



知识嵌入式图神经网络在风机多元状态预测中的应用

刘颖^{1,2†}, 李阳光^{1,2†}, 瞿树晖^{3*}, 董纪昌^{1,2*}, 王竞凡⁴

1. 中国科学院大学经济与管理学院, 北京 100190, 中国

2. 中国科学院大数据挖掘与知识管理重点实验室, 北京 100190, 中国

3. School of Engineering, Stanford University, Palo Alto CA 94305, USA

4. School of Earth, Energy and Environmental Sciences, Stanford University, Palo Alto CA 94305, USA

* 通信作者. E-mail: shuhuiq@stanford.edu, jcdonglc@ucas.ac.cn

† 同等贡献

收稿日期: 2021–09–01; 修回日期: 2021–11–09; 接受日期: 2021–12–19; 网络出版日期: 2022–10–09

国家自然科学基金 (批准号: 71871210, 71850014, 71972174) 资助项目

摘要 风机状态预测是风电数字化和智能运维的关键环节. 深度学习由于在挖掘复杂高维数据隐藏关系上具有强大潜力, 逐渐被应用于风机状态预测中. 然而深度学习在实际运行中也存在着推理性和解释性差等局限性, 如何将领域知识与智能算法有效结合是智能运维的一个重要方向. 本文以多元时间序列图神经网络通用框架 (multivariate time series graph neural network, MT-GNN) 为基础, 提出了一个知识嵌入式图神经网络模型 (knowledge-embedded graph neural network, K-GNN), 对风机多元时间序列状态数据进行预测. 在该模型中, 本文将知识嵌入模块与图学习模块相结合, 通过嵌入相关、因果、专家经验 3 种知识矩阵, 更好地刻画出状态变量之间的关联关系. 结果显示, 在 3 种知识嵌入式 K-GNN 模型中, 嵌入了专家经验矩阵的图神经网络模型在预测上的表现更为出色, 说明领域知识能够有效提升图神经网络模型的泛化性能和可解释性. 本文的研究成果对于风电预测性维护技术的研发和推广具有参考意义.

关键词 风力发电机, 状态预测, 多元时间序列, 专家经验, 图神经网络

1 引言

风电作为实现“碳达峰、碳中和”目标的主力军, 其大规模应用能够降低全社会的用能成本, 实现更经济的能源转型. “十四五”规划纲要明确提出要加快发展非化石能源, 大力提升风能、光伏发电规模. 根据国家能源局的统计数据, 截至 2021 年 6 月底, 我国风电装机容量已达到 2.9 亿千瓦, 同比增

引用格式: 刘颖, 李阳光, 瞿树晖, 等. 知识嵌入式图神经网络在风机多元状态预测中的应用. 中国科学: 信息科学, 2022, 52: 1870–1882, doi: 10.1360/SSI-2021-0300
Liu Y, Li Y G, Qu S H, et al. Application of knowledge-embedded graph neural network for multivariate state prediction of wind turbines (in Chinese). Sci Sin Inform, 2022, 52: 1870–1882, doi: 10.1360/SSI-2021-0300

长 34.7%。在平均温升低于 2°C 的条件下, 2050 年我国风电装机总量预计能够达到 231.2 亿千瓦^[1]。随着电力系统低碳化转型的持续进行, 风电需求持续增长, 风力发电的数字化和智能运维越来越受到重视, 风机状态预测是风电设备预测性维护和故障诊断的关键环节, 及时准确地预测风机状态能够减少停机时间, 避免风机的灾难性损坏^[2], 是风电大规模稳定应用的基础, 对于我国“智慧风电”建设和“双碳”目标的实现具有重要意义。

随着数据采集和预测技术的演进, 风机状态预测领域涌现出了较为丰富的研究成果。从物理建模、统计预测, 到人工智能方法, 各种模型不断被提出, 在预测精度提升、数据隐藏关系挖掘等方面不断取得研究进展。

早期的研究主要集中在基于数值模拟的物理建模法, 通过模拟风电场内的风流和发电过程建立数学模型, 对风力发电功率等指标进行测算^[3,4], 该方法能够在有限的数据采集条件下提供方向性的判断, 但难以对大型风电机组多元状态进行精细化预测。技术的发展使得风力发电行业的数据日益完备, 以时间序列分析为代表的统计预测方法相比于物理建模法, 在预测精度和效果上得到一定的提升^[5~7], 但时间序列模型仅突出了时间因素的作用, 未充分考虑到气象等时间以外的重要因素, 以及状态变量相互关联带来的影响, 使预测精度的改善受到限制^[8]。

近年来, 人工智能和深度学习技术在挖掘复杂数据隐藏关系上表现了强大潜力, 逐渐被应用于风机状态预测中。风电厂通过设置多点传感器可以采集气象、风机多元状态的时间序列数据, 技术人员通过选择合适的模型可以挖掘出风机数据的复杂非线性关系, 对风机状态做出更为精准的预测, 从而有效支撑风电机组的智能运维。大量研究表明, 人工智能方法比传统的物理建模、统计方法表现出更好的预测性能, 例如循环神经网络 (recurrent neural network, RNN)^[9]、支持向量机 (support vector machine, SVM)^[10] 等。深度学习技术的发展进一步扩大了人工智能在预测中的优势, 很多研究针对基础模型进行了改进。比如为了解决 RNN 中的梯度消失问题, 相关研究提出一种长短期记忆网络模型 (long short-term memory, LSTM)^[11,12], LSTM 具有很强的记忆功能, 可以建立前后数据之间的相关性来提高预测的准确性。此外还有研究通过门控循环单元 (gated recurrent unit, GRU) 删除 LSTM 的某些冗余结构, 减少了模型的训练时间^[13]。还有一些研究通过分割风电序列数据或依据不同时段的预测性能对模型进行加权等方式的组合, 建立了混合模型, 取得了较好的预测效果^[14~16]。但上述人工智能模型没有对变量之间的依赖关系进行建模, 不能很好地提取出风机状态之间的关联, 也就无法对复杂多元风机状态做出高精度、可解释的预测。

