

概率混合模型驱动时间序列数据的可解释性预测

Interpretability forecasting for time series data driven by probabilistic mixture model

期刊：	中国科学: 技术科学
稿件ID：	SST-2025-0271.R2
稿件栏目：	论文
作者提交日期：	2026-03-18
参与作者列表：	秦艺丹, 赵瀚玮, 张小楠, 丁幼亮, 郭彤, 陈斌
关键词：	工程人工智能, 概率机器学习, 物理系统输入与输出, 人工智能的可解释性, 结构健康监测
英文关键词：	Engineering artificial intelligence, probabilistic machine learning, input and output data of physical system, interpretability for artificial intelligence, structural health monitoring
学科领域：	土木工程
专题：	

For Review Only

中国科学: 技术科学 2025 年 第 55 卷 第*期: ** ~**
SCIENTIA SINICA Technologica tech. scichina. com
《中国科学》杂志社
SCIENCE CHINA PRESS

论 文

概率混合模型驱动时间序列数据的可解释性预测

秦艺丹[1], 赵瀚玮[1,2*], 张小楠[1], 丁幼亮[1,2], 郭彤[1,2], 陈斌[3]

1. 东南大学土木工程学院, 南京 210096
2. 东南大学混凝土及预应力混凝土结构教育部重点实验室, 南京 210096
3. 中铁桥隧技术有限公司, 南京 210061

*E-mail: civil_hwzhao@seu.edu.cn

国家重点研发计划项目(编号: 2024YFB2605000); 云南省重大科技专项计划(编号: 202502AD080007); 国家自然科学基金资助项目(编号: 52578355, 52378288)资助

摘要 为满足工程物理系统中海量时间序列数据高效处理、可解释建模及预测的需求, 本文提出一套由高斯混合模型(GMM)驱动的工程物理系统输入-输出数据建模与输出数据预测方法. 该方法在传统 GMM 建模的基础上, 提出了两项原创算法: 其一, 通过数据频率直方图与数据 GMM 估计的均方根误差, 自适应确定最优的 GMM 拟合阶数, 减少对工程专业先验知识的依赖; 其二, 基于多个单输入-输出二元 GMM, 实现多输入单输出物理系统的输出时间序列数据生成式预测. 以一座真实桥梁的风环境及其响应实测数据进行验证, 结果表明: 在提供可解释性参数的前提下, 所提出的 GMM 驱动预测算法对于多输入单输出工程物理系统的输出时间序列数据预测精度可以接近经典深度神经网络, 且在执行新数据生成式预测时表现出更优的稳定性与泛化能力.

关键词 工程人工智能, 概率机器学习, 物理系统输入与输出, 人工智能的可解释性, 结构健康监测

1 引言

现实世界中的工程物理系统存在海量的测量数据. 机器学习方法作为实现人工智能(AI)的主要途径, 在工程物理系统测量数据的处理与分析方面展现出卓越的能力[1,2]. 近年来, 面向图像测量数据的机器视觉理论与技术发展迅速. 然而, 相较于图像测量数据, 现实世界中源自工程物理系统的测量数据更多地表现为时间序列数据[3,4]. 尽管专门针对时间序列数据的机器学习方法研究[5,6]早于机器视觉, 但其近年来的发展速度不及机器视觉[7]. 工程物理系统测得的时间序列数据通常与系统状态相关联[8,9], 与传统工程研究的正问题范式(首先基于理论推导等强物理约束与典型试验的小样本验证建立经验模型; 然后不断累积工程案例, 修正经验模型、发展多样性; 最后形成专业的大数据案例库或人脑中的某领域生物智能, 并根据具体工程需求生成有效决策)不同, 反问题的研究范式通常以监检测时间序列数据等反演和预测系统行为或状态, 其内核是“数据驱动”, 这天

引用格式: 秦艺丹, 赵瀚玮, 张小楠, 等. 概率混合模型驱动时间序列数据的可解释性预测. 中国科学: 技术科学,
Qin Y D, Zhao H W, Zhang X N, et al. Interpretability forecasting for time series data driven by probabilistic mixture model (in Chinese). Sci Sin Tech, 2025,

© 2025《中国科学》杂志社 www. scichina. com

然与时下常见 AI 方法[10-12]的基本逻辑契合(如图 1 所示), 二者均从大量观测数据出发,通过模型学习实现系统状态的反演或预测, AI 方法因而成为求解反问题的有效途径. 然而, 随着现实世界工程物理系统的复杂度、冗余度的不断攀升, 经典的 AI 方法与算法逐渐开始难以有效解决真实工程物理系统的可解释预测等实际问题, 如何有效利用初期已知的部分物理约束(先验知识), 以有限数据驱动工程物理系统的可解释性生成式预测(即基于既有数据建立的关联物理意义的参数化显式模型, 进一步推断、预测和生成特定条件下的新数据), 并发展应用于此类场景的可解释性[13,14]工程 AI 方法, 有助于更高效地维护和管理工程理物理系统, 并推动工程科学计算的发展[15]. 概率机器学习在新一代 AI 的可解释性发展中将起到关键作用[16], 而概率混合建模[17,18]则是构建时间序列数据生成模型的有效实现方式.

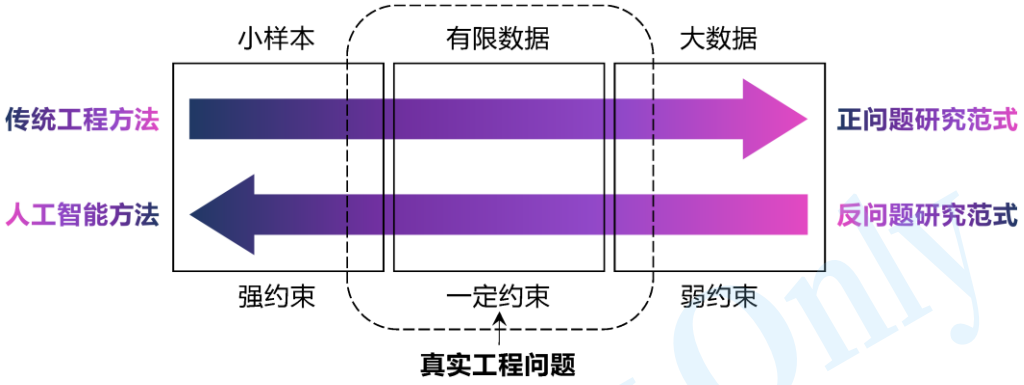


图 1 传统工程方法与人工智能方法的差异,以及真实工程问题破题需求

Figure 1 Differences between traditional engineering methods and artificial intelligence methods, and the need to solve real engineering problems

目前, 基于概率混合模型的机器学习理论与应用研究主要集中于建模与聚类方面, 而涉及预测功能的研究则相对较少. 一些具有预测功能的方法主要基于累积概率密度的极值推断[19-21], 这与 AI 领域的预测含义[22] (即基于 AI 模型的未来时刻时间序列预测)不同. 虽有学者尝试开展基于概率混合模型的预测研究[23,24], 但其功能尚不够完善. 尽管概率混合模型(作为生成模型[25-27]的代表之一)在计算效率方面表现平庸(相较于判别式模型[28,29]), 但其可解释性及数据生成(预测)能力, 在要求严谨性、参数化且需物理意义支撑的工程物理系统科学计算领域具有巨大潜力.

