

控制与决策

Control and Decision

基于迁移子空间学习的偏最小二乘回归软测量方法

韩鹏东, 阎高伟, 任蜜蜂, 程兰, 叶泽甫

引用本文:

韩鹏东, 阎高伟, 任蜜蜂, 程兰, 叶泽甫. 基于迁移子空间学习的偏最小二乘回归软测量方法[J]. *控制与决策*, 2023, 38(11): 3147–3155.

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.13195/j.kzyjc.2022.0398>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

基于广义主成分分析的重构故障子空间建模方法

Reconstructed fault subspace modelling method based on generalized principal component analysis

控制与决策. 2021, 36(4): 808–814 <https://doi.org/10.13195/j.kzyjc.2019.0818>

基于深度时序特征迁移的轴承剩余寿命预测方法

Remaining useful life prediction of bearing based on deep temporal feature transfer

控制与决策. 2021, 36(7): 1699–1706 <https://doi.org/10.13195/j.kzyjc.2019.1809>

基于KRLS的非均匀采样非线性系统辨识

Identification of non-uniformly sampled nonlinear systems based on KRLS

控制与决策. 2021, 36(12): 3049–3055 <https://doi.org/10.13195/j.kzyjc.2020.0962>

面向工业软测量应用的定制化生成对抗数据填补模型

Customized generative adversarial data imputation model for industrial soft sensing

控制与决策. 2021, 36(12): 2929–2936 <https://doi.org/10.13195/j.kzyjc.2020.0974>

基于图像随机分布模型的电熔镁炉工况识别

Conditions recognition of fused magnesia furnace based on dynamic characteristics of B-spline network

控制与决策. 2021, 36(11): 2735–2742 <https://doi.org/10.13195/j.kzyjc.2020.0570>

基于迁移子空间学习的偏最小二乘回归软测量方法

韩鹏东¹, 阎高伟^{1†}, 任蜜蜂¹, 程 兰¹, 叶泽甫²

(1. 太原理工大学 电气与动力工程学院, 太原 030024; 2. 山西格盟中美清洁能源研发有限公司, 太原 030031)

摘要: 针对流程工业中工况改变易导致当前样本与历史样本分布失配, 传统软测量模型失准的问题, 考虑工业数据时序性、动态性以及存在过程漂移等特性对建模的影响, 提出一种基于迁移子空间学习的偏最小二乘回归软测量方法. 首先, 回归框架采用非线性迭代偏最小二乘方法, 对其求解映射向量的目标函数施加基于子空间重构的域适应正则项, 映射过程中保证当前工况中每个样本能够被历史工况样本线性重构. 在此基础上对重构矩阵施加低秩稀疏约束, 保持数据结构的同时使重构矩阵具备块状结构以应对过程漂移特性. 将所提出方法在1个数值案例和3个不同的多工况数据集中进行实验, 并与现有域适应回归方法进行对比分析. 实验表明, 所提出方法能够有效提高模型在跨工况条件下的预测精度, 减少工况间数据分布差异对模型性能的影响.

关键词: 软测量; 多工况; 迁移子空间学习; 偏最小二乘回归; 低秩稀疏约束

中图分类号: TP273

文献标志码: A

DOI: 10.13195/j.kzyjc.2022.0398

引用格式: 韩鹏东, 阎高伟, 任蜜蜂, 等. 基于迁移子空间学习的偏最小二乘回归软测量方法[J]. 控制与决策, 2023, 38(11): 3147-3155.

Partial least squares regression soft sensor method based on transfer subspace learning

HAN Peng-dong¹, YAN Gao-wei^{1†}, REN Mi-feng¹, CHENG Lan¹, YE Ze-fu²

(1. College of Electrical and Power Engineering, Taiyuan University of Technology, Taiyuan 030024, China; 2. Shanxi Gemengzhongmei Clean Energy Research and Development Co., Ltd, Taiyuan 030031, China)

Abstract: Aiming at the problem that changes in working conditions in the process industry can easily lead to mismatches between the current sample and the historical sample distribution, and the inaccuracy of traditional soft-sensing model, considering the impact of industrial data's time series, dynamics and process drift on modeling, this paper proposes a partial least squares regression soft sensor method based on transfer subspace learning. First, the regression framework adopts the nonlinear iterative partial least squares method and applies a domain adaptation regular term based on subspace reconstruction to the objective function of solving the mapping vector. During the shooting process, it is guaranteed that each sample in the current working condition can be linearly reconstructed by the historical working condition sample. On this basis, a low-rank and sparse representation is applied to the reconstruction matrix, while maintaining the data structure, the reconstruction matrix has a block structure to deal with process drift characteristics. The proposed method is tested on a numerical case and three different multi-condition data sets and compared with the existing domain adaptive regression methods. Experiments have demonstrated that this method can effectively improve the prediction accuracy of the model under cross-conditions, and reduce the impact of the difference in data distribution between conditions on the model performance.

Keywords: soft sensor; multiple conditions; transfer subspace learning; partial least squares regression; low-rank and sparse representation

收稿日期: 2022-03-15; 录用日期: 2022-05-31.

基金项目: 国家自然科学基金项目(61973226, 62073232); 山西省重点研发计划项目(201903D121143); 山西省自然科学基金项目(20210302123189).

责任编辑: 牛玉刚.

[†]通讯作者. E-mail: yangaowei@tyut.edu.cn.

*本文附带电子附录文件, 可登录本刊官网该文“资源附件”区自行下载阅览.

0 引言

基于数据驱动的软测量方法通过建立辅助变量与主导变量之间的映射关系,实现对主导变量的估计与测量,已在流程工业中得到广泛应用^[1]. 常见的数据驱动软测量建模方法主要包括以主成分分析^[2](principal component analysis, PCA)、偏最小二乘回归^[3](partial least squares regression, PLSR)为代表的多元统计方法和以支持向量机^[4](support vector machine, SVM)、人工神经网络^[5](artificial neural network, ANN)为代表的机器学习方法. 上述软测量方法均要求训练数据与测试数据服从同一分布. 而由于多样化的产品市场需求,生产设备、原料和环境等随着生产任务的改变而不断调整,进而导致系统运行工况频繁发生变化^[6],过程数据呈现出“多峰”特性,即不同工况对应的过程数据服从不同的分布^[7]. 当新工况出现时,当前工况与历史工况数据分布失配,预先训练的软测量模型性能开始恶化.

域适应策略旨在通过减少源域与目标域数据的分布差异,将从源域中获取的知识用以帮助提升目标域中预测函数的性能^[8-11]. 将多工况问题中的历史工况视为源域,当前工况视为目标域,构建从历史工况迁移到当前工况的域适应模型,为解决多工况下的软测量问题提供解决思路^[12]. 根据目标域样本标签的有无,域适应分为无监督与半监督方法. 考虑工业过程中当前工况的主导变量通常采用离线实验室化验的方式测量,样本标签难以实时获取,因此本文重点关注无监督域适应方法.

