

控制与决策

Control and Decision

基于ISTA-LSTM模型的间歇过程质量预测

赵小强, 脱奔奔, 惠永永, 蒋红梅

引用本文:

赵小强, 脱奔奔, 惠永永, 蒋红梅. 基于ISTA-LSTM模型的间歇过程质量预测[J]. *控制与决策*, 2023, 38(11): 3279–3289.

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.13195/j.kzyjc.2022.0897>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

一种基于深度学习的时间序列预测方法

A time series prediction method based on deep learning

控制与决策. 2021, 36(3): 645–652 <https://doi.org/10.13195/j.kzyjc.2019.0809>

基于批次图像化的卷积自编码故障监测方法

Fault detection of batch image-based convolutional autoencoder

控制与决策. 2021, 36(6): 1361–1367 <https://doi.org/10.13195/j.kzyjc.2019.1342>

基于卷积长短时记忆神经网络的城市轨道交通短时客流预测

Metro short-term traffic flow prediction with ConvLSTM

控制与决策. 2021, 36(11): 2760–2770 <https://doi.org/10.13195/j.kzyjc.2020.0501>

迁移学习引导的变源域长短时记忆网络建筑负荷预测

Load forecasting of buildings using LSTM based on transfer learning with variable source domain

控制与决策. 2021, 36(10): 2328–2338 <https://doi.org/10.13195/j.kzyjc.2020.0215>

基于偏态深度分类的高炉硅含量及波动预测

Prediction of blast furnace silicon content and fluctuation based on skewness depth classification

控制与决策. 2021, 36(2): 491–497 <https://doi.org/10.13195/j.kzyjc.2019.1116>

基于 ISTA-LSTM 模型的间歇过程质量预测

赵小强^{1,2,3†}, 脱奔奔¹, 惠永永^{1,2,3}, 蒋红梅^{1,2,3}

(1. 兰州理工大学 电气工程与信息工程学院, 兰州 730050; 2. 兰州理工大学 甘肃省工业过程先进控制
重点实验室, 兰州 730050; 3. 兰州理工大学 国家级电气与控制工程实验教学中心, 兰州 730050)

摘要: 为了考虑过程变量与质量变量的相关性, 解决间歇过程的时序性和动态特性导致预测精度不高的问题, 提出一种基于改进时空注意力-长短时记忆神经网络 (improved spatial and temporal attention long short-term memory, ISTA-LSTM) 的模型进行间歇过程质量预测. 首先, 对间歇过程的三维数据按变量方向展开成二维矩阵, 对二维数据采用 Min-max 方法归一化; 然后, 使用偏最小二乘 (PLS) 方法对原始数据降维, 提取数据的特征信息, 基于时间注意力和空间注意力构建编码-解码器结构的双层 LSTM 网络, 利用注意力机制自适应地学习神经网络参数, 关注每一个过程变量对质量变量的重要性并分配相应的注意值, 从而保留所有输入的必要信息, 采用带交叉验证的网格搜索算法对预测模型进行超参数寻优, 并建立预测模型; 最后, 在青霉素发酵仿真平台上进行实验验证, 实验结果验证了所提模型对间歇过程质量预测的可行性和有效性.

关键词: 间歇过程; 质量预测; 注意力机制; 长短时记忆网络; 网格搜索法; 偏最小二乘方法

中图分类号: TP277

文献标志码: A

DOI: 10.13195/j.kzyjc.2022.0897

引用格式: 赵小强, 脱奔奔, 惠永永, 等. 基于 ISTA-LSTM 模型的间歇过程质量预测 [J]. 控制与决策, 2023, 38(11): 3279-3289.

Batch process quality prediction based on ISTA-LSTM model

ZHAO Xiao-qiang^{1,2,3†}, TUO Ben-ben¹, HUI Yong-yong^{1,2,3}, JIANG Hong-mei^{1,2,3}

(1. College of Electrical and Information Engineering, Lanzhou University of Technology, Lanzhou 730050, China; 2. Gansu Key Laboratory of Advanced Control for Industrial Processes, Lanzhou University of Technology, Lanzhou 730050, China; 3. National Experimental Teaching Center of Electrical and Control Engineering, Lanzhou University of Technology, Lanzhou 730050, China)

Abstract: In order to consider the correlation between process variables and quality variables, and solve the problem that the timing and dynamic characteristics of batch process lead to low prediction accuracy, a model based on improved spatial and temporal attention long short-term memory (ISTA-LSTM) is proposed for batch process quality prediction. Firstly, the three-dimensional data of batch process is expanded into a two-dimensional matrix according to the variable direction, and the two-dimensional data is normalized by the Min-max method. Secondly, the partial least squares (PLS) method is used to reduce the dimension of the original data and extract the features of the data. Based on temporal attention and spatial attention, a double-layer LSTM network with encoder-decoder structure is constructed. To retain all the necessary input information, the neural network parameters are learned adaptively by the attention mechanism. We pay attention to the importance of each process variable to the quality variable and assign the corresponding attention value. Then, the grid search algorithm with cross verification is used to optimize the prediction model by hyperparameters, and the prediction model is established. Finally, the proposed model is verified on the penicillin fermentation simulation experimental platform. The experimental results show that the proposed model is feasible and effective for process quality prediction.

Keywords: batch process; quality prediction; attention mechanism; long short-term memory; grid search method; partial least squares method

0 引言

随着现代社会消费升级, 人们对多种类、小批量和高质量产品具有迫切的需求^[1], 间歇过程作为一种

小批量、高附加值的生产方式, 具有生产效率高和易操作的特点, 在化工、医药、食品饮料及半导体等领域中广泛应用^[2]. 为确保产品质量的一致性, 对间歇过

收稿日期: 2022-05-20; 录用日期: 2022-09-20.

基金项目: 国家自然科学基金项目 (62263021); 甘肃省科技计划项目 (21YF5GA072, 21JR7RA206).

†通讯作者. E-mail: xqzhao@lut.edu.cn.

程质量变量进行在线预测是间歇生产闭环控制的关键。目前,相当一部分工业产品需要在实验室进行质量检测,传统的质量检测方式具有时滞性和额外的原料浪费,不利于企业的长期发展,因此,这种方式不能及时准确地指导生产。为了提高产品质量和生产效益,质量预测成为专家学者研究的热点^[3-4]。

质量预测方法通过建立过程变量与质量变量之间的预测模型,可以间接完成对难以测量的变量进行质量预测,从而保证间歇过程的高质量生产^[5]。随着工业系统升级改造,大量的生产过程数据被采集记录,因此基于数据驱动的建模方法被广泛应用于质量变量的预测问题,其中偏最小二乘(partial least squares, PLS)^[6]算法是质量预测建模方法的典型代表,但这个算法假设数据具有线性特性,针对这个问题,文献[7]结合核函数方法改进偏最小二乘算法,提出了核偏最小二乘(kernel partial least squares, KPLS)算法,用于解决非线性问题;文献[8]提出了多向高斯混合模型-并发核熵潜结构投影(MGMM-CKEPLS)算法,将非线性数据映射到高维空间,利用各个模态的权值系数建立模型,实现在线质量预测;文献[9]以模糊支持向量机(FLS-SVM)为核心,将模糊隶属度引入到SVM,提出了小批量生产过程的质量预测模型。但这些方法难以处理现代工业生产中的海量数据,可能出现预测精度不高等问题。近年来,神经网络因其较强的非线性学习能力在工业生产的质量预测中得到广泛的应用。文献[10]将灰色理论与BP神经网络相结合构建工序质量预测方法,并用轴类零件加工过程数据验证了可行性;文献[11]利用深度置信网络(DBN)建立了风电功率的预测模型;文献[12]提出了一种可变加权堆叠自动编码器(VW-SAE)提取与输出相关的特征,提升了模型的预测效果。但是以上所述大多为静态建模方法,对生产数据的时序相关性考虑不够,而实际生产数据大多存在动态特性。循环神经网络(recurrent neural network, RNN)从时间维度展开,表示信息在时间维度从前向后的传递和积累,可以处理简单时间序列,文献[13]提出了基于改进RNN的预测模型,通过对比发现改进模型预测误差稳定,预测精度更高,但RNN对于长时间序列会出现梯度消失和梯度爆炸的问题。