而卷积神经网络具有很强的特征提取能力, 其中适用于处理时间序列数据的神经网络为时间卷积网络 (temporal convolution network, TCN), 该方法通过因果卷积和残差连接的扩展, 能够解决深度卷积模型在序列预测中的长期依赖和性能下降的问题, 与前面提到的几种模型相比, TCN 显示出更高的预测准确性^[17]。此外, 图神经网络 (graph neural network, GNN) 的优势在处理关系依赖方面也逐渐凸显。Wu 等^[18] 将 TCN 与 GNN 的优势相结合构造了一个 MT-GNN (multivariate time series graph neural network) 框架, 其中主要包含图结构学习、图卷积和时间卷积 3 个模块, 用于对多元时间序列数据进行建模, 并自动学习图结构。相比其他方法, 该 MT-GNN 框架在建立特征间关系和时间空间依赖关系方面贡献突出, 预测的准确性高于前面提到的几种方法。其中图结构学习模块学习变量之间隐藏的空间依赖关系, 将变量属性之类的外部知识整合到模型之中; 图卷积模块与时间卷积模块相互交错, 分别捕获空间和时间相关性。虽然 MT-GNN 在预测精度上有很大的提升, 但人工智能方法一直存在“黑箱”问题, 模型建立的过程中缺乏与领域知识的有效结合。

本文在多元时间序列通用图神经网络框架^[18]的基础上提出了知识嵌入式 K-GNN (knowledge-embedded graph neural network) 模型。通过获取相关、因果、专家经验 3 种知识矩阵, 将其加入图

卷积模块,使得图卷积层在知识和经验的指导下能更有效地发现数据中潜在的关联性.此外,不同于以往文献将单一的风电功率状态作为输出,本文以某风电企业真实的风机状态数据为研究样本,应用 K-GNN 模型对风机多元状态展开预测,从而提升风电机组智能运维的及时性和有效性.我们对比了当前常用的主流预测方法,包括 ARMA (auto-regressive moving average), RNN, LSTM, GRU, TCN, 以及时序预测框架 MT-GNN^[18]. 通过对比 3 个经典的预测效果评价指标 RSE (relative standard error), RAE (relative absolute error), Corr (correlation), 实证结果发现, MT-GNN 模型框架相对于以往预测模型具有很强的优越性;与此同时,嵌入了专家知识矩阵的图神经网络模型 K-GNN-3 几乎在各个测试集中表现出了比 MT-GNN 更好的预测精度.由此得出,我们提出的 K-GNN 方法能够更有效地刻画状态变量之间的关联关系,取得显著的预测效果改进.

本文的其余部分安排如下:第 2 节介绍预测问题的建模思路和模型框架;第 3 节详细介绍预测方法,包含引用的基础模型框架和本文研究所提出的创新性改进方法,在图结构获取上介绍了 3 种知识矩阵的获取,在图卷积模块介绍了专家经验的嵌入和图卷积的工作机理;第 4 节介绍实验设置,包括数据来源、数据的预处理方法、用于对比预测效果的基准模型和评价指标;第 5 节进行实验,将 K-GNN 方法与几种基准模型在预测准确性上进行评估对比;最后一节对本文研究内容进行了总结.

2 问题建模和方法框架

下面我们首先对风机状态预测问题进行建模,然后详细介绍本文所使用的知识嵌入式图神经网络的模型框架及核心环节.

2.1 风机状态预测问题建模

本研究提出的 K-GNN 方法将多元风机状态的时间序列数据作为输入,对包含风电功率的风机状态进行短期预测.设 $x_t \in \mathbb{R}^{\text{di}}$ 表示 di 维变量在当前时点 t 的值, K-GNN 模型的输入变量为历史风机状态数据 $X = \{x_t, x_{t-1}, x_{t-2}, \dots, x_{t-s} \mid s\}$. 我们对未来 p 时间点的状态进行预测 $\hat{y} = \{\hat{x}_{t+p} \mid p\}$, 使得预测状态和真实状态 $Y = \{x_{t+p} \mid p\}$ 的均方误差最小化

$$\text{minimize } L(\hat{y}, y) = \text{MSE}(\hat{y}, y), \quad (1)$$

其中, s 表示输入的时间序列的长度, p 表示输出时点距离当前时点 t 的时间跨度,单位均为 min. y 表示真实状态, \hat{y} 表示预测状态.

2.2 本文预测模型的框架

接下来简单介绍我们提出的知识嵌入式 K-GNN 模型,部分引用 Wu 等^[18]提出的多元时间序列数据通用图神经网络框架,整体上由图学习模块 (graph learning module)、知识获取模块 (knowledge module)、 m 个图卷积模块 (GC module)、 m 个时序卷积模块 (TC module) 和一个输出模块 (output module) 组成.图学习模块能够学习变量之间的关系,并将这种单向关系提取出来,将变量属性之类的外部知识融入到模型当中.对于序列内的空间和时间依赖性,则设计了一种混合跳跃传播层和一个扩张的起始层来捕获依赖.但由于自动学习结果无法结合领域内的专家知识,形成的关联矩阵并不能很好地呈现变量间的实际关系,为了进一步提升精度和泛化能力,我们通过利用专家经验的正则化作用降低 MT-GNN 的过拟合可能^[19,20],具体来说,我们人为提炼变量之间的关联作为知识矩阵.采用的知识矩阵包括:计算两变量间 Pearson 相关系数,学习因果关系,以及邀请风力发电领域内的专家

