

BP神经网络预测控制在色素得率的应用

程换新¹ 孟祥勇¹ 崔丽洁¹ 孔玲玲²

(1. 青岛科技大学 自动化与电子工程学院 青岛 266061; 2. 核工业理化工程研究院 天津 300180)

摘要: 根据葡萄皮色素提取工艺过程中的提取剂浓度、温度、pH、时间等影响因素与输出结果色素提取率这一变量之间的非线性关系,建立了改进的BP神经网络预测模型。针对传统BP学习算法收敛速度慢、存在局部极值等不足,引入动量项以改进该学习算法。结合实际数据,运用迭代优化的控制算法对网络的权值和阈值进行不断训练并利用MATLAB进行仿真验证。研究结果证明了改进后的BP神经网络对色素提取率的预测控制具有精度高、泛化能力强、实用性强的优点,为色素得率提供了良好的理论基础和预测方法。

关键词: BP神经网络;色素得率;预测控制;MATLAB

中图分类号: TP29 **文献标识码:** A **国家标准学科分类代码:** 510.8060

Application of BP neural network predictive control in pigment yield

Cheng Huanxin¹ Meng Xiangyong¹ Cui Lijie¹ Kong Lingling²

(1. College of Automation Engineering, Qingdao University of Science & Technology, Qingdao 266061, China;

2. Research Institute of Physical & Chemical Engineering of Nuclear Industry, Tianjin 300180, China)

Abstract: According to the nonlinear relationship between influencing factors including extracting agent concentration, temperature, pH and time in the extraction process of grape skin pigment and the outputs pigment extraction yield, the improved BP neural network prediction model is established. The traditional BP learning algorithm exists the deficiencies of a slow convergence speed and local extremum, momentum term is introduced to improve learning algorithm. The weights and thresholds of the network are trained, simulated and verified by MATLAB continually using iterative optimization control algorithm on the actual datas. The improved BP neural network has the advantages of high precision, strong generalization ability and strong practicability for pigment extraction yield prediction control, providing a good theoretical basis and prediction method for pigment yield.

Keywords: BP neural network; yield of pigment; predict control; MATLAB

0 引言

色素是一种重要的食品添加剂,在食品、医药、化妆品等行业有着广泛的应用,研究发现,色素的合成大多具有慢性毒性和致癌致癌作用,给人类健康带来威胁。所以寻求安全性更好的天然色素,尤其是以农作物和果蔬类作为原料提取出的天然食用色素成为国内外研究的热点^[1]。葡萄皮色素组成成份比较复杂,在该色素的提取的过程当中,影响因子又参差不齐,故而采用色素得率为指标进行评价,综合考虑了与药效相关的各项主要指标,能够全面、科学的对提取工艺进行评价和优化。天然植物色素初提液可用不同有机溶剂或不同的酶水解的方法进行萃取纯化,也可以通过加入醋酸铅得到沉淀的方法进行萃取纯化^[2]。还有另外一种方法,即吸附洗脱得方法过柱子得到不同极性的花色

苷提取物。

本文根据色素提取工艺流程的多因素影响^[3],深入分析了在提取过程中温度、时间、PH、乙醇浓度等因素的影响,结合BP神经网络及其控制应用的原理,根据实验样本的不断训练建立成熟可靠实用的网络模型,用训练好的预测模型在相关真实数据的基础上预测色素得率,从而仿真验证了影响色素得率工艺的主要控制变量。

1 色素提取工艺简介

1.1 提取剂浓度对色素得率的影响

分别称取5.0 g过24目筛的葡萄皮于烧杯中,再分别加入90 mL浓度为10%、20%、30%、40%、50%乙醇,调节各浓度乙醇的pH为 3.00 ± 0.02 ,浸泡24 h后,放置在60℃的水浴锅中,温浸30 min,趁热过滤于锥形瓶中,然后