为了解决这个问题,一种基于长短时记忆^[14]神经网络的质量预测方法被应用于预测研究,它通过加入记忆单元和门控结构实现了信息的长期记忆,解决了RNN在处理长时间序列出现的问题。文献[15]提

出了一种堆栈式长短时记忆神经网络和经验模态分解的方法,使用经验模式分解(EMD)算法分解负荷数据,建立家庭短期负荷的预测模型,具有较高精度。注意力机制在自适应学习神经网络参数时表现较好,可以为不同变量分配不同注意值,提升模型预测性能。文献[16]提出了基于注意力长短时记忆神经网络(LSTM)的多阶段发酵过程质量预测方法,通过两步仿射传播(AP)聚类算法进行阶段划分,建立集成质量预测模型,并验证了其方法的可靠性;文献[17]提出了一种基于注意力LSTM的网络辨识方法,在LSTM网络的基础上考虑输入变量与质量变量的相关性,为输入时间序列分配特征注意力,提升了LSTM网络的泛化能力。上述方法对于时间序列的预测效果较好,但未考虑间歇过程的多批次特性,在实际生产过程中,间歇过程具有按批次生产的特性,每个批次的原料种类和配量不完全相同,不能直接对其进行质量预测;另一方面,单一的时间注意力的预测模型容易丢失输入的有效信息,只关注了二维有效特征,预测精度有待提高。

针对上述问题,本文提出一种基于改进时空注意力-长短时记忆神经网络(ISTA-LSTM)的间歇过程质量预测模型。首先,对间歇过程的数据按变量方向展开,保留间歇过程数据的时序相关性;接着,利用PLS提取特征变量,充分挖掘过程数据的潜在信息,减小预测模型计算量和时滞,确保预测的及时性;然后,构建编码-解码器结构的双层LSTM网络,通过引入时间注意力和空间注意力自适应学习时间维隐藏的状态信息和变量间的空间相关性,采用网格搜索法对模型的超参数进行网格寻优并对量化评价指标计算均值,以保证训练预测模型评价的客观性;最后,通过实验验证所提出的模型的预测效果。

1 基本方法

1.1 LSTM神经网络

LSTM是RNN网络的一种变体结构,最初在1997年提出。该网络通过引入3个门控单元控制信息的流动,能较好解决输入序列长期依赖性导致的梯度消失和爆炸问题,在语音和文本等时间序列数据中表现出优异的性能。

图1是LSTM单元的内部结构^[18]。其中有3个输入:前一时刻单元状态 $C_{(t-1)}$ 、前一时刻隐含状态 $h_{(t-1)}$ 及当前时刻输入变量 $x_{(t)}$ 。两个输出分别为:当前时刻单元状态 $C_{(t)}$ 与当前时刻隐含状态 $h_{(t)}$,并同时作为下一时刻的单元输入 $h_{(t-1)}$ 。

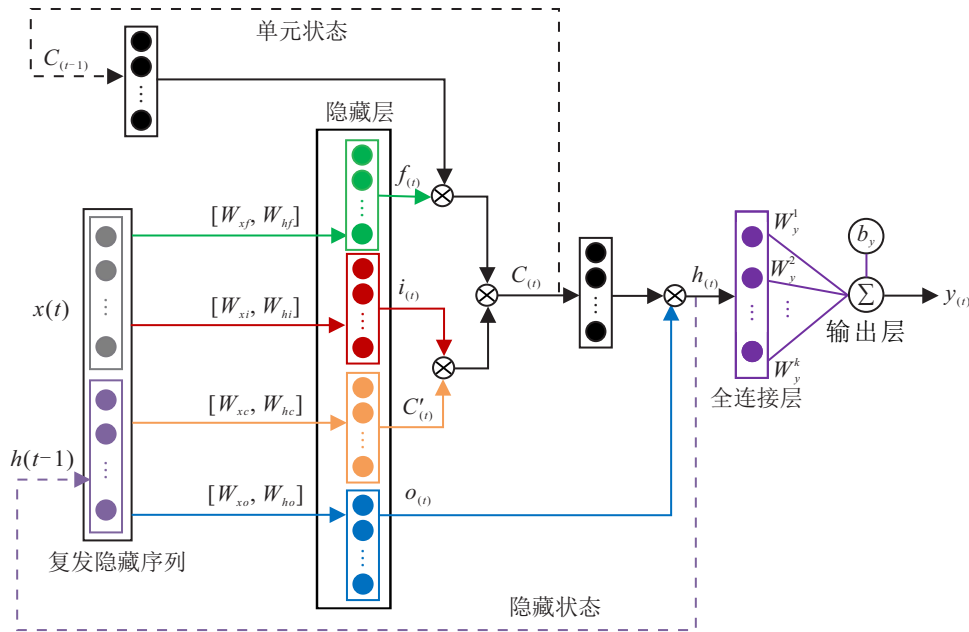


图 1 LSTM 单元结构原理

3 个控制门为输入门 $i_{(t)}$ 、遗忘门 $f_{(t)}$ 、输出门 $o_{(t)}$ ，输入门用来控制输入信息是否有效，遗忘门用来控制历史信息是否遗忘，输出门决定单元状态的特定输出，从而实现动态记忆，LSTM 网络的状态信息更新方程如下：

$$f_{(t)} = \sigma((W_{xf}x(t) + W_{hf}h_{(t-1)}) + b_f), \quad (1)$$

$$i_{(t)} = \sigma((W_{xi}x(t) + W_{hi}h_{(t-1)}) + b_i), \quad (2)$$

$$o_{(t)} = \sigma((W_{xo}x(t) + W_{ho}h_{(t-1)}) + b_o), \quad (3)$$

$$C'_{(t)} = \tanh((W_{xc}x(t) + W_{hc}h_{(t-1)}) + b_c), \quad (4)$$

$$C_{(t)} = i_{(t)} \otimes C'_{(t)} + f_{(t)} \otimes C_{(t-1)}, \quad (5)$$

$$h_{(t)} = o_{(t)} \otimes \tanh(C_{(t)}), \quad (6)$$

$$y_{(t)} = \sum_{i=1}^k W_y^i h_{(t)}^i + b_y. \quad (7)$$

其中： k 为全连接层的维度， $C'_{(t)}$ 、 W 、 b 分别为网络的中间状态、各控制门对应的权重矩阵和偏置向量， \otimes 为向量的点乘运算。 σ 、 \tanh 分别为 sigmoid 激活函数和 tanh 激活函数，其表达如下：

$$\sigma(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}}, \quad (8)$$

$$\tanh(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}}. \quad (9)$$

引入记忆存储单元和门控结构，使得 LSTM 单元能够保持历史信息的长时记忆和动态分析处理，构建数据内部与数据之间的时序关系，在序列数据的处理和长期生产过程数据的质量预测方面具有较好的性能。

