

基于 Koopman 特征核的工业时频因果时延推理网络

翁若昊^{1,2} 郝矿荣^{1,2} 陈磊^{1,2} 丁贺^{1,2} 刘肖燕^{1,2}

摘 要 因果推理在复杂工业系统中对产能分析和产出优化具有重要意义. 然而, 现有方法难以有效处理这种高度非线性与时延的复杂因果关系. 为此, 提出一种基于 Koopman 特征核的时频因果与时延推理网络, 用于复杂工业过程的因果分析与时延识别. 该方法结合 Koopman 特征变换与再生核理论设计核回归层, 在保留时间信息的基础上, 将数据映射到高维再生核希尔伯特空间以提取时不变的非线性关系. 同时, 通过证明非线性格兰杰因果关系在时频域上的一致性, 进而在时域上融入频域特征以提取时间维度的全局信息并捕获变量间的时延关系. 此外, 针对长时延问题, 设计基于状态空间模型的时延发现网络. 实验结果表明, 该方法在三个公共数据集上表现优异, 并在聚酯纤维酯化过程的的实际应用中进一步验证了其有效性.

关键词 因果推理, 工业系统, 再生核希尔伯特空间, 状态空间模型

引用格式 翁若昊, 郝矿荣, 陈磊, 丁贺, 刘肖燕. 基于 Koopman 特征核的工业时频因果时延推理网络. 自动化学报, 2025, 51(8): 1829–1841

DOI 10.16383/j.aas.c240810 **CSTR** 32138.14.j.aas.c240810

Koopman Feature Kernel-based Time-frequency Causal and Delay Inference Network for Industrial Systems

WENG Ruo-Hao^{1,2} HAO Kuang-Rong^{1,2} CHEN Lei^{1,2} DING He^{1,2} LIU Xiao-Yan^{1,2}

Abstract Causal inference plays a crucial role in capacity analysis and output optimization in complex industrial systems. However, existing methods struggle to effectively address highly nonlinear and time-delayed complex causal relationships. To address this, a Koopman feature kernel-based time-frequency causal and delay inference network is proposed for causal analysis and delay identification in complex industrial processes. This method combines Koopman feature transformation and reproducing kernel theory to design a kernel regression layer. By preserving temporal information, it maps data into a high-dimensional reproducing kernel Hilbert space to extract time-invariant nonlinear relationships. Meanwhile, by proving the consistency of nonlinear Granger causality in both time and frequency domains, the method integrates frequency-domain features in the time domain to extract global temporal information and capture time-delay relationships between variables. Furthermore, a time-delay discovery network based on a state-space model is designed to address the challenge of long time delays. Experimental results demonstrate that this method achieves outstanding performance on three public datasets and its effectiveness has been further validated in the practical applications of the polyester fiber esterification process.

Key words Causal inference, industrial system, reproducing kernel Hilbert space, state space model

Citation Weng Ruo-Hao, Hao Kuang-Rong, Chen Lei, Ding He, Liu Xiao-Yan. Koopman feature kernel-based time-frequency causal and delay inference network for industrial systems. *Acta Automatica Sinica*, 2025, 51(8): 1829–1841

在复杂工业系统中, 洞察变量间的因果关系有助于分析产能并优化产品质量. 由于工业生产流程

的复杂性, 对工业生产过程建立准确的机理模型比较困难^[1]. 随着工业化进程加速, 现代工业广泛应用控制系统和传感器满足生产需求^[2]. 这些数据蕴含大量生产规律, 使通过数据挖掘以低成本完成因果分析成为可能^[3]. 因此, 数据驱动的因果推理方法备受关注, 而准确发现变量间的因果关系及其时间延迟成为关键问题^[4]. 现有因果推理方法主要针对静态数据和动态时间序列数据, 分为基于约束、结构因果模型、评分及格兰杰因果的方法^[5–6].

基于约束的方法, 如偏相关系数 (Partial correlation, PC)^[7] 算法和快速因果推理 (Fast causal inference, FCI)^[8] 算法针对静态问题通过条件独立

收稿日期 2024-12-27 录用日期 2025-06-03

Manuscript received December 27, 2024; accepted June 3, 2025
中央高校基本科研业务费专项资金 (2232021A-10), 上海市扬帆计划 (22YF1401300) 资助

Supported by Fundamental Research Funds for the Central Universities (2232021A-10) and Shanghai Sailing Program (22YF1401300)

本文责任编辑 陈胜勇

Recommended by Associate Editor CHEN Sheng-Yong

1. 东华大学信息科学与技术学院 上海 201620 2. 东华大学数字化纺织服装技术教育部工程研究中心 上海 201620

1. College of Information Science and Technology, Donghua University, Shanghai 201620 2. Engineering Research Center of Digitized Textile and Apparel Technology, Ministry of Education, Donghua University, Shanghai 201620

性验证来建立因果图. 针对时间序列问题, Runge 等提出的偏相关与瞬时条件独立性算法 (Partial correlation and momentary conditional independence, PCMCi)^[9] 与 PCMCi+^[10] 添加瞬时独立性验证, Assaad 等^[11] 则提出贪婪因果熵. 这类方法能处理因果不充分数据, 但在强非线性数据或高维条件集情况下计算成本较高, 且准确性下降. 基于结构因果模型的方法, 如 Shimizu 等^[12] 提出静态线性因果发现方法, Hyvärinen 等^[13-14] 则利用结构自回归模型 (Structural vector autoregression, SVAR) 将其扩展至时间序列, 捕获瞬时和延迟因果关系. 此类方法解释性强, 适合干预分析, 但对结构假设和未观测变量较为敏感. 基于评分的方法通过对图结构评分选择最优拟合模型, Zheng 等^[15] 提出一种通过迹指数与增广拉格朗日方法实现的非组合优化结构学习 (Non-combinatorial optimization via trace exponential and augmented Lagrangian for structure learning, NOTEARS), 将因果学习转化为连续优化问题. Pamfil 等^[16] 和 Sun 等^[17] 分别引入结构自回归模型和卷积神经网络以捕获线性和非线性关系. 然而, Kaiser 等^[18] 的研究表明, NOTEARS 方法面对量纲量时, 并不能识别出真正的因果关系. 格兰杰因果方法^[19] 通过测试一个序列对另一个序列预测能力的提升判断因果关系. 神经网络扩展了发现非线性格兰杰因果关系的能力, 如 Nauta 等^[20] 提出基于注意力机制的时间卷积网络, Liang 等^[21] 则提出交叉协方差注意力机制. 近期, 格兰杰因果开始与主流的深度神经网络结合, 依托于神经网络强大的学习能力学习非线性因果关系^[22].

工业系统中的因果推理面临两个主要挑战: 一是变量关系的强非线性以及噪声和混杂变量的干扰; 二是显著的时延性. 复杂工业系统通常包含多个相互作用的子系统和因素, 这些因素之间的关系往往是非线性的, 并且受到环境变化、操作条件和系统耦合效应的干扰, 导致系统行为表现出强非线性和混杂变量的复杂性. 时延一方面来源于物料传递的时间, 另一方面是大部分质量变量通常需通过线下检测获得, 导致过程变量与质量变量之间存在显著延迟. 此外, 大多数现有方法依赖严格假设 (如因果完备性和无混杂变量), 在处理非线性和长时延问题时存在困难, 难以直接应用于工业系统.

针对上述问题, 本文提出一种基于 Koopman 特征核的时频因果与时延推理网络 (Koopman feature kernel-based time-frequency causal and delay inference network, KTFCDN), 包含因果与时延发现两个部分. 其中, 因果发现部分包含

三个核心模块: 格兰杰因果发现层、频域特征提取模块和 Koopman 特征核回归层. 首先, 在时域上融入频域特征捕获时间序列的全局信息, 从而学习变量间的长时延关系; 其次, 利用具有时间不变性的 Koopman 特征核, 将数据映射至高维再生核希尔伯特空间 (Recovery kernel Hilbert space, RKHS), 在保留时域信息的同时提取非线性关系, 显著提升对非线性时延因果关系的建模能力; 最后, 通过结合长短期记忆网络 (Long short-term memory, LSTM) 的权重矩阵与稀疏化约束, 基于格兰杰因果理论提取非线性变量间的因果关系. 此外, 为解决时延发现问题, 设计一个基于状态空间模型的时延发现模块. 该模块通过编码器和解码器结构实现, 编码器利用卷积神经网络 (Convolutional neural network, CNN) 和稀疏化约束自适应学习每个时间步的预测权重, 解码器使用状态空间模型, 增强对长时间窗口内时延的识别能力.

综上, 本文的贡献如下:

1) 提出基于 Koopman 特征核的时频因果与时延推理网络 (KTFCDN), 旨在揭示复杂系统中存在强非线性和时延效应的变量因果关系. 设计因果发现模块, 引入 Koopman 特征核以有效提取时不变的高维非线性特征, 并通过证明非线性格兰杰因果关系在时频域中的一致性, 进而结合频域特征以捕获时域上的全局特征.