本文提出一套由高斯混合模型(GMM)驱动、面向工程物理系统科学计算的可解释建模与预测方法. 该方法将概率混合模型的功能从建模拓展至时间序列数据的预测. 论文首先阐述了相关理论与原创算法, 随后利用真实工程物理系统(一座真实桥梁)的测量数据进行了验证. 实验验证结果表明, 所提出的方法与算法能够在建模过程中自适应地确定 GMM 拟合阶数, 并实现 GMM 驱动的物理系统输出预测. 该方法在保持可解释性的同时, 其预测性能可逼近甚至部分超越经典深度神经网络.

2 研究方法

2.1 基于 EM 算法的 GMM 估计

GMM 作为一种通用概率混合模型,能够通过有限的高斯分量逼近任意连续概率分布,在工程物理系统输入、输出时间序列数据统计建模方面具有极强的泛化能力和灵活性. 因此, 本文选择 GMM 作为所提方法的内核模型. 本文重 GMM 的建模与参数估计理论如下:

假设 d 维特征数据 $\boldsymbol{x}=\{\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_d\}$ 服从 K 分量高斯混合分布, 其概率密度函数如下:

$$p(\boldsymbol{x})=\sum_{k=1}^{K}P_k N(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{\mu}_k,\boldsymbol{\Sigma}_k). \tag{1}$$

其中 P_k、$\boldsymbol{\mu}_k$、$\boldsymbol{\Sigma}_k$ 分别是 d 维特征数据 $\boldsymbol{x}$ 高斯混合分布的第 k 个高斯分量的混合权重、均值向量和协方差矩阵. 混合权重 P_k 满足两个基本假定, 即 $P_k>0$ 和 $\sum_{k=1}^{K}P_k=1$. N(·)表示高斯分布的概率密度函数:

For Review Only

$$N(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{\mu}_k,\boldsymbol{\Sigma}_k) = \frac{1}{\sqrt{|\boldsymbol{\Sigma}_k|(2\pi)^d}}\exp\left(-\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}_k)\boldsymbol{\Sigma}_k^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}_k)^T\right). \quad (2)$$

假设使用 $\boldsymbol{x}$ 作为先验训练数据集样本, 则 $\boldsymbol{x}$ 关于参数 $\boldsymbol{P}=\{P_1, P_2, \cdots, P_k\}$, $\boldsymbol{\mu}=\{\boldsymbol{\mu}_1, \boldsymbol{\mu}_2, \cdots, \boldsymbol{\mu}_k\}$和 $\boldsymbol{\Sigma}=\{\boldsymbol{\Sigma}_1, \boldsymbol{\Sigma}_2, \cdots, \boldsymbol{\Sigma}_k\}$的对数似然函数可以写成:

$$L(\boldsymbol{P},\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma}) = \ln\prod_{i=1}^{d} p(\boldsymbol{x}_i) = \sum_{i=1}^{d}\ln p(\boldsymbol{x}_i) = \sum_{i=1}^{d}\ln\left(\sum_{k=1}^{K} P_k N(\boldsymbol{x}_i|\boldsymbol{\mu}_k,\boldsymbol{\Sigma}_k)\right). \quad (3)$$

定义 $\boldsymbol{\Theta}=\{\boldsymbol{P}, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}\}$, 则可以通过最大似然估计来估计 GMM 的参数 $\boldsymbol{\Theta}$:

$$\hat{\boldsymbol{\Theta}} = \arg\max_{\boldsymbol{\Theta}} L(\boldsymbol{\Theta}). \quad (4)$$

使用 EM 算法迭代学习并找到 GMM 隐变量(即要估计的参数)的最大似然估计解. EM 算法包括 E 步和 M 步. E 步根据上一次迭代的估计结果计算 GMM 隐变量的后验概率. M 步则基于 E 步中计算的后验概率反复估计和迭代更新 GMM 隐变量. 使用 EM 算法进行 GMM 估计的具体过程如下:

E 步, 根据上一次迭代的估计结果计算 GMM 隐变量的后验概率:

$$R_{ik}^{(t)} = \frac{P_k^{(t)} N(\boldsymbol{x}_i|\boldsymbol{\mu}_k^{(t)},\boldsymbol{\Sigma}_k^{(t)})}{\sum_{k=1}^{K} P_k^{(t)} N(\boldsymbol{x}_i|\boldsymbol{\mu}_k^{(t)},\boldsymbol{\Sigma}_k^{(t)})}. \quad (5)$$

其中, $P_k^{(t+1)}$、$\boldsymbol{\mu}_k^{(t+1)}$、$\boldsymbol{\Sigma}_k^{(t+1)}$ 是第 t 次学习迭代时第 k 个高斯分量的模型参数, 这些参数是从上次迭代学习中 M 步的估计结果中获得的. 当 t=1 时, 需要将初始迭代值分配给模型参数.

M 步, 基于 E 步中计算的后验概率反复估计和迭代更新 GMM 隐变量:

$$P_k^{(t+1)} = \frac{\sum_{i=1}^{d} R_{ik}^{(t)}}{d}, \quad (6)$$

$$\boldsymbol{\mu}_k^{(t+1)} = \frac{\sum_{i=1}^{d} R_{ik}^{(t)} \boldsymbol{x}_i}{\sum_{i=1}^{d} R_{ik}^{(t)}}, \quad (7)$$

$$\boldsymbol{\Sigma}_k^{(t+1)} = \frac{\sum_{i=1}^{d} R_{ik}^{(t)} \left(\boldsymbol{x}_i-\boldsymbol{\mu}_k^{(t)}\right)\left(\boldsymbol{x}_i-\boldsymbol{\mu}_k^{(t)}\right)^T}{\sum_{i=1}^{d} R_{ik}^{(t)}}. \quad (8)$$

其中, $P_k^{(t+1)}$、$\boldsymbol{\mu}_k^{(t+1)}$、$\boldsymbol{\Sigma}_k^{(t+1)}$ 是第 t+1 次学习迭代的第 k 个高斯分量的模型参数.

最后, 反复执行 E 步和 M 步的迭代学习过程, 直到对数似然函数收敛.

2.2 GMM 最优拟合阶数的自适应确定方法

无论是基于 EM 算法还是变分推理等其它方法, GMM 的参数估计都需要提前确定最优的拟合阶数(即 K 值). 对于工程科学中物理系统科学计算, K 值的确定在很大程度上依赖于相应工程专业的先验知识. 本文提出了一种自适应的 K 值确定方法, 该方法可以在缺少甚至没有工程专业先验知识的情况下, 根据数据本身确定 K 值.

本文通过计算先验训练数据集频率直方图的各直方高度与各直方区间中心处的 GMM 估计函数概率值之间的均方根误差(RMSE)来确定最优 K 值. RMSE 的计算公式如下:

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}(t_n - c_n)^2}. \quad (9)$$

其中, 对于一元 GMM, t_n 是取频率直方图每个直方高度值的目标数据, c_n 是取频率直方图每个直方中心处的 GMM 估计函数概率值的计算结果, N 是频率直方图的直方数. 如果是二元 GMM, 将有 $N_1 \times N_2$ 个频率直方图区间, 其中 N_1 和 N_2 是两个变量方向上的频率直方图直方数. 此时, 仍可以根据式(9)先计算 RMSE 在单个变量方向上的 N_1 或 N_2 个值, 然后在另一个变量方向求其平均, 即为二元变量的 RMSE 值. 大于二元的 GMM 不能绘制为直方图, 可解释性较差, 故本文考虑以将大于二元的 GMM 转化为多个二元 GMM 的方式处理, 所以不涉及计算三元及以上 GMM 的 RMSE 值计算.