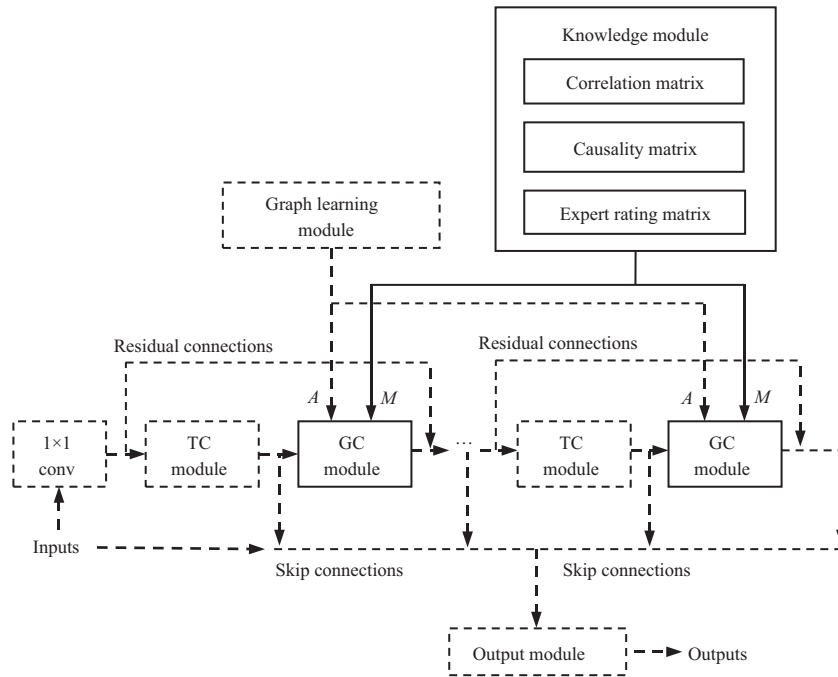


图 1 K-GNN 的框架

Figure 1 The framework of K-GNN

利用其经验为变量间相关性进行打分. 在图卷积模块中加入知识矩阵作为先验知识, 将变量间的知识矩阵和自动学习的图结构相结合, 加入图卷积模块的经验混合层, 使得图卷积层在专家经验的指导下, 结合数据驱动的方法, 从数据中发现被专家经验忽视的潜在的关联性, 从而提升最终预测效果. 具体的预测方法在第 3 节将有详细的说明.

3 预测方法介绍

该部分我们详细介绍预测方法, 包含引用的基础模型框架^[18]和本文研究所提出的知识嵌入方法. 引用部分参考图 1 中虚线所示, 这是我们进行知识嵌入和图卷积的模型背景, 主要包括图学习模块、时间卷积模块、跳跃连接层和输出层. 创新改进部分参考图 1 中实线所示, 我们将详细地介绍本文采用的 3 种知识矩阵的获取方法, 以及如何将知识矩阵加入到图卷积模块当中, 通过外部知识嵌入来优化 MT-GNN 模型.

3.1 图学习模块

图学习模块在图邻接矩阵中自动学习图结构, 从而获得时间序列数据之间潜在的关联信息. 多元时间序列的预测希望一个节点条件的变化带动另一个节点条件的变化, 避免对称或双向的距离度量, 所以设计该方法来学习单向关系.

$$M_1 = \tanh(\alpha E_1 W_1), \tag{2}$$

$$M_2 = \tanh(\alpha E_2 W_2), \tag{3}$$

$$B = \text{ReLU}(\tanh(\alpha(M_1 M_2^T - M_2 M_1^T))), \tag{4}$$

其中 E_1, E_2 表示随机初始化嵌入矩阵, 在训练过程中是通过学习得到的; W_1, W_2 为线性变换转置矩阵, 其对应原始数据特征变量的潜在特征. α 是一个预设的超参, 用来控制 $\tan h$ 激活函数的饱和速率. 式 (4) 通过学习 M_1, M_2 获得原始变量之间的关联矩阵 B , 利用减法项和 ReLU 激活函数对关联矩阵进行正则化, 如果 B_{vu} 为正, 则其对角线对应的 B_{vu} 值为零, 该方程使邻接矩阵呈现非对称性.

B_{vu} 值大小表示节点间关联性的强弱, 对 B 中的每一个节点 $B[i, :]$, 我们保留前 k 个最大的值表示连接性, 剩下的赋值为 0, 由此得到节点间的邻接矩阵 A .

3.2 知识获取模块

本文通过刻画 120 个风机状态变量 $x_t \in \mathbb{R}^n$ ($n = 120$) 之间的关系来获取知识, 通过计算各个变量的相关性、因果关系, 以及利用风力发电专家经验为变量的相关性打分, 得到 3 种知识矩阵 $M = \{M_R, M_C, M_E\}$.

(1) 相关矩阵 M_R . 第 1 类知识矩阵, 我们通过计算 Pearson 相关系数 r_{xy} 的方式获取. 通过计算变量间的两两相关性, 我们可以获得统计意义上的变量间结构关联. 这种方法计算简单、方便, 可以快速获取结果, 但同时该方法假设数据样本相互独立, 缺少变量间的时序关系.

$$r_{xy} = \frac{\sum_{i=1}^{di} (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^{di} (x_i - \bar{x})^2} \sqrt{\sum_{i=1}^{di} (y_i - \bar{y})^2}}, \quad (5)$$

其中, x 和 y 分别表示两个变量, \bar{x} 为变量 x 的均值, di 为状态变量个数. 由以上方程, 通过计算 120 个变量之间的两两相关性得到关联知识矩阵 M_R .

(2) 因果矩阵 M_C . 第 2 类知识矩阵, 我们应用因果学习的方式来获取变量之间的因果关系. 传统的数据统计方法更多关注变量之间的相关性, 实际上, 领域内的专家和实践者更加专注于发现变量之间的因果关系. 例如, 风速的加快是否会导致发电功率的上升等. 相关性并不意味着因果性, 因果性和相关性的主要区别在于判定自变量和因变量的变化是否是由于干扰因子导致的. 我们将变量之间的关系假定为一张网络图, 利用贝叶斯 (Bayes) 网络结构的因果模型, 将变量建模为网络中的节点, 因果建模为网络中的边. 我们利用基于分数的结构学习方式计算得到能够最好地解释数据的网络结构图.

为得到最优的网络结构, 以最大化模型的对数似然函数 (LL) 为目标:

$$\text{maximize LL}(\theta; D) = \prod_{d \in D} P(d | \theta), \quad (6)$$

其中, θ 为拟合的贝叶斯图网络模型的参数, D 为数据集, d 为数据点. 理论上, 在这种最大对数似然函数的目标下, 全联网会获取最高的对数似然值, 造成过度拟合. 因此我们引入一个正则项来惩罚过多的网络参数, 防止过度拟合.

$$\text{maximize LL}(\theta; D) - \frac{\log(a)}{2} \text{dim}(\theta). \quad (7)$$

以上方程又称为贝叶斯信息准则 (Bayesian information criterion, BIC) 分数, 其中 a 是拟合的贝叶斯网络中选用节点的数量. 这里, 我们利用爬山搜索法来学习网络结构, 更多信息请参照文献 [21]. 我们将学习到的贝叶斯网络模型参数 θ 转化为因果关系矩阵 M_C , 有因果关系的单元为 1, 否则为 0.

