种基于迁移成分分析的多模型集成软测量建模方法。该方法使用迁移成分分析求解样本间共享特征映射矩阵, 适配建模过程数据与待测数据的边缘概率分布; 并基于高斯混合模型对建模数据进行聚类划分, 与偏最小二乘算法结合建立子模型的集成模型, 完成对主导变量的预测。基于青霉素平台数据的仿真结果表明, 所提方法不仅能够有效提高青霉素发酵过程软测量模型的精度, 而且适应于变工况下青霉素浓度的预测。

关键词: 迁移成分分析; 集成; 青霉素发酵; 变工况; 软测量

中图分类号: TP274; TP391.9 文献标志码: A 文章编号: 1004-731X(2023)03-0623-09

DOI: 10.16182/j.issn1004731x.joss.21-1165

引用格式: 周阅昇, 熊伟丽. 基于迁移成分分析的发酵过程集成软测量建模[J]. 系统仿真学报, 2023, 35(3): 623-631.

Reference format: Zhou Yuesheng, Xiong Weili. Integrated Soft Sensor Modeling of Fermentation Process Based on Transfer Component Analysis[J]. Journal of System Simulation, 2023, 35(3): 623-631.

Integrated Soft Sensor Modeling of Fermentation Process Based on Transfer Component Analysis

Zhou Yuesheng¹, Xiong Weili^{1,2}

(1. School of Internet of Things Engineering, Jiangnan University, Wuxi 214122, China; 2. Key Laboratory of Advanced Process Control for Industry (Ministry of Education), Jiangnan University, Wuxi 214122, China)

Abstract: The Penicillin fermentation process is an uncertain and multi-stage process. There are different working conditions among different batch fermentation processes, and the distribution of process data is not necessarily the same, which degrades the performance of the traditional soft sensing model. Combined with the transfer learning strategy and Gaussian mixture model, a multi-model ensemble soft sensor modeling method based on transfer component analysis is proposed. In this method, the transfer component analysis is used to get the shared feature mapping matrix between samples, and adapt the edge probability distribution of labeled dataset and unlabeled dataset; the modeling data are clustered based on Gaussian mixture model, then use partial least squares algorithm to establish an ensemble model to predict dominant variables. The simulation results based on penicillin platform data show that the proposed method can not only improve the accuracy of the soft sensor model of penicillin fermentation process effectively, but also adapt to the prediction of penicillin concentration under variable working conditions.

Keywords: transfer component analysis; ensemble; penicillin fermentation; variable working conditions; soft sensor

收稿日期: 2021-11-12

修回日期: 2022-01-19

基金项目: 国家自然科学基金(61773182); 国家重点研发计划子课题(2018YFC1603705-03)

第一作者: 周阅昇(1998-), 男, 硕士生, 研究方向为复杂工业过程建模。E-mail: 6201924228@stu.jiangnan.edu.cn

0 引言

青霉素发酵是一种复杂的生化过程，具有阶段性与非线性的特点^[1]。青霉素浓度是该生化反应过程中非常重要的过程变量，准确检测其值是优化控制、提高产量的关键^[2]。但青霉素浓度传感器测量成本很高，离线化验耗时较长，因此利用软测量技术实现青霉素浓度的预测具有指导生产的积极意义^[3]。

软测量技术能够达成以软件分析来代替硬件仪表检测的目的^[4]。近年来常用的软测量建模方法有偏最小二乘(partial least-square, PLS)法^[5]、支持向量机(support vector machine, SVM)法^[6]、人工神经网络(artificial neural network, ANN)法^[7]等等。针对青霉素发酵过程的阶段性特点，文献[8]引入局部建模策略，通过重复因子划分阶段建立局部模型以提升建模精度；文献[9-10]则引入集成学习策略，先对数据进行聚类，以有效提取过程多阶段特征，再利用集成学习进行子模型的融合，具有比全局模型更好的模型精度和泛化能力。高斯混合模型是一种经典的聚类分析方法^[11]，以高斯概率密度函数来精确地量化对象，常用于工业生产中的工况识别以及过程阶段划分。

上述软测量模型要求待测数据与建模数据特征分布一致，然而在青霉素发酵过程中，不能简单假定每次发酵都处于相同的工况下，补料、环境变化等因素都会使工况发生变化，不同工况下得到的过程数据，其分布并不一定相同，从而使已有的软测量模型预测精度下降^[12]，需考虑改进软测量模型，使其拥有适应工况变化时数据差异的能力。因此本文结合迁移学习策略，提升软测量模型在变工况下的性能。

迁移学习是对不同但相关领域问题进行求解的一种新机器学习范式^[13]。文献[14]结合最大均值差异与联合分布适配，将已知多源域数据信息迁移到未知工况进行软测量建模，其预测精度显著提高；文献[15]利用域适应和保持数据结构的思