算法 1 给出了所提出的 GMM 最优拟合阶数的自适应确定方法的算法.

算法 1 频率直方图辅助 GMM 最优拟合阶数 K 的自适应确定

1: **输入**: 不超过 2 维的先验训练数据集 $\boldsymbol{x}$, 以及 $\boldsymbol{x}$ 在每个维度的频率直方图的直方数.
2: 计算 $\boldsymbol{x}$ 的频率直方图各直方中心位置和对应频率.
3: 创建空集的 **RMSE** 向量.
4: 令 K = 1.

For Review Only

5: **重复 6-19**.
6: 采用式(1)~(8)估计具有 K 个混合高斯分量 GMM 概率密度函数 $p(\boldsymbol{x})$.
7: 计算在频率直方图各直方中心的 GMM 估计函数的概率值.
8: 采用式(9)计算频率直方图的各直方高度与各直方中心位置 GMM 估计函数概率值之间的 *RMSE* 值.
9: **如果** $\boldsymbol{x}$ 是一维数据集.
10: 直接将所计算的 RMSE 值作为第 K 个 RMSE 值.
11: **如果** $\boldsymbol{x}$ 是二维数据集.
12: 先计算单个变量方向的多个 RMSE 值, 然后求其平均值, 并作为第 K 个 RMSE 值.
13: **结束如果判定**.
14: 将第 K 个 RMSE 值添加到 **RMSE** 向量中.
15: **如果** $K > 1$.
16: 计算 **RMSE** 向量中两两元素的差向量, 并将其作为**ΔRMSE** 向量.
17: **结束如果判定**.
18: $K \leftarrow K + 1$.
19: **重复直到 RMSE** 向量的第 K 个元素 $< \tau_1$ 且 **ΔRMSE** 向量的第 K-1 个元素 $> \tau_2$.
20: **输出**: K 值.

在**算法 1** 中, 一般情况下 RMSE 向量内的值是大于零且逐步减小的、而ΔRMSE 向量内的值是小于零且逐步增大的, τ_1 和 τ_2 的设置虽然仍需要工程专业的先验知识. 然而, 通过上述算法的过程, K 值的确定至少实现了从主观定性分析到客观定量分析的转变. 此外, 作者认为: 满足关于 τ_2 的收敛条件的重要性大于满足关于 τ_1 的收敛条件, 因为满足关于 τ_2 的收敛条件反映了 RMSE 的变化趋势趋于稳定.

2.3 基于 GMM 的 MISO 系统输出时间序列数据预测方法

GMM 在多维数据的动态建模和聚类方面已得到了深入的探索, 并在工程领域得到了广泛应用. 而它在时间序列数据的统计特征回归和预测方面也同样具有极强的发展潜力. 基于上一节中可动态建模的自适应 K 值确定的二元 GMM, 结合工程应用中具有多个主导因素的物理系统时间序列输出数据预测的实际需求, 本文提出了一种面向多输入-单输出(MISO)场景的基于多个二元 GMM 的新型系统输出时间序列数据预测方法.

所提方法首先建立与 MISO 系统的各个“单因素自变量–目标因变量”相对应的二元 GMM, 然后通过与各单因素自变量相对应的二元 GMM 及其自变量数据来预测在同一时刻的目标因变量值. 需要指出的是: 由于 MISO 系统的多个输入之间可能存在耦合, 建议根据先验知识选取相对独立的输入进行建模和预测, 以减小本文方法与算法的计算消耗; 如果存在多个相关联(即具备一定耦合性)的输入, 会增加整个方法计算消耗, 但并不会影响预测精度.

假设具有 1 个目标因变量和 J 个单因素自变量的 MISO 系统的第 j 个二元 GMM 的概率密度函数为:

$$p^j(\boldsymbol{x}^j_{indep}, \boldsymbol{x}_{dep} \,|\, \boldsymbol{P}^j, \boldsymbol{\mu}^j, \boldsymbol{\Sigma}^j). \tag{10}$$

其中, 模型参数 $\boldsymbol{P}^j$ 、$\boldsymbol{\mu}^j$ 、$\boldsymbol{\Sigma}^j$ 可以通过 2.1 节的过程确定最优的 K 值并据此进行参数估计, $\boldsymbol{x}^j_{indep}$ 为先验训练数据集 $\boldsymbol{x}$ 中的第 j 个单因子自变量, $\boldsymbol{x}_{dep}$ 为先验训练数据集 $\boldsymbol{x}$ 中目标的因变量; $j = 1, \cdots, J$; $\boldsymbol{x}_{indep} = \left\{\boldsymbol{x}^1_{indep}, \boldsymbol{x}^2_{indep}, \cdots, \boldsymbol{x}^J_{indep}\right\}$.

假设有数据集 $\boldsymbol{x}^*$, 它与之前的先验训练数据集 $\boldsymbol{x}$ 来自同一物理系统, 故其与 $\boldsymbol{x}$ 具有相似的统计特征. 将 s 时刻的第 j 个单因子自变量值(即 $\boldsymbol{x}^{*j}_{indep}(s)$)代入式(10), 得到以下形式:

$$p^j(\boldsymbol{x}^*_{dep} \,|\, \boldsymbol{x}^{*j}_{indep}(s); \boldsymbol{P}^j, \boldsymbol{\mu}^j, \boldsymbol{\Sigma}^j). \tag{11}$$

由于 $\boldsymbol{P}^j$ 、$\boldsymbol{\mu}^j$ 、$\boldsymbol{\Sigma}^j$ 可以通过前述过程基于先验训练数据集 $\boldsymbol{x}$ 确定, 因此式(11)可以缩写为:

$$p^j(\boldsymbol{x}^*_{dep} \,|\, \boldsymbol{x}^{*j}_{indep}(s)). \tag{12}$$

然后, 对于数据集 $\boldsymbol{x}^*$的每个单因素自变量, 可以根据式(12)预测 s 时刻的目标因变量的值(即 $\boldsymbol{x}^*_{dep}(s)$). 本文提出多种推理预测指标, 它们的公式如下:

$$I_1 = \boldsymbol{x}^*_{dep} \left| \max_{\boldsymbol{x}^*_{dep}} \left\{ p^j(\boldsymbol{x}^*_{dep} \,|\, \boldsymbol{x}^{*j}_{indep}(s)) \right\}, \right. \tag{13}$$

$$I_2 = \boldsymbol{x}^*_{dep} \cdot \frac{p^j(\boldsymbol{x}^*_{dep} \,|\, \boldsymbol{x}^{*j}_{indep}(s))}{\sum p^j(\boldsymbol{x}^*_{dep} \,|\, \boldsymbol{x}^{*j}_{indep}(s))}, \tag{14}$$