目前,利用无监督域适应方法解决机器学习问题(分类或回归)主要有两种策略:1)第1种旨在学习一个公共子空间,使源域与目标域的数据投影到该子空间后分布相近^[13-16],然后利用投影后的源域数据训练模型,实现对目标域的预测. 但是该类策略仅关注不同域之间数据分布的差异,在寻找子空间的过程中没有与标签信息建立相关性联系,导致公共子空间缺乏对标签信息的解释,易破坏原始数据中特征与标签之间的映射关系. 2)第2种策略旨在设计一种具备域适应功能的正则项,对建立的预测模型进行约束^[17-19]. 实质上是将数据映射到重构的标签空间中,使源域和目标域数据在此空间上的投影既具备对标签信息的解释性,同时具有相近的分布. 根据文献^[9]域适应误差上界理论分析可知,域适应策略的效果主要受到两个方面的影响,一方面是源域上模型的预测能力,另一方面是源域与目标域之间数据的分布差异. 第2种策略在数据分布对齐与保持预测能力之间

进行了折衷,较第1种策略更为可靠.

然而,当前域适应的大量研究工作主要集中于分类任务,但工业过程中软测量问题为回归任务,回归标签的连续性导致其无法与类别标签进行同样的one-hot编码重构过程,若将数据直接映射在标签空间内,则无法满足子空间基的正交性要求. 为解决该问题,域不变迭代偏最小二乘^[20](domain-invariant iterative partial least squares, DIPALS)遵循偏最小二乘回归的思想,通过使标签与特征相关性最大构建隐变量空间,使其满足正交性要求,且在构建隐变量空间的过程中对目标函数添加方差对齐项,使投影在公共隐变量空间的源域与目标域数据方差差异最小. 在经典偏最小二乘模型的目标函数上添加域适应正则化项,使其寻找源域隐变量空间的同时实现源域与目标域数据的分布适配,已经成为利用域适应方法解决多工况软测量问题的一种新框架^[20-22].

另外,由于过程数据通过不同传感器连续采样得到,数据样本之间具有序列结构与动态特性,在寻找公共隐变量空间与实现数据分布对齐的过程中,考虑保持数据结构是必要的. 文献^[23]在DIPALS基础上,提出近邻拉普拉斯正则项,在模型训练过程中既保持了数据结构信息,又能够大幅度降低训练时间,满足工业软测量的实时性要求. 文献^[19]研究了一种基于低秩稀疏约束的迁移子空间学习方法,该方法假设在公共子空间内目标域样本可以被源域样本线性重构,并通过对重构矩阵施加低秩和稀疏约束,使数据在映射到公共子空间的过程中能够保持数据局部结构. 更重要地,尽管认为目标域和源域数据均采样于各自域的分布,但在工业过程中,严格意义上服从同一分布的样本并不存在,同一工况中数据也会因设备损耗、催化剂失活等发生程度较轻的过程缓慢漂移,进而使分布出现差异. 因此,历史工况与当前工况之间往往跨越多个子空间,对重构矩阵施加低秩约束还可以使其具有块状结构,有助于实现历史工况与目标工况数据分布的分段对齐. 在传统软测量模型中,解决这一问题通常依赖于滑动窗口策略对模型的更新和校正来实现.

综上所述,考虑过程数据的多工况特性、时序性以及动态特性,本文提出一种基于迁移子空间学习的偏最小二乘回归(partial least squares regression based on transfer subspace learning, TSL-PLSR)软测量方法. 采用非线性迭代偏最小二乘回归^[24](nonlinear iterative partial least squares, NIPALS)框架,将基于低秩稀疏表示的迁移子空间学习方法作为正则化项嵌

入在偏最小二乘寻找隐变量空间的目标函数中,在每次求解映射向量的过程中既保证隐变量对主导变量的可解释性,又实现历史工况与当前工况数据的分布对齐。

本文的主要贡献如下:

1) 通过主导变量与辅助变量相关性最大来寻找隐变量空间,使基于子空间学习的域适应学习算法可以作为正则化项嵌入在偏最小二乘回归器构建过程中,减少域适应过程对数据映射关系的破坏。

2) 通过基于低秩稀疏表示的迁移子空间学习方法保持了过程数据局部结构,且低秩约束使重构矩阵具有块状结构,更好地消除不同工况之间的差异。

1 问题描述与预备知识

沿用文献[9]的表示,将域定义为数据分布 $P \in R^m$ 和标签生成函数 $l: R^m \rightarrow R$ 的成对形式 $\langle P, l \rangle$. 记源域 $\mathcal{D}_s = \langle P, l \rangle$, 目标域 $\mathcal{D}_t = \langle Q, l \rangle$, 其中 $P \neq Q$. 假设有历史工况数据集 $\mathbf{X}_s \in R^{n_s \times m}$ 采样于分布 P , n_s 为样本数, m 为样本特征维度, 其具有连续标签 $\mathbf{Y}_s \in R^{n_s \times 1}$. 同时, 有目标域数据集 $\mathbf{X}_t \in R^{n_t \times m}$ 采样于分布 Q , n_t 为样本数. 由域的定义可知, 源域和目标域具有相同的标签生成函数 l , 源域模型在目标域中的预测性能取决于两者之间的分布差异, 其中 l 可由源域数据 \mathbf{X}_s 和标签 \mathbf{Y}_s 建模获得. 一个经典的无监督域适应回归任务为寻找一个映射 $h: R^m \rightarrow R$, 使得目标域上的预测损失期望最小, 即

$$E_Q[|h - l|] = \int_{R^m} |h - l| dQ. \quad (1)$$

其中: $h = f \circ g$ 表示 h 是 f 和 g 的复合函数, $g: R^m \rightarrow R^L$, $f: R^L \rightarrow R$, R^m 表示 m 维源空间, R^L 表示 L 维隐空间。

在软测量建模领域, 可将不同工况的数据认为属于不同的域. 本文将历史工况视为源域, 当前工况视为目标域, 辅助变量视为特征, 主导变量视为标签展开研究。

1.1 基于低秩稀疏表示的迁移子空间学习

迁移子空间学习方法旨在找到历史工况与当前工况的一个公共子空间, 使两者投影到该子空间后的数据分布相近. 令 \mathbf{W} 为公共子空间的投影矩阵, 假设在公共子空间内, 当前工况数据可以由历史工况数据线性表示, 即当前工况数据可以通过历史工况数据进行重构, 该问题可以表示为

$$\min_{\mathbf{W}, \mathbf{Z}} \|\mathbf{W}^T \mathbf{X}_t^T - \mathbf{W}^T \mathbf{X}_s^T \mathbf{Z}\|_F^2, \quad (2)$$