转移到圆底烧瓶中,减压浓缩后加入无水乙醇,静置一会后,过滤除去沉淀,旋蒸至挂壁,减量法称重,计算其色素得率^[4]。

1.2 乙醇体积对色素得率的影响

分别称取 5.0 g 过 24 目筛的葡萄皮,分别加入 pH 3.00±0.02 的 20%乙醇 45、60、75、90、105 mL,浸泡 24 h 后,放置于 60 °C 的水浴锅中,温浸 30 min,趁热过滤于锥形瓶中,然后转移到圆底烧瓶中,减压浓缩后加入无水乙醇,静置一会后,过滤除去沉淀,旋蒸至挂壁,减量法称重,计算其色素得率。

1.3 提取时间对色素得率的影响

分别称取 5.0 g 过 24 目筛的葡萄皮,加入 pH 3.00±0.02 的 20%乙醇 90 mL,浸泡 24 h 后,放置于 60 °C 的水浴锅中,分别温浸 20、30、40、50、60 min,趁热过滤于锥形瓶中,然后转移到圆底烧瓶中,减压浓缩后加入无水乙醇,静置一会后,过滤除去沉淀,旋蒸至挂壁,减量法称重,计算其色素得率。

1.4 提取温度对色素得率的影响

分别称取 5.0 g 过 24 目筛的葡萄皮,加入 pH 3.00±0.02 的 20%乙醇 90 mL,浸泡 24 h 后,分别放置于 40、50、60、70、80 °C 的水浴锅中,温浸 30 min,趁热过滤于锥形瓶中,然后转移到圆底烧瓶中,减压浓缩后加入无水乙醇,静置一会后,过滤除去沉淀,旋蒸至挂壁,减量法称其重,算出其色素得率。

1.5 提取 PH 对色素得率的影响

分别称取 5.0 g 过 24 目筛的葡萄皮,分别加入 pH 为 1.00±0.02、2.00±0.02、3.00±0.02、4.00±0.02 的 20%乙醇 90 mL,浸泡 24 h 后,分别放置于 60 °C 的水浴锅中,温浸 30 min,趁热过滤于锥形瓶中,然后转移到圆底烧瓶中,减压浓缩后加入无水乙醇,静置一会后,过滤除去沉淀,旋蒸至挂壁,减量法称其重,计算其色素得率。

2 BP 神经网络

人工神经网络是一个高度并行的非线性系统,由大量简单的处理单元相互连接,具有大规模并行处理的特点,具有高度非线性和复杂的逻辑运算能力。理论上通过系统的实际输出与期望输出之间的误差来调整神经网络的突触权值,即让神经网络学习,可以逼近任何非线性映射^[5]。反向传播学习算法(BP)是 LMS 算法的推广,两个算法均采用相同的代价函数即均方误差,通过不断输入样本使算法调整网络的参数以使均方误差最小化。依据实际输出和期望输出之差,依次调整网络权值的多层前馈型神经网络,被称为 BP 神经网络^[6-7]。BP 网络具有实现任何复杂非线性映射的功能、可在任意精度范围内表达复杂的非线性映射、具有泛化能力。其流程如图 1 所示。

2.1 建立 BP 神经网络

影响色素得率的主要因素是提取剂浓度、乙醇体积、提

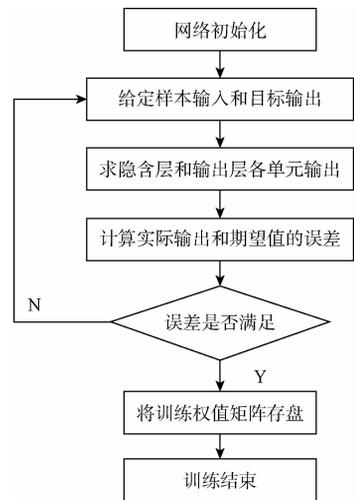


图 1 BP 神经网络流程

取时间、提取温度和 pH 值,将这 5 个主要影响因素作为 BP 神经网络的输入,输出为色素得率以构建一个多输入单输出的 BP 神经网络模型。本模型包含输入节点数为 M 的输入层、隐含层节点数为 K 的隐含层和输出层节点数为 N 的输出层,如图 2 所示。该模型各层定义如下^[8]。

$$\text{输入层输出: } O_m = I_m, m = 1, 2, \dots, M \quad (1)$$

$$\text{隐含层输出: } O_k = f_1 \left(\sum_{m=1}^M \omega_{km} x_m + b_k \right) \quad (2)$$

$$\text{输出层输出: } y_n = f_2 \left(\sum_{k=1}^K \omega_{nk} O_k + b_n \right) \quad (3)$$