For Review Only

$$I_3 = \boldsymbol{x}^*_{dep} \circ \tanh\left(\frac{3}{\max\left(\left|\boldsymbol{x}^*_{dep}\right|\right)} \boldsymbol{x}^*_{dep}\right) \cdot \frac{p^j\left(\boldsymbol{x}^*_{dep} \middle| \boldsymbol{x}^{*j}_{indep}(s)\right)}{\sum p^j\left(\boldsymbol{x}^*_{dep} \middle| \boldsymbol{x}^{*j}_{indep}(s)\right)}, \tag{15}$$

$$I_4 = p^j\left(K \middle| \boldsymbol{x}^*_{dep}, \boldsymbol{x}^{*j}_{indep}(s)\right)\boldsymbol{\mu}^j_{dep} \cdot \frac{p^j\left(\boldsymbol{x}^*_{dep} \middle| \boldsymbol{x}^{*j}_{indep}(s)\right)}{\sum p^j\left(\boldsymbol{x}^*_{dep} \middle| \boldsymbol{x}^{*j}_{indep}(s)\right)}, \tag{16}$$

$$I_5 = p^j\left(K \middle| \boldsymbol{x}^*_{dep}, \boldsymbol{x}^{*j}_{indep}(s)\right)\boldsymbol{\mu}^j_{dep} \circ \tanh\left(\frac{3}{\max\left(\left|\boldsymbol{x}^*_{dep}\right|\right)} \boldsymbol{x}^*_{dep}\right) \cdot \frac{p^j\left(\boldsymbol{x}^*_{dep} \middle| \boldsymbol{x}^{*j}_{indep}(s)\right)}{\sum p^j\left(\boldsymbol{x}^*_{dep} \middle| \boldsymbol{x}^{*j}_{indep}(s)\right)}, \tag{17}$$

$$I_6 = (I_1 + I_2)/2, \tag{18}$$

$$I_7 = (I_1 + I_3)/2, \tag{19}$$

$$I_8 = (I_1 + I_4)/2, \tag{20}$$

$$I_9 = (I_1 + I_5)/2. \tag{21}$$

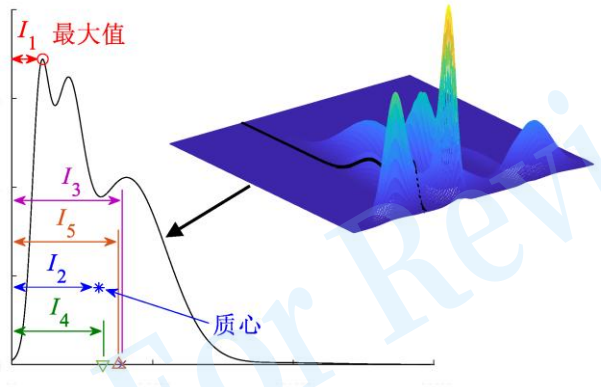


图 2 预测推断指标的物理和几何意义示意图

Figure 2 Schematic diagram on the physical and geometric meaning for inference indicators of prediction

图 2 给出了使用一组来自真实物理系统的数据测算并解释式(13)~(21)中预测推理指标的物理和几何意义示意图. 结合图2可以很好地理解I_1~I_9的意义: I_1 是对应于式(12)函数最大值处的横坐标; I_2 是与式(12)函数所包围区域的质心对应的横坐标, · 表示点积; I_3 则为 I_2 指标乘以激活函数(本文中使用双曲正切函数), 以此引入非线性, ∘表示哈达玛积[30]; I_4 是将 I_2 指标中的 $\boldsymbol{x}^*_{dep}$ 替换为 $\boldsymbol{x}^*_{dep}$ 和 $\boldsymbol{x}^{*j}_{indep}(s)$ 的后验概率乘以 $\boldsymbol{\mu}^j_{dep}$, $\boldsymbol{\mu}^j_{dep}$ 指代第 j 个二元 GMM 中目标因变量的均值向量估计结果; I_5 则为 I_4 指标乘以使用双曲正切激活函数的结果. I_6、I_7、I_8 和 I_9 分别是 I_1、I_2、I_3、I_4 和 I_5 的线性组合, 读者复现本方法时也可结合实际需求采用其它组合方式.

算法 2 多二元 GMM 驱动的目标时间序列预测

1: **输入**: J 个分别与“各单因素自变量和目标因变量”相关的二元 GMM(即 J 个 $p^j\left(\boldsymbol{x}^j_{indep}, \boldsymbol{x}_{dep} \middle| \boldsymbol{P}^j, \boldsymbol{\mu}^j, \boldsymbol{\Sigma}^j\right)$), 以及数据长度为 S、包含各单因自变量的数据集 $\boldsymbol{x}^*$.

2: **做** $s \in \{2, \cdots, S\}$ **的循环**.

3: **做** $j \in \{1, \cdots, J\}$ **的循环**.

4: 计算 $p^j\left(\boldsymbol{x}^*_{dep} \middle| \boldsymbol{x}^{*j}_{indep}(s)\right)$.

5: 计算推理预测指标 I_1、I_2、I_3、I_4、I_5、I_6、I_7、I_8 和 I_9.

6: 寻找$\{I_1, I_2, I_3, I_4, I_5, I_6, I_7, I_8, I_9\}$中最接近目标值的值; 目标值可选上一时刻观察到的目标因变量值, 即 $\boldsymbol{x}^*_{dep}(s-1)$; 然后, 将该最接近的值作为第 j 个二元 GMM 在的 s 时刻的预测值, 即 $\boldsymbol{x}^{*j}_{dep}(s)$ 的预测值.

7: **结束** j **的循环**.

8: 计算各二元 GMM 预测的$\{\boldsymbol{x}^{*1}_{dep}(s), \cdots, \boldsymbol{x}^{*j}_{dep}(s), \cdots, \boldsymbol{x}^{*J}_{dep}(s)\}$的平均值, 并将其作为 $\boldsymbol{x}^*_{dep}(s)$ 的预测值.

9: **结束** s **的循环**.

10: **输出**: $\boldsymbol{x}^*_{dep}$ 在 $s \in \{2, \cdots, S\}$所有时刻的预测值.

在**算法 2** 中, $\boldsymbol{x}^{*1}_{dep}(s)$、$\boldsymbol{x}^{*j}_{dep}(s)$ 和 $\boldsymbol{x}^{*J}_{dep}(s)$ 表示时刻 s 的目标因变量的预测值, 这些值由第 1、第 j 和第 J 个二元 GMM 推断得出. 本文中, $\{I_1, I_2, I_3, I_4, I_5, I_6, I_7, I_8, I_9\}$的目标值使用上一时刻的观察值; 如果观测值未知, 该目标值也可以使用在上一时刻循环中得到的预测值. 对于循环起点 s=1, 由于不存在上一时刻, 可直接采用该时刻的实际观测值作为推理指标的参考目标值; 若该观测值缺失, 则以对应二元 GMM 的初始期望作为替代.

3 结果分析

3.1 实验数据来源

采用真实工程物理系统的测量数据对本文所提方法与算法进行有效性验证. 实验使用的数据集(如

For Review Only

图 3 所示)为中国上海与江苏公、铁交通线上某座千米级主跨斜拉桥的桥址处风速、风向数据，以及该桥某根拉索的振动加速度幅值数据. 该数据集属于典型时间序列数据，序列内的各个元素间存在明显的前后时间序列逻辑关联性.

数据集的长度为 28800，数据持续时长为 20 天. 风速风向数据由机械风速仪测得，其采样频率为 1/60Hz. 桥梁拉索振动加速度由加速度传感器测得，其采样频率为 50Hz；测得数据后，每 60 秒提取一次加速度信号的幅值. 由于风向单位的特殊性，当实际风向在 360°附近变化时，原始时间序列信号可能出现从 360°到 0°的突变； 然而，这种突变仅代表风向从接近 360°增大到略超过 360°(或反之)，并非真正的大于 360°的剧烈变化；为避免风向信号在 0°和 360°附近频繁跳变，本文对接近 0°和 360°的原始风向数据进行了±360°的平移补偿，以确保时间序列信号的连续性. 该数据集曾被 Zhao 等的研究[31]采用.

