

一种时空协同的图卷积长短期记忆网络及其工业软测量应用

常树超¹, 赵春晖^{1†}

(1. 浙江大学 控制科学与工程学院, 杭州 310027)

摘要: 近年来, 软测量技术的发展有效解决了工业过程中对于难以直接测量的质量变量的感知困难, 为过程的控制与优化提供了有力保障。通常在含有多个质量变量的过程中, 样本间的时序关系和多个质量变量间相互影响的空间关系能够反映过程本身的特性, 这种时空特性的挖掘有益于软测量模型性能的提升, 传统软测量方法往往局限于对时序关系的学习而并未考虑对质量变量间的空间关系进行有效利用。因此本文提出一种时空协同的图卷积长短期记忆网络 (Graph Convolution Long Short-Term Memory Networks, GC-LSTM), 应用于工业软测量场景。采用多通道网络结构将图卷积网络的空间关系挖掘能力和长短期记忆网络的时序关系学习能力相结合, 对过程进行时空协同学习, 实现了软测量应用。具体来说, 每条通道用于对每种质量变量进行独立学习; 对于过程的时序特性, 利用各通道内的长短期记忆网络提取针对不同质量变量的时序特征; 对于过程的空间特性, 构建质量变量间空间关系的图结构, 采用跨通道的图卷积运算将不同通道内不同质量变量的时序特征基于空间关系进行融合, 得到兼具过程时空特性的特征, 因而在软测量建模中实现了过程时空协同学习与融合。通过燃煤电厂磨煤机的实际生产数据验证了所提出的方法对软测量性能提升的有效性。

关键词: 时空协同; 图卷积网络; 长短期记忆网络; 软测量

中图分类号: TP183

文献标志码: A

DOI:

A Spatio-Temporal Synergistic Graph Convolution Long Short-Term Memory Networks and Its Application for Industrial Soft Sensor

CHANG Shu-chao¹, ZHAO Chun-hui^{1†}

(1. College of Control Science and Engineering, Zhejiang University, Hangzhou 310027, China)

Abstract: Recently, the development of soft sensor has shown great superiority in the measurement of unmeasurable quality variables in industrial process, which provides essential basis for the control and optimization of the process. Generally, in process with multiple quality variables, the temporal dependencies among samples and the spatial dependencies among quality variables can well reflect the inner property of a process. Therefore, the mining for spatio-temporal property will be advantageous for the promotion of soft sensor performance, while conventional methods are generally limited in learning temporal dependencies but neglect the usage for the spatial dependences among quality variables. In this paper, we propose a spatio-temporal synergistic Graph Convolution Long Short-Term Memory Networks (GC-LSTM) for the application of industrial soft sensor, which combines the spatial-mining ability of Graph Convolutional Networks and the temporal-mining ability of Long-Short Term Memory through multi-channel network structure. The proposed model adopts spatio-temporal synergistic learning to exploit the inner property of the process, and implements soft sensing. Specifically, each quality variable is learnt independently in each channel. As for the temporal property of a process, Long-Short Term Memory Networks in each channel can extract temporal features for specific quality variable. As for the spatial property of a process, graph is constructed to describe the spatial dependencies among quality variables. Then, graph convolutional operation across channels can fuse the temporal features of different quality variables in different channels based on the spatial information in graph for the extraction of spatio-temporal features. Thus, the proposed model implements spatio-temporal synergistic learning and fusion in the modeling process. Experiments based on real data set from coal mill at coal-fired power plant validate the effectiveness of the proposed model for performance improvement.

Keywords: spatio-temporal synergy; Graph Convolutional Networks; Long Short-Term Memory; soft sensor

收稿日期: 2020-xx-xx; 修回日期: 2020-xx-xx.

基金项目: 浙江省工业化与信息化融合联合基金(No. U1709211), 省重点研发项目基金(2019C03100).

[†]通讯作者. E-mail: chhzhao@zju.edu.cn.

0 引言

随着自动化技术水平的不断进步,现代工业已开始逐步迈入全自动化生产阶段。得益于控制理论中闭环反馈的核心理念,通过对工业生产中的被控变量进行感知从而调控生产过程,能够有效克服生产过程中的扰动,使得被控变量快速精准追踪设定值,因而实现了生产过程的自动化控制。然而实际工业生产环境中存在着大量难以直接测量或者测量存在较长时滞的被控变量(如物质成分需要化验),因此传统的检测方式无法提供闭环回路中的反馈信息,反馈控制便难以实现。

软测量技术的产生为解决上述问题提供了一种有效方法^[1-5]。由于整个工业生产过程中的众多变量间存在相互耦合关系,因此软测量的核心思想是利用可以直接测量的变量(过程变量)建立模型预测难以测量的变量(质量变量)。基于软测量技术的闭环反馈控制性能在很大程度上取决于软测量模型的预测性能,因此构建一种预测精准、实时性好的软测量模型能够为后续的过程控制与优化提供可靠的感知基础。

目前软测量技术可以分为基于模型和基于数据两大类。由于基于数据的软测量方法无需大量工业过程的机理知识为基础,仅依靠现场采集的大量数据构建模型来刻画对象的特性,因此得到了广泛的研究与发展。前人已提出多种基于数据的软测量模型,包含主成分回归(PCR^[6])、偏最小二乘回归(PLSR^[7,8])、独立成分回归(ICR^[9])、高斯过程回归(GPR^[10])等多元统计分析方法,以及支持向量回归(SVR^[11])、模糊神经网络(TSK^[12])、人工神经网络(ANN^[13,14])等机器学习模型。由于工业生产过程在时间上具有连续性,即邻近采样时刻之间的数据具有较强的时序相关性,因此不少研究专门针对时序数据所具备的特性,提出了动态软测量模型。Zhou等人^[15]提出一种多输出自回归移动平均模型(M-ARMAX)用于高炉十字测温,能够在保证模型精度的同时降低模型阶次。Shang等人^[16]提出一种改进的动态偏最小二乘(DPLS)模型,通过时序扩展的方式实现动态性,并且同时避免了输入变量增加造成的过拟合问题。Qin等人^[17]提出质量关联的慢特征回归(QSFR),能够在提取过程慢变特征的同时确保与质量变量的相关性。为了能够在考虑动态性的同时发挥神经网络的非线性拟合能力,Wang等人^[18]在时序拓展的基础上基于卷积神经网络(CNN)实现软测量建模。为了方便地学习过