2) 构建基于状态空间模型的时延发现模块, 用于发现因果变量对之间的时间延迟关系. 通过引入状态空间模型以及对编码器的稀疏化约束, 使网络具备发现长期时间延迟关系的能力.

3) 基于提出的 KTFCDN, 通过因果与所设计的时延距离评价指标, 在三个公共数据集上验证了该模型的性能. 将其应用于实际聚酯纤维酯化过程中得到其因果图与对应时延, 并以此为指导, 显著提升预测精度.

1 相关知识

1.1 时间序列的格兰杰因果

格兰杰因果关系用图结构 $G = (V, E)$ 表示, V 代表节点集, E 代表边集. 值得一提的是, 格兰杰因果图并不总是无环的, 由于时间序列过去的观测值往往会作用于当前值, 因此它很可能是自环的.

随着基于格兰杰因果的方法持续发展, 更多的非线性方法相继提出, 它们的提出基于向量自回归模型 (Vector autoregression, VAR) 的非线性扩展非线性自回归模型 (Nonlinear autoregression re-

gression, NAR)^[22]

$$x_t = f(x_{1(<t)}, \dots, x_{n(<t)}) + e_t \quad (1)$$

其中, f 为非线性函数, $x_{i(<t)} = (\dots, x_{i(t-2)}, x_{i(t-1)})$ 表示第 i 个序列的过去值, e_t 为在时间 t 的噪声项. 过去已经有一些格兰杰因果方法基于核方法进行非线性扩展, Marinazzo 等^[23] 通过将原始数据映射到高维的 RKHS 中得到变量的非线性格兰杰因果关系. Ren 等^[24] 则是基于 Hilbert-Schmidt 独立性准则 (Hilbert-Schmidt independence criterion, HSIC), 提出 HSIC-Lasso 正则化进行特征选择, 得到非线性格兰杰因果关系. 然而这些方法在对时序数据进行从低维到高维的转换时, 均没有考虑到非线性映射时的时间关系变化, 故会导致时序因果关系的误判.

1.2 状态空间模型

状态空间模型 (State space model, SSM) 在时间序列处理上展现出强大的性能, 受到越来越多的关注. SSM 来源于控制理论中的状态空间方程, 它体现出输入变量、状态变量、输出变量之间的关系, 并且可以实现输入输出变量之间的维度转换. 状态空间方程与循环神经网络 (Recurrent neural network, RNN) 有类似的结构, 因此也会存在长期遗忘问题. 为使 SSM 准确记忆长期的历史信息, A 矩阵的初始化使用 HiPPO 矩阵^[25]

$$A_{nk} = \begin{cases} (2n+1)(2k+1), & n > k \\ n+1, & n = k \\ 0, & n < k \end{cases} \quad (2)$$

其中, A_{nk} 代表 HiPPO 矩阵中第 n 行、第 k 列的元素. 基于此, Gu 等^[26] 引入一种新的状态空间模型的训练方法, 提出专用于捕捉序列中的长距离依赖的结构化状态空间模型 (S4). 随后, Gu 等^[27] 提出 Mamba, 为 S4 添加选择机制使模型仅记忆有价值的信息, 进一步提升模型对长距离依赖的处理能力以及运算效率.

2 方法

2.1 问题描述

给定一个具有长度 T 的多元时间序列数据集 $M = \{X_i\}_{i=1}^n$, 其中, X_i 为多元时间序列中的一个变量的长度为 T 的一元时间序列数据, 即 $X_i = (x_1^i, x_2^i, \dots, x_T^i) \in \mathbf{R}^T$. 目标是构建一个因果模型, 用以发现变量之间因果关系并确定变量之间的时间延迟长度, 最终得到一个有向图 G . 在这个有向图

$G = (V, E, T)$ 中, 顶点 $v_i \in V$ 代表输入变量, 有向边 $e_i \in E$ 代表变量之间存在的因果关系, 有向边 $\tau_i \in T$ 代表变量之间的时间延迟关系.

2.2 基于 Koopman 特征核的时频因果网络

本文提出一种基于 Koopman 特征核的时频因果网络作为 KTFCDN 的因果发现部分, 用以学习工业系统中的非线性时延因果关系. KTFCDN 采用因果解耦网络, 即对于 n 个输入变量, 采用独立且并行的网络对每个变量单独进行因果发现, 以确保不会错误地将变量之间的耦合关系视为因果关系, 图 1 中展示了单个 KTFCDN 的结构.

2.2.1 神经网络中的格兰杰因果

直接从神经网络中寻找输入输出之间的关系往往十分困难, 因此需要研究通过隐藏层中的变量来间接寻找输入输出之间的因果关系. 假设两个由神经网络构成的映射函数 f 和 g , 它们分别将输入 X 映射到隐藏层变量 Z , 再映射到输出变量 Y , 那么有 $Z = f(X)$, $Y = g(Z)$. 假设输入 X 与隐变量 Z 具有因果关系, 那么输入 X 的引入会给隐变量 Z 带来额外的信息量, 对于条件概率分布有 $P(Z|X) \neq P(Z)$. 由于在搭建的神经网络中隐变量 Z 是输入输出之间的中间变量, 根据传递关系, 可以得到

$$P(Y|X) = P(Y|Z)P(Z|X) \quad (3)$$

则有

$$P(Y|X) \neq P(Y|Z)P(Z) = P(Y) \quad (4)$$

即输入 X 与输出 Y 同样具有因果关系. 因此可以得出结论, 对于任意的输入 X , 它与隐变量 Z 的因果关系与输出变量 Y 是等价的, 也就是说可以通过判断 X 与 Z 的关系, 获得 X 与 Y 之间的因果关系, 并且可以通过对函数 g 进行设计, 增强模型对非线性时延因果关系的提取能力.

鉴于时间序列数据普遍存在时延与历史依赖性, 选择以 RNN 架构对时间序列建模. RNN 可将历史信息压缩至隐藏状态中, 从而使模型能够在输入与隐藏状态之间建立关联, 以捕捉输入与输出之间潜在的非线性时延因果关系. 然而传统 RNN 对时间序列的长期依赖关系建模能力有限, 难以建模长时延下的因果结构. 为此采用 LSTM 结构来对函数 f 进行建模, 其内部门控机制可有效控制信息的传递与遗忘, 有效提升对长期依赖关系的建模能力. 通过分析 LSTM 中输入门、遗忘门、输出门及候选状态对应的四个权重矩阵, 可以衡量各输入变量对隐藏状态在不同时间步的影响, 从而建立输入变量之间的因果联系. 将这四个权重矩阵加权叠加用于

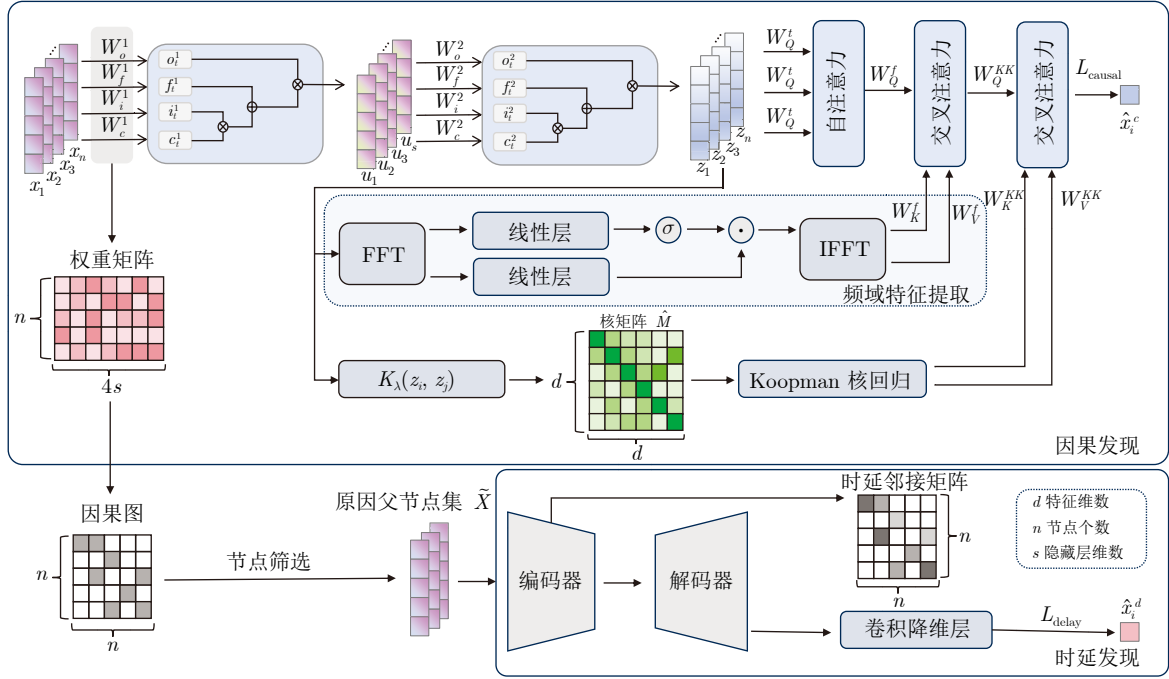


图1 第 i 个 KTFCDN 结构
Fig.1 The i -th KTFCDN structure

发现因果关系

$$W_G = [W_f, W_i, W_o, W_c]^T \quad (5)$$

其中, W_f 、 W_i 、 W_o 、 W_c 分别是遗忘门、输入门、输出门、状态门的权重矩阵. 对每个输入值, 需要得出一个评分来衡量它对隐藏状态的贡献, 因此需要对 W_G 的第一维度计算 L_2 范数, 最终可以得到一个 $1 \times n$ 的因果矩阵. 第 j 个网络中的因果矩阵 GC^j 表示为

$$GC^j = \left\| W_G^{(j)} \right\|_{2, \text{col}} \in \mathbf{R}^{1 \times n} \quad (6)$$

