

# 基于 Regression GAN 的原油总氢物性预测方法

郑念祖<sup>1</sup> 丁进良<sup>1</sup>

**摘要** 针对生成对抗网络 (Generative adversarial network, GAN) 不适用于原油物性回归预测的问题, 本文提出一种回归生成对抗网络 (Regression GAN, RGAN) 结构, 该结构由生成模型 G、判别模型 D 及回归模型 R 组成. 通过判别模型 D 与生成模型 G 间的对抗学习, D 提取原油物性核磁共振氢谱 (<sup>1</sup>H NMR) 谱图的潜在特征. 首层潜在特征是样本空间的浅层表示, 利于解决回归问题, 采用首层潜在特征建立回归模型 R, 提高了预测的精度及稳定性. 通过增加条件变量和生成样本间的互信息约束, 并采用回归模型 R 的 MSE 损失函数估计互信息下界, 生成模型 G 产生更真实的样本. 实验结果表明, RGAN 有效地提高了原油总氢物性回归预测精度及稳定性, 同时加快了生成模型的收敛速度, 提高了谱图的生成质量.

**关键词** 回归生成对抗网络, 原油物性预测, 生成对抗网络, 核磁共振氢谱

**引用格式** 郑念祖, 丁进良. 基于 Regression GAN 的原油总氢物性预测方法. 自动化学报, 2018, 44(5): 915–921

**DOI** 10.16383/j.aas.2018.c170485

## Regression GAN Based Prediction for Physical Properties of Total Hydrogen in Crude Oil

ZHENG Nian-Zu<sup>1</sup> DING Jin-Liang<sup>1</sup>

**Abstract** In view that generative adversarial network (GAN) is not applicable to prediction of physical properties of crude oil, a novel regression GAN (RGAN) framework is proposed in this study, which consists of a generator G, a discriminator D and a regression model R. Through adversarial learning between discriminator D and generator G, D extracts a series of latent features of <sup>1</sup>H nuclear magnetic resonance spectroscopy (<sup>1</sup>H NMR) of crude oil. The first layer of latent features is shallow representation of the data space, which helps to solve the regression task. The regression model R is established using the first layer of latent features, which improves the accuracy and stability of the prediction. At the same time, the MSE loss function of the regression model R is applied to estimate the lower bound of the mutual information between conditional variables and generated samples, therefore generator G can produce more realistic samples. Experiment results demonstrate that RGAN can improve the prediction accuracy and stability of physical properties of total hydrogen in crude oil efficiently, and also improve the convergence speed of the generator as well as the quality of spectra generation.

**Key words** Regression generative adversarial network (RGAN), prediction of crude oil properties, generative adversarial nets (GAN), <sup>1</sup>H nuclear magnetic resonance spectroscopy (<sup>1</sup>H NMR)

**Citation** Zheng Nian-Zu, Ding Jin-Liang. Regression GAN based prediction for physical properties of total hydrogen in crude oil. *Acta Automatica Sinica*, 2018, 44(5): 915–921

核磁共振氢谱 (<sup>1</sup>H nuclear magnetic resonance spectroscopy, <sup>1</sup>H NMR) 可用于检测有机化合物中氢原子与周围化学官能团的相互作用, 在化学、中药材质量及药物分析方面早已得到广泛研究<sup>[1–2]</sup>. 近年来, 该技术得到迅速发展. 作为新的原油物性预测

手段之一, 该技术制样简单、灵敏度与分辨率较高, 提供结构信息丰富, 具有良好的发展潜力与应用前景<sup>[3–5]</sup>.