去时刻与当前时刻的关联关系,Su等人^[19]采用循环神经网络(RNN)建立软测量模型。然而RNN存在的梯度消失问题,导致其无法有效考虑长期时序关系的影响。因此,长短期记忆网络(LSTM)的出现有效克服了RNN存在的缺陷,通过细胞状态的引入能够同时提取长期和短期的时序关联特性。Yuan等人^[20]提出一种有监督长短期记忆网络(SLSTM)用于软测量,能够更加有针对性地提取与质量变量相关的非线性动态特征,适用于连续过程中存在的时序性和非线性特点。在LSTM模型的基础上,也可通过引入attention机制使得模型关注对预测更有帮助的样本,提升软测量性能^[21-23]。

上述具有动态性的软测量模型多关注于如何有效提取能够反映过程时序关系的动态特征,以提升软测量模型的预测性能,而并未对变量之间的相互关系进行更深入地挖掘。对于软测量问题中的不同变量,由于它们在空间中处于同一过程反应的不同位置,因此不同变量之间的波动情况存在或多或少的相互影响和耦合关系,这里可称之为空间关系。对过程变量与质量变量之间空间关系的利用正是软测量建模有效性的基础,而多个质量变量间存在的空间关系却未被充分挖掘和利用,这种空间关系也是过程特性的一种表现(本文重点研究如何对质量变量间的空间关系进行挖掘,后文所提空间关系均指代质量变量间的空间关系)。如果在软测量建模的过程中同时考虑过程本身的时序关系和质量变量间的空间关系,对二者进行协同学习与融合,则能够在描述过程动态性的同时,将不同质量变量的学习过程关联起来,实现合作式学习。相较于传统软测量方法,能够充分挖掘数据中蕴含的过程时空特性信息,有助于提升软测量模型的性能。

对于在软测量模型中如何挖掘质量变量间的空间关系,发展迅速的图卷积网络以其善于挖掘图结构下相互关系的优势提供了一种可行的方式。通常在图结构中,结点表示所研究对象,边表示结点之间的某种关联关系,利用图卷积运算能够高效地基于图结构中所描述的关联关系对结点进行特征提取。根据图卷积运算的形式,图卷积网络可以分为基于谱域和基于空域两种^[24]。其中基于谱域的图卷积是以图信号傅里叶变换作为理论基础。Bruna等人^[25]首先提出了基于图谱理论的图卷积,但由于特征值分解的运算复杂度,限制了在较大图结构上的应用。因此,Defferrard等人^[26]提出了采用切比雪夫多项式简化的ChebNet,用以减轻运算的复杂度。之

后Kipf等人^[27]在ChebNet的基础上进一步提出了一阶简化的图卷积运算, 由于所得到的计算公式较为简洁且能够从空域的角度得到较好的解释, 因此成为目前主流的图卷积网络模型, 在社交关系分析、文件分类等领域均有广泛应用。不同于基于谱域的图卷积, 基于空域的图卷积认为结点信息沿着边进行传播, 据此来提取结点的特征。Micheli^[28]首先提出名为NN4G的空域图卷积网络模型, 通过残差连接和跳跃连接使得信息能够在不同层间进行传播, 但由于未标准化邻接矩阵, 会导致结点状态存在尺度差异。Atwood等人^[29]假设结点间的信息扩散具有一定的转移概率, 提出一种扩散卷积神经网络(DCNN), 由于该模型主要适用于捕捉局部特性, 因此忽视了图中存在的非局部关联关系。

目前图卷积网络通常将样本视为结点以挖掘样本间而非质量变量间的相互关系。除此之外, 图结构中结点间的相互关系通常采用距离指标进行描述, 这种样本间的度量方式并不适用于对质量变量间的空间关系进行描述。由于在动态软测量模型中进一步引入质量变量间的空间关系, 能够实现过程时空特性的协同学习与挖掘, 有助于预测性能的提升。然而传统的图卷积网络模型并不能直接实现空间信息的引入, 因此如何有效发挥图卷积的特点, 在软测量中同时学习样本间的时序关系和质量变量间的空间关系, 是研究的重点所在。

本文提出一种时空协同的图卷积长短期记忆网络(GC-LSTM)软测量模型。通过多通道网络结构的设计将图卷积网络和长短期记忆网络的优势相结合, 在软测量建模中对反映过程内在特性的时空特征进行协同学习。具体来说, 每一独立通道用于对每种质量变量进行学习; 对于时序特性, 采用长短期记忆网络在不同通道内提取针对不同质量变量的时序特征; 对于空间特性, 构建质量变量间空间关系的图结构, 采用跨通道的图卷积运算将不同通道内不同质量变量的时序特征基于空间关系进行融合, 得到兼具过程时空特性的特征, 从而实现了过程时空特性协同挖掘与学习。因此, GC-LSTM将图卷积网络和长短期记忆网络的优势相结合建立时空协同下的软测量模型, 用于提升软测量性能。

本文的主要贡献点总结如下:

- 设计了一种用图结构描述质量变量间空间关系的多通道图卷积网络模型, 首次在软测量建模过程中引入质量变量间的空间信息, 对过程的空间特性进行充分挖掘与利用。

- 将图卷积网络和长短期记忆网络在多通道网络结构下相结合, 分别在样本维度和变量维度上发挥长短期记忆网络和图卷积网络的优势, 通过时空协同学习得到反映过程内在特性的时空特征用于软测量。该方法从时空协同学习的新视角对过程特性进行了深入挖掘, 提升了软测量性能。

1 相关知识

本节主要介绍经典的长短期记忆网络和图卷积网络, 便于读者对后续GC-LSTM的介绍更好理解。

1.1 长短期记忆网络

长短期记忆网络(LSTM)最早由Hochreiter等人^[30]提出, 是一种RNN的变体模型, 能够解决传统RNN存在的梯度消失问题。之后也出现许多改进版本的LSTM, 目前最常用的LSTM模型主要采用门结构, 图1所示为其内部结构示意图。

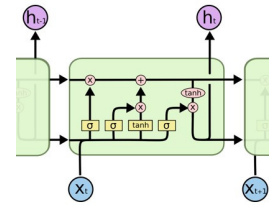


图1 LSTM内部结构示意图^[31]