(3) 专家经验矩阵 M_E . 在生产运营等环节中, 我们经常利用包含大量知识和经验的程序系统来协助推理和判断, 模拟专家的经验决策过程, 解决特定领域内的问题. 专家经验指的是人类专家根据工作经验提供的领域内知识, 这种类似于人类领域专家的思维过程能够指导模型或系统的工作, 从而更加合理、高效地解决一些人类难以直接处理的复杂问题. 专家经验可以极大地减少解决复杂问题的推

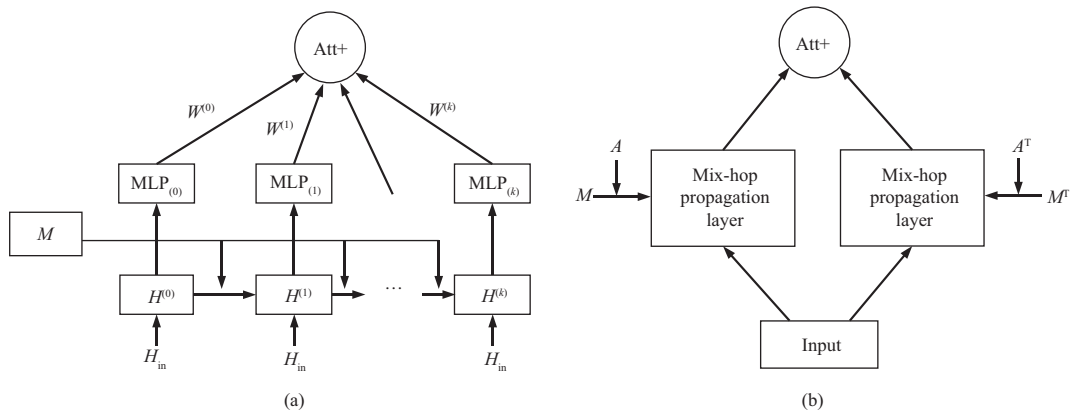


图 2 (a) 混合跳跃传播层和 (b) 图卷积模块
 Figure 2 (a) Mix-hop propagation layer and (b) graph convolution module

理空间、搜索空间, 以及初始化空间, 从而使得复杂问题的解决成为可能. 因此收集和利用领域知识和专家经验将有助于提升系统的启发性、透明性, 以及灵活性, 从而提升系统的辅助预测、维护的效率, 使系统的决策结果更容易被理解和信赖.

专家经验的形式多种多样, 主要包括: 陈述性知识, 对概念事物和对象的表达; 结构知识, 对概念、事物、对象之间的关联性的描述; 程序知识, 关于概念和规则的应用; 元知识, 定义知识的知识; 启发性知识, 主题内的特定知识. 本文是关于数据驱动方法的研究, 因此获取和应用的专家经验属于结构性知识, 进一步来说, 本文利用结构性知识研究各个输入变量之间的相互关系、因果关系, 以及依赖性. 通过将结构性知识输入至图网络之中, 分解变量中的关联性, 解耦变量之间的正交性, 来提高变量的信息利用率, 从而达到快速提升网络学习速度和预测精度的目的. 同时由于专家经验能够对关系进行显式表达, 因此我们可以揭开复杂神经网络自动学习到的部分复杂知识的面纱, 这使得进一步解读模型学习到的知识结构成为可能.

第 3 类知识矩阵, 我们将关联性分成 3 个等级: 无关联 (0), 有一定关联 (0.5), 有强关联 (1). 通过专家访谈, 基于风电领域专家经验, 为 120 组变量之间的关联度进行打分, 获取变量间的关联矩阵 M_E .

3.3 图卷积模块

图卷积模块在本文图神经网络中的主要作用是处理节点之间的相互依赖关系, 融合节点 (变量) 和强关联节点的相互信息, 其输入来自上一层时间卷积的输出. 在该模块中, 可以通过数据驱动的方式学习出变量之间的相互关系. 我们在该层加入 3.2 小节介绍的知识矩阵, 指导图卷积模块更好地学习变量之间的相互关系. 两个混合跳跃传播层是图卷积模块的主要结构, 混合跳跃传播层处理每个节点变量的流入信息, 并且在经验混合时加入知识矩阵, 通过对混合跳跃传播层和经验混合层的输出进行注意力相加来获取最终的信息流出. 图卷积模块再将混合跳跃传播层输出的信息经过关注层进行融合. 图 2 显示了融合知识矩阵的图卷积模块 (GC module) 和混合跳跃传播层 (mix-hop).

如图 2(a) 显示, 给定一个图邻接矩阵 A , 混合跳跃传播层用来处理临近特征节点上的信息传递. 混合跳跃传播层包括信息传递、信息选择输出两个步骤. 给定图结构, 信息传递步骤输入前一步骤的隐藏节点信息 (潜在特征向量) H^{k-1} 和原始状态信息 H_{in} , 递归地向下一步骤传递经过处理的节点信息 H^k . 在图卷积模块中, 随着传递层数量 K 达到一定多的数目 (K 是一个很大的值), 节点隐藏状

态会收敛到一个点. 因此, 在传递过程中除了传递经过处理的信息 $\tilde{A}H^{(k-1)}$, 同时保留了一部分节点的原始状态 H_{in} , 因此传递的节点状态既可以保留局部性, 又可以探索更深的邻域. 信息传递步骤定义如下:

$$H^{(k)} = \beta H_{in} + (1 - \beta)\tilde{A}H^{(k-1)}, \quad (8)$$

其中, H_{in} 是原始输入状态, $\beta \in [0, 1]$ 是一个预设的超参数, 它控制保留根节点原始状态 H_{in} 和传递的信息向量 $H^{(k-1)}$ 的对应比率, 我们经验化地将 β 的初始值设定为 0.3, 通过反向传播逐渐学习优化. $\tilde{A} = \tilde{D}^{-1}(A + I)$, A 是图结构学习得到的邻接矩阵, I 是单位矩阵, $\tilde{D}_{ii} = 1 + \sum_j A_{ij}$, D 为对角矩阵, $k \in [1, K]$ 是当前传递层, K 是总共迭代的次数.