式中:输入层输入变量 I_m , 输入层的输出量 o_k , 输入层的输入 x_m , 隐含层的输出量 o_k , 输入层节点 m 和隐含层节点 k 间的权值 ω_{km} , 输入层节点 m , 与隐含层节点 k , 隐含层阈值 b_k , 节点 k 与输出层节点 n 间的权值 ω_{nk} , 输出层阈值 b_n 。

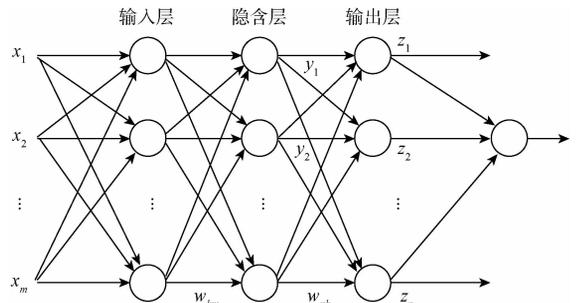


图 2 神经网络的结构

2.2 BP 神经网络的参数调整及实现

为了克服 BP 神经网络的固有缺点,本文采用了 LM 算法。LM 算法实际上是梯度下降法和牛顿法的组合^[9],它的优点在于梯度下降法越接近最优值下降速度越慢,在下降梯度趋零时,目标函数下降速度减慢,拟牛顿算法可在最优值附近产生理想的搜索方向,两者结合的 LM 法的网络权值数目较少时收敛非常迅速^[10]。

在训练中,动量项被添加到权重和阈值校正算法,这相当于阻尼项,减少了学习过程中的震荡趋势,改善了收敛性能。利用前修正值来平滑学习路径,避免陷入局部极小值,加速学习速度。

对网络的输出是先对网络隐含层小波结点的输出加权求和,再经 Sigmoid 函数变换后得网络输出减少训练过程中发散的可能性^[11],极大的改进了以搜索方法为核心的迭代优化算法^[12]。

设系统输入输出样本组数 $p(p=1,2,3,\dots,P)$,学习率为、动量因子满足 $0<\lambda<1$), $\eta>0$ 。则系统的目标函数为:

$$E = \sum_{p=1}^P E^p = \frac{1}{2P} \sum_{p=1}^P \sum_{n=1}^N (d_n^p - y_n^p) \quad (4)$$

式中:指代的是输出层第 p 个结点的期望输出为网络实际输出。具体调整要求如下。

1) 输入层与隐含层结点之间的权值调整式:

$$\omega_{km}^{\text{new}} = \omega_{km}^{\text{old}} + \eta \sum_{m=1}^p \delta_{km} + \lambda \Delta \omega_{km}^{\text{old}} \quad (5)$$

$$\delta_{km} = \frac{\partial E_n^p}{\partial \omega_{km}} = \sum_{n=1}^N (\delta_{nk} \omega_{nk}) \cdot \frac{\partial O_k^p}{\partial I_k^p} \cdot x_m^p \quad (6)$$

式中: ω_{km}^{old} 、 ω_{km}^{new} 为分别是输入层与隐含层调整前与调整后的权值, $\Delta \omega_{km}^{\text{old}}$ 为输入层和隐含层的动量项, δ_{km} 、 δ_{nk} 为分别是隐含层和输出层权值的变化量, O_k^p 、 I_k^p 为分别是隐含层第 p 个节点的输出量和输入, x_m^p 为输入层第 p 个节点输入。