每个LSTM单元根据上一时刻的隐含层输出 h_{t-1} 和细胞状态 C_{t-1} 以及当前时刻的输入 x_t , 计算得到当前时刻的隐含层输出 h_t 和细胞状态 C_t 。相较于RNN, LSTM通过细胞状态的传递, 能够同时对不同时刻间存在的长期和短期时序关系进行记忆和学习, 适用于时序数据的处理, 并且LSTM内部的计算方式能够避免RNN原本存在的梯度消失问题。目前LSTM已被广泛应用于序列学习、机器翻译等诸多领域。

1.2 图卷积网络

目前较为常用的图卷积网络(GCN)由Kipf等人^[27]提出。图的定义由结点和连接结点的边构成, t 时刻图中所有结点的特征可用 $F_t \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 表示, 其中 m 和 n 分别表示结点个数和每个结点的特征个数。为了在数学上方便描述结点之间的连接关系, 因此定义了邻接矩阵 $A \in \mathbb{R}^{m \times m}$, 如果结点 i 和结点 j 直接相连, 则元素 A_{ij} 为1, 否则为0。基于邻接矩阵可以定义度矩阵 $D \in \mathbb{R}^{m \times m}$, 度矩阵是对角矩阵, 其中元素定义为 $D_{ii} = \sum_{j=1}^m A_{ij}$, 用于表示每个结点邻居结点的个数。基于上述定义, 图卷积层由下述公式(1)给出定义。

$$H_t^{(l)} = \sigma(\tilde{D}^{-1/2} \tilde{A} \tilde{D}^{-1/2} H_t^{(l-1)} W^{(l)}) \quad (1)$$

其中 $H_t^{(l)}$ 表示 t 时刻第 l 层的隐含特征, $H_t^{(0)} = F_t$, $\tilde{A} = A + I_m$ 表示带有自连接的邻接矩阵, I_m 为单位矩阵, $W^{(l)}$ 表示权重参数, $\sigma(\cdot)$ 表示ReLU激活函数, $\tilde{D}^{-1/2}$ 左乘右乘的目的是对邻接矩阵进行标准化。在图卷积层的定义中, 邻接矩阵的引入能够将同一时刻下图结构中相邻结点间的特征进行融合, 通过多层图卷积网络能够提取基于图中相互关系的特征, 可用于后续的分类或回归任务。传统的图卷积网络通常将样本视为图结构中的结点, 且采用距离度量方式对结点间连接关系进行学习, 这种图结构构造方式具有一定的局限性, 并不适用于非样本结点图的构造。

2 方法

本节首先介绍所提模型适用的软测量问题设定以及提出GC-LSTM的动机, 之后详细介绍GC-LSTM如何对过程的时序特性和空间特性进行协同挖掘, 以及模型具体结构和应用过程。

2.1 软测量问题设定与动机

本文所提出的GC-LSTM软测量模型适用的场景需满足两个条件, 即过程数据具有时序关系且多个质量变量之间具备空间相互影响关系, 大多数工业生产都能够满足上述两个条件。文中分别采用 $X \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 和 $Y \in \mathbb{R}^{m \times p}$ 表示由过程变量和质量变量构成的数据矩阵, 其中 m , n , p 分别表示软测量任务中样本、过程变量和质量变量的数目。软测量模型的目标是学习得到过程变量到质量变量的映射关系, 即 $f: X \rightarrow Y$ 。

在满足上述设定的软测量问题中, 过程的特性可以体现在两方面, 即样本维度和变量维度。由于连续生产过程中邻近采样时刻的样本间具有较强的时序相关性, 因此样本维度体现了过程的时序特性。同一过程的不同变量处在空间上的不同位置, 它们之间亦存在相互影响关系, 这里称之为空间关系, 因此变量维度能够体现过程的空间特性。

现有动态软测量模型往往仅利用了样本间的时序关系, 以及过程变量和质量变量间的空间关系对质量变量进行预测, 然而并未对质量变量间的空间关系进行充分挖掘和利用。因此本方法正是基于对质量变量间空间关系的考量, 分别利用LSTM和GCN的模型特性同时对过程中样本间的时序关系和变量间的空间关系进行挖掘与融合, 再通过网络的协同学习与训练过程, 提取能够反映过程时空特性的特征用于软测量, 建立一种时空协同的软测量模型, 从而在更充分挖掘过程时空特性的

基础上实现软测量性能的提升。

2.2 时序特性挖掘

对于过程时序特性的挖掘, GC-LSTM利用LSTM对样本间的时序关系进行学习。由于过程中邻近采样时刻的样本间存在一定的时序相关性, 因此需要将样本按时间顺序依次输入LSTM中, 提取出每个样本对应的时序特征。具体结构如图2所示, 其中 x_t , C_t , h_t 分别代表了当前时刻 t 输入样本的过程变量、细胞状态和所提取的时序特征, l 代表所考虑时序关系的长度。

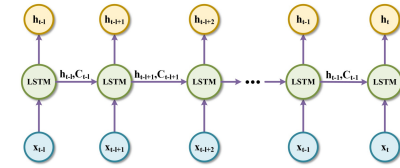


图2 LSTM对过程时序特征的提取

LSTM单元内部的具体计算过程如下公式(2)-(7)。其中 W_f , W_i , W_C , W_o 和 b_f , b_i , b_C , b_o 分别表示不同门对应的权重和偏置, f_t , i_t , o_t 表示 t 时刻不同门的计算结果, $\sigma(\cdot)$ 和 $\tanh(\cdot)$ 分别表示Sigmoid和Tanh激活函数, $*$ 表示Hadamard乘积, $[\cdot, \cdot]$ 表示将两个向量进行拼接。

$$f_t = \sigma(W_f \cdot [h_{t-1}, x_t] + b_f) \quad (2)$$

$$i_t = \sigma(W_i \cdot [h_{t-1}, x_t] + b_i) \quad (3)$$

$$\tilde{C}_t = \tanh(W_C \cdot [h_{t-1}, x_t] + b_C) \quad (4)$$

$$C_t = f_t * C_{t-1} + i_t * \tilde{C}_t \quad (5)$$

$$o_t = \sigma(W_o \cdot [h_{t-1}, x_t] + b_o) \quad (6)$$

$$h_t = o_t * \tanh(C_t) \quad (7)$$

上述公式(2)、(3)、(6)分别代表遗忘门、输入门和输出门的计算过程, 公式(5)根据遗忘门和输入门的计算结果更新当前时刻的细胞状态。因此, 通过细胞状态的引入能够对不同时刻样本间信息的遗忘和记忆关系进行学习, 提取的特征同时包含了当前时刻和之前时刻的变量信息, 因而体现了对过程时序特性的挖掘。将所提取的时序特征用于对质量变量进行预测, 则能够在软测量过程中对过程的时序特性进行挖掘和利用。