想，提出一种引入流行正则化的磨机参数软测量方法，充分挖掘与迁移已知工况数据信息，有效改善数据分布失配下磨机参数软测量的泛化能力。以上这些研究成功将迁移学习与软测量结合应用，解决了多工况下球磨机负荷参数软测量问题。而目前针对变工况发酵过程的软测量模型构建方法研究较少。迁移成分分析(transfer component analysis, TCA)作为一种经典迁移学习算法^[16]，已在故障检测^[17]、图像分类^[18]等领域成功应用，该算法可适配不同分布数据间的边缘概率分布以减少数据差异。

综上所述，本文提出了一种基于迁移成分分析的多模型集成建模策略。该方法使用迁移成分分析处理已知工况数据(源域)与待测工况数据(目标域)，改善源域与目标域数据服从不同分布时模型失准的问题，并基于高斯混合模型将经过处理的源域数据进行聚类划分，使用偏最小二乘回归与对应标签数据建立子模型的集成模型，最后将处理后的目标域数据通过建立的模型进行青霉素浓度预测。结果表明，所提方法能有效适应工况变化，迁移已知工况数据信息建立鲁棒性较强的软测量模型，实现对未知分布待测数据的高精度预测。

1 相关算法

1.1 迁移成分分析

迁移成分分析属于基于特征的迁移学习^[19]方法，通过求解使领域间距离最小，同时最大程度保留其内部属性的特征映射，来适配不同领域间的边缘概率分布。假设源域 $D_s = \{X_s, Y_s\}$ ，其中 X_s 为源域样本数据集， Y_s 为源域标签数据集；目标域 $D_t = \{X_t\}$ ，其中 X_t 为目标域样本数据集，目标域标签数据未知，变工况情况下传统软测量模型性能恶化，其主要原因是源域与目标域数据分布不同，即 $P(X_s) \neq P(X_t)$ ，TCA假设存在一个特征映射 ϕ ，使映射后的新特征空间内两域间边缘概率

分布尽可能一致, 即 $P(\phi(\mathbf{X}_s)) \approx P(\phi(\mathbf{X}_t))$ 。

为求解这个特征映射 ϕ , TCA 借助最大均值差异来度量源域与目标域间的距离, 即:

$$dist(\mathbf{X}_s, \mathbf{X}_t) = \left\| \frac{1}{n_1} \sum_{i=1}^{n_1} \phi(\mathbf{x}_{si}) - \frac{1}{n_2} \sum_{j=1}^{n_2} \phi(\mathbf{x}_{tj}) \right\|_H^2 \quad (1)$$

式中: n_1 为源域样本个数; n_2 为目标域样本个数; $\mathbf{x}_{si} \in \mathbf{X}_s, \mathbf{x}_{tj} \in \mathbf{X}_t$; $\|\cdot\|_H$ 表示再生核希尔伯特空间范数。将展开后的内积转化为核矩阵形式, 式(1)可进一步表示为

$$dist(\mathbf{X}_s, \mathbf{X}_t) = tr(\mathbf{KL}) \quad (2)$$

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} \mathbf{K}_{s,s} & \mathbf{K}_{s,t} \\ \mathbf{K}_{t,s} & \mathbf{K}_{t,t} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{(n_1+n_2) \times (n_1+n_2)} \quad (3)$$

式中: $\mathbf{K}_{s,s}, \mathbf{K}_{t,t}, \mathbf{K}_{s,t}, \mathbf{K}_{t,s}$ 分别为源域、目标域及两域间的核矩阵, 且 $\mathbf{K}(i, j) = [\phi(\mathbf{x}_i)^T \phi(\mathbf{x}_j)]$; \mathbf{L} 为度量矩阵, 其计算表达式为

$$\mathbf{L}(i, j) = \begin{cases} \frac{1}{n_1^2}, & \mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j \in \mathbf{X}_s \\ \frac{1}{n_2^2}, & \mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j \in \mathbf{X}_t \\ -\frac{1}{n_1 n_2}, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (4)$$

将核矩阵分解为 $\mathbf{K} = (\mathbf{K}\mathbf{K}^{-1/2})(\mathbf{K}^{-1/2}\mathbf{K})$, 同时定义低维矩阵 $\tilde{\mathbf{W}} \in \mathbb{R}^{(n_1+n_2) \times m}$, 将核映射转化到 m 维空间上 ($m < n_1 + n_2$), 转化后的核矩阵可表示为

$$\tilde{\mathbf{K}} = (\mathbf{K}\mathbf{K}^{-1/2}\tilde{\mathbf{W}})(\tilde{\mathbf{W}}^T\mathbf{K}^{-1/2}\mathbf{K}) = \mathbf{K}\mathbf{W}\mathbf{W}^T\mathbf{K} \quad (5)$$

式中: $\mathbf{W} = \mathbf{K}^{-1/2}\tilde{\mathbf{W}}$, 优化对象由 \mathbf{K} 转化为 \mathbf{W} 。将式(5)代入式(2)中可得

$$dist(\mathbf{X}_s, \mathbf{X}_t) = tr(\mathbf{W}^T\mathbf{K}\mathbf{L}\mathbf{K}\mathbf{W}) \quad (6)$$