1.2 注意力机制

随着信息流的增加，传统的编码器框架出现了记忆部分遗失问题。针对该问题，Bahdanau 等^[19]最早使用注意力机制 (attention) 实现编码-解码神经网络翻译，效果较优，现已成为提升神经网络性能的重要工具。这种思想借鉴人类的注意力方式，解决了传统预测模型预测速度慢、精度低的问题。

注意力机制计算输入与目标之间的相似性，预测模型可以通过关注这种相似性赋予各变量不同的注意值，从而关注更重要的输入，计算方法如下：

$$\text{similarity}(\text{input}, \text{target}) = f(\text{input} \cdot \text{target}), \quad (10)$$

$$w_i = \frac{\exp((\text{similarity})_i)}{\sum_{j=1} \exp((\text{similarity})_j)}. \quad (11)$$

其中： $f(\cdot)$ 为神经网络， t 为注意值的总数， w_i 为 $x_{(i)}$ ($i \in t$) 的注意力权重值，使用式 (11) 使得所有的注意值之和为 1。

2 基于 ISTA-LSTM 模型的间歇过程质量预测

2.1 间歇过程数据预处理

间歇过程具多批次生产特性，其生产数据除了时间和变量外，还有批次维度，即 $X(I \times J \times K)$ 。其中： I 为批次次数， J 为变量个数， K 为采样次数。因此需要将样本数据 $X(I \times J \times K)$ 采用按变量方向随批次增加顺序排列的方式，展开得到二维矩阵 $X(IK \times J)$ ，如图 2 所示。

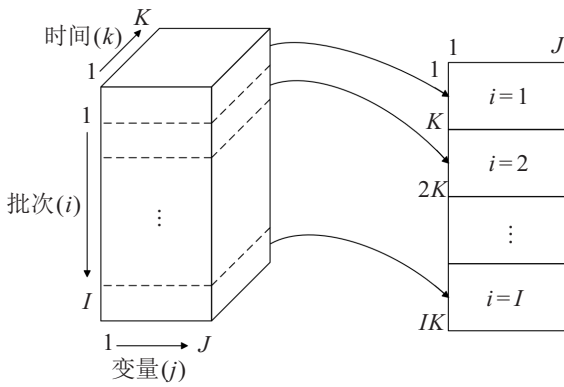


图2 三维数据展开方法

由于间歇过程数据变化明显,不同变量之间的量纲差异大,因而对于用按变量方向展开的数据按Min-max方法进行归一化处理,归一化可以减少训练时间,防止模型的激活函数出现过饱和状态,处理方法如下:

$$x'_i = \frac{x_i - x_{\min}}{x_{\max} - x_{\min}} \quad (12)$$

其中: x'_i 、 x_i 、 x_{\max} 、 x_{\min} 依次为归一化值、样本值、最

大值、最小值. 通过Min-max方法将展开的二维数据归一化,即可直接用于质量预测.

2.2 ISTA-LSTM预测模型

本文提出的ISTA-LSTM模型,以LSTM网络作为基本激活单元构建编码-解码器结构的模型框架,如图3所示. 首先通过编码层的偏最小二乘降维方法提取输入变量的特征信息,将该特征作为空间注意力模块的输入. 空间注意力模块通过搜索输入信息与空间之间的相关性,在每个时间步选取与质量预测相关的输入信息,并对该信息根据其重要程度做加权处理,得到新的样本数据. 将获得不同空间注意值的加权样本数据作为编码层LSTM网络的输入,学习其中隐藏的状态信息;然后将该隐藏状态信息作为时间注意机制的输入,在不同的时间步找出与质量预测相关的隐藏状态信息,使用时间注意值对其加权求和得到上下文向量,为最终预测建立基于时间的动态模型;最后以上下文向量作为解码层LSTM的输入,预测输出结果.

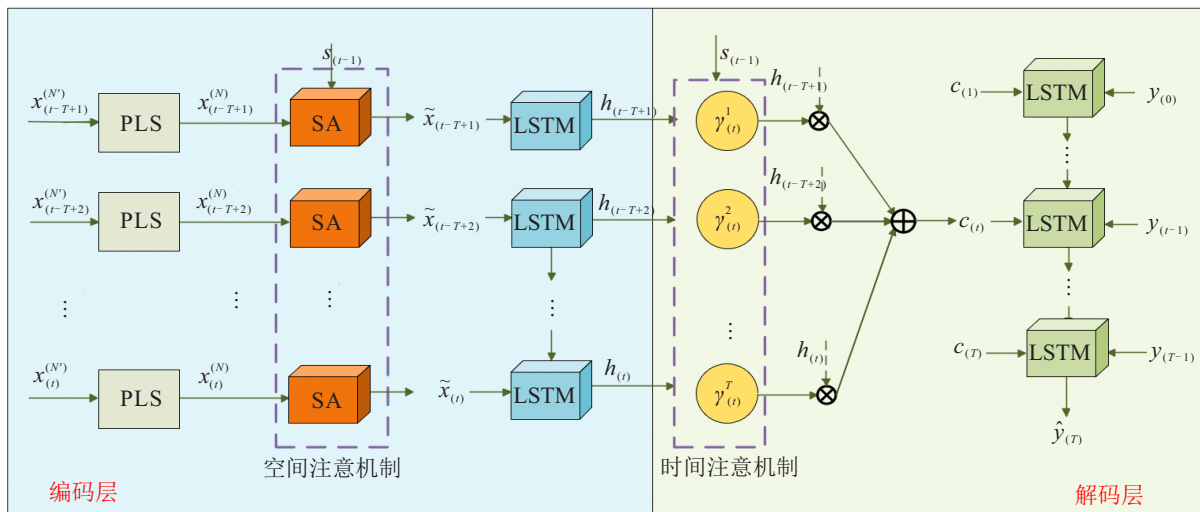


图3 ISTA-LSTM网络架构

2.2.1 基于PLS的降维模块

PLS方法用于解决间歇过程数据量较大的问题,即从数据 $x_{(t)}^{(N')}$ 中提取 N' 个主要特征, N' 为变量个数, N 为降维后的特征数,去掉剩余 $N' - N$ 个与质量变量相关性较低的特征信息,从而增强输入变量的关键信息,抑制干扰信息;另一方面,数据降维可减小预测过程的计算量,从而减小预测时间,实现更加即时的预测效果.

PLS建模时,若对生产过程进行 t 次采样,则过程变量矩阵为 $X = \{x_{(1)}^{N'}, x_{(2)}^{N'}, \dots, x_{(t)}^{N'}\}$, 质量变量为 $Y = \{y_{(1)}, y_{(2)}, \dots, y_{(t)}\}$. 先对过程变量矩阵 X 和质量

变量矩阵 Y 进行双线性分解,即

$$X = U\alpha^T + X_0, \quad (13)$$

$$Y = T\beta^T + Y_0. \quad (14)$$

其中: U 和 T 分别为 X 和 Y 的得分向量, α 和 β 分别为 X 和 Y 的加载向量, X_0 和 Y_0 分别为 X 和 Y 的残差矩阵^[20]. 然后通过反复提取 Y 和 T 的正交分量,使 $u_i \in U$ 和 $t_i \in T$ 的关联度最大化,即

$$\text{Cov}(u_i, t_i) = \sqrt{\text{Var}(u_i)\text{Var}(t_i)} \times r(u_i, t_i) \rightarrow \max. \quad (15)$$

使用拉格朗日乘子算法求解该极值问题,然后计

算投影方向 w_i , 即

$$w_i = X^T t / \|X^T y\|. \quad (16)$$

根据所求投影方向 w_i , 建立原始数据 X 和目标变量 Y 对潜在成分 u_i 的回归方程, 同时删除 u_i 表示的信息, 即

$$E_1 = X - t_1 p_1^T, \quad (17)$$

$$f_1 = y - t_1 q_1. \quad (18)$$

其中: p_1 和 q_1 为最小二乘回归的回归系数, E_1 和 f_1 为 X 和 Y 的残差, 这里包含了未被潜在成分 u_i 表示的信息. 当提取成分的数量达到最佳时, 基本消除了自变量中的冗余成分, 可用于表示原始数据的最大相关性. 图 3 中, 在采样时刻 t , $x_{(t)}^{(N')}$ 为数据预处理之后的输入变量, $x_{(t)}^{(N)}$ 为降维后的样本数据.