2.3 空间特性挖掘

对于过程空间特性的挖掘, 由于质量变量间的空间关系是所关注的要素, 因此需要将质量变量作为研究对象, 利用结点间的边描述质量变量间的空间关系。如果每个结点的特征能够表征不同质量变

量, 则通过建立GCN能够将图中不同结点的特征基于质量变量间的空间关系进行融合, 从而实现过程空间特性的挖掘。

在传统的图卷积网络研究中, 通常图中的边已知, 或者采用欧氏距离、核函数等距离度量方式计算得到。但是, 这种样本间的度量方式无法适用于质量变量间空间关系的描述。因此, 我们考虑采用稀疏编码对质量变量间的空间关系进行学习。

稀疏编码通过学习字典矩阵和稀疏表示, 从而能够稀疏化地表示原始数据。类似于稀疏编码的想法, 我们采用公式(8)中的目标函数和约束条件学习图中的边。由于在数学上邻接矩阵能方便地描述边, 因此学习得到邻接矩阵即可。

$$\min_A \|Y - YA\|_2^2 + \lambda \|A\|_1 \quad (8)$$

其中 A 为所求邻接矩阵, $\|\cdot\|_1$ 和 $\|\cdot\|_2$ 分别表示 L_1 和 L_2 范数, λ 为平衡系数。目标函数中的第一项要求质量变量矩阵通过邻接矩阵尽可能重构自身, 同时加上邻接矩阵对角线元素为0的限制。于是邻接矩阵中每一列元素表示了一种质量变量由其他质量变量的构造系数, 能够反映质量变量间的构造关系, 即相互影响关系。除此之外, 为了避免邻接矩阵标准化过程中造成的正负抵消情况, 假设质量变量间的相互关系非负且对称, 同时, L_1 范数项的引入能够对较弱的构造关系进行压缩。上述有约束最小化问题可由凸优化方法进行求解, 求解后得到的邻接矩阵并未考虑每种质量变量对自身的信息的利用, 因此需要再加上对角矩阵, 即结点的自连接, 以构成完整的邻接矩阵。不同于标准邻接矩阵中非0即1的元素, 所学得的邻接矩阵能够对不同强度的连接关系实现精细化描述。传统基于距离的度量方式通常无法对变量间存在的负相关关系进行有效表征, 而稀疏编码学习得到的是变量间的构造关系, 因此能够在变量间存在正相关或负相关关系的情况下均有效表征出变量间空间关系的强弱, 同时稀疏编码学习得到的线性构造系数更适合与图卷积网络的结点特征线性组合运算方式相结合。

通过稀疏编码所学习得到的邻接矩阵, 能够有效地将质量变量间的空间关系用图中的边进行描述。然而, 在空间特性的挖掘过程中每个图结点的特征需要代表不同质量变量, 而质量变量为所需预测的未知结果, 无法直接获取作为图结点特征, 并且过程时序特性和空间特性的挖掘方式并不相同。因此, 如何寻找合适的结点特征来表征不同质量变量, 以及如何将LSTM和GCN有机结合, 同时实现

对过程时空特性的协同学习, 是接下来需要解决的问题和难点。

2.4 提出的图卷积长短期记忆网络

为了让图结构中每个结点的特征能够表征不同的质量变量, 可以利用每个结点提取到的空间特征各自独立地对不同质量变量进行预测。因而通过网络的训练后, 每个结点的特征则能够对应于不同质量变量。这种学习方式可以看做是构造了多个独立的通道, 每个通道代表一种质量变量, 并用于对每种质量变量进行学习。基于上述想法能够在软测量中实现对过程空间特性的挖掘, 当每个结点的特征不仅对应于不同质量变量, 同时能够蕴含过程时序信息时, 则基于图中空间关系进行卷积运算后, 提取的特征便能够兼具过程的时空特性。网络在训练的过程中能够协同对时序关系和空间关系的学习, 得到融合过程时空信息的软测量特征。因此, 能够在对过程时空特性协同学习的基础上实现软测量应用。基于上述想法, GC-LSTM采用一种多通道网络结构的设计实现时空协同学习, 所设计多通道网络结构如图3所示。

在网络的训练过程中, LSTM和GCN对时序特性和空间特性的学习能够相互协同, 同时发挥两者的优势。首先, 过程变量被分别送入 p 个独立通道内, 每个通道代表一种质量变量, 利用LSTM层提取针对不同质量变量的时序特征; 之后将每个通道所提取的时序特征作为图结构中的结点。值得注意的是, 虽然每个结点的特征并非直接表示质量变量, 而是从过程变量中提取得到, 但通过网络的反向训练后能够有针对性地对对应于每种质量变量的预测。再结合稀疏编码所学的邻接矩阵, 采用跨通道的图卷积运算能够将不同通道内不同质量变量的时序特征基于图结构中的空间关系进行融合, 将具有较强空间关系的通道关联, 从而提取出能够反映过程内在特性的时空特征。其中, 由于图卷积层的运算将相关通道内相同对应时刻的时序特征进行融合, 因此融合后所得特征仍能保留原有特征的时序特性; 最后, 各通道再经过两个FC层得到每种质量变量的预测结果。通过上述多通道网络结构的设计, LSTM和GCN的特性同时得到了发挥, 并在网络的训练过程中协同学习出反映过程特性的时空特征用于软测量。每种质量变量不仅能够在各自通道内独立地学习, 同时借助图卷积运算将原本独立的通道有效关联起来, 使得不同质量变量的学习过程兼具独立性和共享性。

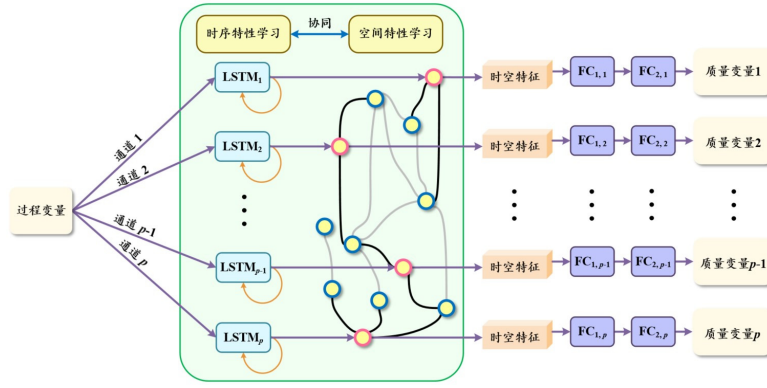


图3 GC-LSTM的多通道网络结构，由 p 个通道和四层网络（1个LSTM层、1个GCN层和2个FC层）构成，其中，输入和输出分别为过程变量和质量变量构成的数据矩阵， p 为质量变量个数。FC表示全连接层，连接模块间的箭头代表数据前向传播流向，误差反向传播方向即为前向传播的反方向，LSTM模块的圆弧箭头代表将输出循环作为下一时刻的输入，不同结点分别代表不同通道的时序特征。