其中 $\mathbf{Z} \in R^{n_s \times n_t}$ 为重构矩阵. 若将不同工况的样本投影到公共子空间后具有相似分布, 则不同工况投

影后的样本被认为位于同一流形结构中, 每个样本可以由邻近样本线性表示. 考虑工业运行过程因催化剂失效、设备磨损等存在缓慢漂移问题, 单一工况下的过程数据也具有分布差异, 历史工况与当前工况样本之间往往跨越多个流形子空间. 对重构矩阵施加低秩约束, 可以使重构矩阵具有块状结构, 保证当前工况样本可以由不同流形子空间下的历史样本进行线性重构, 实现历史工况样本与当前工况样本的分段对齐. 另外, 对重构矩阵施加稀疏约束, 可以在重构过程中保持数据局部结构和几何性质. 因此, 对重构矩阵施加低秩稀疏约束, 并使用一个稀疏矩阵 \mathbf{E} 补偿噪声数据, 即

$$\begin{aligned} & \min_{\mathbf{W}, \mathbf{Z}, \mathbf{E}} \text{rank}(\mathbf{Z}) + \|\mathbf{Z}\|_1 + \|\mathbf{E}\|_1; \\ & \text{s.t. } \mathbf{W}^T \mathbf{X}_t^T = \mathbf{W}^T \mathbf{X}_s^T \mathbf{Z} + \mathbf{E}. \end{aligned} \quad (3)$$

矩阵的块状结构能够实现局部重构, 使公共子空间内历史工况样本和当前工况样本具有相似的几何性质^[25]. 由于秩最小优化问题是非凸的, 即式(3)是一个NP难问题, 当重构矩阵 \mathbf{Z} 的秩不是特别大时, 重构矩阵的核范数可用来替代求解低秩约束^[26]

$$\begin{aligned} & \min_{\mathbf{W}, \mathbf{Z}, \mathbf{E}} \|\mathbf{Z}\|_* + \|\mathbf{Z}\|_1 + \|\mathbf{E}\|_1; \\ & \text{s.t. } \mathbf{W}^T \mathbf{X}_t^T = \mathbf{W}^T \mathbf{X}_s^T \mathbf{Z} + \mathbf{E}. \end{aligned} \quad (4)$$

在此基础上, 文献[19]引入一个判别子空间学习函数来提高源域样本在公共子空间中的预测能力. 判别子空间学习函数采用结构风险最小化定义为

$$\phi(\mathbf{W}, \mathbf{Y}_s, \mathbf{X}_s) = \|\mathbf{X}_s \mathbf{W} - \mathbf{Y}_s\|_F^2 + \eta \|\mathbf{W}\|_F. \quad (5)$$

式(4)转化为

$$\begin{aligned} & \min_{\mathbf{W}, \mathbf{Z}, \mathbf{E}} \phi(\mathbf{W}, \mathbf{Y}_s, \mathbf{X}_s) + \|\mathbf{Z}\|_* + \alpha \|\mathbf{Z}\|_1 + \beta \|\mathbf{E}\|_1; \\ & \text{s.t. } \mathbf{W}^T \mathbf{X}_t^T = \mathbf{W}^T \mathbf{X}_s^T \mathbf{Z} + \mathbf{E}, \\ & \phi(\mathbf{W}, \mathbf{Y}_s, \mathbf{X}_s) = \|\mathbf{X}_s \mathbf{W} - \mathbf{Y}_s\|_F^2 + \eta \|\mathbf{W}\|_F. \end{aligned} \quad (6)$$

其中 α 、 β 、 η 均为正则化调整因子. 文献[19]同时对多类问题中的标签空间进行松弛处理, 为求解公共子空间的投影矩阵提供更高的自由度, 使其更好地权衡域适应子空间项与判别函数子空间项发挥的作用。

1.2 非线性迭代偏最小二乘

非线性迭代最小二乘是偏最小二乘回归的一种经典求解方法^[27]. 以历史工况数据为例建模, 一个典型的偏最小二乘回归模型的目标函数为

$$\max_{\mathbf{w}_i} \text{cov}(\mathbf{X}_s \mathbf{w}_i, \mathbf{Y}_s), \quad i = 1, 2, \dots, L. \quad (7)$$

其中: \mathbf{w}_i 为第 i 个隐变量对应的映射向量, L 为隐变量个数. 标准 NIPALS 采用最小二乘的方法求解隐空间中满足要求的各个映射向量, 包含 4 个基本步骤: 初始化、映射、回归和直交补. 本文旨在强调 NIPALS 方法每次迭代过程中求解映射向量的思路. 从式 (7) 出发, 采用最小二乘方法求解隐变量的映射向量目标式为

$$\begin{aligned} \min_w \|\mathbf{X}_s \mathbf{w}_i - \mathbf{Y}_s\|_F^2; \\ \text{s.t. } \|\mathbf{w}_i\| = 1, i = 1, 2, \dots, L. \end{aligned} \quad (8)$$

在单变量回归问题中, 经过投影后式 (8) 中的 F 范数优化问题会转化为 2 范数优化问题, 不易求导. 为方便计算, NIPALS 采取如下所示的目标函数求解映射向量:

$$\begin{aligned} \min_w \|\mathbf{X}_s - \mathbf{Y}_s \mathbf{w}_i^T\|_F^2; \\ \text{s.t. } \|\mathbf{w}_i\| = 1, i = 1, 2, \dots, L. \end{aligned} \quad (9)$$

经过理论推导可知, 式 (9) 为 (8) 的上界, 最小化式 (9) 等价于最小化 (8) 的上界. 若考虑设计一个可对齐当前工况与历史工况数据分布的域适应正则化项添加到式 (9), 确保添加之后可以求解出映射向量的最优解, 则意味着可以找到一个公共隐变量空间, 在该空间内, 历史工况投影后的数据不仅保持对主导变量的解释性, 而且与当前工况投影后的数据分布相近. 基于 NIPALS 的偏最小二乘回归模型为利用域适应方法解决回归问题提供了新的框架.