2.2.2 空间注意力模块

若每个样本有 N 个变量, 则滑动窗口中的 $x_{(t)} = \{x_{(t)}^1, x_{(t)}^2, \dots, x_{(t)}^N\}$, 编码层网络框架中, 空间注意力机制的结构原理如图 4 所示.

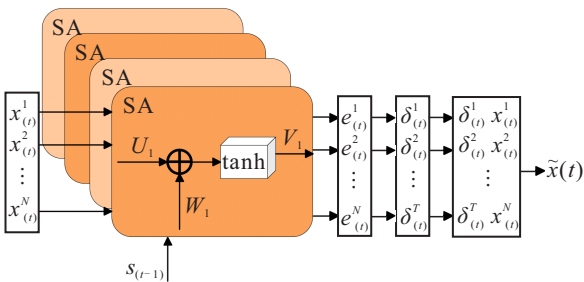


图 4 空间注意力模块原理

由于解码层 LSTM 网络的隐藏状态中隐含与质量预测相关的状态信息, 可以用前一时刻解码层的隐藏状态 $s_{(t-1)}$ 和输入 $x_{(t)}^n$ 之间的相似性描述输入与质量变量之间的关系. 采用编码-解码层这种双层的框架结构可以关注每个变量重要程度并给予不同空间注意权重, 不断更新空间注意值以便得到较好的预测效果. 空间注意值的更新方式如下:

$$e_{(t)}^n = V_1^n \tanh(U_1^n x_{(t)}^n + W_1^n s_{(t-1)} + b_1^n), \quad 1 \leq n \leq N. \quad (19)$$

$$\delta_{(t)}^n = \frac{|e_{(t)}^n|}{\sum_{j=1}^N |e_{(t)}^j|}, \quad 1 \leq n \leq N. \quad (20)$$

其中: $|\cdot|$ 为取绝对值, \tanh 为双曲线激活函数, 用来将自变量输入限制在 $[-1, 1]$ 之间. $e_{(t)}^n$ 为 t 时刻第 n 个变量对应的空间注意值, V_1^n 、 U_1^n 、 W_1^n 、 b_1^n 为通过学

习不断更新的空间注意力参数, $\delta_{(t)}^n$ 为空间注意力权重. 通过式 (20) 使得每个采样时刻输入的注意值之和为 1. 在整个模型中, 空间注意机制是一种感知器网络, 训练模型过程中采用时间反向传播 (BPTT) 算法学习优化注意力参数, 从而获得较好的感知效果.

样本的输入变量获得空间注意时, 加权后的样本如下:

$$\tilde{x}_{(t)} = (\delta_{(t)}^1 x_{(t)}^1, \delta_{(t)}^2 x_{(t)}^2, \dots, \delta_{(t)}^N x_{(t)}^N). \quad (21)$$

将加权后的样本数据 $\tilde{x}_{(t)}$ 作为编码层 LSTM 网络的输入, 在前向传递过程中使用 LSTM 网络从 $\tilde{x}_{(t)}$ 学习输入层的隐藏状态, 编码层 LSTM 网络内部各门控结构和存储单元的计算如下:

$$\tilde{f}_{(t)} = \sigma((W_{xf} \tilde{x}_{(t)} + W_{hf} h_{(t-1)}) + b_f), \quad (22)$$

$$\tilde{i}_{(t)} = \sigma((W_{xi} \tilde{x}_{(t)} + W_{hi} h_{(t-1)}) + b_i), \quad (23)$$

$$\tilde{o}_{(t)} = \sigma((W_{xo} \tilde{x}_{(t)} + W_{ho} h_{(t-1)}) + b_o), \quad (24)$$

$$\tilde{C}'_{(t)} = \tanh((W_{xc} \tilde{x}_{(t)} + W_{hc} h_{(t-1)}) + b_c), \quad (25)$$

$$\tilde{C}_{(t)} = \tilde{i}_{(t)} \otimes \tilde{C}'_{(t)} + \tilde{f}_{(t)} \otimes \tilde{C}_{(t-1)}, \quad (26)$$

$$\tilde{h}_{(t)} = \tilde{o}_{(t)} \otimes \tanh(\tilde{C}_{(t)}). \quad (27)$$

其中: $\tilde{C}_{(t)}$ 为相应的存储单元, \otimes 为两个向量的逐点乘法, W 和 b 为需要学习的参数. 编码层 LSTM 采用 Adam 算法^[21] 实现梯度优化, 引入空间注意力自适应识别与质量变量相关性较强的输入变量, 提升了原始 LSTM 网络的预测性能.

2.2.3 时间注意力模块

解码层将时间注意机制嵌入 LSTM 网络, 建立基于 LSTM 网络的动态预测模型, 用于预测质量变量 $\hat{y}_{(t)}$, 时间注意力模块原理如图 5 所示.

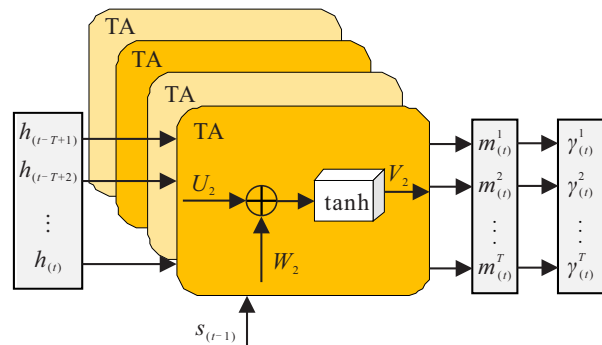


图 5 时间注意力模块原理

将编码层输出的隐藏状态作为解码层网络的输入, 通过参考前一时刻解码层的隐藏状态 $s_{(t-1)}$ 测量编码层 LSTM 输出的隐藏状态, 再计算每一个编码层隐藏状态对应的时间注意值, 在时刻 t 的隐藏状态注

意值计算式如下:

$$m_{(t)}^k = V_2^k \tanh(W_2^k s_{(t-1)} + U_2^k h_{(t-T+k)} + b_2^k), 1 \leq k \leq T; \quad (28)$$

$$\gamma_{(t)}^k = \frac{|m_{(t)}^k|}{\sum_{m=1}^T m_{(t)}^m}, 1 \leq k \leq T. \quad (29)$$