在最小化两域间距离即式(6)时, 需引入正则化项 $tr(\mathbf{W}^T\mathbf{W})$ 。约束项是数据的散度, 对映射后的数据 $\mathbf{W}^T\mathbf{K}$ 而言, 就是其协方差矩阵 $\mathbf{W}^T\mathbf{K}\mathbf{H}\mathbf{K}\mathbf{W}$, $\mathbf{H} = \mathbf{I}_{n_1+n_2} - 1/(n_1+n_2)\mathbf{I}\mathbf{I}^T$, 其中 \mathbf{I} 表示单位矩阵, \mathbf{I} 表示 n_1+n_2 行的全 1 列向量。

综合上述推导, 可得 TCA 最后的优化目标为

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{W}} \quad & tr(\mathbf{W}^T\mathbf{K}\mathbf{L}\mathbf{K}\mathbf{W}) + \mu \cdot tr(\mathbf{W}^T\mathbf{W}) \\ \text{s.t.} \quad & \mathbf{W}^T\mathbf{K}\mathbf{H}\mathbf{K}\mathbf{W} = \mathbf{I}_m \end{aligned} \quad (7)$$

式中: μ 为权衡因子。最终通过求解式(7), 得到最优映射矩阵 \mathbf{W} , 完成对源域与目标域特征数据空间的映射。

1.2 高斯混合模型

高斯混合模型 (gaussian mixture model, GMM) 是一种概率统计学模型, 当其用于数据聚类分析时, 本质上是通过若干不同权重的高斯成分的融合来近似逼近任意数据分布^[20]。设数据矩阵为 \mathbf{x} , 其概率密度函数可表示为

$$p(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^K \omega_i g(\mathbf{x} | \boldsymbol{\mu}_i, \boldsymbol{\Sigma}_i) \quad (8)$$

式中: \mathbf{x} 的维度决定 $g(\mathbf{x})$ 的维度; $g(\mathbf{x})$ 是高斯函数; K 为 GMM 中高斯成分的个数; ω_i 为混合权重, $0 \leq \omega_i \leq 1$, 这个数值决定了第 i 个高斯函数在 GMM 中的权重; $\boldsymbol{\mu}_i$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}_i$ 为第 i 个高斯函数的均值矩阵与协方差矩阵。令 $\boldsymbol{\theta} = \{\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_K\} = \{\boldsymbol{\mu}_1, \boldsymbol{\Sigma}_1, \boldsymbol{\mu}_2, \boldsymbol{\Sigma}_2, \dots, \boldsymbol{\mu}_K, \boldsymbol{\Sigma}_K\}$ 为 GMM 参数集。

第 i 个高斯函数表达式为

$$g(\mathbf{x}; \theta_i) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^N |\boldsymbol{\Sigma}_i|}} \exp\left[-\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_i)^T \boldsymbol{\Sigma}_i^{-1}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_i)\right] \quad (9)$$

若 $\mathbf{x} = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n\}$ 为 N 维训练样本集, 令

$$\boldsymbol{\Theta} = \left\{ \left\{ \omega_1, \boldsymbol{\mu}_1, \boldsymbol{\Sigma}_1 \right\}, \left\{ \omega_2, \boldsymbol{\mu}_2, \boldsymbol{\Sigma}_2 \right\}, \dots, \left\{ \omega_K, \boldsymbol{\mu}_K, \boldsymbol{\Sigma}_K \right\} \right\}$$

构造对数似然函数:

$$\lg L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\Theta}) = \sum_{i=1}^n \lg \left[\sum_{j=1}^K \omega_j g(\mathbf{x}_i; \theta_j) \right] \quad (10)$$

参数估计问题进一步转化为

$$\hat{\boldsymbol{\Theta}} = \operatorname{argmax} [\lg L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\Theta})] \quad (11)$$

一般通过期望最大化 (expectation maximization, EM) 算法来求解以上问题的各参数, E 步骤根据贝叶斯公式计算, 得出后验概率 $r_{iq}^{(l)}$ 为

$$r_{iq}^{(l)} = \frac{\omega_i^{(l)} g(\mathbf{x}_q; \theta_i^{(l)})}{\sum_{i=1}^K \omega_i^{(l)} g(\mathbf{x}_q; \theta_i^{(l)})} \quad (12)$$

式中： $\theta_i^{(t)} = \{\mu_i^{(t)}, \Sigma_i^{(t)}\}$ ， t 为第 t 次迭代； x_q 为新来样本。

M步骤根据概率更新高斯参数：

$$\omega_i^{(t+1)} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n r_{iq}^{(t)} \quad (13)$$

$$\mu_i^{(t+1)} = \frac{\sum_{i=1}^n r_{iq}^{(t)} x_q}{\sum_{i=1}^n r_{iq}^{(t)}} \quad (14)$$

$$\Sigma_i^{(t+1)} = \frac{\sum_{i=1}^n r_{iq}^{(t)} (x_q - \mu_i^{(t+1)})(x_q - \mu_i^{(t+1)})^T}{\sum_{i=1}^n r_{iq}^{(t)}} \quad (15)$$