上述多通道网络结构中的LSTM层和GCN层已由公式(2)-(7)和(1)定义，FC层由下述公式(9)定义。

$$H^{(l)} = \sigma(H^{(l-1)}W^{(l)} + b^{(l)}) \quad (9)$$

其中 $H^{(l)}$ 为第 l 层的隐含特征， $W^{(l)}$ 和 $b^{(l)}$ 分别表示权重和偏置参数， $\sigma(\cdot)$ 表示ReLU激活函数。

GC-LSTM的损失函数由公式(10)定义，各层中的模型参数采用梯度下降进行优化训练，其中 Y 和 \hat{Y} 分别表示质量变量的真实值和预测值。为避免过拟合，引入模型参数的二范数正则项，正则项系数为 γ 。

$$\text{loss}(Y, \hat{Y}) = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^p (Y_{ij} - \hat{Y}_{ij})^2 + \gamma \|W\|_2^2 \quad (10)$$

在实际应用时，首先需要使用训练集中的质量变量矩阵，采用稀疏编码对质量变量间空间关系的图结构进行学习，在后续模型训练和测试过程中始终保持该图结构不变。再构建上述多通道网络结构并进行训练，即可得到GC-LSTM软测量模型。

GC-LSTM通过所设计的多通道网络结构，先后利用LSTM和GCN对过程的时序特性和空间特性进行协同挖掘和学习，得到能够表征过程内在时空属性的特征用于软测量。相较于仅考虑过程时序特性的软测量模型，GC-LSTM充分发挥了LSTM和GCN各自的优势，有效地在时空协同的基础上实现了软测量应用。

3 实验验证

本节利用燃煤电厂磨煤机实际生产数据对GC-LSTM软测量模型的有效性进行验证，表1为所使用磨煤机数据集的相关介绍。磨煤机是将煤块压碎、击碎或研碎成煤粉的机械设备，从煤块到煤粉的转化能够增加表面积，从而有助于后续的燃煤发电过

程。其中磨煤机各部件温度过低可能会对磨煤机的生产效率和性能产生一定影响，过高则会带来一定的安全隐患。因此，本实验中选择其中的5个部件温度作为磨煤机生产中所关注的质量变量，它们在机理上能够通过物理传热进行相互影响。图4为所选5个质量变量在数据集中的变化情况，可以看出其动态变化特性具有较强的相似性，同时在局部变化上也存在一定的差异性。

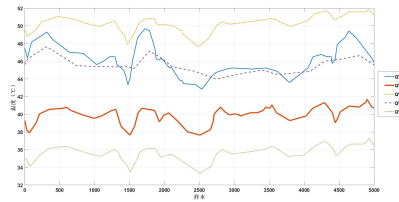


图4 所选质量变量在数据集中的变化情况

表1 磨煤机数据集介绍

样本总数	5000
采样频率	1分钟
过程变量	给煤量、功率、电流、转速、压力、部件温度等（共31个）
质量变量	电机线圈温度、润滑油温度、行星齿轮轴承温度、旋转分离器轴承温度、油箱温度（共5个，分别用QV1~5表示）

由于各变量之间存在较大的量纲差异，因此采用min-max标准化将每个变量转化至[0,1]范围内。将样本按照时间顺序排列，前80%（即4000个样本）作为训练集，后20%（即1000个样本）作为测试集。由于模型采用序列方式输入，同时存在跨通道的公共模块，因此在该数据量下已能对模型参数实现较好训练。实验进行5次重复，实验结果取平均。采用决定系数（ R^2 ）和均方根误差（ $RMSE$ ）作为评价指标，分别由公式(11)和(12)计算得到。

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^m (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^m (y_i - \bar{y})^2} \quad (11)$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (\hat{y}_i - y_i)^2} \quad (12)$$

其中 m 为测试样本个数, y_i 和 \hat{y}_i 分别表示样本 i 的真实值和预测值, \bar{y} 表示测试集样本真实值的平均值。 R^2 表征了模型所解释方差占总体方差的部分, $RMSE$ 则表征了预测值和真实值偏差的平均水平, 当 R^2 越接近100%, $RMSE$ 越小时, 模型性能越好。

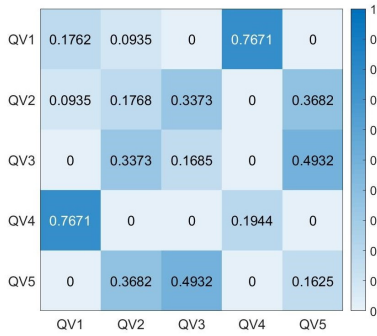


图5 稀疏编码所学习的邻接矩阵(标准化后), 该矩阵为对称矩阵, 数值越大表示变量间的空间关系越强, 通常公式(1)中的自连接单位矩阵也可乘上系数以调整自连接的强弱, 此处采用0.2倍的单位矩阵作为自连接, 公式(8)中的系数 λ 设置为0.05。

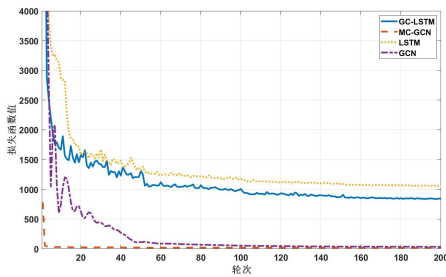


图6 各网络模型损失函数值变化曲线

图5所示为通过稀疏编码学习得到的邻接矩阵, 从中可以看出QV1和QV4相互关系密切, QV2、QV3和QV5三者之间的影响关系较为平均, 这与根据图4的直观判断相符合。模型中序列长度设置为50, 训练中批次大小设置为64, 使用Adam优化器进行参数学习, 初始学习率设置为0.001, 每50个轮次学习率减半, 共进行200轮次训练。