2) 对隐含层与输出层之间的权值调整为:

$$\omega_{nk}^{\text{new}} = \omega_{nk}^{\text{old}} + \eta \sum_{m=1}^p \delta_{nk} + \lambda \Delta \omega_{nk}^{\text{old}} \quad (7)$$

$$\delta_{nk} = \frac{\partial E_n^p}{\partial \omega_{nk}} = (d_n^p - y_n^p) \cdot y_n^p (1 - y_n^p) \quad (8)$$

式中: ω_{nk}^{old} 为调整前隐含层与输出层的权值,调整后隐含层与输出层的权值 ω_{nk}^{new} ,隐含层与输出层的动量项 $\Delta \omega_{nk}^{\text{old}}$ 。

BP神经网络控制算法的具体实现步骤如下:

1) 初始化设置。设置所有的突触权值和阈值,将其随机数最小。BP神经网络连接权值,学习率和动量因子初始化,并设置优化目标,随机生成初始权值序列 $\omega(0)$ 置输入样本计数器 $p=1$ 。

2) 计算输入样本的期望输出并且测得到网络实际输出,当训练样本不足时循环输入。

3) 求梯度向量和误差。

4) 决定方向并算出学习速率。

5) 调节 BP 网络参数且输入下一样本。

6) 停机测试。当每个回合的均方误差变化的绝对速率足够小时,认为反向传播算法已经收敛。若 $E(\omega(k)) < \epsilon$,则停机;否则置 $p=p+1$,转步骤 2) 循环。

3 色素提取工艺的 BP 神经网络模型

色素提取工艺受到多方面因素影响,为保证建立神经网络预测模型要合理选择主控因素。经过分析与实验得,

影响得率的主要因素有乙醇浓度、乙醇用量、提取时间、提取温度和提取 pH 值,5 个主要因素为模型色素的输入量,将色素得率作为输出量。则输入量的向量 $\mathbf{X} = (X_1, X_2, X_3, X_4, X_5)^T$ 输出量向量 $\mathbf{Y} = (Y_1)$ 一维向量。在设计中选择了 3 层 BP 神经网络预测结构,输入层节点数为 5 个,输出层神节点数为 1 个,隐含层节点数为 11 个,隐含层函数采用函数 $\text{tansig}(n) = 2/(1 + \exp(-2n)) - 1$,输出层函数采用函数 purelin 即 $y=x$ 。因此可确定色素得率的网络预测模型^[13]如图 3 所示。

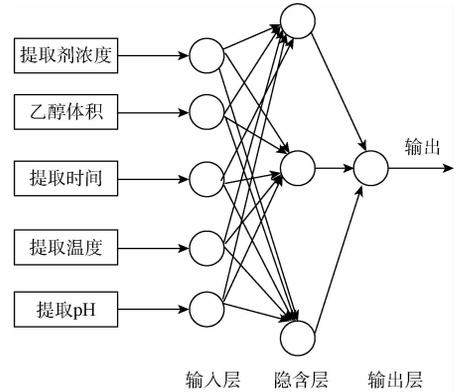


图3 BP神经网络的预测模型

归一化的基本思想是修正网络误差性能函数,使网络得到较小的权值和阈值,从而使响应变得平滑,进而减少过度适应。由于各变量代表不同的物理量,取值范围差别很大,为避免主控因素对网络训练和预测结果造成误差,要对数据作归一化处理以提高网络训练精确度。具体公式如下所示:

$$X_i = \frac{X'_i - X_{\min}}{X_{\max} - X_{\min}} \quad (9)$$

式中: X_{\max} 、 X_{\min} 、 X'_i 分别为原始数组的最大和最小值及实测值,归一化数据值。前 80 组样本作为训练样本,后 40 组作为预测样本。训练前归一化的处理使每个节点的数值均在 $0 \sim 1$,设置模型的训练函数为 trainlm ,其他为默认数值。各个训练参数分别为预测精度 $\text{goal}=0.0001$,学习速率 $\text{lr}=0.001$,训练次数 $\text{epochs}=1000$,每间隔 100 步显示一次训练结果。对 BP 神经网络进行学习训练,当训练误差达到最小时停止训练并验证预测数值,经过实验可知训练到 650 次时,系统误差达到最小值,如图 4 所示。