其中: $s_{(t-1)}$ 为前一时刻的解码层隐藏状态, V_2^k 、 W_2^k 、 U_2^k 和 b_2^k 为滑动窗口第 k 个样本需要学习的参数, $m_{(t)}^k$ 为时间步长 t 的滑动窗口中第 k 个编码器隐藏状态的注意值, $\gamma_{(t)}^k$ 为时间注意值, T 为滑动窗口的大小. 通过式 (29) 使得所有隐藏状态的注意值之和为 1. 对所有编码器隐藏状态计算基于时间注意值的加权和, 获得自适应上下文向量, 即

$$c_{(t)} = \sum_{k=1}^T h_{(t-T+k)} \gamma_{(t)}^k. \quad (30)$$

结合自适应上下文向量与给定的目标序列 $\{y_{(1)}, y_{(2)}, \dots, y_{(t-1)}\}$, 将自适应加权后的上下文向量作为解码层 LSTM 网络的输入, 即可更新解码层隐藏状态, 即

$$\tilde{s}_{(t-1)} = W_3 y_{(t-1)} + V_3 s_{(t-1)} + b_3, \quad (31)$$

$$s_{(t)} = f_l(c_{(t)}, \tilde{s}_{(t-1)}). \quad (32)$$

其中: W_3 和 V_3 为对应的权重矩阵, b_3 是偏置向量, $f(\cdot)$ 为一个 LSTM 单元. 最后计算预测质量变量 $\hat{y}_{(T)}$, 即

$$\hat{y}_{(T)} = F(y_{(1)}, y_{(2)}, \dots, y_{(T-1)}, x_{(1)}, x_{(2)}, \dots, x_{(T)}) = V(f_l([\tilde{s}_{(T-1)}; C_{(T)}])) + b_v. \quad (33)$$

其中: V 和 b_v 为权重矩阵和偏置项, $[\tilde{s}_{(T-1)}; C_{(T)}]$ 为 $T-1$ 时刻输出层隐藏状态和 T 时刻上下文向量的全连接处理. 解码层采用 BPTT 算法进行模型训练, 采用 Adam 算法实现梯度优化, 模型参数通过使用均方误差 (mean square error, MSE) 来学习, 将 MSE 作为预测模型的损失函数, 如下所示:

$$\text{MSE} = \frac{1}{N_t} \sum_{i=1}^{N_t} (y_i - \hat{y}_i)^2. \quad (34)$$

其中: N_t 为训练集样本总数, y_i 和 \hat{y}_i 分别为第 i 个采样点对应的真实值和预测值. MSE 值越小, 说明模型训练效果和稳定性越好.

2.3 ISTA-LSTM 超参数调优

本文利用带交叉验证的网格搜索法对网络进行优化改进. 网格搜索法 (grid search, GS)^[22] 是一种实

用的超参数寻优方法, 通过穷举搜索预先指定的模型参数寻找最优参数组合, 该方法具有简单高效、可并行计算等优点, 可以有效地解决超参数寻优的问题; 交叉验证 (cross validation, CV)^[23] 是一种将数据样本切割成较小样本的统计学方法, 常用于回归建模和评估预测模型对于其他数据集的泛化能力.

为了训练出更好的预测模型, 本文采用标准五折交叉验证方法, 将训练样本分为 5 等份互斥子集, 将其中 4 份作为训练集, 1 份作为验证集, 验证集的选取遍历 5 等份子训练样本, 然后对 5 次的验证结果求和取平均, 作为预测模型超参数调优的依据, 如图 6 所示.

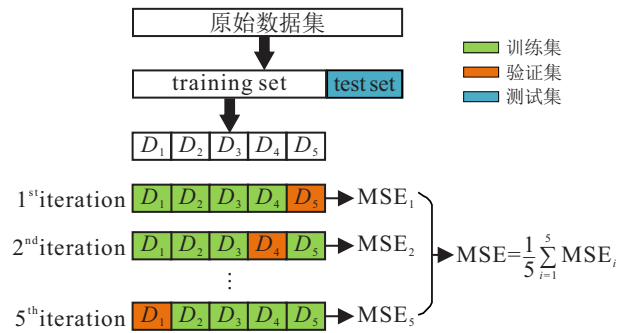


图6 标准五折交叉验证

ISTA-LSTM 模型的超参数寻优就是对 LSTM 网络超参数进行网格寻优, 两层 LSTM 网络的超参数包括编码层隐含层节点数 s_d 、解码层隐含层节点数 T_d 、初始学习率、最大迭代次数. 首先, 依据先验知识设置不同置信超参数, 生成待定超参数网格; 然后, 采用 GS 法对不同待定超参数组合寻优, 获得训练好的初始 ISTA-LSTM 网络, 具体步骤如下:

1) 数据划分: 先将数据进行预处理, 然后将数据集 $\phi = \{X, Y\}$ 划分为 10 等份互斥子集 $\phi = \{\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_{10}\}$, 训练集、验证集和测试集的比例设为 6 : 2 : 2, 先随机取两个子集作为测试集, 然后将剩余 8 个子集重新均分为 5 等份, 取 $\phi'_{tr} = \{\varphi'_1, \varphi'_2, \varphi'_3, \varphi'_4\}$ 为训练集, $\phi'_{va} = \{\varphi'_5\}$ 为验证集, 对每个子集验证一次, 共重复 5 次.

2) 模型验证: 使用训练集 ϕ_{tr} 和 STA-LSTM 算法获得网络模型, 用验证集 ϕ_{va} 检验模型性能, 采用平均绝对误差 MSE 作为评价指标.

3) 参数寻优: 进行标准五折交叉验证, 对 5 种结果求和取平均, 表达式如下:

$$\text{CV}_{(5)} = \frac{1}{5} \sum_{i=1}^5 \text{MSE}_i. \quad (35)$$

根据最小的 $\text{CV}_{(5)}$ 的结果可获得对应的最优超

参数.

2.4 质量预测策略

对本文所建模型进行质量预测的流程如图 7 所示.

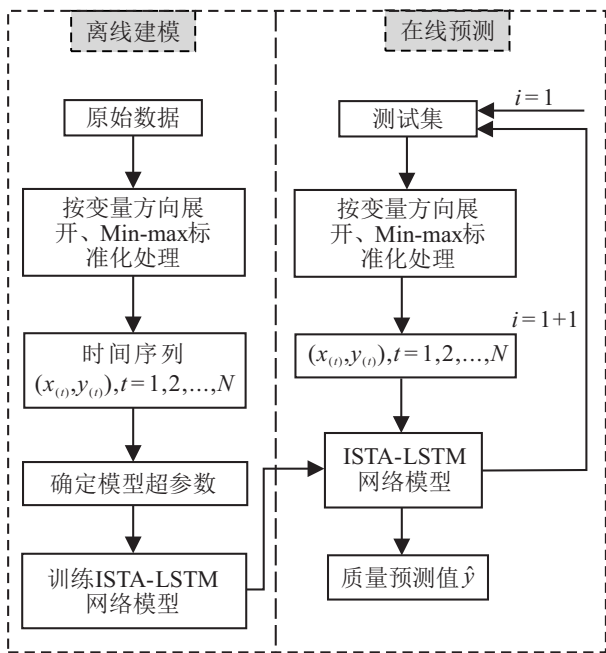


图 7 质量预测流程

首先通过历史数据完成离线模型训练, 然后使用同样的方法对测试集进行数据预处理, 最后进行质量变量的在线预测. 其中: $x_{(t)}$ 、 $y_{(t)}$ 为测试集中的输入变量和质量变量; i 为测试集中的样本总数, $0 < i < 1600$. 预测过程主要分为两部分: 离线建模和在线预测. 离线建模时采用历史数据学习网络参数, 得到训练好的预测模型, 然后使用预测模型进行实时预测.

2.4.1 离线建模

- 1) 对间歇过程的三维数据按变量方向展开成二维矩阵;
- 2) 采用 Min-max 方法对数据进行标准化, 建立模型框架;
- 3) 训练预测模型, 使用网格搜索法和交叉验证方法对模型进行超参数优化.

2.4.2 在线质量预测

1) 对测试集的所有数据样本按变量方向展开成二维矩阵, 使用与离线建模时同样的数据预处理方法进行数据标准化处理.