相较于把所有的隐藏节点信息直接相加, 信息选择输出层引入信息关注矩阵 $W^{(k)}$ 关注主要隐藏节点的信息, 滤除在每一步骤产生的无用信息, 保留最重要信息. 在图卷积模块初始状态或者变量间没有关联性的情况下, 直接相加所有隐藏节点信息只会向下一层输出无用的噪声. 其中参数矩阵 $W^{(k)}$ 为图卷积模块中通过反向传播学习得到的关注矩阵. 当给定隐藏节点信息相互独立时, 仍然可以通过对 $W^{(k)}$ 进行相应调整来保留原始节点 $k > 0$ 的自身信息. 信息关注输出步骤定义如下:

$$H_{out} = \sum_{k=0}^K H^{(k)} W^{(k)}, \quad (9)$$

其中, $W^{(k)}$ 是第 k 传播层对应的关注矩阵, 对特征间的关联性进行相应的调整. H_{out} 是图卷积模块输出层.

我们的知识矩阵 M 同时体现在信息传递和信息选择输出层中, 用于指导我们的邻接矩阵和关注矩阵学习. 在信息传递步骤中, 对每一步传递的信息融合了知识矩阵, 并对知识矩阵进行加权选择:

$$H^{(k)} = \beta H_{in} + (1 - \beta)((1 - \alpha_1)\tilde{A} + \alpha_1 M)H^{(k-1)}, \quad (10)$$

其中 $\alpha_1 \in [0, 1]$ 是一个预设的调节图学习矩阵和知识矩阵的比率参数, 将其初始值设为 0.1, 通过反向传播逐渐学习优化.

由此, 我们通过输入经验矩阵来提升图卷积模块的学习效率和效果, 可以使该卷积层在领域知识和专家经验的指导下, 结合数据驱动的方法, 从数据中发现被忽视的潜在的变量间关系, 从而提升模型最终的预测效果. 该方法类似于在原始损失方程 (1) 的基础上, 额外的将知识矩阵用作正则化模型的训练. 其效果相当于使图网络自学习得到的关联矩阵 A 向知识矩阵 M 靠近.

3.4 时间卷积模块

时间卷积模块通过一组标准空洞 1D 卷积过滤器 (dilated 1D convolution filters) 来对高维时间特征进行提取. 该模块由两个 1D 空洞初始层 (dilated inception layer) 组成^[18]. 一个空洞初始层后面连接一个正切双曲激活函数作为过滤器, 另一个空洞初始层后面连接一个 sigmoid 激活函数, 两个函数用来控制输出到下一个模块的信息量.

在确定合适的过滤器大小时, Wu 等^[18] 提出由 4 个过滤器 filter 组成的时间起始层, 4 个过滤器大小分别为 1×2 , 1×3 , 1×6 和 1×7 , 通过 4 种大小的过滤器组合覆盖所有可能的时间信号周期; 在处理非常长的序列时, Wu 等采用空洞卷积来避免使用非常深的网络或非常大的过滤器, 从而降低模型复杂度. 例如, 让每一层的膨胀因子以指数 q ($q > 1$) 的速度增加, 假设初始膨胀因子为 1, 则一个卷积核大小为 c 的 ε 层空洞卷积网络的对应感受野大小为

$$R = 1 + \frac{(c-1)(q^\varepsilon - 1)}{q-1}. \quad (11)$$

空洞初始层结合了起始和空洞卷积, 时间卷积部分的输入表示为 z , 给定某个特征 b 的 1D 序列输入表达形式为 $z_{\cdot,b} \in R^l$. 第 1 个时间卷积模块的输入来自 1×1 卷积的输出, 其余时间卷积模块的输入来自残差连接以及上一层图卷积的输出, 如图 2 所示. 由 $f_{1 \times 2} \in R^2$, $f_{1 \times 3} \in R^3$, $f_{1 \times 6} \in R^6$, $f_{1 \times 7} \in R^7$ 组成通过学习获得的过滤器组, 因此空洞初始层表示为

$$z_{\cdot,b}^l = \text{concat} \left(z_{\cdot,b}^{l-1} \star f_{1 \times 2}, z_{\cdot,b}^{l-1} \star f_{1 \times 3}, z_{\cdot,b}^{l-1} \star f_{1 \times 6}, z_{\cdot,b}^{l-1} \star f_{1 \times 7} \right), \quad (12)$$

其中, $z_{\cdot,b}^l$ 为当前 l 层的输入, f 为过滤器, \star 为卷积符号, concat 为连接运算符.

4 个滤波器的输出根据最大的滤波器被截断到相同的长度, 并在信道维数上串联, 空洞卷积表示为

$$(z_{\cdot,b}^l \star f_{1 \times g})[j] = \sum_{i=0}^{g-1} f_{1 \times g}(i) \star z_{\cdot,b}^l(j - e \times i), \quad (13)$$

其中, e 为空洞因子, g 表示过滤器的大小, l 指第 l 层.

3.5 跳跃连接层和输出模块

跳跃连接层是 $1 \times L_i$ 标准卷积:

$$(h \star f_{1 \times L_i})[j] = \sum_{k=0}^{L_i-1} f_{1 \times L_i}(k) \star h(j - k), \quad (14)$$

其中 h 表示跳跃连接层的输入, L_i 为输入 X 到第 i 跳跃连接层的长度, 由此来规则化每一层时间卷积层的输出向量的维度, 使得每个输出具有相同的序列长度.

输出模块能够将输入数据的维数转换为期望的输出维数, 该模块由两个 1×1 标准卷积层构成. 当期望输出某一时点的预测值时, 输出维数为 1 维. 当期望输出连续 n 个时点的预测值时, 输出维数为 n 维.

4 实验设置

该部分内容介绍数据处理的设备条件和预处理工作, 引入用于预测准确性对比的 6 种基准方法以及 3 种评价指标.