通过训练,得出神经网络模拟输出的样本和实际输出曲线,如图 5 所示。

4 与响应面法^[14] (response surface method) 实验结果比较

利用 Design Expert8.0.6.1 软件对实际数据进行多元回归拟合,得到色素得率对提取剂浓度 (X_1)、乙醇体积 (X_2)、提取温度 (X_3) 的二次多元回归模型:

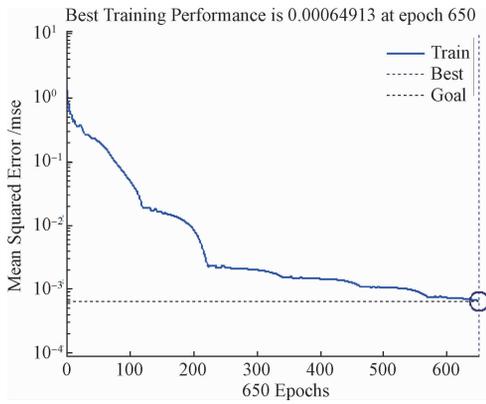


图 4 第 650 次迭代优化后数据误差

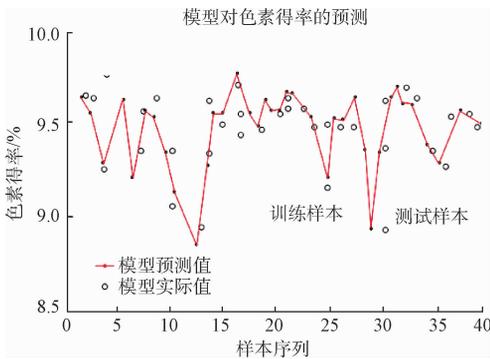


图 5 模型对得率的预测值和实际值比

$$Q = -119.38991 + 1.218X_1 + 0.86413X_2 + 2.74298X_3 + 3.25E - 0.03X_1X_2 - 0.013075X_1X_3 + 0.017275X_2X_3 - 0.01366X_1^2 - 0.01346X_2^2 - 0.030235X_3^2 (R_2 = 0.9981)$$

表 1 二次回归模型方差分析

方差来源	平方和	自由度	均方差	F 值	P 值
总模型	53.16	9	5.91	1872.20	<0.0001
X_1	0.035	1	0.035	10.98	0.0090
X_2	1.45	1	1.45	458.07	<0.0001
X_3	3.26	1	3.26	1032.98	<0.0001
X_1X_2	0.48	1	0.48	150.67	<0.0001
X_1X_3	3.42	1	3.42	1083.80	<0.0001
X_2X_3	5.97	1	5.97	1881.91	<0.0001
X_1^2	16.48	1	16.48	5222.58	<0.0001
X_2^2	16.00	1	16.00	5070.77	<0.0001
X_3^2	15.94	1	15.94	5054.04	<0.0001
残差	0.028	9	3.155E-03		
失拟项	0.016	5	3.179E-03	1.02	0.5076
纯误差	0.013	4	3.125E-03		
总变异	56.00	19			

由表 1 可知, X_2 、 X_3 、 X_1^2 、 X_2^2 、 X_3^2 、 X_1X_2 、 X_1X_3 、 X_2X_3 的 $P < 0.0001$, 故这 8 项均表现出极显著的水平。而对于 X_1 来说, $P > 0.05$, 则表现出不显著的水平。进一步对该回归模型进行显著性检验发现, 模型的决定系数为 $R_2 = 0.9981$, 表明预测值与实测值之间的相关性良好; 为增加模型预测的可靠性, 将 R_2 给予适当的调整 $R_{2,adj} = 0.9989$,