式中： $\omega_i^{(t+1)}$ ， $\mu_i^{(t+1)}$ ， $\Sigma_i^{(t+1)}$ 分别为当经过 $t+1$ 次迭代后，第 i 个高斯分量各自的先验概率、均值向量与协方差矩阵。EM算法通过不断进行E步骤和M步骤对参数进行迭代，直到对数似然函数收敛到阈值，最终得到对应的后验概率和高斯参数，完成对训练样本的聚类。

2 基于迁移成分分析的多模型集成软测量建模

为解决工业过程中因建模数据与待测数据存在分布差异而预测结果不佳的实际问题，本文利用迁移学习的思想，基于迁移成分分析方法对已知数据信息进行充分利用并加以迁移，改善了软测量模型对不同分布数据预测的泛化能力，提高预测精度。同时结合发酵过程分为菌体生长期、青霉素分泌期与菌体自溶期三阶段的机理特点，使用高斯混合模型进行集成建模。综合上述分析，提出基于迁移成分分析的子模型集成软测量建模策略，如图1所示。

设源域、目标域数据分别为 $D_s = \{X_s, Y_s\}$ 和 $D_t = \{X_t\}$ ，基于迁移成分分析的多模型集成软测量建模步骤为：

(1) 利用迁移成分分析获取最优特征映射矩阵，适配源域与目标域数据的边缘分布：

$(X'_s, X'_t) = TCA(X_s, X_t)$ ，其中 X'_s ， X'_t 为适配后的新源域数据与新目标域数据；

(2) 结合青霉素发酵过程分为3个阶段的机理特点，使用高斯混合模型对新源域数据进行聚类划分，得到3个子类 X'_{s1} 、 X'_{s2} 、 X'_{s3} ；

(3) 与偏最小二乘回归结合来对各子类及其标签 (X'_{s1}, Y_{s1}) 、 (X'_{s2}, Y_{s2}) 、 (X'_{s3}, Y_{s3}) 建立软测量模型；

(4) 计算待测样本 X'_t 属于各子类的概率，以概率融合方法作为子模型融合策略^[21]，将 X'_t 代入集成软测量模型中得到最终预测结果 Y_t 。

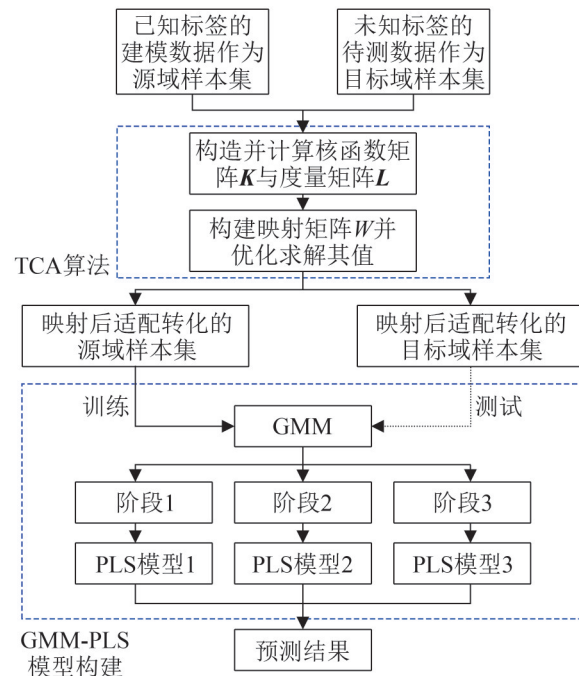


图1 软测量建模框架

Fig. 1 Frame chart of soft sensor modeling

3 仿真实验

3.1 数据采集与指标选取

为验证所提方法的有效性，选取青霉素发酵过程数据来进行仿真分析。实验数据通过Pensim仿真平台获取，该平台以Birol机理模型为内核，考虑了多种与实际发酵过程相关的变量，已广泛应用于过程建模与检测领域。辅助变量选择实际

生产过程中容易检测的曝气量、冷却水流速、二氧化碳量、溶解氧量和pH值; 主导变量选择难以在线测量的青霉素浓度。

设定发酵时间为400 h, 采样间隔为0.2 h, 训练集和测试集均取1 000组。为了模拟工况变化, 仿真中固定其他初始条件为默认值, 在初始基质浓度为5、10、15的情况下, 生成3组不同的过程数据, 分别定义为工况1、工况2和工况3。图2为3种工况数据经主成分分析降维至三维后的数据散点图, 表明不同工况下数据存在一定的分布差异。

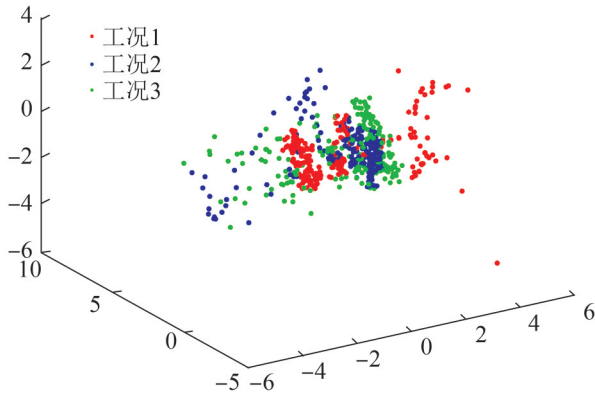


图2 不同工况数据分布

Fig. 2 Data distribution under different working conditions

为量化各种方法的预测精度, 本文使用均方根误差(root mean squared error, RMSE)、平均绝对误差(mean absolute error, MAE)和相关指数(R-square, R^2)三种指标来进行比较。其计算公式为