由于原油物性复杂多变, 常用的建模方法诸如偏最小二乘回归 (Partial least square regression, PLSR)、支持向量机 (Support vector machine, SVM)、卷积神经网络 (Convolutional neural network, CNN) 等往往无法适用于实际复杂的非线性关系, 因此模型的泛化能力在一定程度上受到限制<sup>[6–8]</sup>. 近年来, 生成对抗网络 (Generative adversarial network, GAN) 以其对抗学习成为人工智能领域的一个热门方向<sup>[9]</sup>, 其基本思想在于判别模型 D 通过对抗学习提取样本空间的潜在特征表示, 迫使生成器 G 的概率分布匹配于未知的真实的

收稿日期 2017-08-31 录用日期 2017-12-23  
Manuscript received August 31, 2017; accepted December 23, 2017

国家自然科学基金 (61590922, 61525302), 教育部科研业务费项目 (N160801001, N161608001) 资助

Supported by National Natural Science Foundation of China (61590922, 61525302) and the Research Funds by the Ministry of Education of China (N160801001, N161608001)

本文责任编辑 谭莹

Recommended by Associate Editor TAN Ying

1. 东北大学流程工业综合自动化国家重点实验室 沈阳 110819

1. State Key Laboratory of Synthetical Automation for Process Industries, Northeastern University, Shenyang 110819

数据分布. 与传统的生成模型不同, GAN 不是直接对样本空间中每个样本点进行概率密度估计, 而是通过生成器  $G$  对样本分布进行隐式表达. 因此, 如何将 GAN 对抗学习获得的潜在特征表示充分利用以提高回归模型的泛化能力是一个值得思考的问题.

本文尝试解决预测回归问题, 同时能够学习得到一个生成模型. 近年来, 在分类任务中采用生成模型的研究受到了广泛的关注, 并取得了许多进展. Kingma 等<sup>[10]</sup> 采用变分方法改进深度生成模型和近似贝叶斯推理, 使得生成方法适用于半监督分类问题; Radford 等<sup>[11]</sup> 将判别模型  $D$  中全部特征层应用于分类, 取得了不错的效果, 但其存在判别模型  $D$  与分类模型  $C$  不能同时联合训练的问题; Springenberg 等<sup>[12]</sup> 提出 CatGAN (Categorical generative adversarial networks) 对 GAN 进行半监督形式拓展, 通过引入类别损失来进行指导 GAN 的学习, 其基于熵损失的无监督学习方法表现较好. 然而, 以上工作均是应用于分类问题中, 为此, 我们提出一种回归生成对抗网络 (Regression generative adversarial network, RGAN) 对 GAN 进行拓展, 从而应用于回归问题中, 该模型同时训练得到回归模型  $R$  与生成模型  $G$ , 且  $R$  与判别模型  $D$  共享首层潜在特征, 在 RGAN 框架下,  $G$ ,  $D$  及  $R$  相互促进, 使得 RGAN 模型的预测精度及生成质量均得到提高.

## 1 基本原理与方法

### 1.1 GAN 的基本理论

生成对抗网络 GAN 引入一种新的生成模型训练框架, 该框架包括两部分: 1) 生成模型  $G$  捕获真实样本的概率分布, 学习如何产生新的样本尽可能“欺骗”判别模型; 2) 判别模型  $D$  尽可能判断输入的样本是否来自于生成器  $G$ ,  $G$  和  $D$  互相对抗, 形成一个最大最小博弈游戏的价值函数.

$$\min_G \max_D \mathbb{E}_{x \sim p_{\text{data}}(x)} [\log D(x)] + \mathbb{E}_{z \sim p(z)} [\log (1 - D(G(z)))] \quad (1)$$

其中,  $z$  表示从特定分布  $p(z)$  中随机采样所得的向量,  $p_{\text{data}}(x)$  表示真实样本数据的概率分布. GAN 同样存在训练过程不稳定、模型崩溃等问题. 在过去的几年中, 从各个方面提出了很多模型用于提高其性能. DCGAN (Deep convolutional generative adversarial networks)<sup>[12]</sup> 采用反卷积神经网络与卷积神经网络分别构造生成模型  $G$  与判别模型  $D$ , 并对如何建立一个稳定的 GAN 网络提供了实验性的指导; CGAN (Conditional generative adversarial nets)<sup>[13]</sup> 将条件变量同时加入  $G$  与  $D$  中, 使得样本数据的生成基于条件变量; EBGAN (Energy-