其中, $\|\cdot\|_{2, \text{col}}$ 表示对矩阵的每一列计算 L_2 范数. 将 n 个网络的因果矩阵拼接起来, 通过对矩阵设置阈值将其 0-1 化, 最终得到完整的因果图:

$$GC = [GC^1, \dots, GC^n]^T \quad (7)$$

2.2.2 频域特征提取模块

在实际时间序列建模中, 变量间的因果关系存在时间延迟, 这会对神经网络等建模方法的因果结构提取造成困难. 为缓解这一问题, 本文引入频域特征提取模块, 将时序信号映射到频率域, 使得变量的长期特征集中于低频段、短期特征集中于高频段^[28], 从而提升神经网络对跨时间尺度因果结构的识别能力.

在进行频域建模前, 需首先确认频域变换不会破坏原有的非线性因果关系. 为此, 从理论角度证

明: 若两个时间序列变量在时域中满足非线性格兰杰因果关系, 则该因果关系在频域中同样成立, 具备一致性.

命题 1. 设时间序列 x 与 y 之间存在非线性格兰杰因果关系, 则该关系在频域上同样成立, 即非线性格兰杰因果关系在时域与频域上具有一致性.

证明. 一组具有非线性格兰杰因果关系的自变量 x 和因变量 y 满足 NAR 模型

$$y = f(x_{(<t)}) + e(t) \quad (8)$$

其中, $e(t)$ 服从均值为 0、方差为 σ^2 的正态分布. 根据式 (8) 得到变量 y 的自相关函数 $R_y(\tau)$

$$R_y(\tau) = \mathbb{E} [[f(x_{t_y}) + e(t)] [f(x_{t_y+\tau}) + e(t+\tau)]] \quad (9)$$

其中, τ 代表自相关函数中的时间滞后, t_y 代表具有时间延迟的 NAR 模型中变量 y 对应的变量 x 因果关系的具体时刻. 在展开式中, 由于 $e(t)$ 与 $e(t+\tau)$ 只是在时间上平移, 因此它们独立同分布, 当 $\tau \neq 0$ 时它们无自相关关系, 有 $\mathbb{E}[e(t)e(t+\tau)] = 0$. 只有当 $\tau = 0$ 时, $e(t)$ 与 $e(t+\tau)$ 是自相关的, 因此有

$$\mathbb{E}[e(t)e(t+\tau)] = \delta(\tau)[\mathbb{E}(e^2(t)) - \mathbb{E}^2(e(t))] = \delta(\tau)\sigma^2 \quad (10)$$

其中, $\delta(\tau)$ 是 τ 的冲激函数. 此外, 在 NAR 模型的假设中, 噪声 $e(t)$ 与变量 y 同样也是独立同分布的,

因此有 $E[f(x_{t_y})e(t+\tau)] + E[f(x_{t_y+\tau})e(t)] = 0$, 所以变量 y 的自相关函数可以化简为

$$R_y(\tau) = E[f(x_{t_y})f(x_{t_y+\tau})] + \sigma^2\delta(\tau) \quad (11)$$

通过 y 的自功率谱密度函数 $S_y(\omega)$, 可以了解 y 在频域上的能量分布. 根据维纳-辛钦定理, 任意均值为常数的平稳过程的自相关函数和功率谱密度是一对傅里叶变换对, 因此 $S_y(\omega)$ 表示为

$$S_y(\omega) = \mathcal{F}[R_y(\tau)] = \int_{-\infty}^{\infty} \{E[f(x_{t_y})f(x_{t_y+\tau})] + \sigma^2\delta(\tau)\}e^{-i2\pi\omega\tau} d\tau = S_{f_x}(\omega) + \sigma^2 \quad (12)$$

其中, $\mathcal{F}$ 表示傅里叶变换算子, $S_{f_x}(\omega)$ 代表输入信号 x 在经过函数 $f(x)$ 后的功率谱密度函数. 由式 (12) 可以看出, 在频域中, 变量 y 的能量分布依然可以通过变量 x 在频域上的分布表示出来, 即非线性格兰杰因果关系在时频域上具有一致性. $\square$

频域特征提取模块通过提取格兰杰因果层输出的隐藏状态的频域特征, 帮助网络获取时域上的全局特征. 使用 l 层门控线性单元 (Gated linear unit, GLU) 的频域特征提取模块定义如下:

$$\begin{cases} f_k = FFT(Z_d) \\ GLU(x) = \sigma(W_{f_1}x + b_{f_1}) \odot (W_{f_2}x + b_{f_2}) \\ \tilde{f}_k = GLU^{(l)}(f_k) = GLU(\cdots GLU(f_k)\cdots) \\ \tilde{Z}_c^f = IFFT(\tilde{f}_k) \end{cases} \quad (13)$$

其中, Z_d 代表先前网络输出的状态值, $\tilde{Z}_c^f$ 代表频域特征提取模块输出的特征, W_f 与 b_f 代表门控机制中的权重矩阵与偏置矩阵. 将隐藏状态经过快速傅里叶变换 (Fast Fourier transform, FFT) 后, 通过门控线性单元提取频域特征, 再对提取特征后的状态进行逆快速傅里叶变换 (Inverse FFT, IFFT) 还原回时域.

2.2.3 Koopman 特征核回归层

在工业系统中, 变量之间的关系具有非常强的非线性, 因此, 本文设计一个 Koopman 特征核回归层, 以增强模型对于非线性格兰杰因果的提取能力. 为增强模型的非线性能力, 将数据映射到高维的 RKHS 中提取特征. 将低维空间中的复杂的非线性问题转换为高维空间的线性问题. 然而, 考虑到变量之间的关系具有时延, 因此在转换到高维 RKHS 中时, 保证数据的长期特征不被扭曲, 引入 Koopman 特征核. 通过引入 Koopman 特征变换, 使核函数具有时间不变性. 对于一个动力系统, Koopman 特征函数定义为

$$\varphi_\lambda(x) = e^{-\lambda t} \varphi_\lambda(F^t(x)) \quad (14)$$

其中, λ 代表特征值, t 表示当前时刻, $F^t(x)$ 代表动力系统状态流函数. Koopman 特征函数已经被证明是连续函数的通用逼近器^[29]. 显然, Koopman 特征函数依赖于动力系统中状态随时间的流动, 因此为将任意函数转换为 Koopman 特征函数, 本文提出一种不变变换^[30], 它将定义在初始条件集上的函数 f 转换为一个 Koopman 特征函数

$$\varphi_\lambda(x_T) = I_\lambda^T g(x_0) = \int_0^T e^{-\lambda(\tau-t)} g(F^t(x)) d\tau \quad (15)$$

其中, I 为不变变换算子, T 为系统状态演化的总时间. 通过不变变换, 可以将希尔伯特空间寻找最优算子的问题进行重构: 假设一组输入输出数据的集合 $D = \{(x_T^i)_{i=1}^N, y_T\} \subset (X_T, Y_T)$, 将输入空间 X_T 映射到输出空间 Y_T 的问题可以近似为寻找一个算子 M , 基于再生核理论, 将问题转化到 RKHS 中, 寻找一个算子 $\hat{M} \in H$, 使其符合带有正则化的最小二乘问题的解, 即

$$\hat{M} = \arg \min_{M \in H} \sum_{i=0}^N \|y(T_i) - M(x(T_i))\|_{Y_T}^2 + \lambda \|M\|_H^2 \quad (16)$$

其中, T_i 代表第 i 组变量对应的演化总时间. 由于 Koopman 特征函数是连续函数的通用逼近器, 因此这样的最优算子可以通过多个不变变换聚合出的模态分解算子逼近, 即

$$\hat{M}(\cdot) \equiv \sum_{i=1}^D \bar{\varphi}_{\lambda_i} : X_T \longrightarrow Y_T \quad (17)$$