2) 将处理后的测试数据输入到网络模型, 进行质量预测和性能评价. 设置模型预测评价指标为均方根误差 (root mean square error, RMSE)、平均绝对误差 (mean absolute error, MAE) 和标准差 σ_y . RMSE 的范围为 $[0, +\infty]$, 该值越大表示误差越大, 但该指标对

异常值比较敏感, 可能出现评价不准确的现象, 因而设置 3 项评价指标. RMSE、MAE 和标准差计算公式如下:

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2}, \quad (36)$$

$$MAE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^n |y_i - \hat{y}_i|, \quad (37)$$

$$\sigma_y = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_{error} - \mu)^2}. \quad (38)$$

其中: y_i 为真实值, \hat{y}_i 为预测值, μ 为预测误差的平均值, N 为测试集的维度. RMSE 和 MAE 越小, 模型性能越好.

3 仿真实例验证与分析

3.1 实验平台

本文所用实验验证的软硬件参数: 处理器为 Ryzen 7 5800H, CPU 频率为 3.20 GHz, 机带 RAM 为 16.0 GB, 操作系统为 Windows 11, 深度学习框架为 Pytorch 1.11、Python 3.8、Anaconda 4.11.

3.2 青霉素发酵仿真实验

青霉素生产制备过程是一个典型的间歇过程, 具有非线性、时变性和不确定性等特征, 其产物青霉素在医疗方面具有不可替代的作用, 但其数据之间和数据内部存在多变量的相互耦合现象, 机理十分复杂, 重要参数难以实时在线测量, 因此建立精确的质量预测模型具有重要的意义^[24]. 青霉素发酵工艺流程如图 8 所示.

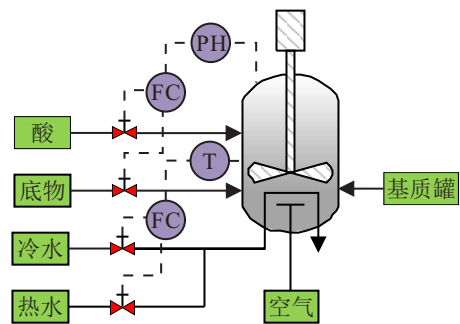


图 8 青霉素发酵工艺流程

为验证本文提出的改进 STA-LSTM 模型对工业过程质量预测的准确性和即时性, 本文以青霉素发酵过程为研究对象, 采用美国 Illinois 科技学院开发的 Pensim 2.0 仿真软件^[25]产生的过程数据进行实验验证, 设置反应时间为 400 h, 采样时间为 0.5 h, 设置不同但都属于正常参数范围的初始条件产生 10 批次正常工况数据, 从 18 个变量中选取 13 个变量做实验

证^[26],输入输出变量如表1所示.

表1 青霉素发酵的输入输出变量

输入变量	输出变量
通风速率/(L/h)	底物浓度/(g/L)
搅拌速率/(r/min)	菌体浓度/(g/L)
底物流加速率/(L/h)	青霉素浓度/(g/L)
补料温度/K	
溶解氧浓度/(mmol/L)	
反应器体积/L	
二氧化碳浓度/(mmol/L)	
pH值	
发酵罐温度/K	
产生热量/cal	

为验证 ISTA-LSTM 算法的降维效果,分别选质量变量为底物浓度、菌体浓度和青霉素浓度. 经过对青霉素发酵过程进行研究及数据预处理后,通过 PLS 方法提取特征,最终确定3个质量变量,分别保留6个相关性较大的输入变量作为模型的输入.

根据超参数优化结果确定模型结构,所建 ISTA-LSTM 模型结构和超参数设定如表2所示.

表2 模型基本结构及参数设定

参数名称	置信值	优化值
输入维度	6	6
LSTM 隐含层数	2	2
LSTM 隐含层节点数	256	256
输出维度	1	1
学习率	0.001	0.001
最大迭代次数	300	200
编码 LSTM 隐藏层节点数	20	40
解码 LSTM 隐藏层节点数	20	40

设置输入变量的重要性指标为权重系数,权重系数用来刻画输入变量与预测目标的相关性,以及通过回归关系对质量变量的解释能力,降维结果如图9所示.

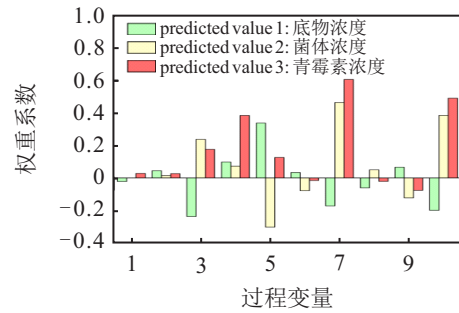


图9 PLS降维结果

以底物浓度为质量变量,对比降维前后模型的预测性能,表3给出了降维前后效果对比. 可以看出,降维前后预测模型的评价指标 RMSE 和 MAE 都明显减小,说明预测精度提高,训练时间减小了 11.028 s,预测效率有较大提升. 可以得知:本文所提预测模型可有效提取数据特征,对预测效果有很大的改善,可以减小模型训练时间,提升预测性能.

表3 降维前后效果对比

data set	RMSE	MAE	运行时间/s
原始数据	0.2366	0.1411	690.125
降维数据	0.0239	0.0113	679.097

为验证 ISTA-LSTM 模型的预测性能,本文以青霉素浓度为预测目标,将其与 LSTM、S-LSTM^[27]、GSTAE^[28]、STA-LSTM 和 VW-SAE 这5种质量预测模型在青霉素发酵过程中进行比较,6种预测模型的结构参数如表4所示.

S-LSTM 是一种有监督的 LSTM 软测量模型, VW-SAE 是一种可变量加权堆栈自编码器, GSTAE 网络为加入门控结构的目标相关自编码器,能够控制历史信息的有效性,将其作为对比模型展开进一步研究. 由于神经网络模型的训练结果存在随机性,运行结果会有所不同,为了确保验证结果的客观性,本文采用同样的模型参数和数据集对各算法进行 10 次仿真,取 10 次预测结果的平均值作为模型评价指标,结果如表5所示.

表4 各对比模型结构参数设定

参数名称	LSTM	S-LSTM	GSTAE	STA-LSTM	VW-SAE	ISTA-LSTM
输入维度	6	6	6	10	6	6
网络隐含层数	1	1	3	2	3	2
隐含层节点数	256	256	256	(20,20)	256	(40,40)
学习率	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001
最大迭代次数	200	200	200	300	200	200
输出维度	1	1	1	1	1	1

表 5 青霉素浓度各网络预测结果

网络模型	RMSE	MAE
LSTM	0.228 1	0.162 1
S-LSTM	0.271 7	0.247 1
GSTAE	0.093 3	0.067 9
STA-LSTM	0.077 5	0.053 1
VW-SAE	0.033 4	0.024 3
ISTA-LSTM	0.016 2	0.012 2

6 种网络的拟合曲线如图 10 所示, STA-LSTM 网络的预测精度高于 LSTM、S-LSTM 和 GSTAE 网络, 但在第 1 000 个采样点之后, VW-SAE 网络的预测性能更佳. 可以看出, 本文提出的 ISTA-LSTM 网络的预测性能最好, 其预测值在第 1 000 个采样点之前基本与实际值重合, 在此之后出现较稳定的拟合误差, 相比较 STA-LSTM 网络, 拟合误差更小, 验证了本文所提模型的预测效果.