为了验证所提出软测量模型的有效性, 分别设计了偏最小二乘回归 (PLSR^[7])、最小二乘支持向量回归 (LS-SVR^[32])、高斯过程回归 (GPR^[33])、模糊神经网络 (TSK^[12])、全连接网络 (FC^[34])、长短期记忆网络 (LSTM^[31])、图卷积网络 (GCN^[27]) 和多通道图卷积网络 (MC-GCN

(采用和GC-LSTM相似的模型结构, 区别在于MC-GCN各通道首先采用FC提取特征, 而并不能考虑数据中的时序关系)) 共8种模型作为对比实验。后4种基于神经网络的模型均采用四层隐含层结构, 从输入至输出的各层神经元个数, 依次设置为1024, 256, 256, 256, 具体实际应用中可先设置较少的层数和神经元, 根据模型交叉验证效果考虑是否需要增加模型层数和神经元个数。其中LSTM序列长度和GC-LSTM保持一致, 设置为50; 由于传统GCN在训练过程中需要同时使用训练和测试数据一起构造样本图, 因此为了实验公平性, 实验中GCN的训练和测试过程分别只使用训练和测试样本的过程变量基于距离度量方式构造图结构, 此处采用RBF核函数作为距离度量方式。图6为各网络模型损失值变化曲线, 可以看出各网络模型均能够在设置轮次内实现快速收敛。其中LSTM和GC-LSTM的损失函数值较大, 是由于这两种考虑时序关系的模型在生成序列时会重复利用部分样本, 因此训练时的损失值较大。

实验中各模型的训练和测试用时如表2所示 (用时最短用粗体显示)。可以看出PLSR、LS-SVR、GPR、TSK和FC五种模型的训练用时较短, 而LSTM、GCN、MC-GCN和GC-LSTM四种模型的训练用时相对较长。所提GC-LSTM模型由于模型结构最为复杂, 因此训练用时也最长。然而离线建模用时的长短通常并不影响软测量模型在线应用时的效率, 因此通过测试用时结果可以看出各模型均能够很好地满足工业现场的实时性在线需求。当实际工业应用中存在过多的过程变量时, 可能会对模型的运算效率造成一定影响。通常需要基于机理关联分析或特征选择方法, 剔除掉耦合关系较高的过程变量以提高模型的计算效率。

表2 各模型训练和测试用时对比

模型	训练用时 (秒)	测试用时 (秒)
PLSR	0.016	0.002
LS-SVR	54.709	1.526
GPR	9.335	0.160
TSK	29.150	0.250
FC	45.384	0.006
LSTM	163.761	0.048
GCN	208.474	0.054
MC-GCN	142.126	0.008
GC-LSTM	872.847	0.240

五次实验的平均 R^2 和 $RMSE$ 结果以及在各质量变量上的平均性能指标和排名情况如表3所示 (最佳表现用粗体显示)。通过对比可以看出GC-LSTM在QV1和QV3上的表现均优于其他对

比模型，虽然在QV2和QV5上的表现略差于LS-SVR和LSTM，但性能指标上的差异较小。由于GC-LSTM将不同通道内所提取的时序特征进行融合，可能会对本身已提取出较好特征的通道造成一定影响，所以无法确保在所有质量变量上均表现最佳，但利用相关通道内的特征信息能够在普遍情况下帮助提升自身通道的泛化能力和鲁棒性。因此GC-LSTM的优势主要表现在对整体软测量性能的显著提升，通过平均性能指标和平均排名的对比能够得到体现。LSTM和MC-GCN在不同质量变量上具有各自的优势，整体上二者表现相当且优于常规的FC模型。根据质量变量的波动情况和邻接矩阵可以看出，该软测量问题中样本间和质量变量间

分别存在较强的时序关系和空间关系，因此引入过程时序信息和空间信息的软测量模型（LSTM、MC-GCN和GC-LSTM）表现均优于其他软测量模型。PLSR、LS-SVR、GPR和TSK四种非基于神经网络的软测量模型性能相当，其中TSK采用多条模糊规则构建模型，通过类似集成学习的方式综合多个模型的预测结果，因此预测性能略有提升。而GCN模型性能较差的原因在于训练和测试阶段分别依据各自样本的过程变量构建图结构，导致使用了不同的图结构，并且通过距离计算得到的样本间相互关系可能并非真实存在的特性。因此传统以样本为图结点的图卷积网络并不适合直接应用于解决软测量问题。

表 3 各模型的软测量结果(性能评价指标为 $R^2(\%)$ 和 $RMSE(^{\circ}C)$)

模型	$R^2(\%)$							$RMSE(^{\circ}C)$						
	QV1	QV2	QV3	QV4	QV5	平均结果	平均排名	QV1	QV2	QV3	QV4	QV5	平均结果	平均排名
PLSR	86.2	55.7	75.6	10.5	77.0	61.0	6.7	0.440	0.360	0.175	0.501	0.218	0.339	6.8
LS-SVR	88.9	74.8	24.4	58.2	69.7	63.2	6.0	0.395	0.271	0.308	0.342	0.251	0.313	6.0
GPR	94.1	25.0	86.5	53.9	45.2	60.9	6.7	0.290	0.468	0.130	0.359	0.338	0.317	6.7
TSK	93.6	65.9	36.8	68.1	67.7	66.4	5.7	0.285	0.315	0.279	0.295	0.256	0.286	4.8
FC	84.1	59.9	58.2	67.6	77.4	69.4	5.2	0.473	0.341	0.226	0.301	0.216	0.311	5.5
LSTM	95.1	59.2	64.6	73.9	79.4	74.4	3.0	0.261	0.345	0.209	0.267	0.206	0.258	3.3
GCN	93.8	58.9	69.7	49.6	67.9	68.0	6.0	0.294	0.346	0.194	0.375	0.258	0.294	6.3
MC-GCN	98.6	44.0	85.1	63.4	74.3	73.1	4.3	0.142	0.404	0.131	0.319	0.231	0.245	4.2
GC-LSTM	98.8	71.3	89.4	73.3	78.3	82.2	1.5	0.127	0.287	0.115	0.266	0.212	0.201	1.3