因此, 将不变变换与核理论中的表示定理相结合, 可以构建出一个在希尔伯特空间中满足不变变换聚合要求的核函数. 根据核理论中的表示定理可知, 这样的最优算子在 RKHS 中存在最优解, 表示为核函数的线性组合^[31]. 由式 (18) 可知, 这个核函数所在的 RKHS 每个分量的核函数都在不同的 RKHS 中. 为满足不变变换的条件, 将这个核函数所在的 RKHS 构建为它每个分量所在的 RKHS 中的直和, 即

$$\tilde{H} = H^{\lambda_1} \oplus H^{\lambda_2} \oplus \cdots \oplus H^{\lambda_D} \quad (18)$$

在这个 RKHS 上, 可以将不变变换引入核函数中, 构建一个具有时间不变性的 Koopman 特征核函数, 即

$$K_\lambda(x_j, x_k) = \int_0^{T'} \int_0^T e^{-\lambda(\tau-t)} k(x_j(\tau), x_k(\tau')) \times e^{-\lambda^*(\tau'-t)} d\tau d\tau' \quad (19)$$

这个核函数定义在空间 $\tilde{H}$ 上, 其中 λ 为特征值. 由于不变变换对于任意的特征值都是成立的, 因此这个核函数对于任意的特征值也是成立的. 然而在深度学习方法中, 面对的数据是一个离散的序列, 因此通过累加和的方式来近似积分的结果, 即

$$K_{\lambda}(x_j, x_k) = \sum_{\tau'=1}^{T'} \sum_{\tau=1}^T e^{-\lambda(\tau-t)} \times k(x_j(\tau), x_k(\tau')) e^{-\lambda^*(\tau'-t)} \quad (20)$$

基于再生核理论, 空间 $\tilde{H}$ 上的最优算子表示为由 Koopman 特征核得到的核矩阵的线性组合. 将第 i 个网络的核回归层设计为

$$\begin{cases} \hat{M}_i = \sum_{j=0}^d \sum_{k=0}^d \alpha K_{\lambda_i}(z_j, z_k) \\ \tilde{Z}_c^{kk} = \hat{M}_i Z_c \end{cases} \quad (21)$$

其中, $\hat{M}_i$ 为最优算子; Z_c 为先前网络输入核回归层的状态值; d 为输入核回归层的特征维度; z_j, z_k 为 Z 中具体的状态向量; $\tilde{Z}_c^{kk}$ 为核回归层输出的特征; α 为可学习的权重矩阵.

2.2.4 特征融合与损失函数

在经过频域特征提取模块得到频域特征 $\tilde{Z}_c^F$ 与 Koopman 核回归层得到时不变非线性特征 $\tilde{Z}_c^{kk}$ 后, 使用自注意力与交叉注意力机制, 将这两组特征都融合进时域特征 $\tilde{Z}_c^t$ 中. 首先, 格兰杰因果层输出的特征 Z_c 经过自注意力机制, 提取时域特征得到特征 $\tilde{Z}_c^t$; 其次, 依次通过两个交叉注意力机制, 先在 $\tilde{Z}_c^t$ 上融合 $\tilde{Z}_c^f$ 得到时频特征 $\tilde{Z}_c^{tf}$, 再在 $\tilde{Z}_c^{tf}$ 上融合 $\tilde{Z}_c^{kk}$ 得到总融合特征 $\tilde{Z}_c$. 使用交叉注意力融合时, 将 $\tilde{Z}_c^t$ 与 $\tilde{Z}_c^{tf}$ 作为主要特征, 将 $\tilde{Z}_c^f$ 与 $\tilde{Z}_c^{kk}$ 作为辅助特征, 即通过 $\tilde{Z}_c^t$ 和 $\tilde{Z}_c^{tf}$ 生成查询矩阵, 用 $\tilde{Z}_c^f$ 与 $\tilde{Z}_c^{kk}$ 生成键、值矩阵. 基于上述获得的矩阵, 根据自注意力 (Self attention, SA) 与交叉注意力 (Cross attention, CA) 机制计算 $\tilde{Z}_c$, 即

$$\begin{cases} \tilde{Z}_c^t = SA(Z_c) \\ \tilde{Z}_c^{tf} = CA(\tilde{Z}_c^t, \tilde{Z}_c^f) \\ \tilde{Z}_c = CA(\tilde{Z}_c^{tf}, \tilde{Z}_c^{kk}) \end{cases} \quad (22)$$

最后使用融合的总特征 $\tilde{Z}_c$ 经过卷积神经网络 (CNN) 与全连接网络 (Fully connected network, FCN) 降维, 进行预测. 总的网络损失函数使用岭回归对因果矩阵进行稀疏化约束, 即

$$\begin{cases} \hat{x}_i^c = FCN(CNN(\tilde{Z}_c)) \\ L_{\text{causal}} = \sum_{i=1}^N ((x_i - \hat{x}_i^c)^2 + \lambda \|GC\|^2) \end{cases} \quad (23)$$

其中, x_i 为变量真实值, $\hat{x}_i^c$ 为因果发现网络输出的预测值.

2.3 基于 SSM 的时间延迟发现网络

KTFCDN 的时延发现部分基于 SSM 实现, 利用其优秀的长期依赖的建模能力, 在较长的时间窗口中发现时延. 图 1 展示了时延发现部分的结构. KTFCDN 使用编码器-解码器结构来识别输入与输出之间的时间延迟关系, 整体架构采用因果解耦网络, 每个子网络独立预测一个变量. 编码器用于识别输入与隐变量之间的时延关系; 解码器负责时间序列的建模与预测任务. 为增强解码器在长时序建模中的能力, 采用基于 SSM 改进而来的 Mamba 模型作为其实现方式. 相比于传统的 SSM, Mamba 添加的选择性记忆机制使模型仅记忆有价值的信息, 以提升解码器对长输入序列的处理能力, 使得网络在接受较长的延迟窗口时依然能够有效地发现时延.

与因果发现类似, 同样能证明对于时间延迟关系, 输入与隐变量之间的时间延迟关系与输入输出之间的时间延迟关系是一致的. 对于一组输入 X 与隐变量 Z , 假设它们的时间延迟为 τ , 意味着 $t - \tau$ 时刻的输入 $x_{t-\tau}$ 与隐变量 Z_t 之间是有关的, 有 $P(Z_t | x_{t-\tau}) \neq P(Z_t)$. 由隐变量 Z_t 的传递关系可以得到

$$\begin{aligned} P(Y_t | x_{t-\tau}) &= P(Y_t | Z_t) P(Z_t | x_{t-\tau}) \neq \\ &P(Y_t | Z_t) P(Z_t) = P(Y_t) \end{aligned} \quad (24)$$

即输出 Y_t 与 $t - \tau$ 时刻的输入 $x_{t-\tau}$ 同样是有关的, 即时间延迟关系与隐变量是一致的. 编码器部分采用 1×1 卷积核的 CNN 实现. 模型训练完成后, 通过编码器的权重矩阵来估计时延值. 具体地, 假设每组因果变量存在唯一的主导时间延迟, 则权重矩阵中输入变量对应维度中具有最大响应的索引即对应该输入变量的时延. 解码器则使用前述的 Mamba 模型, 进一步建模输入序列数据, 并通过 FCN 输出预测结果. 网络整体可以表示为

$$\begin{cases} Z_d = \text{Encoder}(X) = W_x X + b_t \\ \tilde{Z}_d = \text{Decoder}(Z_d) = \bar{C} h_t = \bar{C} (\bar{A} h_{t-1} + \bar{B} Z_d) \\ \hat{x}_i^d = FCN(\tilde{Z}_d) \end{cases} \quad (25)$$

其中, Encoder 为编码器, Decoder 为解码器, W_x 和 b_t 为编码器中的权重和偏置矩阵, X 为输入数据, h_t 代表时间步 t 的隐状态, A 、 B 、 C 分别为 Mamba 模型中的状态转移矩阵、输入控制矩阵和输出映射矩阵.

由于假设时延值是唯一的, 在训练过程中权重

矩阵应该突出唯一的正确索引, 而尽量缩小其他的权值, 所以需要编码器中的权重矩阵进行稀疏化约束. 采用熵正则化对时延矩阵进行稀疏化约束, 熵是概率分布中不确定性的度量, 它能够反映信息的混乱程度. 熵越高, 代表概率分布的越均匀; 熵越低, 代表概率分布的越集中. 因此通过最小化时延矩阵的熵值使其远离均匀分布. 损失函数表示为

$$L_{\text{delay}} = L_{\text{MSE}} + \lambda H(p_{w_x}) = \sum_{i=1}^n \left((x_i - \hat{x}_i^d)^2 - \lambda \sum_{i=1}^n (\text{softmax}(w_{x_i}) \ln(\text{softmax}(w_{x_i}))) \right) \quad (26)$$

其中, x_i 为变量真实值, $\hat{x}_i^d$ 为时延发现网络输出的预测值, w_{x_i} 为第 i 个时延发现网络编码器中的权重矩阵.