2 基于迁移子空间学习的偏最小二乘回归软测量方法

在基于低秩稀疏约束的迁移子空间学习方法中, 研究人员根据结构风险最小化构造判别子空间学习函数来解决多模态下的分类任务. 本文考虑利用目标式 (6) 解决跨工况软测量建模任务, 但该目标式存在一个潜在约束, 即公共子空间的维度等于标签的维度. 与分类任务不同, 回归任务标签的连续性导致无法对标签进行同样的 one-hot 重构, 这意味着分布对齐项直接发生在特征与标签的回归系数上, 易导致对回归系数的破坏和部分特征信息的损失. 为解决上述问题, 本文按照 NIPALS 算法的框架, 利用标签信息构建特征的公共隐变量空间, 使分布对齐项发生在寻找公共隐变量空间的过程中, 具体步骤如下.

step 1: 初始化. 将历史工况数据和当前工况数据进行去均值处理, 在不引起混淆的前提下, 处理后的数据仍用 \mathbf{X}_s 、 \mathbf{X}_t 、 \mathbf{Y}_s 表示. 遵循 NIPALS 算法的思想, 通过迭代以下步骤计算公共隐变量空间的每一维基

向量.

step 2: 寻找公共隐变量空间的映射向量. 将式 (4) 作为域适应正则化项添加到式 (9), 将 NIPALS 算法中求解隐变量空间映射矩阵的过程与式 (4) 求解公共子空间的过程相统一, 保证隐变量空间既具备对标签信息的解释能力, 又在该隐变量空间内, 目标工况数据可以被历史工况数据线性重构, 使目标工况样本与历史工况的样本位于同一流形中. 在流形学习中, 通常假设位于同一流形中的数据样本具有相似分布, 且邻近的样本具有相似的标签值. 求解隐变量空间中每个基向量的目标式重新定义为

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{w}_i, \mathbf{Z}, \mathbf{E}, \mathbf{Z}_1, \mathbf{Z}_2} \frac{1}{2} \|\mathbf{X}_s - \mathbf{Y}_s \mathbf{w}_i^T\|_F^2 + \|\mathbf{Z}_1\|_* + \\ \alpha \|\mathbf{Z}_2\|_1 + \beta \|\mathbf{E}\|_1. \\ \text{s.t. } \mathbf{w}_i^T \mathbf{X}_t^T = \mathbf{w}_i^T \mathbf{X}_s^T \mathbf{Z} + \mathbf{E}; \\ \mathbf{Z}_1 = \mathbf{Z}; \\ \mathbf{Z}_2 = \mathbf{Z}; \\ \mathbf{w}_i \mathbf{w}_i^T = \mathbf{I}, i = 1, 2, \dots, L. \end{aligned} \quad (10)$$

其中 $\mathbf{W} = [\mathbf{W}, \mathbf{w}_i]$. $\mathbf{w}_i \mathbf{w}_i^T = \mathbf{I}$ 是将式 (6) 转化为式 (10) 的保证, 这一约束条件将在迭代过程中利用范数标准化实现. 同时, 由于该约束条件的存在, 将式 (6) 转化为 (10) 的过程中删除了对映射向量的 F 范数约束, 给公共隐变量空间的每个基向量提供更高的自由度, 而不必担心其偏离可行域. 为方便求解, 引入 \mathbf{Z}_1 、 \mathbf{Z}_2 两个变量, 该问题可根据交替乘法进行求解^[9].

step 3: 回归. 分别计算历史工况和目标工况在公共隐变量空间的得分向量和负载向量, 有

$$\mathbf{t}_{si} = \mathbf{X}_s \mathbf{w}_i, \mathbf{t}_{ti} = \mathbf{X}_t \mathbf{w}_i; \quad (11)$$

$$\mathbf{c}_i = \mathbf{Y}_s^T \mathbf{t}_{si} / \mathbf{t}_{si}^T \mathbf{t}_{si}; \quad (12)$$

$$\mathbf{p}_{si} = \mathbf{X}_s^T \mathbf{t}_{si} / \mathbf{t}_{si}^T \mathbf{t}_{si}, \mathbf{p}_{ti} = \mathbf{X}_t^T \mathbf{t}_{ti} / \mathbf{t}_{ti}^T \mathbf{t}_{ti}. \quad (13)$$

其中: $\mathbf{T}_s = [\mathbf{T}_s, \mathbf{t}_{si}]$, $\mathbf{T}_t = [\mathbf{T}_t, \mathbf{t}_{ti}]$, $\mathbf{C} = [\mathbf{C}, \mathbf{c}_i]$, $\mathbf{P}_s = [\mathbf{P}_s, \mathbf{p}_{si}]$, $\mathbf{P}_t = [\mathbf{P}_t, \mathbf{p}_{ti}]$.

step 4: 直交补. 由式 (14) 和 (15) 分别计算历史工况和目标工况数据经过上述投影后的残差, 按照式 (10) 继续计算投影向量, 进行循环迭代, 直到循环 L 次停止. 有

$$\mathbf{X}_s = \mathbf{X}_s - \mathbf{t}_{si} \mathbf{p}_{si}^T, \mathbf{X}_t = \mathbf{X}_t - \mathbf{t}_{ti} \mathbf{p}_{ti}^T; \quad (14)$$

$$\mathbf{Y}_s = \mathbf{Y}_s - \mathbf{t}_{si} \mathbf{c}_i^T. \quad (15)$$

在迭代停止后, 可获得最终回归系数

$$\mathbf{B} = \mathbf{W} (\mathbf{P}_s^T \mathbf{W})^{-1} \mathbf{C}^T. \quad (16)$$

目标域标签的预测值为

$$\hat{\mathbf{Y}}_t = \mathbf{X}_t \mathbf{B} + \mathbf{E}[\mathbf{Y}_s]. \quad (17)$$

算法 1 基于迁移子空间学习的偏最小二乘回归算法.

输入: 历史工况数据 \mathbf{X}_s , 历史工况标签 \mathbf{Y}_s , 目标工况数据 \mathbf{X}_t , 隐空间维度 L ;

输出: 目标工况标签预测值 $\hat{\mathbf{Y}}_t$.

初始化: 去均值化 $\mathbf{X}_s = \mathbf{X}_s - E[\mathbf{X}_s]$, $\mathbf{X}_t = \mathbf{X}_t - E[\mathbf{X}_t]$, $\mathbf{Y}_s = \mathbf{Y}_s - E[\mathbf{Y}_s]$.

step 1: 由式(10)计算 \mathbf{w}_i 并对 \mathbf{w}_i 进行范数标准化计算 $\mathbf{w}_i = \mathbf{w}_i / \|\mathbf{w}_i\|$;

step 2: 由式(11)计算历史工况与目标工况的得分向量, 由式(12)和(13)计算历史工况数据、历史工况标签、目标工况数据的负载向量;

step 3: 由式(14)和(15)计算历史工况数据、目标工况数据以及历史工况标签的残差;

step 4: 由 $\mathbf{P}_s = [\mathbf{P}_s, \mathbf{p}_{si}]$, $\mathbf{T}_s = [\mathbf{T}_s, \mathbf{t}_i]$, $\mathbf{C} = [\mathbf{C}, \mathbf{c}_i]$, $\mathbf{W} = [\mathbf{W}, \mathbf{w}_i]$ 更新 \mathbf{P}_s , \mathbf{T}_s , \mathbf{C} , \mathbf{W} ;

step 5: 重复 L 次上述 step 1 ~ step 4;

step 6: 由式(16)和(17)计算回归系数 \mathbf{B} 以及目标工况标签的预测值 $\hat{\mathbf{Y}}_t$.