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_t^{(i)} - y_{pre}^{(i)})^2} \quad (16)$$

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_t^{(i)} - y_{pre}^{(i)}| \quad (17)$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_t^{(i)} - y_{pre}^{(i)})^2}{\sum_{i=1}^n (\bar{y}_t - y_t^{(i)})^2} \quad (18)$$

3.2 实验分析

首先在同一工况下进行算法仿真: 采用工况1数据作为源域建模数据与目标域待测数据的数据源, 分别以局部加权偏最小二乘(locally weighted partial least squares, LWPLS)算法、集成偏最小二乘(GMM-PLS)算法和本文提出的TCA-GMM-PLS算法进行对比, 3种指标计算结果见表1, 预测结果如图3所示。

对比实验表明同一工况下数据, 其分布相同, 此时通过三种模型均得到了比较好的预测结果, 其中本文所提方法具有更高的预测精度, 相比传统软测量策略对青霉素浓度的预测误差更小。在工况稳定情况下, 是一种非常理想的青霉素浓度软测量方式。

表1 同一工况下3种算法预测结果

Table 1 Three model prediction results under the same working condition

算法	RMSE	MAE	R^2
LWPLS	0.031 5	0.021 9	0.995 3
GMM-PLS	0.025 4	0.019 6	0.996 9
TCA-GMM-PLS	0.006 1	0.004 1	0.999 8

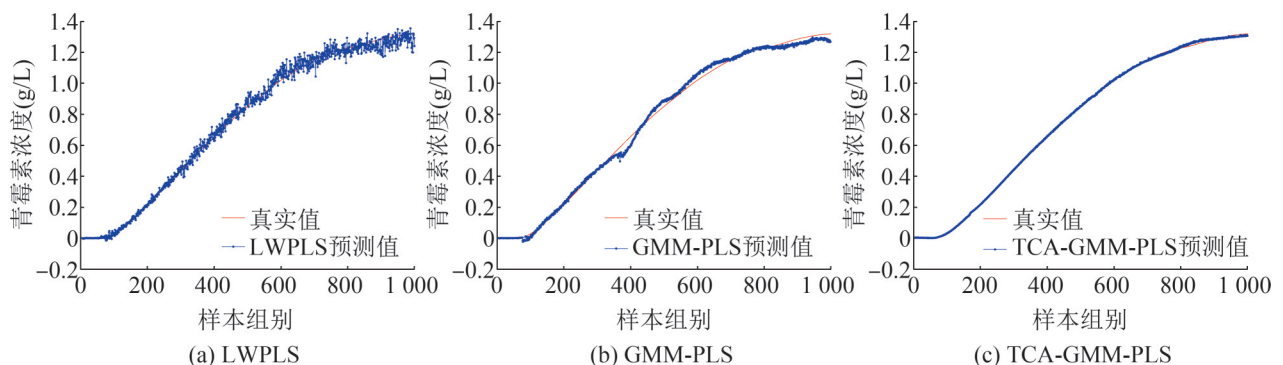


图3 同一工况下青霉素浓度预测结果

Fig. 3 Prediction results of penicillin concentration under same working condition

然后在不同工况下进行仿真对比：图4展示了TCA适配各工况数据后，3种工况数据经主成分分析降维并选取前三维的结果，对比图2可见不同工况间分布差异明显减小。表2是3种建模方法进行预测的指标计算结果。图5给出了由工况1作为源域建模数据，工况3作为目标域预测青霉素浓度时，三种软测量方法的实验结果。

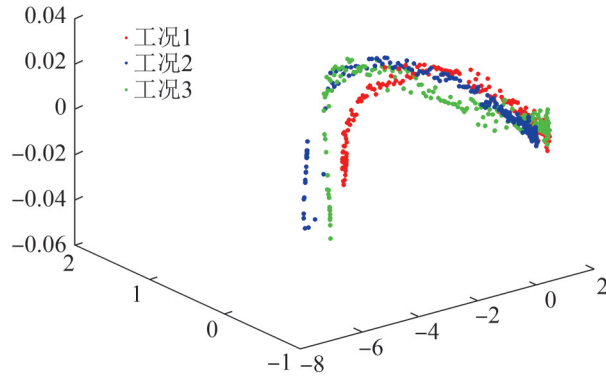


图4 适配后不同工况数据分布

Fig. 4 Data distribution under different working conditions after adaptation

表2 变工况下3种模型预测结果

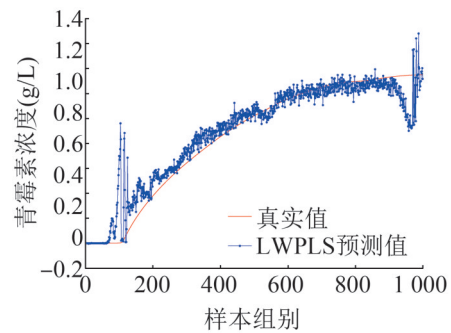
Table 2 Three model prediction results under variable working conditions