3 实验分析

3.1 数据集描述

3.1.1 向量自回归数据集 (VAR)

本节实验测试在真实关系为线性时模型的性能表现, 首先在一个具有 10 个维度、最大滞后为 3 的合成线性多变量向量自回归过程上测试本文的方法, 其中每个时间序列具有 10 000 个时间点. 在测试时间延迟发现的实验中, 对设置的延迟进行调整, 测试在不同时间延迟下时间延迟发现的准确性. 根据设置的时间延迟, 将数据集记为 VAR-10、VAR-50、VAR-70 和 VAR-100.

3.1.2 Lorenz-96 数据集

Lorenz-96 模型^[32]是一个经典的混沌系统, 模拟具有非线性核混沌特性的大气系统. p 维的 Lorenz-96 模型表示为

$$\frac{dx_{t_i}}{dt} = \frac{x_{t_{i+1}} - x_{t_{i-2}}}{x_{t_{i-1}}} - x_{t_i} + F \quad (27)$$

其中, F 为强迫常数, 用于调节系统的混沌程度, 并且将边界条件设置为 $x_{-1} = x_{p-1}$, $x_0 = x_p$ 以及 $x_1 = x_{p+1}$. 取 $p = 10$, $F = 10$, 生成 1 000 个样本作为训练数据.

3.1.3 功能磁共振成像数据集 (fMRI)

fMRI (Functional magnetic resonance imaging)^[33]数据集中包含 28 个模拟的大脑血氧水平依赖数据, 为尽可能接近工业数据的特点, 选择其中数据量较大的四个数据集: Timeseries 5、Timeseries 6、Timeseries 7 和 Timeseries 9, 记为数据集

fMRI5、fMRI6、fMRI7 和 fMRI9.

3.2 评价标准与超参数分析

对于因果发现部分, 本节比较模型学习得到的因果图 $\hat{G}$ 与真实因果图 G 的相似度, 从而判断学习得到的因果图的准确性. 通过真阳性 (True positive, TP)、假阳性 (False positive, FP)、真阴性 (True negative, TN) 和假阴性 (False negative, FN) 定义的准确度 (Accuracy, Acc) 和 F1 分数来衡量 $\hat{G}$ 与 G 的相似度.

在实验中, Koopman 核回归层的基础核函数选择使用高斯核函数

$$k(x_T(\tau), x'_T(\tau')) = \exp \left(-\frac{\|x_T(\tau) - x'_T(\tau')\|^2}{2\gamma^2} \right) \quad (28)$$

其中, $x_T(\tau)$ 和 $x'_T(\tau')$ 分别为两个样本点, τ 和 τ' 为具体的时间点, γ 为带宽参数.

图 2 展示了核函数中不同的参数 γ 的设置对因果发现精度的影响. 从图中可以看到, 对于不同的数据集, 能使模型达到最优的参数区间并不相同. 模型对超参数变化并不是十分敏感, 能使模型达到相对较高精度的超参数区间较大, 但在范围中依然存在较小的区间能使模型达到最优.

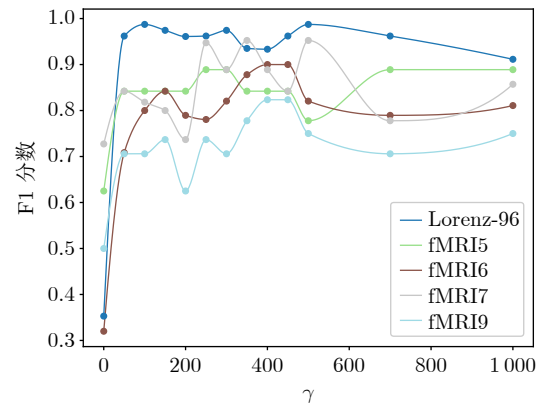


图 2 不同的 γ 值对应的各数据集因果发现 F1 分数
Fig. 2 F1 scores of causal discovery for different datasets corresponding to different values of γ

对于时延发现部分, 通过比较模型学习得到的时延值与真实的时延值的接近程度来衡量时延发现的准确性. 相比于常见的使用准确率判断的方法, 本文认为一个简单的二元评判指标并不能准确地衡量时间延迟的准确性. 因此通过设计的距离度量来判断时延, 进而通过比较发现时延的位置与正确时延的距离来判断时延的准确度, 即

$$\text{dist} = 1 - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(\frac{\hat{\tau}_i - \tau_i}{T} \right)^2 \quad (29)$$

其中, N 为具有因果关系的节点对数, T 为发现时延所使用的时间窗口长度, $\hat{\tau}_i$ 为第 i 对因果节点的预测时延大小, τ_i 为第 i 对因果节点的真实时延值.

3.3 基线模型与参数设置

将本文提出的 KTFCDN 与以下六个方法进行对比: PCMCI^[9]、TCDF^[20]、NGC^[22]、eSRU^[34]、GVAR^[35] 和 CR-VAE^[36]. 本节对所有方法的参数都进行调整, 使得它们在测试的数据集上得到最佳的性能.

KTFCDN 在实验中共训练 50 个 epoch, batch size 设置为 64. 在因果发现网络中, 因果稀疏化正则项的权重系数设为 0.001. 学习率设置上, VAR 和四个 fMRI 数据集采用 0.001, Lorenz-96 数据集采用 0.01. 时间窗口长度方面, VAR 数据集设为 100, 其余数据集均设为 10. 对于核函数中的超参数 γ , 分别在 VAR、Lorenz-96 和四个 fMRI 数据集上依次设置为: 200、500、300、400、350、400. 在时延发现网络中, 学习率设置与因果发现网络一致, 时延

熵正则化系数设为 0.001.

3.4 实验结果

3.4.1 因果发现实验结果

本部分在 VAR、Lorenz-96 和 fMRI 三个数据集上评估因果发现的性能, 结果如表 1 所示. 从结果中可以看到, 为提升非线性的因果发现能力, 将数据通过 Koopman 核回归层在高维非线性域进行转化, 这使得模型在非线性数据集上取得相比其他模型更优秀的性能. 并且得益于时频结合模块提取的全局信息, 面对 Lorenz-96 这样时间上长期相关的数据集取得了相当高的精度. 并且尽管模型对非线性数据进行特殊设计, 也并未失去对线性数据的因果发现能力. 图 3 展示了 VAR、Lorenz-96 和 fMRI6 数据集上本文与基线模型的因果邻接矩阵的可视化结果, 可以清晰地看到, 本文方法获得的结果更接近真实的因果图.

表 1 因果发现比较实验
Table 1 Causal discovery comparison experiment

模型	VAR		Lorenz-96		fMRI5		fMRI6		fMRI7		fMRI9	
	Acc (%)	F1	Acc (%)	F1	Acc (%)	F1	Acc (%)	F1	Acc (%)	F1	Acc (%)	F1
TCDF	96	0.8235	72	0.4528	76	0.6250	86	0.6667	68	0.5000	56	0.4211
PCMCI	96	0.9091	81	0.6250	60	0.6667	82	0.7000	80	0.8000	56	0.6452
eSRU	90	0.7222	83	0.7792	72	0.6316	88	0.6250	68	0.5556	68	0.6363
NGC	98	0.9523	97	0.9630	84	0.7500	92	0.8000	84	0.7500	68	0.5000
GVAR	99	0.9756	98	0.9756	76	0.7692	90	0.6875	88	0.8235	80	0.8059
CRVAE	91	0.8000	96	0.9478	80	0.7619	94	0.8500	80	0.7619	72	0.6923
KTFCDN	100	1.0000	99	0.9873	92	0.8889	96	0.9000	96	0.9524	88	0.8235

注: 加粗字体表示最优结果.