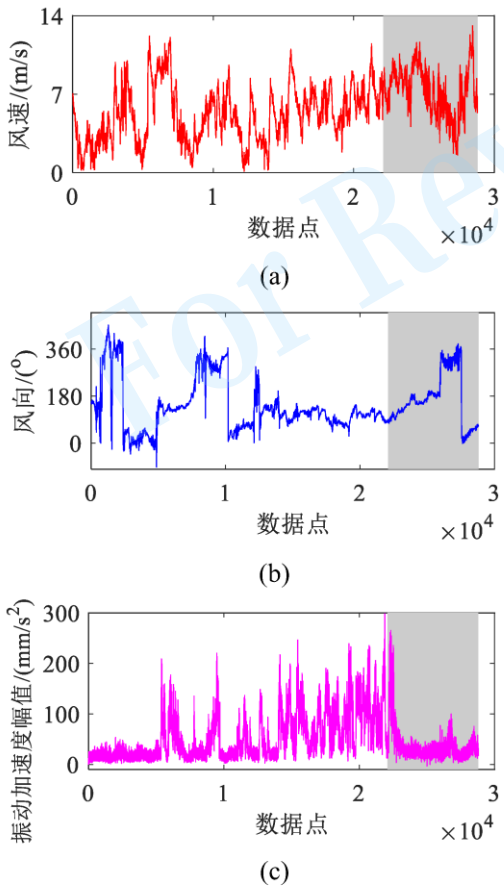


图 3 用于验证的真实工程物理系统测量数据集: (a)风速; (b)风向; (c)振动加速度幅值

Figure 3 Measurement data set from real engineering physical system for verification: (a) Wind speed ; (b) Wind direction ; (c) Vibration acceleration amplitude

如图 3 所示，在采用该数据集验证本文所提方法与算法时，数据集前 22100 组数据用于建立 GMM，全部 28800(前 22100+后 6700)组数据用来作预测结果的验证.

3.2 建模结果分析

基于物理和力学知识，拉索结构在特殊的风环境条件下容易发生高幅振动. 因此，依据桥址风环境参量(风速、风向)数据与桥梁拉索振动加速度幅值数据的潜在关联关系.

本文选取两组具有因果关联的二维数据进行 GMM 建模分析: 第一组为风速与结构振动加速度幅值，第二组为风向与结构振动加速度幅值. 图 4 中展示了基于两组风环境参量与结构振动加速度幅值数据的二元 GMM 建模结果: 图 4(a)为风速-振动加速度幅值的二元 GMM 建模结果，图 4(b)为风向-振动加速度幅值的二元 GMM 建模结果. 二维概率密度分布揭示了不同风环境参量与结构振动加速度幅值之间的统计关联关系. 以图 4(a)为例，在风速约 1.5–3.5 m/s 的区间且振动加速度幅值极小(17 mm/s^2 左右)的区域出现了极高的概率密度峰值，表明在该风速区间桥梁拉索结构出现了大量的低幅自由振动. 又如图 4(b)中，在风向约 80–120° 的区间且振动加速度幅值偏大(大于 100 mm/s^2)的区域出现了一些次高的概率密度峰值，表明该风向区间的作用容易激起桥梁拉索结构的一些高幅振动.

如图 4 中两组二元 GMM 所对应的 RMSE-ΔRMSE 曲线所示，该两组二元 GMM 分别在分量数迭代至 K=6 和 K=9 时逐渐趋于平稳，对应的二元 GMM 达到最优拟合状态. 结果表明本文提出的基于 RMSE-ΔRMSE 的判据能够在缺少甚至没有相关工程专业先验知识的情况下，根据数据本身有效确定 GMM 的最优 K 值.

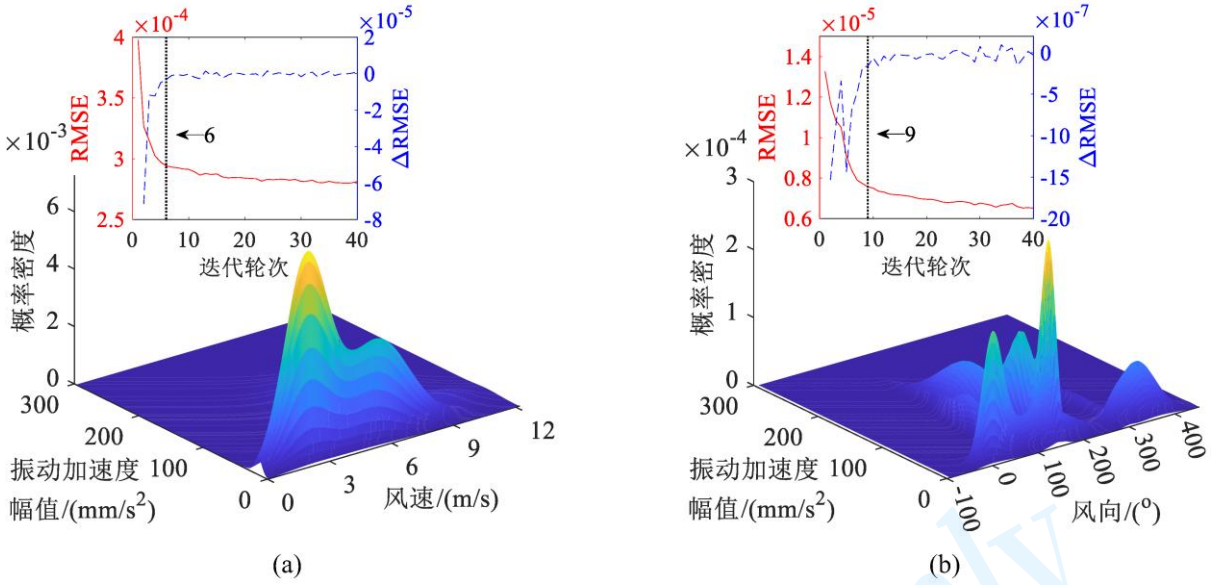


图 4 数据集建模及 *K* 值的优化过程: (a)风速-振动加速度幅值二元 GMM 建模; (b)风向-振动加速度幅值二元 GMM 建模

Figure 4 Data set modeling and the optimization process of K value: (a) Binary GMM modeling of wind speed and vibration acceleration amplitude ; (b) Binary GMM modeling of wind direction and vibration acceleration amplitude

3.3 预测结果分析

基于已构建的最优二元 GMM 模型(分别针对风速-结构振动加速度幅值与风向-结构振动加速度幅值建模), 任一时刻的目标变量(结构振动加速度幅值)均可由风速和风向这两个单一因子联合预测. 该实现范式可推广至物理系统中具有多输入(大于等于两个)单输出的所有场景.

图 5 和表 1 对比了本文提出的 GMM 驱动预测方法与双向长短期记忆(Bi-LSTM)网络方法(使用 Zhao 等研究[32]中的网络模型架构)、贝叶斯多元线性回归方法(使用 Zhao 等研究[33]中的理论模型)对不同时间区间的预测结果, Bi-LSTM 网络、贝叶斯多元线性回归使用相同数据集进行对比验证. 图 5(b)–(d)展示了两类方法预测值与实测值之间的散点分布图; 并给出了散点的相关系数(CC), 以量化预测结果与实测数据的线性相关程度. 表 1 总结了各方法在预测不同区段的 RMSE 和预测结果与实测数据散点的相关系数, 用于量化评价两类方法在不同时间区间的预测性能. 图 5(a)中本文方法预测结果为采用前 22100 组数据所建立 GMM 对全 28800 区间的预测结果; 贝叶斯多元线性回归的预测结果为采用全 28800 组数据所建模型自回归预测全 28800 区间的预测结果; 而 Bi-LSTM 网络的预测结果分别为采用全 28800 组数据所建模型自回归预测全 28800 区间和采用前 22100 组数据所建模型预测后 6700 区间的预测结果.