算法	RMSE	MAE	R^2
LWPLS	0.133 6	0.081 2	0.916 2
GMM-PLS	0.061 9	0.045 7	0.982 0
TCA-GMM-PLS	0.048 2	0.026 4	0.989 1

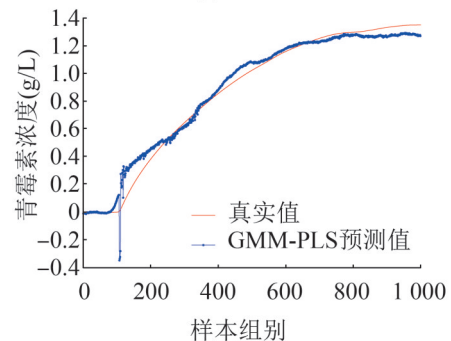
由表2和图5可见，当在建模数据与待测数据分布不同，即工况发生了变化时，传统软测量模型的性能明显下降，预测结果较差；GMM-PLS由于考虑了青霉素发酵多阶段特性，具有一定的预测精度；而本文基于TCA与GMM的建模策略，仍具有良好的预测结果，说明了所提模型的泛化能力与鲁棒性能的提升。

图6给出在所提软测量方法下各工况数据分别作为源域建模数据及目标域待测数据的青霉素浓度预测结果，“工况1-工况3”表示工况1作为建模数据集，工况3作为待测数据集。均方根误差

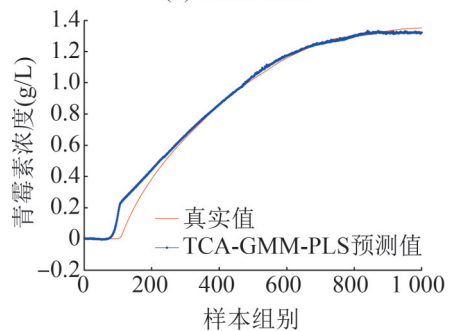
差均在各子图中标出，可见工况改变时软测量模型性能会下降，但结合图7对比各情况下不同方法的预测误差，本文所提方法预测误差仍均为其中最小。此仿真实验结果进一步说明了本文提出的软测量建模方法具有较好的稳定性，在工况改变情况下的提高了模型适应性，能对不确定性较强的青霉素发酵过程建立起鲁棒性强、高预测精度的软测量模型。



(a) LWPLS



(b) GMM-PLS



(c) TCA-GMM-PLS

图5 变工况下青霉素浓度预测结果

Fig. 5 Prediction results of penicillin concentration under variable working conditions