based generative adversarial network)<sup>[14]</sup> 从能量模型的角度对 GAN 进行改进; WGAN (Wasserstein GAN)<sup>[15]</sup> 将 Wasserstein 距离代替 JS 散度 (Jensen-Shannon divergence), 用于估计真实样本数据分布与生成样本分布之间的距离, 使得模型的对抗学习更加稳定, 其目标函数为

$$\min_{\theta} \max_w \mathbb{E}_{x \sim p_{\text{data}}(x)} [f_w(x)] - \mathbb{E}_{z \sim p(z)} [f_w(g_{\theta}(z))] \quad (2)$$

其中,  $f_w$ ,  $g_{\theta}$  分别为判别模型  $D$  与生成模型  $G$  的参数形式, 考虑 WGAN 训练的稳定性及指示性, 因此, RGAN 采用 Wasserstein 距离作为生成样本概率分布与真实样本概率分布之间距离的度量.

### 1.2 RGAN 模型

回归生成对抗网络 (RGAN) 包括一个生成模型  $G$ 、一个判别模型  $D$  及一个回归模型  $R$ . 其基本思想是基于判别模型  $D$  通过对抗学习得到一系列潜在特征层, 而这些特征层对于下游任务 (例如分类或回归) 往往具有促进作用, 即通过  $R$  与  $D$  共享特征层可以提高回归模型  $R$  的性能表现. 同时, 利用回归模型  $R$  估计生成模型  $G$  的条件变量与生成样本之间互信息的下界值, 约束生成模型  $G$ , 并使生成模型  $G$  产生更真实的样本. 由于对抗的性质,  $G$  迫使  $D$  的判别能力得到提升, 这又有利于回归模型  $R$  预测性能的提升, 因此就有可能利用这个闭环. 在这个闭环中  $G$ ,  $R$ ,  $D$  可以交替训练使得各自模型趋于最优. 但回归问题与分类问题的不同在于与判别模型共享的特征层不同, 对于 RGAN, 回归模型  $R$  与判别模型  $D$  共享首层潜在特征对问题的解决起关键作用, RGAN 具体结构如图 1 所示.

在图 1 中,  $G$  的输入为噪声  $z$  及条件变量  $c$ , 输出为生成样本  $x' = G(z, c)$ . 由于对抗性,  $D$  迫使  $G$  根据条件变量产生生成样本.  $R$  根据判别模型  $D$  对输入样本提取的首层潜在特征, 进行回归预测, 同时作用于生成模型  $G$  的生成过程.  $G$  采用反卷积神经网络,  $D$  由卷积神经网络及全连接层组成,  $R$  的结构则可根据具体问题选取, 本文取为卷积神经网络.

#### 1.2.1 RGAN 的目标函数

假设真实样本的数据分布为  $p_{\text{data}}(x)$ , 随机噪声  $z$  服从已知分布  $p(z)$ , 条件变量  $c$  的分布为  $p(c)$ ,  $f_w$ ,  $g_{\theta}$  和  $r_{\psi}$  分别为判别模型  $D$ , 生成模型  $G$  与回归模型  $R$  的参数形式. 根据 Wasserstein 距离, 将最大最小游戏目标函数作为  $G$  与  $D$  的价值函数.

$$\min_{\theta} \max_w \mathbb{E}_{x, c \sim p_{\text{data}}(x, c)} [f_w(x, c)] - \mathbb{E}_{z, c \sim p(z, c)} [f_w(g_{\theta}(z, c), c)] \quad (3)$$