则仅有 0.86% 的响应值的总变异不能用该模型表示。失拟项的 $P > 0.05$, 故失拟项不显著, 则说明该回归模型与实测值能较好地拟合。

根据单因素实验选出对提取率影响较大 3 个因素进行星点的因素和水平设计进行响应面设计, 得到拟合的回归方程模型并对其进行回归方差分析。参照理论上的优化条件进行试验, 结果为提取率的平均值与理论提取率接近, 两者之间的 RSD 为 0.862%。

本模型通过训练得出平均绝对误差: ans 为 0.4268, 提取率的平均值与理论提取率之间的 $RSE = 0.8001\%$, 通过对比得出 BP 神经网络用于色素得率的预测模型要优于 RSM 实验的结果。

5 结 论

在色素提取工艺中改变影响色素得率的主要因素是提高色素得率的重要手段, 这点运用化学常用的 RSM 方法^[15]得到验证, 但是 RSM 的运用比较繁琐。优化改进后的 BP 神经网络用于色素得率的预测有比较高的预测精度及实用性^[16], 这在模拟仿真中也得到了成功验证并且预测的精确度和实用性比较高, 为提高色素得率提供了良好的理论基础和预测方法。未来可以在此方向上重点研究以取得更好的应用。

参 考 文 献

- [1] 肖正春, 张广伦. 我国植物食用色素资源开发利用评价[J]. 中国野生植物资源, 2014, 33(1): 45-54.
- [2] 李艳平, 马西平. 葡萄皮色素提取工艺研究[J]. 中国南方果树, 2010, 39(6): 57-58.
- [3] 赵珍珍. 红肉火龙果色素提取工艺优化及其化学成份分析[D]. 福州: 福建农林大学, 2012.
- [4] 罗漩, 李颖, 邓艳芹. 响应面法提取葡萄皮色素及其稳定性的研究[J]. 中国调味品, 2015, 40(2): 104-113.
- [5] 刘春, 马颖. 遗传算法和神经网络结合的 PSD 非线性校正[J]. 电子测量与仪器报, 2015, 29(8): 1157-1163.
- [6] 杨国强. 基于模糊自适应控制的锅炉温度控制[J]. 轻工机械, 2013, 31(2): 52-55.
- [7] 丁硕, 常晓恒. LM 算法改进的 BP 网络在模式分类中的应用研究[J]. 电子测试, 2014(2): 33-35.
- [8] 宋志杰, 王健. 模糊聚类 and LM 算法改进 BP 神经网络的变压器故障诊断[J]. 高压电器, 2013, 49(5): 54-58.
- [9] 程焕新, 伊飞. 面向轻汽油醚化的 BP 神经网络的预测模型控制[J]. 石油化工自动化, 2012, 48(6): 40-41.
- [10] 傅荟璇, 赵红. MATLAB 神经网络应用设计[M]. 北京: 机械工业出版社, 2010.
- [11] 朱江森, 宋文峰, 高源, 等. 基于改进型 BP 神经网络的氢原子钟钟差预测[J]. 仪器仪表学报, 2016, 37(2): 454-460.
- [12] 程焕新, 于沙家. 面向脱硫系统的 BP 神经网络的预测

- 控制[J]. 石油化工自动化,2015,51(5):39-42.
- [13] 余发山,康洪. 基于 GA 优化 BP 神经网络的液压钻机故障诊断[J]. 电子测量技术,2016,39(2):134-137.
- [14] 余昆,杨文娇,陈玲. 响应面分析法优化葡萄皮色素提取工艺[J]. 中外葡萄与葡萄酒,2013(2):27-31.
- [15] 杨新河,李勤,黄建安,等. 普洱茶色素提取工艺条件的响应面分析及其抗氧化性活性研究[J]食品科学,2011,32(6):1-5.
- [16] 夏玫,陈立潮. BP神经网络泛化能力改进研究[D]. 太原:太原科技大学,2009.

作者简介

程换新,1966年出生,教授,博士,硕士生导师,主要从事控制理论与应用研究。