3 实验分析

3.1 评价指标

为了量化各种方法的预测性能, 采用均方根误差 (root mean square error, RMSE) 和测定系数 (coefficient of determination, R^2) 作为预测精度的评价标准, 其计算公式如下:

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\hat{y}_i - y_i)^2}, \quad (18)$$

$$R^2(\mathbf{y}, \hat{\mathbf{y}}) = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (\mathbf{y}_i - \hat{\mathbf{y}}_i)^2}{\sum_{i=1}^N (\mathbf{y}_i - \bar{\mathbf{y}})^2}. \quad (19)$$

其中: \hat{y}_i 和 y_i 分别为第 i 个样本的实际值与预测值, \bar{y} 为实际值的均值, N 为测试样本个数.

3.2 数值案例

本文首先通过随机给定均值向量和协方差矩阵 (半正定矩阵) 的方式构造两个服从不同分布的多元高斯分布函数, 并生成样本数为 50 的两个数据集, 分别记为 $\mathbf{X}_s \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}_s, \Sigma_s)$ 和 $\mathbf{X}_t \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}_t, \Sigma_t)$. 其中: $\boldsymbol{\mu}_s \neq \boldsymbol{\mu}_t$, $\Sigma_s \neq \Sigma_t$, 每个数据集有 6 个变量. 为模拟工况变化过程中输入输出之间的映射关系也会发生变化, 设计 \mathbf{X}_s 和 \mathbf{X}_t 对应的标签生成函数为

$$y_s = 0.8 \times \sum_{i=1}^6 x_s^i, \quad y_t = 1.2 \times \sum_{j=1}^6 x_t^j. \quad (20)$$

为验证所提出方法在该数值案例中的有效性, 选

取 PLSR 作为对比方法. 实验结果如图 1 所示, 相比较直接在源域中建立 PLSR 模型对目标域进行预测, 本文方法通过域适应正则化项对回归模型进行约束, 可以有效提高模型在目标域中的预测性能. 另外, 图 1 展示了 PLSR 与 TSL-PLSR 方法在目标域中预测值与真实值的对比曲线, 可以直观地看出, 所提方法的预测曲线更接近真实曲线.

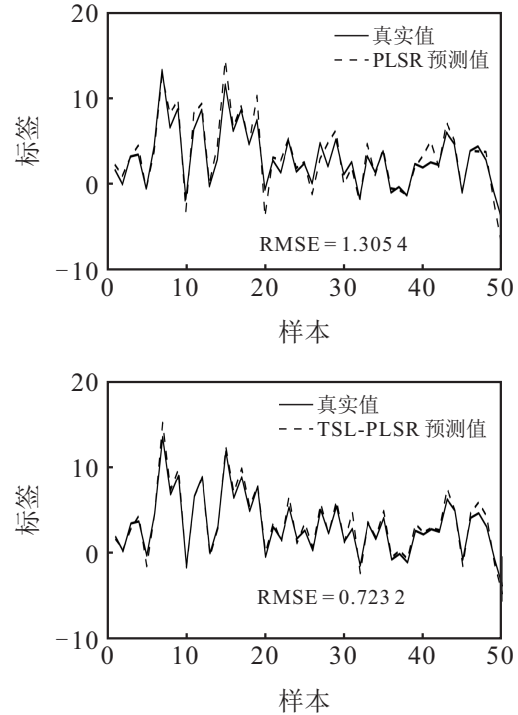


图 1 数值案例中的预测结果

将本文方法的域适应项作用于隐变量提取过程, 表 1 分别列出 PLSR 和 TSL-PLSR 方法在提取隐变量过程中, 源域与目标域得分向量在 3 种不同距离度量准则 (MMD、Wasserstein、Euclidean) 下的距离与对应目标域中模型的均方根误差. 由于该数值案例中, 源域和目标域分别通过两个多元高斯分布生成, 数据的每一维变量均服从高斯分布, 数据共线性较强. 当通过 PLSR 对源域数据建模时, 仅提取一维隐变量即可实现有效建模. 如表 1 所示, PLSR 方法在隐变量个数为 1 时, 模型在目标域中的预测误差最小. 与 PLSR 不同, 本文方法在提取隐变量的过程中, 期望降低源域与目标域之间数据分布的差异. 由表 1 可知, 在提取前 3 个隐变量的过程中, TSL-PLSR 方法中源域与目标域得分向量之间的距离显著小于 PLSR 方法中得分向量之间的距离. 同时, TSL-PLSR 方法中, 直到隐变量个数为 5 时, 模型在目标域中的预测性能达到最优, 进一步表明在利用域适应策略解决回归任务时, 仅降低数据分布差异而忽略数据对标签信息的解释性是不可行的.

表1 源域和目标域得分向量之间的分布距离

L	PLSR				TSL-PLSR			
	分布距离			RMSE	分布距离			RMSE
	MMD	Wasserstein	Euclidean		MMD	Wasserstein	Euclidean	
1	0.273 5	0.947 4	12.651 7	1.015 9	0.220 8	0.673	6.904 6	3.985 5
2	0.062	0.263 8	10.775 6	1.424 4	0.076 3	0.260 6	5.671 1	4.603 1
3	0.132 3	0.340 3	8.841 3	1.318 3	0.001 4	0.033 3	0.662	3.060 7
4	0.065 8	0.219	5.898 1	1.318 9	0.116 6	0.359 6	6.595	0.921 9
5	0.167 6	0.450 3	9.875 8	1.305 4	0.199 9	0.574 2	11.046 8	0.723 2

3.3 仿真实验

数值案例中的实验结果表明,本文方法可有效应对回归任务中训练数据与测试数据分布存在差异的问题.为表明本文方法在工业过程数据中的有效性和鲁棒性,选取两个已经公开的基准数据集与实验室所采集的湿式球磨机进行验证.另外,域适应方法有效的一个重要前提是历史工况与目标工况需保持过程机理的相似性.实验所选取的多工况数据集均是在同一过程下通过改变不同的控制变量模拟多工况过程所采集的,因此同一数据集中的不同工况之间具有过程机理的相似性,满足迁移的条件.