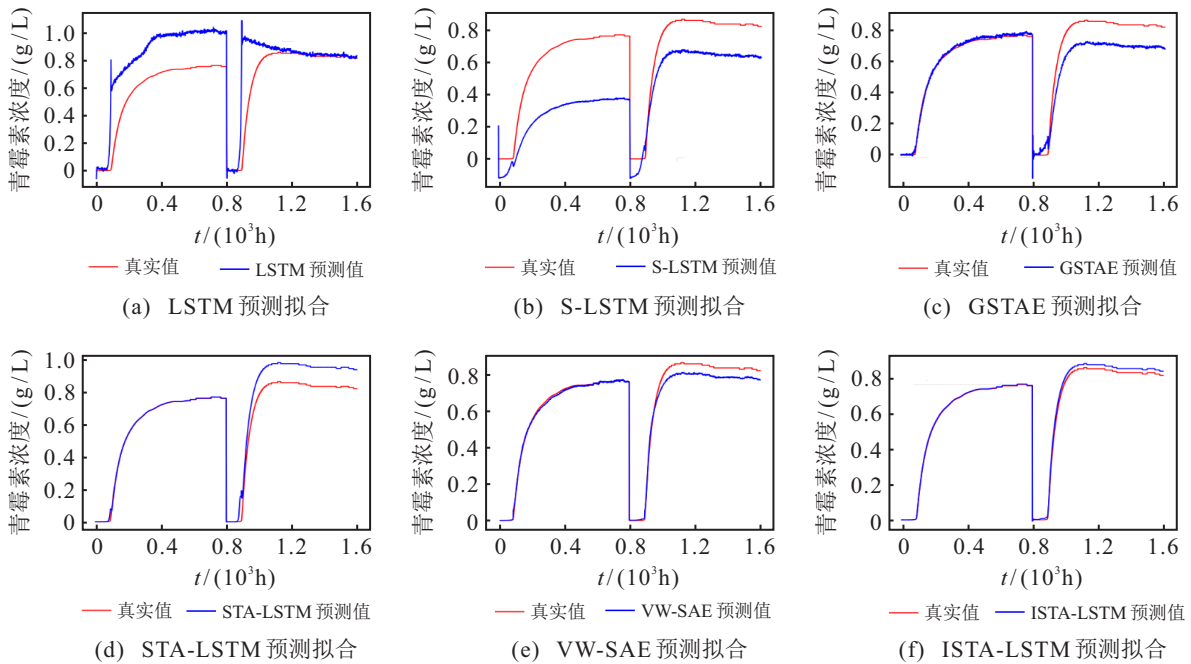


图 10 不同模型对青霉素浓度拟合

实验说明, 本文所提预测模型能更好地提取输入变量与质量变量之间的时序依赖关系, 而且将 LSTM 网络作为基本激活单元能够很好地处理历史数据中的相关信息.

为验证超参数优化网络的泛化能力, 以表 1 中菌体浓度为质量变量, 对超参数优化前后的预测性能进行对比, 图 11 给出了预测效果对比结果. 可以看出: 测试集数据共有 1 600 个样本, 在 100 次~800 次采样区间, 两种模型都能很好地拟合菌体浓度真实值, 改进算法的预测误差更小; 在第 850 次~900 次采样区间改进前后的预测效果都较好; 在第 850 次采样之后, 未进行超参数优化的模型出现时滞误差, 优化模型误差更小且基本拟合真实值.

图 11 说明超参数优化模型的预测效果更好, 该模型具有较好的泛化能力.

表 6 对比了改进前后的预测效果, 改进前后模型的 RMSE 和 MAE 都有明显减小, 说明预测精度有很大提升.

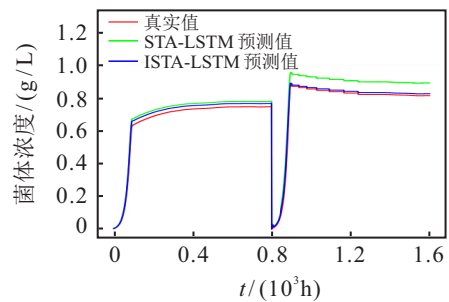


图 11 超参数优化前后预测拟合

表 6 优化前后模型性能

评价指标	STA-LSTM	ISTA-LSTM
RMSE	0.057 1	0.017 4
MAE	0.052 1	0.015 8
预测误差标准差	0.000 7	0.000 6

改进前后预测误差频率的分布直方图如图 12 所示, 可以看到误差分布符合高斯分布, 优化前标准差为 0.000 7, 优化后标准差降为 0.000 6, 说明改进模型的预测误差更加收敛, 预测精度更加准确. 所提模型

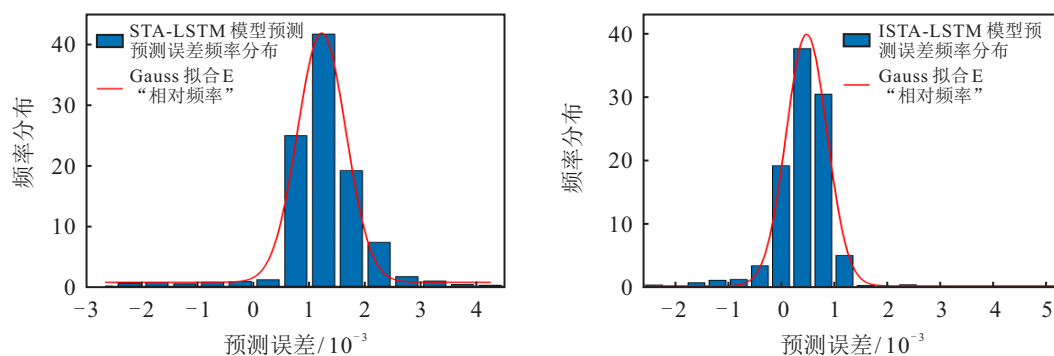


图12 优化前后预测误差频率分布直方图

对不同的质量变量都有较好的预测效果,具有良好的泛化性能。

4 结论

本文提出了一种基于改进时空注意力-长短期记忆神经网络的间歇过程动态质量预测模型,充分考虑了间歇过程的数据特性导致预测精度不高的问题,利用长短时记忆网络的记忆功能实现长时间序列的在线预测,提升了间歇过程质量预测的效果。首先,通过按变量方向展开方式将间歇过程的三维数据展开成二维矩阵,再使用Min-max标准化方法处理数据;然后,构建了基于时间和空间注意力的双层LSTM的预测模型,使用PLS方法提取数据特征,充分提取数据之间的相关信息,减少后期的模型训练时间,通过引入网格搜索和交叉验证法对STA-LSTM模型的超参数进行网格化寻优,确定了相对较好的参数组合,从而建立了离线模型;最后,通过青霉素发酵过程的历史数据,分别以青霉素浓度和菌体浓度为预测目标进行改进模型的性能验证,与4种模型做预测效果对比,结果表明改进预测模型具有较好的预测效果和泛化能力。实验验证了本文方法对间歇过程质量预测的可行性和有效性。

参考文献(References)