结合图 5 和表 1 可以发现, 本文所提的 GMM 驱动预测方法在利用前 22100 组数据所建立 GMM 对全 28800 区间和后 6700 区间进行预测时, 均取得了较低的 RMSE(13.8111 与 13.7182)以及较高的相关系数(0.9527 与 0.9139), 并显示出在新数据生成式预测任务下的精度与稳定性优势. 相比之下, Bi-LSTM 网络虽在全 28800 区间段自回归预测时取得了略优的精度(RMSE 为 11.9720, 相关系数为 0.9686), 但在新数据生成式预测时(即前 22100 组数据预测全 28800 区间和前 22100 组数据预测后 6700 区间)性能波动明显, 无论是利用前 22100 组数据训练模型预测全 28800 区间(RMSE 升至 18.5184, 相关系数降至 0.9124), 还是利用前 22100 组数据训练模型预测后 6700 区间(RMSE 升至 35.4252, 相关系数降至 0.5463), 其精度和稳定性均显著下降. 此外, 还可以发现: 对于贝叶斯多元线性回归等经典的可解释性回归预测方法, 虽然能提供可解释性支撑, 但在进行如本文示例数据集这类波动性较高的系统输出预测任务时, 其预测精度实在难以让人满意.

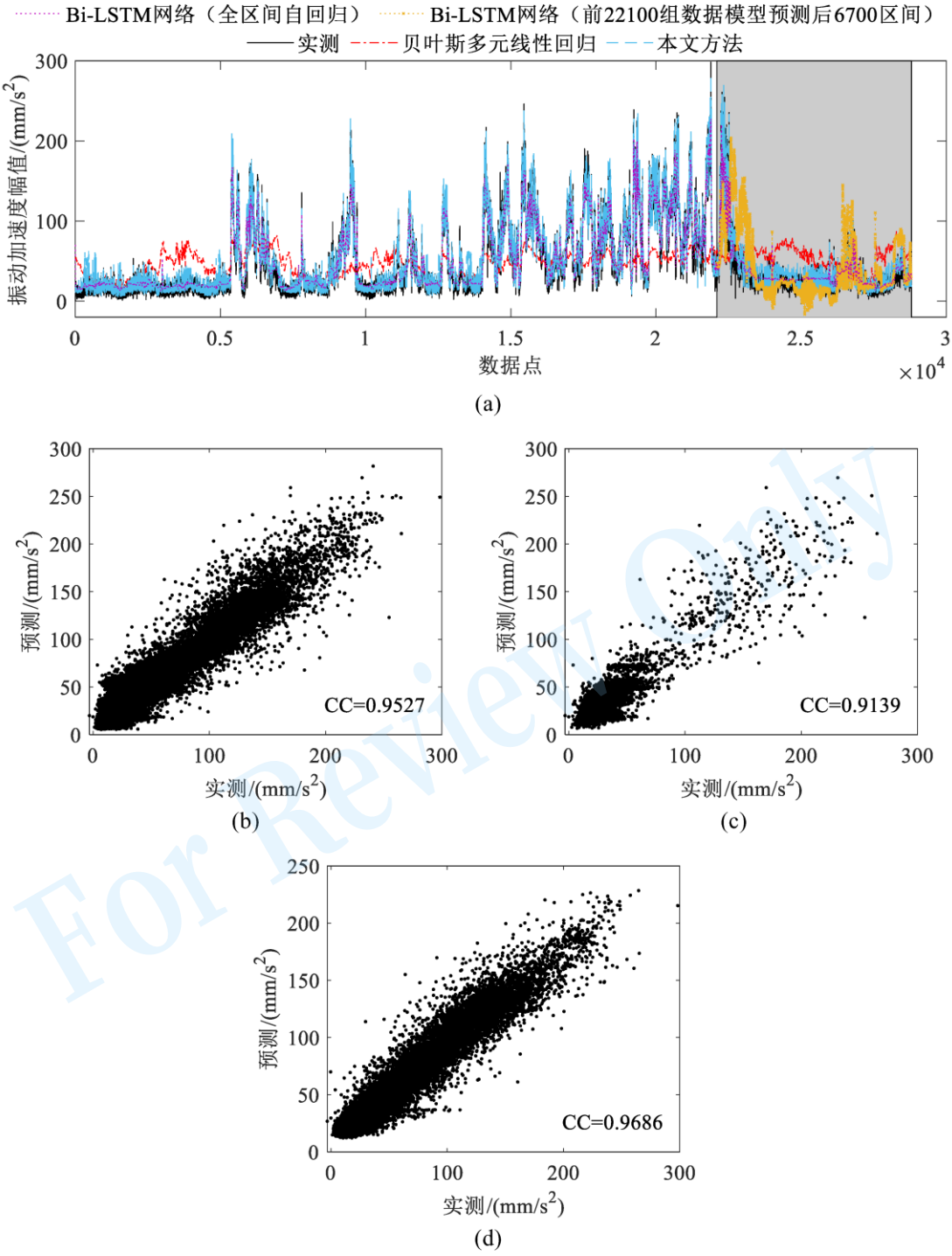


图 5 (网络版彩图) GMM 驱动预测与主流方法的比较: (a) 时间序列预测结果的比较 (b) GMM 驱动预测(前 22100 组数据所建模型预测全 28800 区间) (c) GMM 驱动预测(前 22100 组数据所建模型预测后 6700 区间) (d) Bi-LSTM 网络(全 28800 组数据所建模型自回归预测全 28800 区间)

Figure 5 (Color online) Comparison between the GMM-driven prediction and the popular methods: (a) comparison of time series predictions; (b) GMM-driven predictions (models built from the first 22,100 sets of data predict the full 28,800 intervals); (c) GMM-driven predictions (models built from the first 22,100 sets of data predict the full 6,700 intervals)(D) Bi-LSTM networks (models built from the full 28,800 sets of data predict the full 28,800 intervals)

For Review Only

表 1 GMM 驱动预测与主流方法的定量比较

Table 1 Quantitative comparison of GMM driven prediction with popular methods

方法	RMSE	CC
本文所提的 GMM 驱动预测(前 22100 组数据所建模型预测全 28800 区间)	13.8111	0.9527
本文所提的 GMM 驱动预测(前 22100 组数据所建模型预测后 6700 区间)	13.7182	0.9139
Bi-LSTM 网络(全 28800 组数据所建模型自回归预测全 28800 区间)	11.9720	0.9686
Bi-LSTM 网络(前 22100 组数据所建模型预测全 28800 区间)	18.5184	0.9124
Bi-LSTM 网络(前 22100 组数据所建模型预测后 6700 区间)	35.4252	0.5463
贝叶斯多元线性回归(全 28800 组数据所建模型自回归预测全 28800 区间)	42.0135	0.3417

结果充分表明, 本文所提出的GMM驱动预测方法在预测精度与稳定性之间实现了良好的平衡, 能够在新数据生成式预测任务中输出与 Bi-LSTM 网络自回归预测精度相接近的稳定可靠结果, 表现出较强的泛化能力. 此外, 相较于专用于时间序列回归与预测的经典深度神经网络的黑箱式建模和预测过程, GMM驱动预测方法可提供各单输入因子对应的二元 GMM 及其预测分量, 以支持工程物理系统输出的影响因素重要性分析等任务; 并支持利用GMM统计参数对各单因子(输入)的统计特征与目标变量(输出)的统计特征之间的联系进行深入挖掘和研究, 从而为模型结果提供更好的可解释分析依据.