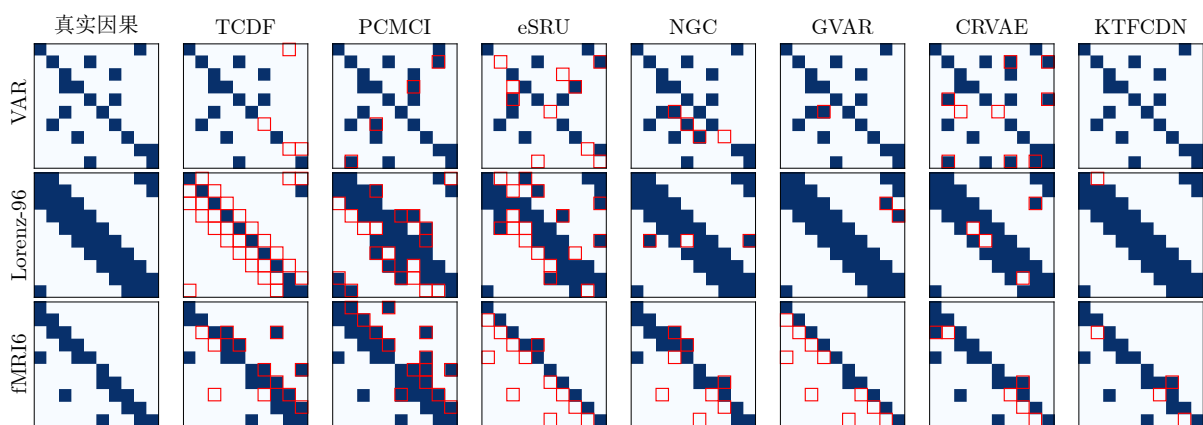


图 3 因果邻接矩阵 (第 1 列提供了真实因果的可视化, 其余列提供了由因果发现方法发现的因果图, 错误的因果关系用红色的方框标注)

Fig.3 Causal adjacency matrices (the first column provides a visualization of the ground truth causal relationships, while the others present the causal graphs discovered by causal discovery methods, incorrect causal relationships are highlighted with red boxes)

3.4.2 时间延迟发现实验结果

与因果发现部分略有不同, 由于 Lorenz-96 数据集中并没有准确的时延值, 因此仅使用 VAR 和 fMRI 两个数据集评估时延发现的性能. 对比方法依然使用上述 6 个基线模型, 由于 eSRU、GVAR 和 CRVAE 没有时延发现的能力, 不计入比较. 在工业系统中, 本文认为时间延迟值应该是唯一的, 因此在 VAR 数据集中, 将时延值设置为唯一的, 并通过调整时延值的长短来测试模型发现长期时延的能力. 在 VAR 数据集中, 将所有方法观测时延的窗口统一设置为 200, 在 fMRI 数据集中设置为 20, 实验结果如表 2 所示. 由表中结果可以看到, 无论是线性数据集还是非线性数据集, 本文方法发现的时间延迟准确率均高于其他方法. 并且得益于解码器上使用状态空间模型, 在面对较长的时延发现窗口与较长的时间延迟时精度都有所下降, 但本文的模型始终能够准确发现时延.

3.5 消融实验

本部分对所提出的 KTFCDN 中的时频融合模块和 Koopman 特征核回归层进行消融研究. 表 3 展示了消融实验的结果. 其中, cLSTM 为仅有格兰杰因果发现层的网络, KCDN 为仅使用 Koopman 特征核回归层的网络, 而 TFCDN 则为仅使用时频融合模块的网络. 从消融研究中可以发现, 添加任意一个模块都能有效提高对线性关系的判断能力. 在面对 Lorenz-96 这样在时间上长期相关的数据集时, 尽管对核函数施加时不变的 Koopman 特征变换, 精度相比基础模型依然出现明显的下降, 通过时频融合模块帮助模型学习全局信息则能有效

解决这个问题. 而在非线性关系更强的 fMRI 数据集上, Koopman 特征核回归层则展现出显著的优势. 将两个部分结合起来后, 在各个数据集上始终能够获得最佳的精度. 从消融研究中可以清晰地看出, 两个模块在面对不同场景的因果关系时, 都发挥着重要的作用, 两者显然都是不可或缺的.

3.6 模型复杂度及运行效率分析

本部分对所提出的 KTFCDN 各组成模块的理论计算复杂度进行分析. 令 T 表示时间窗口的长度, N 是输入节点个数. 由于主要影响模型计算复杂度的参数是 N 和 T , 因此相关计算模块各层的复杂度如下: 格兰杰因果层的复杂度为 $\Omega_{GC} = O(NT)$, 时频特征融合层的复杂度为 $\Omega_{TF} = O(NT^2 + TN^2)$, Koopman 核回归层的复杂度为 $\Omega_{Koopman} = O(N^2T^3)$, 时延发现网络的复杂度为 $\Omega_{Delay} = O(T)$.

由计算复杂度可知, KTFCDN 模型的主要计算复杂度来源于 Koopman 核回归层, 其计算开销显著高于其他模块. 这一部分的高复杂度主要源于核矩阵的构建与核回归操作, 其中涉及时间维度上的双重积分, 理论复杂度达到 $O(N^2T^3)$, 而格兰杰因果层、时频特征融合层以及时延发现网络的计算复杂度均较低, 对整体运行效率影响较小.

为进一步评估模型在不同输入规模下的运行效率, 以 N 和 T 为变量设计运行效率分析实验. 在实验中固定总样本数为 10000, 测量模型的参数总量、每次训练的浮点数运算次数 (Floating point operations, FLOPs) 以及每个 epoch 的平均训练时长. 所有实验均在一张 NVIDIA GTX-1650 GPU 上完成, 实验结果汇总如表 4 所示.

从实验结果可以看出, 随着输入节点数量和时

表 2 时延发现比较实验
Table 2 Time delay discovery comparison experiment

模型	VAR-10	VAR-50	VAR-70	VAR-100	fMRI5	fMRI6	fMRI7	fMRI9
TCDF	1.000	0.9861	0.9327	0.8894	0.8609	0.8805	0.8925	0.9063
PCMCI	1.000	0.9856	0.9830	0.9466	0.8795	0.8962	0.9063	0.9160
NGC	1.000	0.9855	0.9760	0.9020	0.8610	0.8689	0.8570	0.9310
KTFCDN	1.000	1.0000	1.0000	1.0000	0.8972	0.9439	0.9695	0.9975

表 3 KTFCDN 消融研究结果
Table 3 Ablation study results of KTFCDN

模型	VAR		Lorenz-96		fMRI5		fMRI6		fMRI7		fMRI9	
	Acc (%)	F1	Acc (%)	F1	Acc (%)	F1	Acc (%)	F1	Acc (%)	F1	Acc (%)	F1
cLSTM	98	0.95	97	0.96	84	0.75	92	0.80	84	0.75	68	0.50
TFCDN	100	1.00	98	0.95	84	0.75	94	0.84	88	0.82	80	0.71
KCDN	100	1.00	94	0.93	88	0.84	94	0.86	92	0.89	84	0.75
KTFCDN	100	1.00	99	0.99	92	0.89	96	0.90	96	0.95	88	0.82

表 4 KTFCDN 运行效率分析
Table 4 Operational efficiency analysis of KTFCDN

节点数量	时间窗口长度	参数量 (M)	FLOPs (MMac)	每 epoch 训练时间 (s)
5	10	0.26	2.49	2.37
5	50	0.83	14.85	7.09
5	100	2.54	35.72	9.21
10	10	0.59	5.82	12.26
10	50	1.63	39.23	38.34
10	100	4.77	103.23	93.73
15	10	0.91	9.36	29.66
15	50	2.34	67.26	114.68
15	100	6.62	185.99	280.53

间窗口长度的增加, KTFCDN 的计算量和训练时间呈现明显增长趋势. 在处理具有长时间延迟的大规模工业系统时, 模型的训练耗时相对较高, 但即使在极端情况下, 当窗口长度扩展至 100 时, 整体耗时仍保持在可接受范围内. 特别是对于工业系统因果推理问题, 通常不需要极高的实时性, 模型具有良好的实际可行性与扩展性.

4 实际案例分析

聚酯纤维是一种生活中十分常用的材料, 常见于各类服装、家居装饰、包装材料等. 聚酯纤维的聚合过程涉及复杂的化工工艺, 是一种非常复杂的工业系统. 聚酯的生产过程包括酯化、预缩聚、终缩聚三个过程. 在此过程中, 纯对苯二甲酸 (Purified terephthalic acid, PTA) 和乙二醇 (ethylene glycol, EG) 按一定比例混合送入酯化反应器. 酯化反应器不设置搅拌装置, 反应通过反应器中未反应完全的 EG 自然循环驱动. 在高温下, 蒸发的 EG 和水蒸气通过酯化分离塔进行分离, 蒸汽从塔顶逸出, 经过冷凝回收, 提取出的 EG 从塔底流出, 可重复使用^[37]. 将本文的模型应用于这个工业系统中, 以此来验证本文方法在真实复杂工业过程中的效果. 聚酯工艺的整体流程图如图 4 所示.

实验使用酯化过程中生产线上的传感器在酯化反应阶段采集的数据. 生产线上的传感器采样时间间隔为 1 min, 主要测量温度、压力、流量等相关指标, 其中也包含一些质量指标. 数据集选取酯化阶段产出的低聚物密度及其可能相关的变量构建一个多维的时间序列数据. 这个多维时间序列数据包含 14 个维度和 10000 个时间步.