- [1] 王普,曹彩霞,高学金,等.基于扩展得分矩阵的多阶段间歇过程质量预测[J].高校化学工程学报,2019,33(3):664-671.
(Wang P, Cao C X, Gao X J, et al. Quality prediction of multi-stage batch process based on extended score matrix[J]. Journal of Chemical Engineering in Universities, 2019, 33(3): 664-671.)
- [2] 周新杰,王建林,艾兴聪,等.基于IDPC-RVM的多模态间歇过程质量变量在线预测[J].化工学报,2022,73(7):3120-3130.
(Zhou X J, Wang J L, Ai X C, et al. IDPC-RVM based online prediction of quality variables for multimode batch processes[J]. CIESC Journal, 2022, 73(7): 3120-3130.)
- [3] 赵斐,陆宁云,杨毅.基于工况识别的注塑过程产品质量预测方法[J].化工学报,2013,64(7):2526-2534.
(Zhao F, Lu N Y, Yang Y. Product quality prediction method for injection molding process based on operating mode recognition[J]. CIESC Journal, 2013, 64(7): 2526-2534.)
- [4] Kourtis T, MacGregor J F. Process analysis, monitoring and diagnosis, using multivariate projection methods[J]. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 1995, 28(1): 3-21.
- [5] Agarwal P, Aghaee M, Tamer M, et al. A novel unsupervised approach for batch process monitoring using deep learning[J]. Computers & Chemical Engineering, 2022, 159: 107694.
- [6] Cha J. Partial least squares[J]. Advanced Methods of Marketing Research, 1994, 407: 52-78.
- [7] Lindgren F, Geladi P, Wold S. The kernel algorithm for PLS[J]. Journal of Chemometrics, 1993, 7(1): 45-59.
- [8] 赵小强,周文伟,惠永永.基于核熵投影的CPLS间歇过程监测及质量预测[J].高校化学工程学报,2018,32(5):1186-1193.
(Zhao X Q, Zhou W W, Hui Y Y. Monitoring and quality prediction of CPLS batch process based on kernel entropy projection[J]. Journal of Chemical Engineering of Chinese Universities, 2018, 32(5): 1186-1193.)
- [9] 董华,杨世元,吴德会.基于模糊支持向量机的小批量生产质量智能预测方法[J].系统工程理论与实践,2007,27(3):98-104.
(Dong H, Yang S Y, Wu D H. Intelligent prediction method for small-batch producing quality based on fuzzy least square SVM[J]. Systems Engineering—Theory & Practice, 2007, 27(3): 98-104.)
- [10] 王秋明,刘科成,高慧颖.基于灰色理论与BP神经网络的工序质量预测研究[J].北京理工大学学报,2011,31(2):249-252.
(Wang Q M, Liu K C, Gao H Y. Research of procedure quality forecast based on the grey theory and BP neural networks[J]. Transactions of Beijing Institute of Technology, 2011, 31(2): 249-252.)

- [11] 袁桂丽, 吴振民, 刘骅骐, 等. 基于深度置信网络的短期风电功率预测[J]. 太阳能学报, 2022, 43(2): 451-457.
(Yuan G L, Wu Z M, Liu H Q, et al. Short-term wind power prediction based on deep belief network[J]. Acta Energeticae Solaris Sinica, 2022, 43(2): 451-457.)
- [12] Yuan X F, Huang B, Wang Y L, et al. Deep learning-based feature representation and its application for soft sensor modeling with variable-wise weighted SAE[J]. IEEE Transactions on Industrial Informatics, 2018, 14(7): 3235-3243.
- [13] 李泽龙, 杨春节, 刘文辉, 等. 基于LSTM-RNN模型的铁水硅含量预测[J]. 化工学报, 2018, 69(3): 992-997.
(Li Z L, Yang C J, Liu W H, et al. Research on hot metal Si-content prediction based on LSTM-RNN[J]. CIESC Journal, 2018, 69(3): 992-997.)
- [14] Hochreiter S, Schmidhuber J. Long short-term memory[J]. Neural Computation, 1997, 9(8): 1735-1780.
- [15] 刘建华, 李锦程, 杨龙月, 等. 基于EMD-SLSTM的家庭短期负荷预测[J]. 电力系统保护与控制, 2019, 47(6): 40-47.
(Liu J H, Li J C, Yang L Y, et al. Short-term household load forecasting based on EMD-SLSTM[J]. Power System Protection and Control, 2019, 47(6): 40-47.)
- [16] 高学金, 孟令军, 高慧慧. 基于注意力LSTM的多阶段发酵过程集成质量预测[J]. 控制与决策, 2022, 37(3): 616-624.
(Gao X J, Meng L J, Gao H H. Integrated quality prediction of multi-stage fermentation process based on attention LSTM[J]. Control and Decision, 2022, 37(3): 616-624.)
- [17] 王雅欣, 徐宝昌, 徐朝农, 等. 基于工厂数据的注意力LSTM网络辨识方法[J]. 化工学报, 2020, 71(12): 5664-5671.
(Wang Y X, Xu B C, Xu C N, et al. Attention LSTM network identification method based on factory data[J]. CIESC Journal, 2020, 71(12): 5664-5671.)
- [18] 姚国风, 李天杰, 刘兰芳, 等. 基于DAE和LSTM的居民用电负荷预测方法[J]. 控制工程, 2022, 29(11): 2048-2053.
(Yao G F, Li T J, Liu L F, et al. Residential power load forecasting method based on DAE and LSTM[J]. Control Engineering of China, 2022, 29(11): 2048-2053.)
- [19] Bahdanau D, Cho K, Bengio Y. Neural machine translation by jointly learning to align and translate[J/OL]. 2014, arXiv: 1409.0473.
- [20] Qiao J, Wang G, Li W, et al. A deep belief network with PLSR for nonlinear system modeling[J]. Neural Networks, 2018, 104: 68-79.
- [21] Kingma D P, Ba J. Adam: A method for stochastic optimization[J/OL]. 2014, arXiv: 1412.6980.
- [22] LaValle S M, Branicky M S. On the relationship between classical grid search and probabilistic roadmaps[J]. The International Journal of Robotics Research, 2004, 23(7/8): 673-692.
- [23] Racine J. Consistent cross-validators for dependent data: Hv-block cross-validation[J]. Journal of Econometrics, 2000, 99(1): 39-61.
- [24] 张雷, 张小刚, 陈华. 基于Gath-Geva算法和核极限学习机的多阶段间歇过程软测量[J]. 化工学报, 2018, 69(6): 2576-2585.
(Zhang L, Zhang X G, Chen H. Soft sensors for multi-stage batch processes based on Gath-Geva algorithm and kernel extreme learning machine[J]. CIESC Journal, 2018, 69(6): 2576-2585.)
- [25] Birol G, Ündey C, Cinar A. A modular simulation package for fed-batch fermentation: Penicillin production[J]. Computers & Chemical Engineering, 2002, 26(11): 1553-1565.
- [26] 姚红娟, 赵小强, 李炜, 等. 基于双权重多邻域保持嵌入的间歇过程故障检测[J]. 控制与决策, 2021, 36(12): 3023-3030.
(Yao H J, Zhao X Q, Li W, et al. Fault detection of batch process based on double weight and multiple neighborhoods preserving embedding[J]. Control and Decision, 2021, 36(12): 3023-3030.)
- [27] 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.
- [28] Sun Q Q, Ge Z Q. Gated stacked target-related autoencoder: A novel deep feature extraction and layerwise ensemble method for industrial soft sensor application[J]. IEEE Transactions on Cybernetics, 2022, 52(5): 3457-3468.

作者简介

赵小强(1969—), 男, 教授, 博士生导师, 从事故障诊断、图像处理与数据挖掘等研究, E-mail: xqzhao@lut.edu.cn;

脱奔奔(1996—), 男, 硕士生, 从事间歇过程的故障诊断与预测的研究, E-mail: 1830706394@qq.com;

惠永永(1992—), 男, 副教授, 博士, 从事故障诊断的研究, E-mail: hyylut@126.com;

蒋红梅(1976—), 女, 副教授, 博士, 从事故障诊断的研究, E-mail: jhm@lut.cn.