4 讨论

针对已得到深入研究与广泛应用的 GMM 建模工作, 本文提出的GMM最优 K 值自适应确定方法及算法可在最小化工程专业先验知识的条件下, 辅助求得数据集的最优 GMM. 研究发现: 对于具有多分量高斯混合分布概率特征的数据集, 若其 K 的真值为 K_t, 从统计学的角度其估计值越接近 K_t 越好(即在不超过 K_t 的前提下, K 的估计值越高越好). 然而, 对于与工程物理系统相对应的多分量高斯混合分布概率特征数据集, 最优 K 值并非 K_t, 而是一个能反映工程物理系统测量数据主要特征、同时忽略局部细小特征的 K 值(即 K 的估计值并非在不超过 K_t 的前提下越高越好); 这是因为测量数据未必能完全反映真实物理系统的本征特征, 部分局部细小特征可能源于噪声等其他因素; 此时, 数据集频率直方图直方高度与 GMM 估计函数概率值之间的 RMSE 变化量(即ΔRMSE)是否已进入接近零的平稳阶段, 可作为一项有效的判断准则.

在当前全球人工智能领域研究中鲜有关注的基于 GMM 的预测方向, 本文提出的面向 MISO 工程物理系统输出时间序列数据的 GMM 驱动预测方法与算法, 能够实现对系统输出的高精度预测(其预测值与实测值的相关系数达 0.9527, 接近经典深度神经网络预测结果的 0.9686). 所提预测方法通过建立多个单输入(即单因子变量)-输出(即目标变量)所对应的二元 GMM 实现, 这些二元 GMM 基于各单输入与输出的先验训练数据集构建而成. 研究发现: 对于波动性较高的系统输出, 可解释性与预测精度往往难以兼得(如图2中所示, 时间序列数据波动性越高, 概率密度函数所围区域的跨度越大, 导致单个推断值难以准确估计一个大范围区域), 故本文所提算法中由多个基于 GMM 测算的推理指标所组成推理池是同时达成高预测精度和可解释性的关键. 尽管在时间序列数据领域, 广为人知的经典深度神经网络(如 LSTM 网络、Transformer 网络等)可实现高精度回归与预测, 但其普遍缺乏可解释性,但不适用于需要实时校核超参数且要求超参数与物理意义清晰关联的工程物理系统与科学计算领域; 与此相比,本文方法的参数结构可解释程度高、模型生成机制与工程物理量之间具备一致性约束, 从而使预测结果能够对应实际物理含义, 在执行新数据生成式预测时表现出更优的稳定性与泛化能力.

针对桥梁结构等工程物理系统的长期时变特性, 在工程实践中建议于固定周期触发对 GMM 阶数与参数的更新, 以确保模型在工程物理系统全生命期内的准确性和有效性.

5 结论

针对现实工程物理系统中海量时间序列测量数据的处理与分析需求, 以及科学计算领域可解释人工智能方法缺乏的现状, 本文提出一套由二元 GMM

串联构建的可解释建模与预测方法体系, 其包含两项创新: 一是GMM建模中最优K值的自适应确定方法及算法, 二是GMM驱动的时间序列预测方法及算法. 第一项创新通过数据频率直方图与数据GMM估计函数间的RMSE辅助确定GMM的最优K值(即最优拟合阶数), 进而在最小化工程专业先验知识的条件下完成GMM优化建模; 第二项创新通过多个与“单输入-输出”相对应的二元GMM, 实现了MISO工程物理系统的输出时间序列预测, 相关方法及算法可根据已建立的二元GMM与当前时刻系统各输入值, 预测该时刻的系统输出. 最后, 论文使用真实工程物理系统实测数据验证了所提方法与算法的有效性.

所提方法及算法的实施范式在需明确可解释性的MISO物理系统的时间序列数据人工智能建模与预测应用场景中具有良好的推广潜力. 所提出的GMM驱动预测算法在模型参数具备明确统计与物理可解释性的前提下, 可逼近经典深度神经网络的预测性能, 并在执行新数据生成式预测时表现出更优的稳定性与泛化能力.

尽管本文所涉方法及算法目前仅在某桥梁结构健康监测系统的单一实测数据集上验证了其有效性, 但基于GMM的建模与预测框架具有高度的可扩展性与适用潜力, 预计可推广至其他类型的工程物理系统. 未来工作将通过更多其它工程领域的数据集, 进一步验证其在不同场景下的扩展性和适用性.

参考文献

1 Bao Y, Li H. Civil engineering in the era of artificial intelligence (in Chinese). China Civil Eng J, 2019, 52(05): 1–11 [鲍跃全, 李惠. 人工智能时代的土木工程. 土木工程学报, 2019, 52(05): 1–11]

2 Zhao H W, Zhang X N, Ding Y L, et al. Probabilistic mixture model driven interpretable modeling, clustering, and predicting for physical system data. Eng Appl Artif Intel, 2025: 112069

3 Ren S G, Zhang J X, Gu X J, et al. A survey of feature extraction methods for time series(in Chinese). J Chin Comput Syst, 2021, 42(02): 271–278 [任守纲, 张景旭, 顾兴健, 等. 时间序列特征提取方法研究综述. 小型微型计算机系统, 2021, 42(02): 271–278]

4 Li P P, Song S X, Wang J M. Time series symmetric pattern mining (in Chinese). J Softw, 2022, 33(03): 968–984 [李盼盼, 宋韶旭, 王建民. 时间序列对称模式挖掘. 软件学报, 2022, 33(03): 968–984]

5 Zhai J F. Time series data research based on TCN (in Chinese). Electron Technol Softw Eng, 2021, (02): 196–198 [翟剑锋. 基于TCN的时序数据研究(中文). 电子技术与软件工程, 2021, (02): 196–198]

6 Feng H, Zhou Y D, Zeng W L, et al. A physics-based PSO-BPNN model for civil aircraft noise assessment. Appl Acoust, 2024, 221: 109992

7 Yang H, Shi S C. Review of content-based image retrieval technology (in Chinese). Softw Guide, 2023, 22(04): 229–244 [杨慧, 施水才. 基于内容的图像检索技术研究综述. 软件导刊, 2023, 22(04): 229–244]

8 Guo W T, Zeng W L, Zhou Y D. A Copula-ECAC model for estimating aviation noise around airports. Transport Res D-Tr E, 2025, 142: 104666

9 Yuan Y G, Yi T H, Xin G F, et al. Research on real-time safety evaluation method of concrete bridges based on deflection monitoring (in Chinese). China Civil Eng J, 2025, 58(03): 68–82 [袁阳光, 伊廷华, 辛公锋, 等. 基于挠度监测的混凝土桥梁实时安全评估方法研究. 土木工程学报, 2025, 58(03): 68–82]