4.1 数据准备

本研究的数据来源于中国某个风能发电企业, 通过风机上配置的传感器获取风机 2015 年 7 月 1 日 12:00~2017 年 8 月 9 日 16:58 期间每分钟的 120 个状态, 共计一百万余条时间序列数据. 状态包含风机多个关键位置的温度、发电机转速和加速度、变流器电压电流、网侧有功功率, 以及环境温度等数据. 在数据预处理阶段, 我们对传感器收集到的所有数据采用离差标准化方法 $(x - \min)/(\max - \min)$ 进行归一化处理. 并将数据分成训练集、验证集和测试集 3 部分, 其中训练集为时间上前 60% 的数据, 验证集为中间 20% 的数据, 测试集为最后 20% 的数据. 对于输入变量 $X = \{x_t, x_{t-1}, x_{t-2}, \dots, x_{t-k} | k\}$ 和输出变量 $Y = \{x_{t+n} | n\}$ 的参数, k 取 120, n 取 1, 3, 5, 10, 20. 在预测准确性对比阶段, 我们对用于对比的几种基准模型的超参都进行了精细调整, 以获取对应方法可以取得的最高性能.

关于 K-GNN 模型, 批量 (batch size) 为 32 个, 图卷积层为 2 层, 卷积层数 5 层, 模型的学习优化器 optimizer 为 Adam 优化器, 学习率为 0.001, 权重衰减 (weight decay) 为 $1E-5$. 对于本文模型和

其他基准模型在训练时取 $\text{epoch} = 50$, 并对每种方法用验证数据集运行 10 次得到平均的 RSE, RAE, Corr (定义) 值.

4.2 用于对比的基准模型

我们选取了 6 种基准方法用于预测准确性的对比, 包括 ARMA, RNN, LSTM, GRU, TCN, MT-GNN 方法. MT-GNN 方法即为本文所参照的多元时间序列预测 GNN 通用框架, 其他 5 种基准方法的介绍如下所示.

ARMA. 自回归移动平均模型常被应用于金融市场、气象预报等, 是最常用的平稳序列拟合模型. 风机状态多元时间序列数据集具有非平稳特点, 并且可能具有较复杂的非线性趋势, 在数据处理时需要先进行平稳化, 或对序列进行分解, 然后利用 ARMA 对子序列进行建模预测分析. 在本文用于对比的 AMRA 基准模型中, 其阶次通过 BIC 求解获取.

RNN. 循环神经网络被更多地用来处理序列数据信息, 其主要优势在于能够将之前的输入信息保留下来应用到当前输出的计算中. 作为一种人工神经网络, RNN 的单元首先按照各输入在网络层中所占的比重来为输入分配一个权重矩阵, 然后对这些权重应用一个损失函数来获得其输出, 该函数的作用是控制实际输出与目标输出之间的误差. 但 RNN 方法的输入需要依次处理, 无法并行化. 此外在处理较长的序列时, 会产生梯度消失和梯度爆炸问题. 在本文用于对比的 RNN 基准模型中, 模型深度 3 层, 每层隐单元为 200.

LSTM. 长短期记忆网络则是一种特殊的循环神经网络, 与 RNN 相比, LSTM 往往被应用于更长的序列数据当中, 因为 LSTM 能够应对当训练较长序列时可能出现的梯度消失或梯度爆炸问题. 在本文用于对比的 LSTM 基准模型中, 模型深度 3 层, 每层隐单元为 200.

GRU. 类似于长短期记忆网络, 门控循环单元模型的原理是利用门控机制控制输入、记忆等信息做出当前时间上的预测. GRU 包括两个门, 一个被称作重置门 (reset gate), 另一个被称作更新门 (update gate). 设计这两个门控机制的目的是为了利用全部信息来避免梯度消失问题, 其主要的功能在于保存较长序列中的信息, 使其不会随时间推进或因与预测不相关而被删除. 在本文用于对比的 GRU 基准模型中, 模型深度 3 层, 每层隐单元为 200.

TCN. 时间卷积网络通过使用并行性来加快培训和评估速度, 它由 3 部分组成: 因果卷积、膨胀卷积和残差连接, 解决了深度卷积的长期依赖和性能下降问题, 通过因果卷积和残差连接预测序列模型. 在本文用于对比的 TCN 基准模型中, 模型深度同样为 3 层, 每层隐单元为 200.

4.3 评价方法和指标

我们在相对平方误差 (RSE)、相对绝对误差 (RAE) 和经验相关系数 (Corr) 3 项指标上对预测准确性进行对比. 其中 RSE, RAE 越小越好, Corr 越大越好.

5 实验结果对比分析

我们将风机状态时序数据代入本研究提出的知识嵌入式 K-GNN 模型进行预测, K-GNN-1, K-GNN-2, K-GNN-3 分别代表嵌入了第 1, 2, 3 类知识矩阵的模型. 此外, 将数据带入 6 种基准方法 ARMA, RNN, LSTM, GRU, TCN, MT-GNN, 在 RSE, RAE 和 Corr 上对比预测的准确程度, 结果如表 1 所示.

在全部实验结果的对比上, 我们验证了 MT-GNN 在预测精度提升上的优越性. 对比观察表 1 中

表 1 全部实验结果
Table 1 All experimental results

Method	Metric	Time horizon=1	Time horizon=3	Time horizon=5	Time horizon=10	Time horizon=20
ARMA	RSE	0.2612	0.3077	0.3325	0.3982	0.4711
	RAE	0.1832	0.2665	0.2819	0.3671	0.4200
	Corr	0.5644	0.5212	0.5158	0.5091	0.4499
RNN	RSE	1.0370	0.9882	0.9185	0.8979	0.9533
	RAE	0.7391	0.7026	0.6929	0.6385	0.8117
	Corr	0.0773	0.1419	0.0251	0.0801	0.0457
LSTM	RSE	0.9759	0.9956	0.9794	0.9860	0.9538
	RAE	0.6683	0.6574	0.5752	0.6183	0.7734
	Corr	0.0179	0.1103	0.0237	0.1547	0.0358
GRU	RSE	0.9262	0.9320	0.9582	1.0100	1.0319
	RAE	0.7073	0.8713	0.7414	1.0330	0.9205
	Corr	0.0985	0.1053	0.1863	0.0550	0.1003
TCN	RSE	0.7586	0.9196	0.8952	0.9099	0.8862
	RAE	0.5737	0.8856	1.0261	0.7081	0.7126
	Corr	0.3516	0.3884	0.4823	0.4579	0.4644
MT-GNN	RSE	0.1438	0.1789	0.2008	0.2399	0.3438
	RAE	0.0544	0.0728	0.0831	0.0979	0.1668
	Corr	0.7212	0.7246	0.7000	0.6740	0.6243
K-GNN-1	RSE	0.1433	0.1766	0.1999	0.2318	0.3217
	RAE	0.0438	0.0681	0.0831	0.0981	0.1613
	Corr	0.7800	0.7745	0.7354	0.7001	0.6451
K-GNN-2	RSE	0.1515	0.1751	0.2020	0.2708	0.3303
	RAE	0.0597	0.0630	0.0915	0.1247	0.1755
	Corr	0.7533	0.7534	0.7297	0.7101	0.6338
K-GNN-3	RSE	0.1418	0.1722	0.1986	0.2317	0.3226
	RAE	0.0600	0.0623	0.0777	0.0990	0.1572
	Corr	0.7391	0.7798	0.7482	0.6810	0.6559

ARMA, RNN, LSTM, GRU, TCN, MT-GNN 在 5 种预测时间范围的各项预测指标数据, 可以看出 MT-GNN 相比于前几种模型, RSE, RAE 明显降低, Corr 明显增加.