由于在这种实际生产过程中, 无法知道真实的传感器测量数据之间的因果与时延关系, 因此通过预测任务来间接判断发现的因果与时延的准确性. 本文设置一个基础的预测模型 (Base), 实验中使用

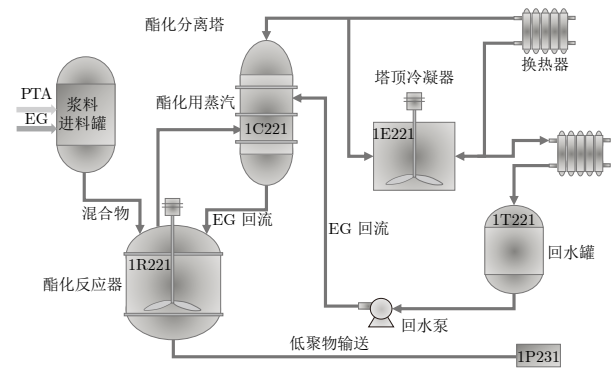


图 4 聚酯纤维生产酯化阶段工艺方案
Fig. 4 Process scheme for esterification stage of polyester fiber production

的是 GRU (Gated recurrent unit) 与 FCN 的组合作为基准模型, 随后通过发现的因果与时延关系对基准模型的输入进行数据增强. 对于每一个预测变量, 只选择因果图上它的原因变量进行预测, 并且根据得到的时间延迟在时间步上对输入数据进行平移, 进而实现数据增强. 由准确的因果与时延关系进行的数据增强能够为预测模型带来额外的信息, 会有效地提升基准模型的预测精度, 而由不准确的因果与时延关系提供的数据增强, 则不会对预测精度带来提高甚至会损害模型的精度. 本文采用平均绝对误差 (Mean absolute error, MAE) 和均方根误差 (Root mean squared error, RMSE) 两个指标评价预测性能. 实验在数据集的单步与多步预测任务上, 选取 6 个基线模型及 KTFCDN 模型 (仅输出因果结构的 KTFCDN) 进行对比, 基于这些模型得到的因果与时延关系构建数据增强. 对于不具备时延发现能力的模型, 仅利用因果关系构建数据增强. 实验中, 只对输入数据进行处理, 所有的方法都共享相同的基准模型结构与参数. 实验结果如表 5 所示. 图 5 展示了预测指标在单步与多步预测任务中

表 5 聚酯纤维酯化数据集预测实验结果
Table 5 Prediction experiment results on the polyester fiber esterification dataset

模型	1 步预测		3 步预测		5 步预测	
	MAE	RMSE	MAE	RMSE	MAE	RMSE
Base	0.4557	1.2153	0.6016	1.6172	0.7118	1.8534
TCDF	0.8770	2.4114	0.9875	2.6900	1.0401	2.7822
PCMCI	0.4230	1.1564	0.5887	1.6691	0.6623	1.8487
eSRU	0.4520	1.1873	0.6075	1.6512	0.6932	1.8914
GVAR	0.4429	1.2987	0.6568	2.0803	0.7680	2.3720
NGC	0.5360	1.2447	0.6580	1.6117	0.7503	1.8641
KTFCDN	0.4250	1.1681	0.5751	1.6408	0.6425	1.8496
KTFCDN	0.4103	1.1403	0.5538	1.5691	0.6298	1.7433

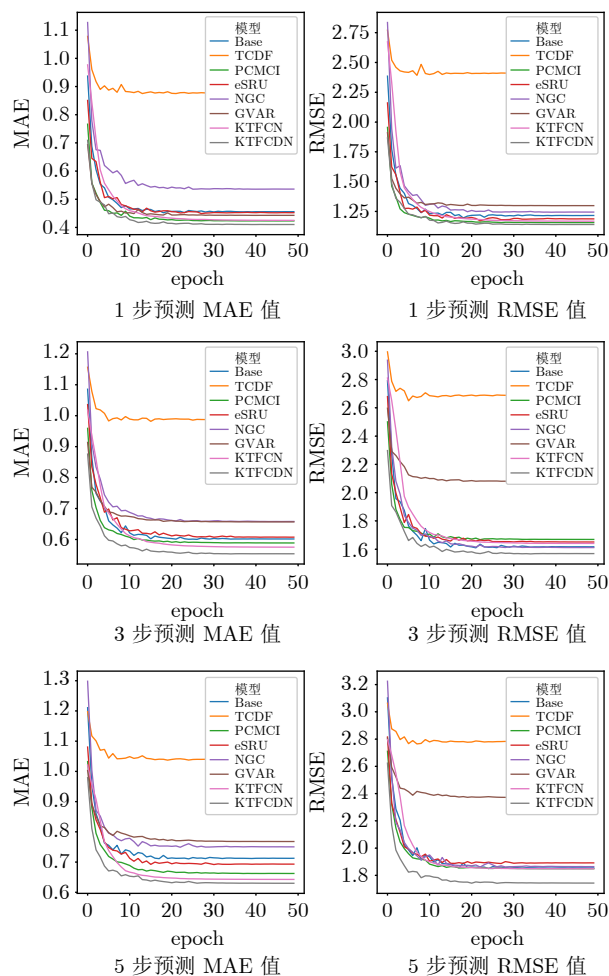


图5 比较不同预测步数预测指标收敛情况

Fig.5 Comparison of convergence of prediction metrics with different prediction steps

的收敛情况。

由于实验都是通过同一个基准模型进行的,只是进行不同的数据增强,收敛速度大致相同,但最终都收敛于不同的值。其中,CRVAE在聚酯酯化数据集上经过反复调试,始终无法得到一个合理的因果图。从实验结果中可以看到,KTFCDN提供的因果与时延关系进行数据增强,使得基准模型的预测精度得到明显的提升,且随着预测步数的提升,精度提升更加明显。由此得出,在非线性程度较大、存在时延的真实工业数据集上,本文方法相比传统的因果推理方法具有较大的优势。

5 结束语

本文提出一种新的因果发现方法:针对工业过程中时间序列数据具有强非线性、时延的特点,提出具有时间不变性的Koopman特征核,通过基于再生核理论建立核回归层,在不丢失时间信息的基

础上建立变量之间的强非线性关系。同时,在证明了非线性格兰杰因果关系在时频域上的一致性后,通过融入频域信息来获得时域上的全局特征,进一步增强模型建立时延关系的能力。并且考虑可能存在的较长时延,基于捕获时间上长期依赖能力更强的状态空间模型,提出时延发现网络来具体发现时延。

然而,本文方法依然有一定的局限性。由于使用结构化的因果解耦网络,在一些非常复杂的工业系统,如果拥有非常大量的变量,可能会非常耗时。另外,时延发现网络高度依赖因果发现的准确性,如果因果发现出现错误,那么网络往往无法发现一个准确的时延关系。本文提出的方法为今后克服这些限制提供了可能性。

References

- 1 Zhao Jian-Cheng, Zhao Chun-Hui. An industrial process monitoring method based on total measurement point coupling structure analysis and estimation. *Acta Automatica Sinica*, 2024, **50**(8): 1517–1538
(赵健程, 赵春晖. 面向全量测点耦合结构分析与估计的工业过程监测方法. *自动化学报*, 2024, **50**(8): 1517–1538)
- 2 Liu Yu-Meng, Zheng Xu, Tian Ling, Wang Hong-An. Remaining useful life estimation of facilities based on reasoning over temporal graphs. *Acta Automatica Sinica*, 2024, **50**(1): 76–88
(刘雨蒙, 郑旭, 田玲, 王宏安. 基于时序图推理的设备剩余使用寿命预测. *自动化学报*, 2024, **50**(1): 76–88)
- 3 Tang Peng, Peng Kai-Xiang, Dong Jie. A novel method for deep causality graph modeling and fault diagnosis. *Acta Automatica Sinica*, 2022, **48**(6): 1616–1624
(唐鹏, 彭开香, 董洁. 一种新颖的深度因果图建模及其故障诊断方法. *自动化学报*, 2022, **48**(6): 1616–1624)
- 4 Tan Shuai, Wang Yi-Fan, Jiang Qing-Chao, Shi Hong-Bo, Song Bing. Fault propagation path-aware network: A fault diagnosis method. *Acta Automatica Sinica*, 2025, **51**(1): 161–173
(谭帅, 王一帆, 姜庆超, 侍洪波, 宋冰. 基于不同故障传播路径差异化的故障诊断方法. *自动化学报*, 2025, **51**(1): 161–173)
- 5 Ren Wei-Jie, Han Min. Survey on causality analysis of multivariate time series. *Acta Automatica Sinica*, 2021, **47**(1): 64–78
(任伟杰, 韩敏. 多元时间序列因果关系分析研究综述. *自动化学报*, 2021, **47**(1): 64–78)
- 6 Sun Yue-Wen, Liu Wen-Zhang, Sun Chang-Yin. Causality in reinforcement learning control: The state of the art and prospects. *Acta Automatica Sinica*, 2023, **49**(3): 661–677
(孙悦雯, 柳文章, 孙长银. 基于因果建模的强化学习控制: 现状及展望. *自动化学报*, 2023, **49**(3): 661–677)
- 7 Spirtes P, Glymour C. An algorithm for fast recovery of sparse causal graphs. *Social Science Computer Review*, 1991, **9**(1): 62–72
- 8 Malinsky D, Spirtes P. Causal structure learning from multivariate time series in settings with unmeasured confounding. In: *Proceedings of the ACM SIGKDD Workshop on Causal Discovery*. PMLR, 2018. 23–47
- 9 Runge J, Nowack P, Kretschmer M, Flaxman S, Sejdinovic D. Detecting and quantifying causal associations in large nonlinear time series datasets. *Science Advances*, 2019, **5**(11): Article No. eaau4996