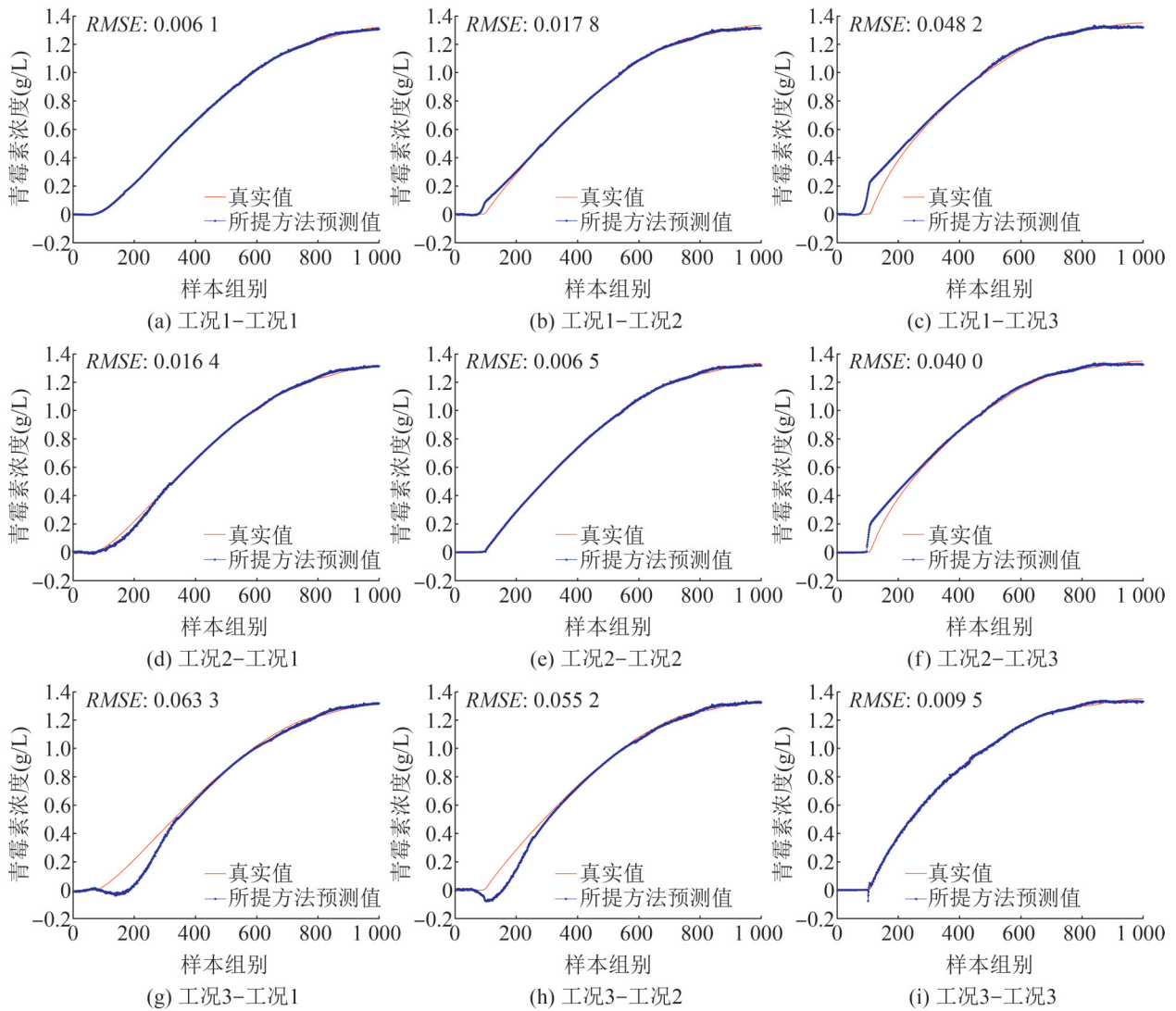


图6 青霉素浓度预测结果
Fig. 6 Prediction results of penicillin concentration

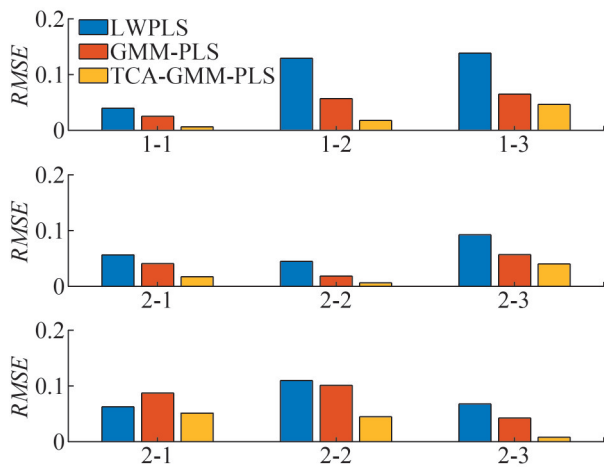


图7 各组实验预测误差对比
Fig. 7 Comparison of prediction errors of each group of experiments

4 结论

考虑青霉素发酵过程的阶段性、非线性及补料、环境等因素带来的不确定性, 本文结合迁移成分分析与高斯混合模型, 提出了一种基于迁移成分分析的子模型集成软测量模型。首先使用TCA适配源域建模数据和目标域待测数据的边缘分布, 然后采用GMM-PLS方法对青霉素浓度进行回归预测。Pensim仿真平台实验结果验证了所提方法的有效性, 表明建立的青霉素浓度软测量模型具有良好的预测精度和较强的泛化能力, 能充分利用已知数据对服从不同分布的未知工况数据进行预测。

参考文献:

- [1] 刘聪, 谢莉, 杨慧中. 基于改进DPC的青霉素发酵过程多模型软测量建模[J]. 化工学报, 2021, 72(3): 1606-1615.
Liu Cong, Xie Li, Yang Huizhong. Multi-model Soft Sensor Development for Penicillin Fermentation Process Based on Improved Density Peak Clustering[J]. Journal of Chemical Industry and Engineering, 2021, 72(3): 1606-1615.
- [2] Birol G, Ündey C, Çinar A. A Modular Simulation Package for Fed-Batch Fermentation: Penicillin Production[J]. Computers and Chemical Engineering (S0098-1354), 2002, 26(11): 1553-1565.
- [3] 曹鹏飞, 罗雄麟. 化工过程软测量建模方法研究进展[J]. 化工学报, 2013, 64(3): 788-800.
Cao Pengfei, Luo Xionglin. Modeling of Soft Sensor for Chemical Process[J]. Journal of Chemical Industry and Engineering, 2013, 64(3): 788-800.
- [4] Francisco S, Rui A, Jerome M. Review of Soft Sensor Methods for Regression Applications[J]. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems (S0169-7439), 2016, 152: 69-79.
- [5] Wang Z, He Q, Wang J. Comparison of Variable Selection Methods for PLS-Based Soft Sensor Modeling [J]. Journal of Process Control (S0959-1524), 2015, 26: 56-72.
- [6] 赵超, 李俊, 戴坤成, 等. 基于自适应加权最小二乘支持向量机的青霉素发酵过程软测量建模[J]. 南京理工大学学报, 2017, 41(1): 100-107.
Zhao Chao, Li Jun, Dai Kuncheng, et al. Soft Sensor Modeling for Penicillin Fermentation Process Based on Adaptive Weighted Least Squares Support Vector Machine[J]. Journal of Nanjing University of Science and Technology, 2017, 41(1): 100-107.
- [7] Mamo N B, Dennis Y A. 基于人工神经网络的注水开发油藏产量预测[J]. 石油勘探与开发, 2020, 47(2): 357-365.
Mamo N B, Dennis Y A. Artificial Neural Network Based Production Forecasting for a Hydrocarbon Reservoir under Water Injection[J]. Petroleum Exploration and Development, 2020, 47(2): 357-365.
- [8] 李元, 燕亚运, 唐晓初. 基于局部模型的多阶段在线产品质量预测[J]. 系统仿真学报, 2016, 28(4): 966-971, 978.
Li Yuan, Yan Yayun, Tang Xiaochu. Online Product Quality Prediction for Multi-phase Based on Local Model[J]. Journal of System Simulation, 2016, 28(4): 966-971, 978.
- [9] Shi X, Xiong W. Adaptive Ensemble Learning Strategy for Semi-supervised Soft Sensing[J]. Journal of the Franklin Institute (S0016-0032), 2020, 357: 3753-3771.
- [10] 赵帅, 史旭东, 熊伟丽. 一种分层集成的高斯过程回归软测量建模方法[J]. 系统仿真学报, 2019, 31(10): 2042-2051.
Zhao Shuai, Shi Xudong, Xiong Weili. A Hierarchical Integrated Soft Sensing Modeling Method for Gauss Process Regression[J]. Journal of System Simulation, 2019, 31(10): 2042-2051.
- [11] Yao L, Ge Z. Scalable Semi-supervised GMM for Big Data Quality Prediction in Multimode Processes[J]. IEEE Transactions on Industrial Electronics (S0278-0046), 2019, 66(5): 3681-3692.
- [12] Liu Y, Yang C, Liu K, et al. Domain Adaptation Transfer Learning Soft Sensor for Product Quality Prediction[J]. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems (S0169-7439), 2019, 192: 103813.
- [13] Long M, Wang J, Ding G, et al. Transfer Feature Learning with Joint Distribution Adaptation[C]// 2013 IEEE International Conference on Computer Vision (ICCV). Sydney, Australia: IEEE, 2013: 2200-2207.
- [14] 阎高伟, 贺敏, 汤健, 等. 基于最大均值差异多源域迁移学习的湿式球磨机负荷参数软测量[J]. 控制与决策, 2018, 33(10): 1795-1800.
Yan Gaowei, He Min, Tang Jian, et al. Soft Sensor of Wet Ball Mill Load Based on Maximum Mean Discrepancy Multi-source Domain Transfer Learning[J]. Control and Decision, 2018, 33(10): 1795-1800.
- [15] 贺敏, 汤健, 郭旭琦, 等. 基于流形正则化域适应随机权神经网络的湿式球磨机负荷参数软测量[J]. 自动化学报, 2019, 45(2): 398-406.
He Min, Tang Jian, Guo Xuqi, et al. Soft Sensor for Ball Mill Load Using DAMRRWNN Model[J]. Acta Automatica Sinica, 2019, 45(2): 398-406.
- [16] Pan S J, Tsang I W, Kwok J T, et al. Domain Adaptation Via Transfer Component Analysis[J]. IEEE Transactions on Neural Networks (S0893-6080), 2011, 22(2): 199-210.
- [17] 兰雨涛, 胡超凡, 金京, 等. 基于迁移成分分析的跨域轴承故障分类方法研究[J]. 机电工程, 2021, 38(5): 521-527.
Lan Yutao, Hu Chaofan, Jin Jing, et al. Cross Domain Classification Method of Bearings Fault Based on Transfer Component Analysis[J]. Mechanical & Electrical Engineering Magazine, 2021, 38(5): 521-527.
- [18] Giona M, Michele V, Mikhail K, et al. Semi-supervised Transfer Component Analysis for Domain Adaptation in Remote Sensing Image Classification[J]. IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing (S0196-2892), 2015, 53(7): 3550-3564.
- [19] Pan S J, Yang Q. A Survey on Transfer Learning[J]. IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering (S1041-4347), 2010, 22(10): 1345-1359.
- [20] Kaneko H, Funatsu K. Adaptive Soft Sensor Based on

Online Support Vector Regression and Bayesian Ensemble Learning for Various States in Chemical Plants [J]. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems (S0169-7439), 2014, 137: 57-66.

[21] Sheng X, Ma J, Xiong W. Smart Soft Sensor Design with Hierarchical Sampling Strategy of Ensemble Gaussian Process Regression for Fermentation Processes[J]. Sensors (S1424-8220), 2020, 20(7): 1957.