接下来我们将 K-GNN 与 MT-GNN 模型进行比较, 实验结果表明, K-GNN-1 和 K-GNN-3 在不同预测时段和各项评估指标上的表现几乎都优于 MT-GNN, 其中 K-GNN-3 的表现相对最优. 表 2 中加粗数据表示同样输出时间和评估指标下 (同列数据比较), K-GNN 比 MT-GNN 实验结果表现更好的数据.

将表 2 中第 2 和 4 行与第 1 行对比可得, K-GNN-1 和 K-GNN-3 几乎在各项指标上超越 MT-GNN, 这表明加入了相关性知识矩阵和专家经验矩阵的模型比纯自动学习图结构的图卷积模型预测更准确. 综合 5 种预测时段来看, K-GNN-3 方法在以上 4 种图卷积模型中精度提升更大, 整体表现更为出色, 尤其是 20 min 的预测, K-GNN-3 与 MT-GNN 相比, 将 RSE, RAE 分别降低了约 6%, 将

表 2 MT-GNN 与 K-GNN 的比较
Table 2 Comparison of MT-GNN and K-GNN

	Time horizon=1			Time horizon=3			Time horizon=5			Time horizon=10			Time horizon=20		
	RSE	RAE	Corr	RSE	RAE	Corr	RSE	RAE	Corr	RSE	RAE	Corr	RSE	RAE	Corr
MT-GNN	0.1438	0.0544	0.7212	0.1789	0.0728	0.7246	0.2008	0.0831	0.7000	0.2399	0.0979	0.6740	0.3438	0.1668	0.6243
K-GNN-1	0.1433	0.0438	0.7800	0.1766	0.0681	0.7745	0.1999	0.0831	0.7354	0.2318	0.0981	0.7001	0.3217	0.1613	0.6451
K-GNN-2	0.1515	0.0597	0.7533	0.1751	0.0630	0.7534	0.2020	0.0915	0.7297	0.2708	0.1247	0.7101	0.3303	0.1755	0.6338
K-GNN-3	0.1418	0.0600	0.7391	0.1722	0.0623	0.7798	0.1986	0.0777	0.7482	0.2317	0.0990	0.6810	0.3226	0.1572	0.6559

Corr 提升了约 5%. 并且经过前面的验证, MT-GNN 在预测精度提升上优于其他几种基准方法, 所以 K-GNN-3 方法在所有基准方法和知识嵌入式图卷积方法中预测精度相对最高.

K-GNN-3 表现优异的原因可能是专家经验能够起到修正预测误差的作用, 减少误差的传播, 起到一定正则化的作用. 我们将图结构学习得到的矩阵与专家经验矩阵进行对比发现, MT-GNN 自动学习到的图结构相比于专家经验矩阵, 规律性较差且存在较大噪声, 忽视了一些根据经验看来应该存在的依赖关系; 同时, 自动学习模型也能够发现少量专家凭借经验不能发现的变量间关系, 我们猜测自学习矩阵和专家经验矩阵之间能够相互补充, 两者结合或许能够进一步提升图卷积模块的学习效率和效果.

K-GNN-3 的预测能力优于 K-GNN-1 可能是由于 K-GNN-1 直接从数据出发计算 Pearson 相关系数, 捕捉了两变量间的线性关联, 但忽视了变量间的时序关系, 且丧失了一定的因果性. K-GNN-2 虽然在 Corr 指标上超越 MT-GNN, 但在 RSE, RAE 的表现上并不好, 这可能是由于数据的复杂程度较高, 以及数据并非通过控制采集从而导致一定程度的误差. 我们将第 2 种知识矩阵与第 3 种知识矩阵进行对比发现, 第 2 种矩阵中的因果关系连接并不充分. 而 K-GNN-3 中通过专家评分得到的关联矩阵是在依据风力发电领域经验并参考相关性和因果性后得出的一个综合优化的矩阵, 在图结构关系的构造上更加合理有效.

6 结论

本文基于一个时间序列预测通用框架 MT-GNN 提出了知识嵌入式 K-GNN 模型, 对多元时间序列风机状态数据进行预测. 我们构建相关、因果、专家经验 3 种知识矩阵, 作为变量间关系的显示表达形式, 并将这部分可以被解释的图结构与通用框架中自动学习得到的图结构相结合, 能够更好地刻画出状态变量间的关联, 从而指导模型的进一步学习. 实证结果显示, 嵌入专家经验矩阵的 K-GNN-3 模型在短期预测上表现更为出色, 该专家经验矩阵是在依据风力发电领域经验并参考相关性和因果性后得出的一个综合优化的矩阵, 在图结构关系的构造上更加合理有效.

在模型应用上, 我们将领域知识融合到智能算法当中, 有效提升了图神经网络模型的泛化性能和可解释性. 本文的方法不仅能够对风机多元状态进行及时有效的预测, 而且对于风力发电预测性维护的其他领域也具有参考价值, 从而助力“智慧风电”和“新型电力系统”建设和实施.

多元时间序列状态数据的预测具有复杂性、时变性的特点. 本文目前仅从知识矩阵的角度来挖掘多元状态之间的复杂关系, 在问题解决和预测精度提升上取得了一定进展, 但是关于设计更加具有可解释性的知识矩阵, 评价知识矩阵对不同时段预测效果的影响, 尚缺乏理论角度上的深入解释和相应的实验设计, 这需要我们在未来进一步地开展研究.