- 10 Runge J. Discovering contemporaneous and lagged causal relations in autocorrelated nonlinear time series datasets. In: Proceedings of the 36th Conference on Uncertainty in Artificial Intelligence (UAI). PMLR, 2020. 1388–1397
- 11 Assaad C K, Devijver E, Gaussier E. Discovery of extended summary graphs in time series. In: Proceedings of the 38th Conference on Uncertainty in Artificial Intelligence. Eindhoven, The Netherlands: PMLR, 2022. 96–106
- 12 Shimizu S, Hoyer P O, Hyvärinen A, Kerminen A. A linear non-Gaussian acyclic model for causal discovery. *Journal of Machine Learning Research*, 2006, **7**: 2003–2030
- 13 Hyvärinen A, Shimizu S, Hoyer P O. Causal modelling combining instantaneous and lagged effects: An identifiable model based on non-Gaussianity. In: Proceedings of the 25th International Conference on Machine Learning. Helsinki, Finland: Association for Computing Machinery, 2008. 424–431
- 14 Hyvärinen A, Zhang K, Shimizu S, Hoyer P O. Estimation of a structural vector autoregression model using non-Gaussianity. *Journal of Machine Learning Research*, 2010, **11**: 1709–1731
- 15 Zheng X, Aragam B, Ravikumar P, Xing E P. DAGs with no TEARS: Continuous optimization for structure learning. In: Proceedings of the 32nd International Conference on Neural Information Processing Systems. Montréal, Canada: Curran Associates Inc., 2018. 9492–9503
- 16 Pamfil R, Sriwattanaworachai N, Desai S, Pilgerstorfer P, Beaumont P, Georgatzis K, et al. DYNOTEARS: Structure learning from time-series data. In: Proceedings of the 23rd International Conference on Artificial Intelligence and Statistics (AISTATS). Palermo, Italy: PMLR, 2020. 1595–1605
- 17 Sun X Y, Schulte O, Liu G L, Poupart P. NTS-NOTEARS: Learning nonparametric DBNs with prior knowledge. In: Proceedings of the 26th International Conference on Artificial Intelligence and Statistics. Valencia, Spain: PMLR, 2023. 1942–1964
- 18 Kaiser M, Sipos M. Unsuitability of NOTEARS for causal graph discovery when dealing with dimensional quantities. *Neural Processing Letters*, 2022, **54**(3): 1587–1595
- 19 Granger C W J. Investigating causal relations by econometric models and cross-spectral methods. *Econometrica*, 1969, **37**(3): 424–438
- 20 Nauta M, Bucur D, Seifert C. Causal discovery with attention-based convolutional neural networks. *Machine Learning and Knowledge Extraction*, 2019, **1**(1): 312–340
- 21 Liang X X, Hao K R, Chen L, Cai X, Hao L G. Causal inference of multivariate time series in complex industrial systems. *Advanced Engineering Informatics*, 2024, **59**: Article No. 102320
- 22 Tank A, Covert I, Foti N, Shojai A, Fox E B. Neural granger causality. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 2021, **44**(8): 4267–4279
- 23 Marinazzo D, Pellicoro M, Stramaglia S. Kernel method for nonlinear Granger causality. *Physical Review Letters*, 2008, **100**(14): Article No. 144103
- 24 Ren W J, Li B S, Han M. A novel Granger causality method based on HSIC-Lasso for revealing nonlinear relationship between multivariate time series. *Physica A: Statistical Mechanics and Its Applications*, 2020, **541**: Article No. 123245
- 25 Gu A, Dao T, Ermon S, Rudra A, Ré C. HiPPO: Recurrent memory with optimal polynomial projections. In: Proceedings of the 34th International Conference on Neural Information Processing Systems. Vancouver, Canada: Curran Associates Inc., 2020. Article No. 125
- 26 Gu A, Gupta A, Goel K, Ré C. On the parameterization and initialization of diagonal state space models. In: Proceedings of the 36th International Conference on Neural Information Processing Systems. New Orleans, USA: Curran Associates Inc., 2022. Article No. 2607
- 27 Gu A, Dao T. Mamba: Linear-time sequence modeling with selective state spaces. In: Proceedings of the 1st Conference on Language Modeling. Philadelphia, USA: OpenReview.net, 2023.
- 28 Zhang Xian-Fa, Hao Kuang-Rong, Chen Lei. Motor imagery EEG classification based on immune multi-domain-feature fusion and multiple kernel learning SVM. *Acta Automatica Sinica*, 2020, **46**(11): 2417–2426
(张宪法, 郝矿荣, 陈磊. 免疫多域特征融合的多核学习 SVM 运动想象脑电信号分类. *自动化学报*, 2020, **46**(11): 2417–2426)
- 29 Korda M, Mezić I. Optimal construction of Koopman eigenfunctions for prediction and control. *IEEE Transactions on Automatic Control*, 2020, **65**(12): 5114–5129
- 30 Bevanda P, Beier M, Lederer A, Lederer S, Hüllermeier E, Hirche S. Koopman kernel regression. In: Proceedings of the 37th International Conference on Neural Information Processing Systems. New Orleans, USA: Curran Associates Inc., 2024. Article No. 713
- 31 Micchelli C A, Pontil M. On learning vector-valued functions. *Neural Computation*, 2005, **17**(1): 177–204
- 32 Karimi A, Paul M R. Extensive chaos in the Lorenz-96 model. *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, 2010, **20**(4): Article No. 043105
- 33 Smith S M, Miller K L, Salimi-Khorshidi G, Webster M, Beckmann C F, Nichols T E, et al. Network modelling methods for fMRI. *Neuroimage*, 2011, **54**(2): 875–891
- 34 Khanna S, Tan V Y F. Economy statistical recurrent units for inferring nonlinear Granger causality. In: Proceedings of the 8th International Conference on Learning Representations. Addis Ababa, Ethiopia: OpenReview.net, 2020.
- 35 Marcinkevičs R, Vogt J E. Interpretable models for Granger causality using self-explaining neural networks. In: Proceedings of the International Conference on Learning Representations. Vienna, Austria: OpenReview.net, 2021.
- 36 Li H M, Yu S J, Principe J. Causal recurrent variational autoencoder for medical time series generation. In: Proceedings of the 37th AAAI Conference on Artificial Intelligence. Washington, USA: AAAI Press, 2023. Article No. 962
- 37 Ding H, Hao K R, Chen L, Shi X. Feature structured domain adaptation for quality prediction of cross working conditions in industrial processes. *Journal of Manufacturing Systems*, 2024, **74**: 887–900



翁若昊 东华大学信息科学与技术学院硕士研究生。主要研究方向为因果推理, 工业过程时序建模和机器学习。E-mail: 2232138@mail.dhu.edu.cn (WENG Ruo-Hao Master student at the College of Information Science and Technology, Donghua University. His research interest covers causal inference,

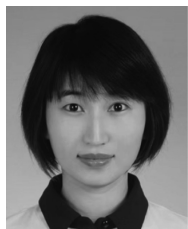
time-series modeling in industrial processes, and machine learning.)



郝矿荣 博士, 东华大学信息科学与技术学院教授. 1995 年获得法国巴黎国家路桥学校数学与计算机专业博士学位. 主要研究方向为神经网络, 图像处理, 智能控制, 流程工业的数字化与智能化. 本文通信作者.

E-mail: krhao@dhu.edu.cn

(HAO Kuang-Rong Ph.D., full professor at the College of Information Science and Technology, Donghua University. She received her Ph.D. degree in mathematics and computer science from Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, Paris, France in 1995. Her research interest covers neural networks, image processing, intelligent control, and digitalization and intelligence of process industry. Corresponding author of this paper.)



陈磊 博士, 东华大学信息科学与技术学院副教授. 主要研究方向为过程控制, 系统辨识, 工业大数据分析.

E-mail: leichen@dhu.edu.cn

(CHEN Lei Ph.D., associate professor at the College of Information Science and Technology, Donghua

University. Her research interest covers process control, system identification, and industrial big data analysis.)



丁贺 东华大学信息科学与技术学院博士研究生. 2020 年获得东华大学自动化专业学士学位. 主要研究方向为不变表征学习与工业过程的时序预测.

E-mail: 2211866@mail.dhu.edu.cn

(DING He Ph.D. candidate at the College of Information Science and Technology, Donghua University. He received his bachelor degree in automation from Donghua University in 2020. His research interest covers invariant representation learning and time-series prediction for industrial processes.)



刘肖燕 博士, 东华大学信息科学与技术学院高级实验师. 主要研究方向为智能仿真与优化.

E-mail: liuxy@dhu.edu.cn

(LIU Xiao-Yan Ph.D., senior experimentalist at the College of Information Science and Technology, Donghua University. Her research interest covers intelligent simulation and optimization.)