Corn数据集^[20]. Corn数据集是用于进行测量仪器模型校准的数据集,包含在3台不同的光谱仪上(M5、MP5和MP6)测量的80个样本的近红外光谱数据.根据光谱仪不同,可将不同光谱仪的测量过程视为不同的工况,将样本的近红外光谱特征作为输入,对相应光谱预测的样本中的4种含量(油、水、淀粉和蛋白质)进行建模预测,分别以M5、MP5和MP6为历史工况,剩余工况为当前工况,完成跨工况迁移实验.

TE数据集^[28]. 田纳西伊斯曼过程(Tennessee Eastman, TE)可以根据生产要求调整其操作点,模拟多工况生产过程. TE数据集根据过程主产物G/H比率不同,共有6种工作工况.选取工况2~4进行实验,每个工况包含实验样本1 001个,并选取TE过程中的22个过程测量变量作为输入,对TE过程中成分变量A(第29维变量)进行建模预测,以工况2、3、4为研究对象完成跨工况迁移实验.

球磨机数据集. 球磨机数据集是通过采集球磨机运行过程中轴承的振动信号,进一步进行傅立叶变换得到的实验数据,常用于预测磨机负荷,如料球比(material-ball volume ratio, MBVR)、物料浓度(pulp density, PD)和充填率(charge volume rate, CVR)等的预测.实验中通过改变介质充填率(media filling rate, MFR)模拟采集到3个不同工况的数据.本文将筒体的振动信号通过快速傅立叶变换后的特征作为输入,对磨机的关键负荷参数MBVR进行建模预测.

3.4 实验和参数设定

实验部分重点关注TSL-PLSR方法与其他域适应学习方法进行软测量建模的区别与联系.为表明回归器与域适应过程同时进行训练可以有效减少对原始数据中特征与标签之间映射关系的破坏,选择基于CORAL^[13]、GFK^[15]、JDOT^[16]三种无监督域适应方法进行对比,3种方法均采用先利用域适应方法进行分布对齐,然后建立PLSR回归模型的建模策略.以历史工况直接建立PLSR模型对当前工况进行预测的实验效果作为基准,当引入域适应学习后,若新模型的均方根误差增加,则认为出现负迁移现象.同时,选取DIPALS^[20]、TNN-LR-DAR^[23]方法进行对比实验,DIPALS在寻找隐变量空间的过程中对齐历史工况与当前工况中得分向量的方差,完成将域适应与回归器同时进行训练的尝试.TNN-LR-DAR方法在DIPALS基础上提出近邻拉普拉斯正则项,模型训练过程中保持数据结构信息的同时能够大幅度降低训练时间,满足工业软测量的实时性要求.

本文方法参数主要有正则化系数 α 、 β 以及隐变量空间维度 L .对于正则化参数采用交替更新的策略进行选择,给定 α 、 β 参数的范围为 $\{10^{-3}, 10^{-2}, 10^{-1}, \dots, 10^3\}$,通过交替更新法为每个数据集寻找最优参数集.考虑算法的计算成本,隐变量空间维度 $L = \max(L_s, L_t)$,其中 L_s 和 L_t 分别为历史工况与当前工况经过PCA保留97.5%信息对应的子空间维度.

3.5 实验结果分析

Corn数据集共有4个标签,分别对应油、水、淀粉和蛋白质的含量.图2为Corn数据中不同工况迁移实验下各类方法预测误差的箱线图.由图2可见,以PLSR方法作为基准,CORAL预测性能与其持平,GFK、JDOT尽管在个别工况中预测性能优于PLSR,但均出现了不同程度的负迁移情况;DIPALS、TNN-LR-DAR和TSL-PLSR的预测性能均优于PLSR.图2曲线表示预测误差中位数在不同方法下的变化趋势,可以更直观地看出,Corn数据集中本文方法较其他对比方法预测效果表现最好.

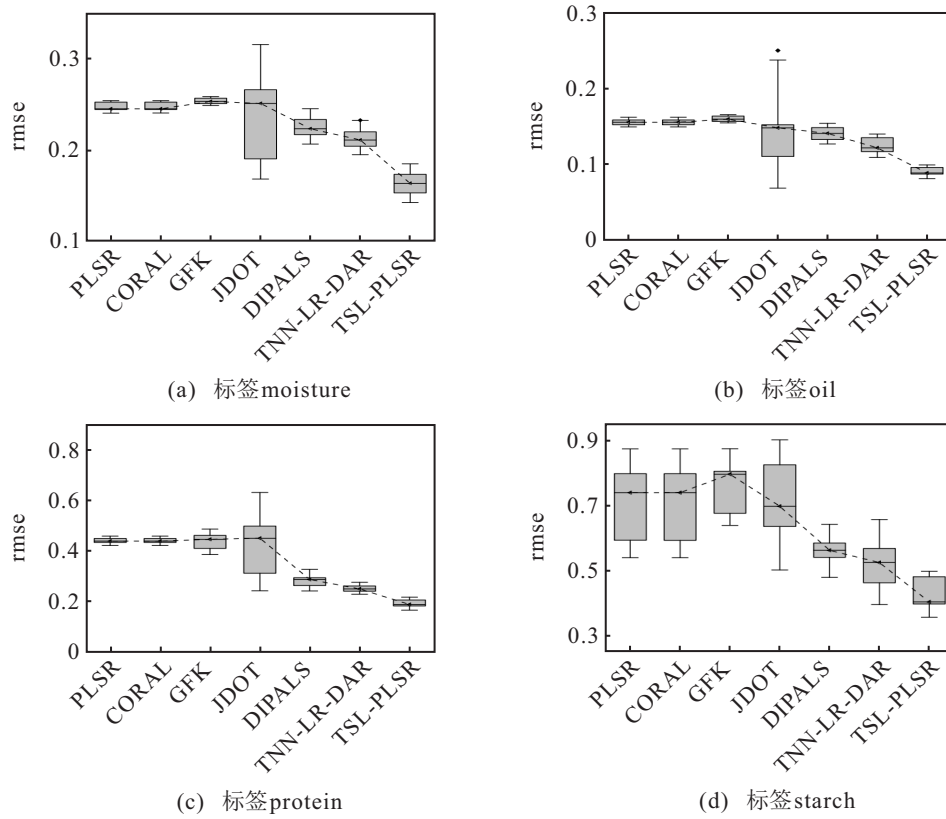


图 2 Corn数据集不同工况之间迁移实验结果箱型图

TE数据集中不同工况迁移实验的预测误差如表 2 所示. 从实验结果可以看出, 相比 PLSR, 对比方法 CORAL、GFK、JDOT 在跨工况预测中均出现负迁移的情况, 进一步表明传统无监督域适应方法在解决软测量任务时, 只考虑数据分布差异而忽略数据对主导变量的解释性, 会破坏原始数据中主导变量与辅助变量之间的映射关系, 进而出现负迁移情况. 相反, 对比方法 DIPALS、TNN-LR-DAR 和本文方法 TSL-PLSR 设计了不同的正则项用于约束偏最小二乘回归模型中提取隐变量的过程, 实现数据分布适配的同时保证了隐变量对主导变量的解释性. 从均方根误差看, 上述 3 种方法在该数据集中的预测性能均优于 PLSR, 且均无负迁移情况. TNN-LR-DAR 在 DIPALS 的基础上, 在域适应过程中添加数据结构保持正则项, 从表 2 可以看出, 其预测性能较 DIPALS 有所提升. 本文在该数据集下较其他对比方法表现最优, 验证了算法的

有效性.