10 Karniadakis G E, Kevrekidis I G, Lu L, et al. Physics-informed machine learning. Nat Rev Phys, 2021, 3(06): 422–440

11 Xu Y, Jin X W, Li H. State-of-the-art and prospect of intelligent science and technology in civil engineering (in Chinese). J Build Struct, 2022, 43(09): 23–35 [徐阳, 金晓威, 李惠. 土木工程智能科学与技术研究现状及展望. 建筑结构学报, 2022, 43(09): 23–35]

12 Momeni A, Rahmani B, Scellier B, et al. Training of physical neural networks. Nature, 2025, 645(8079): 53–61.

13 Mazzutti T, Roisenberg M, de Freitas P J. INFGMN – Incremental Neuro-Fuzzy Gaussian mixture network. Expert Syst Appl, 2017, 89: 160–178

14 Zhang Y, Tino P, Leonardis A, et al. A Survey on Neural Network Interpretability. Ieee T Em Top Comp I, 2021, 5(5): 726–742

15 Fradi A, Daoudi K. Reduced-rank spectral mixtures Gaussian processes for probabilistic time–frequency representations. Signal Process, 2024, 218: 109355

16 Ji S L, Li J F, Du T Y, et al. Review of interpretable methods, applications and safety of machine learning models (in Chinese). J Comput Res Dev, 2019, 56(10): 2071–2096 [纪守领, 李进锋, 杜天宇, 等. 机器学习模型可解释性方法、应用与安全研究综述. 计算机研究与发展, 2019, 56(10): 2071–2096]

17 Ma W, Xie L R, Ma L, et al. Probabilistic modeling of short-term wind power prediction error and output fluctuation (in Chinese). Acta Energ Sol Sin, 2023, 44(11): 361–366 [马伟, 谢丽蓉, 马兰, 等. 短期风电功率预测误差及出力波动的概率建模. 太阳能学报, 2023, 44(11): 361–366]

For Review Only

18 Dai Y Y, Zhang M J, Jiang F Y, et al. Wind speed multi-step prediction based on the comparison of wind characteristics and error correction: Focusing on periodic thermally-developed winds. Eng Appl Artif Intel, 2024, 136: 108924

19 Huang Y, Tang Y F, VanZwieten J. Prognostics With Variational Autoencoder by Generative Adversarial Learning. Ieee T Ind Electron, 2022, 69(1): 856–867

20 Carreño A, Inza I, Lozano J A. SNDProb: A Probabilistic Approach for Streaming Novelty Detection. Ieee T Knowl Data En, 2023, 35(6): 6335–6348

21 Zhu Z, Xu M, Ke J T, et al. A Bayesian clustering ensemble Gaussian process model for network-wide traffic flow clustering and prediction. Transport Res C-Emer, 2023, 148: 104032

22 Wang K, Ye J H. Combined method of cellular automata and relevance vector machine for strong earthquake collapse prediction of vertically irregular multi-story light steel structures (in Chinese). J Build Struct, 2022, 43(08): 232–239 [王坤, 叶继红. 竖向不规则多层轻钢结构强震倒塌预测的细胞自动机与相关向量机联合法. 建筑结构学报, 2022, 43(08): 232–239]

23 Zhao H S, Sun C Y, Wen K Y. Ultra-short-term probability prediction of photovoltaic output based on multi-meteorological type weighted and improved Gaussian mixture model (in Chinese). Acta Energ Sol Sin, 2024, 45(07): 567–576 [赵洪山, 孙承妍, 温开云. 基于多气象类型加权和改进高斯混合模型的光伏出力超短期概率预测. 太阳能学报, 2024, 45(07): 567–576]

24 Jing H Q, Hu C W, He X H, et al. Ultra-short-term probabilistic forecasting method of wind speed based on spatial correlation (in Chinese). China Civil Eng J, 1-9[2025-08-29] [敬海泉, 胡采薇, 何旭辉, 等. 基于空间相关性的风速超短期概率预测方法. 土木工程学报, 1-9[2025-08-29]]

25 Yang L, Fan W T, Bouguila N, et al. Clustering Analysis via Deep Generative Models With Mixture Models. Ieee T Neur Net Lear, 2022, 33(1): 340–350

26 Lan H, Liu Z Q, Hsiao J H, et al. Clustering Hidden Markov Models With Variational Bayesian Hierarchical EM. Ieee T Neur Net Lear, 2023, 34(3): 1537–1551

27 Dai Y X, Zhang J, Qiao J, et al. Ultra-short-term output scenario generation of new energy station based on improved denoising diffusion probability model and model migration (in Chinese). Power Syst Technol, 2025, 49(02): 511–521 [戴宇欣, 张俊, 乔骥, 等. 基于改进去噪扩散概率模型和模型迁移的新能源场站超短期出力场景生成. 电网技术, 2025, 49(02): 511–521]

28 Huang G, Liu T C, Yang Y, et al. Discriminative clustering via extreme learning machine. Neural Networks, 2015, 70: 1–8

29 Yang W L, Wang H J, Zhang Y H, et al. Self-supervised Discriminative Representation Learning by Fuzzy Autoencoder. Acm T Intel Syst Tec, 2023, 14(1): 11

30 Styan G P H. Hadamard products and multivariate statistical analysis. Linear Algebra Appl, 1973, 6: 217–240.

31 Zhao H W, Ding Y L, Li A Q, et al. State-monitoring for abnormal vibration of bridge cables focusing on non-stationary responses: From knowledge in phenomena to digital indicators. Measurement, 2022, 205: 112148

32 Zhao H W, Ding Y L, Li A Q, et al. Digital modeling approach of distributional mapping from structural temperature field to temperature-induced strain field for bridges. J Civ Struct Health, 2023, 13(1): 251–267

33 Zhao H W, Ding Y L, Meng L B, et al. Bayesian Multiple Linear Regression and New Modeling Paradigm for Structural Deflection Robust to Data Time Lag and Abnormal Signal. Ieee Sens J, 2023, 23(17): 19635–19647

Interpretability forecasting for time series data driven by probabilistic mixture model

QIN YiDan[1], ZHAO HanWei[1,2], ZHANG XiaoNan[1], DING YouLiang[1,2], GUO Tong[1,2], CHEN Bin[3]

[1] *School of Civil Engineering, Southeast University, Nanjing 210096, China*
[2] *Key Laboratory of Concrete and Pre-stressed Concrete Structures of the Ministry of Education , Southeast University, Nanjing 210096, China*
[3] *China Railway Bridge & Tunnel Technologies Co., Ltd., Nanjing 210061, China*

To meet the demands for efficient processing, interpretable modeling, and accurate prediction of large-scale, multi-factor time-series data in engineering physical systems, this study proposes a Gaussian Mixture Model (GMM)-driven framework for input–output data modeling and output prediction. Building upon conventional GMM modeling, two algorithmic innovations are introduced. First, a statistically grounded adaptive scheme is developed to determine the optimal GMM order by minimizing the root mean square error (RMSE) between empirical data histograms and GMM estimates, thereby reducing reliance on domain-specific prior knowledge. Second, a generative prediction approach is established for multi-input single-output (MISO) systems by integrating multiple bivariate GMMs. The proposed method is validated using field measurements of wind environments and corresponding structural

For Review Only

responses collected from a real-world bridge. Results demonstrate that, while providing interpretable parameters, the GMM-driven prediction method achieves accuracy comparable to state-of-the-art deep neural networks and exhibits enhanced robustness and generalization capability in generative prediction of new data.

Engineering artificial intelligence, probabilistic machine learning, input and output data of physical system, interpretability for artificial intelligence, structural health monitoring

For Review Only