为了进一步分析不同模型的性能，将LSTM、MC-GCN和GC-LSTM三种模型在其中一次实验中的预测情况分别在图7(a)~(c)中进行展示。首先可以看到对于QV1和QV3的预测，MC-GCN和GC-LSTM两种考虑质量变量间空间关系的模型效果更好，而LSTM在个别时段的预测能力明显不及前两者（图中圆圈部分）。对于QV4和QV5的预测，LSTM和GC-LSTM两种考虑样本间时序关系的模型

性能优于MC-GCN，在局部时段上可以体现出这种优势（图中方框部分）。因此总体上来看，相较于仅考虑过程时序特性的LSTM和仅考虑过程空间特性的MC-GCN，GC-LSTM对过程的时空特性进行学习融合，同时发挥了两者的优势，并通过协同学习有效平衡两者之间的关系，在一些局部时段提高了模型预测精度，实现了对模型整体泛化性能的提升。

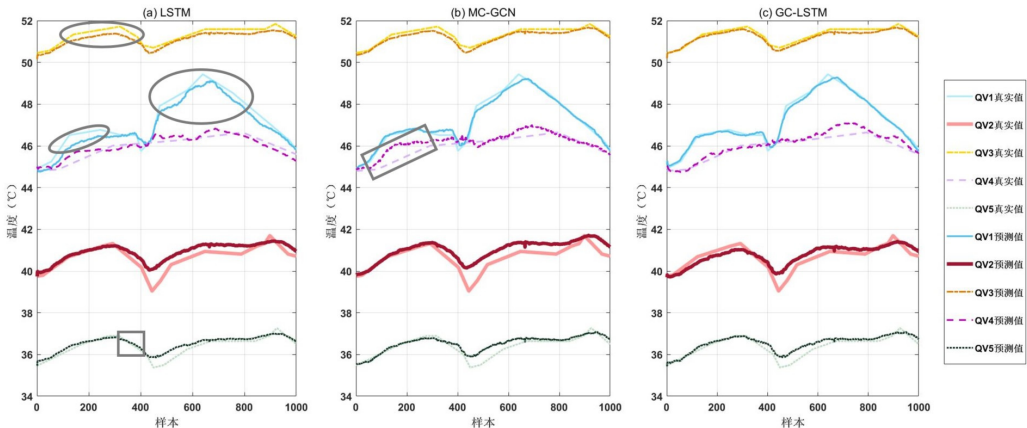


图 7 LSTM、MC-GCN和GC-LSTM的软测量预测效果

相较于传统的图卷积网络, GC-LSTM采用稀疏编码学习质量变量间的空间关系。为验证这种改进的有效性, 对比利用RBF核函数学习图结构的方式, 结果见表4。从中可以看出采用稀疏编码的MC-GCN和GC-LSTM模型性能在一定程度上优于采用核函数的方式, 因此也验证了距离度量方式并不能较好地对变量间相互影响的空间关系进行描述。而采用稀疏编码学习得到的稀疏表示很好地反映了变量间的构造关系, 能够对空间关系更好表示。

表4 不同图结构构造方式下模型性能对比

模型	MC-GCN		GC-LSTM	
性能指标	$R^2(\%)$	$RMSE$	$R^2(\%)$	$RMSE$
RBF核函数	72.3	0.257	77.3	0.239
稀疏编码	73.1	0.245	82.2	0.201

在考虑时序关系的模型LSTM和GC-LSTM中, 所考虑的序列长度对模型性能有一定的影响。表5评估了不同序列长度对LSTM和GC-LSTM模型性能的影响, 可以看到当序列长度分别设置为30和50时能够获得较好性能。当序列过短时可能会忽视长期依赖的时序关系, 而序列过长则会造成一些无用信息的引入, 但序列长度对模型性能的影响较小。在不同的实际问题应用中, 需要对序列长度进行适当地调优, 才能让模型更有效地捕捉时序关系。

表5 不同序列长度下模型性能对比

性能指标	序列长度	LSTM	GC-LSTM
平均 $R^2(\%)$	10	73.2	78.7
	20	73.1	80.3
	30	74.4	79.7
	40	73.2	80.3
	50	74.4	82.2
	60	74.2	80.7
	70	73.1	79.8
平均 $RMSE$	10	0.268	0.217
	20	0.266	0.208
	30	0.257	0.212
	40	0.262	0.209
	50	0.258	0.201
	60	0.268	0.214
	70	0.269	0.209

通过上述实验以及分析, 验证了GC-LSTM在多质量变量、时序性软测量问题中的优越性。首先, LSTM发挥了对样本间时序关系挖掘的作用, 再利用图卷积将时序特征基于质量变量间的空间关系进行融合, 实现对过程时空特性的协同学习, 得到能够反映过程时空特性的特征。相较于传统的软测量模型, GC-LSTM同时考虑了过程的时序关系和空间关系, 对过程存在的时空特性进行了协同挖掘与融合, 在局部时段上有效提升了模型的预测性能。由

于大多数真实工业生产中具备质量变量间的空间特性和样本间的时序特性, 因此该方法具有一定的实际应用价值。

4 结论

本文提出了一种时空协同的工业软测量网络模型——GC-LSTM, 有效融合了样本间的时序信息和质量变量间的空间信息, 实现了对过程时空特性的协同学习, 显著提升了软测量模型在局部时段的预测性能, 以及在多质量变量上的综合表现。通过燃煤电厂磨煤机实际生产数据验证了所提模型在真实软测量场景下的有效性和优越性。未来工作考虑将关于质量变量间空间关系的先验知识引入并量化, 与通过数据分析得出的结果有机结合, 使得所构造的图结构能够更加准确反映过程的空间特性。

参考文献(References)