球磨机数据集 3 个不同工况之间迁移的实验结果如表 3 所示, 以 PLSR 方法, 即不引入域适应策略的实验结果作为基准, CORAL 在该数据集中预测性能与 PLSR 接近; 而 GFK 和 JDOT 方法尽管在个别工况中预测性能有所提升, 但是仍存在负迁移情况. DIPALS、TNN-LR-DAR 和 TSL-PLSR 的预测性能均较 PLSR 有所提升. 图 3 展示了不同方法在球磨机数据下预测值与真实值的对比, 可以看出, 本文方法较其他对比方法预测曲线更接近真实曲线. 事实上, 因为本文方法通过交替乘子法的方式求解隐变量空间的每一维映射向量, 相比较 DIPALS 和 TNN-LR-DAR 通过拉格朗日乘子法获取映射向量的闭式解而言, 为映射向量的求解提供了更高的自由度, 有效提高了模型预测性能.

表 2 TE数据集不同工况之间迁移实验的预测误差(标签 29)

历史工况	待测工况	软测量算法						
		PLSR	CORAL	GFK	JDOT	DIPALS	TNN-LR-DAR	TSL-PLSR
工况 2	工况 3	0.533 5	0.555 0	0.582 7	0.675 8	0.526 4	0.476 3	0.440 1
	工况 4	0.786 3	0.799 8	0.805 9	0.815 2	0.757 2	0.659 0	0.536 6
工况 3	工况 2	0.539 6	0.546 5	0.546 4	0.769 6	0.524 7	0.510 2	0.456 6
	工况 4	0.557 7	0.928 3	0.541 4	0.962 6	0.509 2	0.496 6	0.430 2
工况 4	工况 2	0.608 9	0.737 3	0.768 9	0.705 2	0.550 2	0.546 4	0.519 7
	工况 3	0.457 3	0.876 7	0.555 0	0.770 9	0.435 6	0.414 5	0.398 4

表3 球磨机数据集不同工况之间迁移实验的预测误差(标签MBVR)

历史工况	待测工况	软测量算法						
		PLSR	CORAL	GFK	JDOT	DIPALS	TNN-LR-DAR	TSL-PLSR
工况1	工况2	0.3679	0.3678	0.3634	0.3582	0.3249	0.3386	0.2898
	工况3	0.8178	0.8158	0.7105	0.5327	0.7531	0.7917	0.5079
工况2	工况1	0.3701	0.3700	0.4010	0.4367	0.3728	0.3617	0.3534
	工况3	0.4161	0.4143	0.4083	0.2689	0.3863	0.3965	0.1956
工况3	工况1	0.6393	0.6392	0.6613	0.6272	0.6033	0.6028	0.6023
	工况2	0.3561	0.3556	0.3765	0.3914	0.3280	0.3278	0.3218

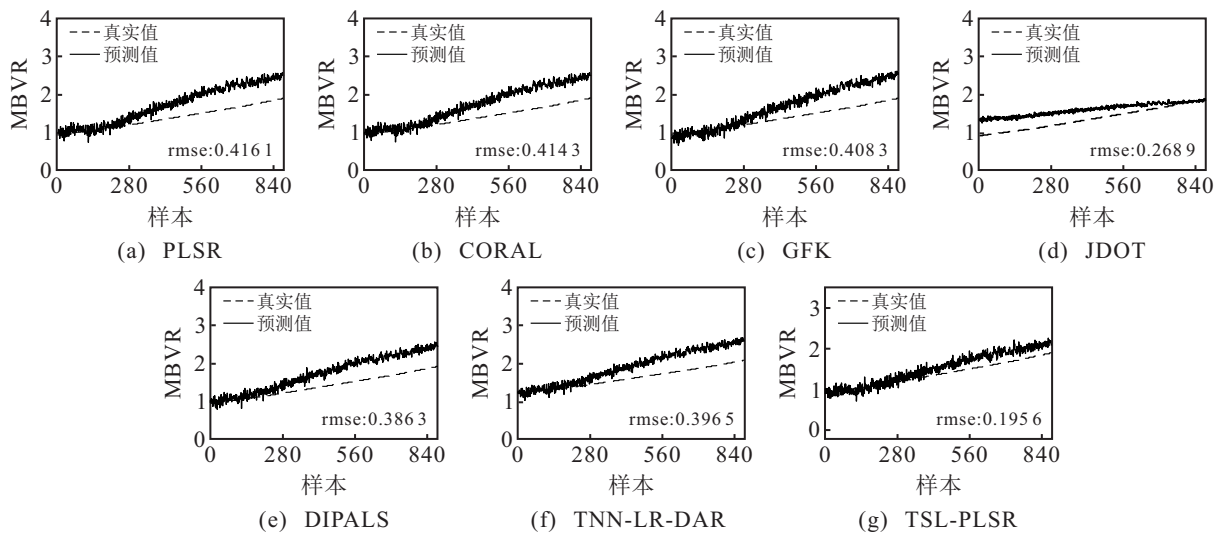


图3 球磨机数据集预测值与真实值对比曲线

4 结论

为了提高多工况条件下软测量模型的预测性能,本文提出了一种基于迁移子空间的偏最小二乘域适应回归软测量方法,将回归过程与数据分布适配统一在一个框架中,避免域适应过程对数据特征与标签之间原始映射关系的破坏.通过在数值案例与多工况数据集上的实验验证了所提出方法的有效性.但所提出方法是在偏最小二乘回归算法基础上进行的研究,仅能处理线性问题,而大部分工业过程是非线性的,引入核化技巧使算法具备处理非线性问题的能力是未来的一个研究方向.