参考文献

- 1 Project Comprehensive Report Writing Group. Comprehensive report on China's long-term low-carbon development strategy and transformation path. *China Popul Resour Environ*, 2020, 30: 1–25 [项目综合报告编写组.《中国长期低碳发展战略与转型路径研究》综合报告. *中国人口·资源与环境*, 2020, 30: 1–25]
- 2 Wang J J, Liang Y Y, Zheng Y H, et al. An integrated fault diagnosis and prognosis approach for predictive maintenance of wind turbine bearing with limited samples. *Renew Energy*, 2020, 145: 642–650
- 3 Focken U, Lange M, Waldl H P. Previento — a wind power prediction system with an innovative upscaling algorithm. In: *Proceedings of European Wind Energy Association Conference*, 2001
- 4 Giebel G, Badger J, Louka P, et al. Short-term forecasting using advanced physical modelling — the results of the Anemos project. In: *Proceedings of European Wind Energy Conference and Exhibition*, 2006
- 5 Erdem E, Shi J. ARMA based approaches for forecasting the tuple of wind speed and direction. *Appl Energy*, 2011, 88: 1405–1414
- 6 Ling C, Xu L. Comparison between ARIMA and ANN models used in short-term wind speed forecasting. In: *Proceedings of Asia-Pacific Power and Energy Engineering Conference*, 2011. 1–4
- 7 Aasim, Singh S N, Mohapatra A. Repeated wavelet transform based ARIMA model for very short-term wind speed forecasting. *Renew Energy*, 2019, 136: 758–768
- 8 Li G, Qi Y, Li Y Q, et al. Research progress on fault diagnosis and state prediction of wind turbine. *Autom Electron Power Syst*, 2021, 45: 180–191 [李刚, 齐莹, 李银强, 等. 风力发电机组故障诊断与状态预测的研究进展. *电力系统自动化*, 2021, 45: 180–191]
- 9 Shi Z C, Liang H, Dinavahi V. Direct interval forecast of uncertain wind power based on recurrent neural networks. *IEEE Trans Sustain Energy*, 2018, 9: 1177–1187
- 10 Li C B, Lin S S, Xu F Q, et al. Short-term wind power prediction based on data mining technology and improved support vector machine method: a case study in Northwest China. *J Clean Prod*, 2018, 205: 909–922
- 11 Sun Z X, Zhao S S, Zhang J X. Short-term wind power forecasting on multiple scales using VMD decomposition, K-means clustering and LSTM principal computing. *IEEE Access*, 2019, 7: 166917
- 12 Yu R G, Gao J, Yu M, et al. LSTM-EFG for wind power forecasting based on sequential correlation features. *Futur Gener Comput Syst*, 2019, 93: 33–42
- 13 Wang Y S, Liao W L, Chang Y Q. Gated recurrent unit network-based short-term photovoltaic forecasting. *Energies*, 2018, 11: 2163
- 14 Yu C J, Li Y L, Bao Y L, et al. A novel framework for wind speed prediction based on recurrent neural networks and support vector machine. *Energy Conver Manage*, 2018, 178: 137–145
- 15 Yuan X H, Chen C, Jiang M, et al. Prediction interval of wind power using parameter optimized Beta distribution based LSTM model. *Appl Soft Comput*, 2019, 82: 105550
- 16 Korprasertsak N, Leephakpreeda T. Robust short-term prediction of wind power generation under uncertainty via statistical interpretation of multiple forecasting models. *Energy*, 2019, 180: 387–397
- 17 Zhu R J, Liao W L, Wang Y S. Short-term prediction for wind power based on temporal convolutional network. *Energy Rep*, 2020, 6: 424–429
- 18 Wu Z H, Pan S R, Long G D, et al. Connecting the dots: multivariate time series forecasting with graph neural networks. In: *Proceedings of the 26th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery & Data Mining*, 2020. 753–763
- 19 Romaszewski M, Głomb P, Cholewa M. Semi-supervised hyperspectral classification from a small number of training samples using a co-training approach. *ISPRS J Photogramm Remote Sens*, 2016, 121: 60–76
- 20 Silva S, Vanneschi L, Cabral A I R, et al. A semi-supervised genetic programming method for dealing with noisy labels and hidden overfitting. *Swarm Evolary Comput*, 2018, 39: 323–338
- 21 Oord A, Dieleman S, Zen H G, et al. Wavenet: a generative model for raw audio. 2016. ArXiv:1609.03499

Application of knowledge-embedded graph neural network for multivariate state prediction of wind turbines

Ying LIU^{1,2†}, Yangguang LI^{1,2†}, Shuhui QU^{3*}, Jichang DONG^{1,2*} & Jingfan WANG⁴

1. *School of Economics and Management, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China;*
2. *Key Laboratory of Big Data Mining and Knowledge Management, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China;*
3. *School of Engineering, Stanford University, Palo Alto CA 94305, USA;*
4. *School of Earth, Energy and Environmental Sciences, Stanford University, Palo Alto CA 94305, USA*

* Corresponding author. E-mail: shuhuiq@stanford.edu, jcdonglc@ucas.ac.cn

† Equal contribution

Abstract State prediction of wind turbines is a key aspect of wind power's digitalization as well as its intelligent operation and maintenance (O&M). Deep learning has been gradually applied to the state prediction due to its powerful potential in mining the hidden relationships of complex and high-dimensional data; however, it also has some practical limitations such as poor inference and interpretation. Therefore, effectively combining domain knowledge with intelligent algorithms gives an important direction to the intelligent O&M. In this paper, we propose a knowledge-embedded graph neural network (K-GNN) model based on the general framework of multivariate time series graph neural network (MT-GNN), so as to predict the multivariate time series state data of wind turbines. We combine the knowledge embedding module and the auto-graph-learning module to better describe the relationships among state variables by embedding three knowledge matrices, i.e. correlation, causality and expert experience. The results demonstrated that among the three types of K-GNN models, the one with the embedded expert experience matrix performs best in prediction, indicating that domain knowledge can effectively improve the generalizability and interpretability of GNN models. It is also believed that the demonstrated work is valuable to the R&D and promotion of wind power predictive maintenance techniques.

Keywords wind turbines, state prediction, multivariate time series, expert experience, graph neural network