- [1] Zhao C H, Wang F L, Yao Y, et al. Phase-based Statistical Modeling, Online Monitoring and Quality Prediction for Batch Processes[J]. Acta Automatica Sinica, 2010, 36(3): 366-374.
- [2] Wang J, Zhao C H. Mode-cloud data analytics based transfer learning for soft sensor of manufacturing industry with incremental learning ability[J]. Control Engineering Practice, 2020, 98: 104392.
- [3] Zhao L P, Zhao C H, Gao F R. Phase Transition Analysis Based Quality Prediction for Multi-phase Batch Processes[J]. Chinese Journal of Chemical Engineering, 2012, 20(6): 1191-1197.
- [4] Zhao C H. A Quality-Relevant Sequential Phase Partition Approach for Regression Modeling and Quality Prediction Analysis in Manufacturing Processes[J]. IEEE Transactions on Automation Science and Engineering, 2014, 11(4): 983-991.
- [5] Zhao C H, Wang F L, Mao Z Z, et al. Quality prediction based on phase-specific average trajectory for batch processes[J]. Aiche Journal, 2008, 54(3): 693-705.
- [6] Zhou P, Zhang L, Li W P, et al. Autoencoder and PCA Based RVFLNs Modeling for Multivariate Molten Iron Quality in Blast Furnace Ironmaking[J]. Acta Automatica Sinica, 2018, 44(10): 1799-1811.
- [7] Facco P, Doplicher F, Bezzo F, et al. Moving average PLS soft sensor for online product quality estimation in an industrial batch polymerization process[J]. Journal of Process Control, 2009, 19(3): 520-529.
- [8] Xu X, Liu Q, Ding J L. Gasoline dry point prediction of fractionation processes using dynamic inner partial least squares[C]. 11th Asian Control Conference (ASCC), 2017: 1438-1442.
- [9] Zhao C H, Gao F R, Wang F L. An Improved Independent Component Regression Modeling and Quantitative Calibration Procedure[J]. Aiche Journal, 2010, 56(6): 1519-1535.

- [10] Grbic R, Sliskovic D, Kadlec P. Adaptive soft sensor for online prediction based on moving window Gaussian process regression[C]. 11th International Conference on Machine Learning and Applications, 2012: 428-433.
- [11] Desai K, Badhe Y, Tambe S S, et al. Soft-sensor development for fed-batch bioreactors using support vector regression[J]. Biochemical Engineering Journal, 2006, 27(3): 225-239.
- [12] Wu D R, Yuan Y, Huang J, et al. Optimize TSK Fuzzy Systems for Regression Problems: Minibatch Gradient Descent With Regularization, DropRule, and AdaBound (MBGD-RDA)[J]. IEEE Transactions on Fuzzy Systems, 2020, 28(5): 1003-1015.
- [13] Shang C, Yang F, Huang D X, et al. Data-driven soft sensor development based on deep learning technique[J]. Journal of Process Control, 2014, 24(3): 223-233.
- [14] Yang H, Chai T Y. Component Content Soft-sensor Based on Neural Networks in Rare-earth Countercurrent Extraction Process[J]. Acta Automatica Sinica, 2006, 32(4): 489-495.
- [15] Zhou P, Liu J P. Data-driven Multi-output ARMAX Modeling for Online Estimation of Central Temperatures for Cross Temperature Measuring in Blast Furnace Ironmaking[J]. Acta Automatica Sinica, 2018, 44(3): 552-561.
- [16] Shang C, Huang X L, Suykens J, et al. Enhancing dynamic soft sensors based on DPLS: A temporal smoothness regularization approach[J]. Journal of Process Control, 2015, 28: 17-26.
- [17] Qin Y, Zhao C H, Huang B. A new soft-sensor algorithm with concurrent consideration of slowness and quality interpretation for dynamic chemical process[J]. Chemical Engineering Science, 2019, 199: 28-39.
- [18] Wang K C, Shang C, Liu L, et al. Dynamic soft sensor development based on convolutional neural networks[J]. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2019, 58(26): 11521-11531.
- [19] Su H B, Fan L T, Schlup J R. Monitoring the process of curing of epoxy/graphite fiber composites with a recurrent neural network as a soft sensor[J]. Engineering Applications of Artificial Intelligence, 1998, 11(2): 293-306.
- [20] Yuan X F, Li L, Wang Y L. Nonlinear Dynamic Soft Sensor Modeling With Supervised Long Short-Term Memory Network[J]. IEEE Transactions on Industrial Informatics, 2020, 16(5): 3168-3176.
- [21] Yuan X F, Li L, Shardt Y, et al. Deep learning with spatiotemporal attention-based LSTM for industrial soft sensor model development[J]. IEEE Transactions on Industrial Electronics, 2020: 1-1.
- [22] Yuan X F, Li L, Wang Y L, et al. Deep learning for quality prediction of nonlinear dynamic processes with variable attention-based long short-term memory network[J]. The Canadian Journal of Chemical Engineering, 2020, 98(6): 1377-1389.
- [23] Feng L J, Zhao C H, Sun Y X. Dual Attention-Based Encoder-Decoder: A Customized Sequence-to-Sequence Learning for Soft Sensor Development[J]. IEEE Transactions on Neural Networks Learning Systems, 2020: 1-12.
- [24] Wu Z H, Pan S R, Chen F W, et al. A Comprehensive Survey on Graph Neural Networks[J]. IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems, 2020: 1-21.
- [25] Bruna J, Zaremba W, Szlam A, et al. Spectral networks and locally connected networks on graphs[DB/OL]. (2014-05-21)[2020-07-05]. <https://arxiv.org/abs/1312.6203>.
- [26] Defferrard M, Bresson X, Vandergheynst P. Convolutional neural networks on graphs with fast localized spectral filtering[C]. Advances in neural information processing systems, 2016: 3844-3852.
- [27] Kipf T N, Welling M. Semi-supervised classification with graph convolutional networks[DB/OL]. (2017-02-22)[2020-07-05]. <https://arxiv.org/abs/1609.02907>.
- [28] Micheli A. Neural network for graphs: A contextual constructive approach[J]. IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems, 2009, 20(3): 498-511.
- [29] Atwood J, Towsley D. Diffusion-convolutional neural networks[C]. Advances in neural information processing systems, 2016: 1993-2001.
- [30] Hochreiter S, Schmidhuber J. Long short-term memory[J]. Neural computation, 1997, 9(8): 1735-1780.
- [31] Olah C. Understanding lstm networks[DB/OL]. (2015-08-27)[2020-07-05]. <http://colah.github.io/posts/2015-08-Understanding-LSTMs>.
- [32] Suykens J, Vandewalle J. Least squares support vector machine classifiers[J]. Neural processing letters, 1999, 9(3): 293-300.
- [33] Williams C K, Rasmussen C E. Gaussian processes for regression[C]. Advances in neural information processing systems, 1996: 514-520.
- [34] Glorot X, Bengio Y. Understanding the difficulty of training deep feedforward neural networks[J]. Journal of Machine Learning Research, 2010, 9: 249-256.

作者简介

常树超(1997—), 男, 硕士生, 从事工业软测量的研究, E-mail: 1059990637@qq.com;

赵春晖(1979—), 女, 教授, 博士生导师, 从事工业大数据分析与应用, 包括状态监测、故障诊断、软测量等, E-mail: chhzhao@zju.edu.cn.