参考文献(References)

- [1] Kadlec P, Gabrys B, Strandt S. Data-driven soft sensors in the process industry[J]. *Computers & Chemical Engineering*, 2009, 33(4): 795-814.
- [2] Zhao Y. A soft sensor based on orthogonal nonlinear principal component analysis[J]. *Asia-Pacific Journal of Chemical Engineering*, 2010, 13(3/4): 233-242.
- [3] Wang Z X, He Q P, Wang J. Comparison of variable selection methods for PLS-based soft sensor modeling[J]. *Journal of Process Control*, 2015, 26: 56-72.
- [4] 刘毅,王海清,李平.用于发酵过程在线建模的自适应局部最小二乘支持向量机回归方法[J].*化工学报*, 2008, 59(8): 2052-2057.
(Liu Y, Wang H Q, Li P. Adaptive local learning based least squares support vector regression with application to online modeling for fermentation processes[J]. *Journal of Chemical Industry and Engineering*, 2008, 59(8): 2052-2057.)
- [5] Gonzaga J C B, Meleiro L A C, Kiang C, et al. ANN-based soft-sensor for real-time process monitoring and control of an industrial polymerization process[J]. *Computers & Chemical Engineering*, 2009, 33(1): 43-49.
- [6] 刘强,秦泗钊.过程工业大数据建模研究展望[J].*自动化学报*, 2016, 42(2): 161-171.
(Liu Q, Qin S Z. Perspectives on big data modeling of process industries[J]. *Acta Automatica Sinica*, 2016, 42(2): 161-171.)
- [7] 张淑美,王福利,谭帅,等.多模态过程的全自动离线模态识别方法[J].*自动化学报*, 2016, 42(1): 60-80.
(Zhang S M, Wang F L, Tan S, et al. A fully automatic offline mode identification method for multi-mode processes[J]. *Acta Automatica Sinica*, 2016, 42(1): 60-80.)

- [8] Pan S J, Yang Q. A survey on transfer learning[J]. IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering, 2010, 22(10): 1345-1359.
- [9] Ben-David S, Blitzer J, Crammer K, et al. A theory of learning from different domains[J]. Machine Learning, 2010, 79(1/2): 151-175.
- [10] 范苍宁, 刘鹏, 肖婷, 等. 深度域适应综述: 一般情况与复杂情况[J]. 自动化学报, 2021, 47(3): 515-548. (Fan C N, Liu P, Xiao T, et al. A review of deep domain adaptation: General situation and complex situation[J]. Acta Automatica Sinica, 2021, 47(3): 515-548.)
- [11] Zhuang F Z, Qi Z Y, Duan K Y, et al. A comprehensive survey on transfer learning[J]. Proceedings of the IEEE, 2021, 109(1): 43-76.
- [12] Curreri F, Patanè L C, Xibilia M G. Soft sensor transferability: A survey[J]. Applied Sciences, 2021, 11(16): 7710.
- [13] Sun B C, Feng J S, Saenko K. Return of frustratingly easy domain adaptation[J]. Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence, 2016, 30(1): 10306.
- [14] Wang J, Chen Y, Feng W, et al. Transfer learning with dynamic distribution adaptation[J]. ACM Transactions on Intelligent Systems and Technology, 2020, 11(1): 1-25.
- [15] Gong B Q, Shi Y, Sha F, et al. Geodesic flow kernel for unsupervised domain adaptation[C]. IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition. Providence, 2012: 2066-2073.
- [16] Courty N, Flamary R, Habrard A, et al. Joint distribution optimal transportation for domain adaptation[J]. Advances in Neural Information Processing Systems, 2017, 30: 3730-3739.
- [17] Wang J D, Feng W J, Chen Y Q, et al. Visual domain adaptation with manifold embedded distribution alignment[C]. Proceedings of the 26th ACM International Conference on Multimedia. New York: ACM, 2018: 402-410.
- [18] Razzaghi P, Razzaghi P, Abbasi K. Transfer subspace learning via low-rank and discriminative reconstruction matrix[J]. Knowledge-Based Systems, 2019, 163: 174-185.
- [19] Xu Y, Fang X Z, Wu J, et al. Discriminative transfer subspace learning via low-rank and sparse representation[J]. IEEE Transactions on Image Processing, 2016, 25(2): 850-863.
- [20] Nikzad-Langerodi R, Zellinger W, Saminger-Platz S, et al. Domain adaptation for regression under Beer-Lambert's law[J]. Knowledge-Based Systems, 2020, 210: 106447.
- [21] Nikzad-Langerodi R, Zellinger W, Lughofer E, et al. Domain-invariant partial-least-squares regression[J]. Analytical Chemistry, 2018, 90(11): 6693-6701.
- [22] Jia R D, Zhang S L, You F Q. Transfer learning for end-product quality prediction of batch processes using domain-adaption joint-Y PLS[J]. Computers & Chemical Engineering, 2020, 140: 106943.
- [23] 徐志强, 任密峰, 程兰, 等. 基于时间近邻拉氏正则的多工况软测量回归[J]. 仪器仪表学报, 2021, 42(11): 279-287. (Xu Z Q, Ren M F, Cheng L, et al. Multi-conditions soft sensor regression based on the time-nearest neighbor Laplacian regularization[J]. Chinese Journal of Scientific Instrument, 2021, 42(11): 279-287.)
- [24] de Jong S. SIMPLS: An alternative approach to partial least squares regression[J]. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 1993, 18(3): 251-263.
- [25] Rene V, Ehsan E, Lin Z C, et al. Low-rank and sparse modeling for visual analysis[M]. Berlin: Springer, 2014: 94-98.
- [26] Lin Z C, Chen M M, Ma Y. The augmented Lagrange multiplier method for exact recovery of corrupted low-rank matrices[J/OL]. 2010, arXiv: 1009.5055.
- [27] Stott A E, Kanna S, Mandic D P, et al. An online NIPALS algorithm for Partial Least Squares[C]. IEEE International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing. New Orleans, 2017: 4177-4181.
- [28] Yuan X F, Ge Z Q, Song Z H. Soft sensor model development in multiphase/multimode processes based on Gaussian mixture regression[J]. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 2014, 138: 97-109.

作者简介

韩鹏东(1995—), 男, 硕士生, 从事软测量、迁移学习等研究, E-mail: 15735185965@163.com;

阎高伟(1970—), 男, 教授, 博士生导师, 从事机器学习与人工智能、软测量系统等研究, E-mail: yangaowei@tyut.edu.cn;

任密峰(1985—), 女, 副教授, 博士, 从事随机控制、深度学习等研究, E-mail: renmifeng@126.com;

程兰(1984—), 女, 副教授, 博士, 从事机器人协同视觉定位与建图等研究, E-mail: taolan_1983@126.com;

叶泽甫(1980—), 男, 工程师, 硕士, 从事煤洁净燃烧及固废利用的研究, E-mail: gmgjyjf@126.com.