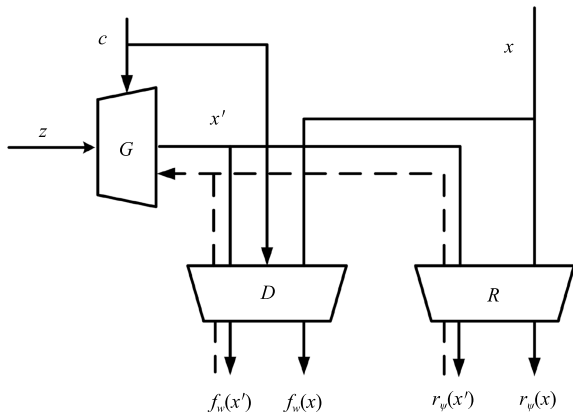


图1 RGAN 模型结构示意图

Fig.1 Diagram of model structure of RGAN

回归模型 R 包括两个部分:

1) 当其输入为真实样本  $x$ , 回归模型 R 需要尽可能根据输入的样本数据做出正确的预测, 采用 MSE 评估回归网络的预测效果.

$$\min_{\psi} \mathbb{E}_{x,c \sim p_{\text{data}}(x,c)} [c - r_{\psi}(x)]^2 \quad (4)$$

2) 当其输入为生成数据  $G(z, c)$  时, 根据变分法, 采用回归模型 R 估计  $G(z, c)$  与条件变量  $c$  之间的互信息  $I[c; G(z, c)]$  的下界值<sup>[16-17]</sup>, 该下界值通过最大化  $\mathbb{E}_{x \sim G(z,c), c} [\log r_{\psi}(c|x)]$  获得, 即最小化  $r_{\psi}(c|g_{\theta}(z, c))$  的负对数似然性 (Negative log likelihood, NLL), 通过基于 MSE 的损失函数实现.

$$\min_{\theta} \mathbb{E}_{z,c \sim p(z,c)} [c - r_{\psi}(g_{\theta}(z, c))]^2 \quad (5)$$

因此, RGAN 的目标函数表示如下:

$$\begin{aligned} \min_{\theta, \psi} \max_w \mathbb{E}_{x,c \sim p_{\text{data}}(x,c)} [f_w(x, c)] - \\ \mathbb{E}_{z,c \sim p(z,c)} [f_w(g_{\theta}(z, c), c)] + \\ \mathbb{E}_{x,c \sim p_{\text{data}}(x,c)} [c - r_{\psi}(x)]^2 + \\ \lambda \mathbb{E}_{z,c \sim p(z,c)} [c - r_{\psi}(g_{\theta}(z, c))]^2 \end{aligned} \quad (6)$$

其中,  $\lambda$  表示平衡判别模型 D 与回归模型 R 对生成模型 G 的约束作用, 然而当  $\lambda = 0$  时, RGAN 仅仅将判别模型 D 的首层潜在特征用于回归问题中, 对生成模型 G 无任何作用.

### 1.2.2 D 与 R 共享首层潜在特征层

RGAN 模型中, 判别模型 D 与回归模型 R 共享首层潜在特征层, 并非全部特征层. 原因是判别模型 D 与生成模型 G 通过对抗学习逐层对真实样本进行特征提取, 并逐层凸显有利于 D 判断样本是否来自于生成器 G 的特征, 这些特征逐层越来越有利于分类问题, 并且深层特征表示与回归问题所需

要的特征并不一致, 因此不能简单地利用判别模型 D 的全部特征层来做回归. 但考虑判别模型 D 的首层潜在特征是对真实样本空间的浅层表达, 有利于回归问题, 因此, 将其应用于回归模型以提高其泛化能力与预测精度. 如图 2 所示, RGAN 分别基于判别模型 D 的一系列特征层建立回归模型 R, 其中 Conv1, Conv2 及 Conv3 分别表示回归模型 D 中第一卷积层、第二卷积层及第三卷积层, 可以看到回归模型 R 的训练集及测试集的损失函数均随周期数逐渐减小, 同时在预测精度及训练稳定性方面, 首层潜在特征 Conv1 均优于其后的特征层. 因此 D 与 R 共享首层潜在特征对于提高回归模型的稳定性及预测精度至关重要.

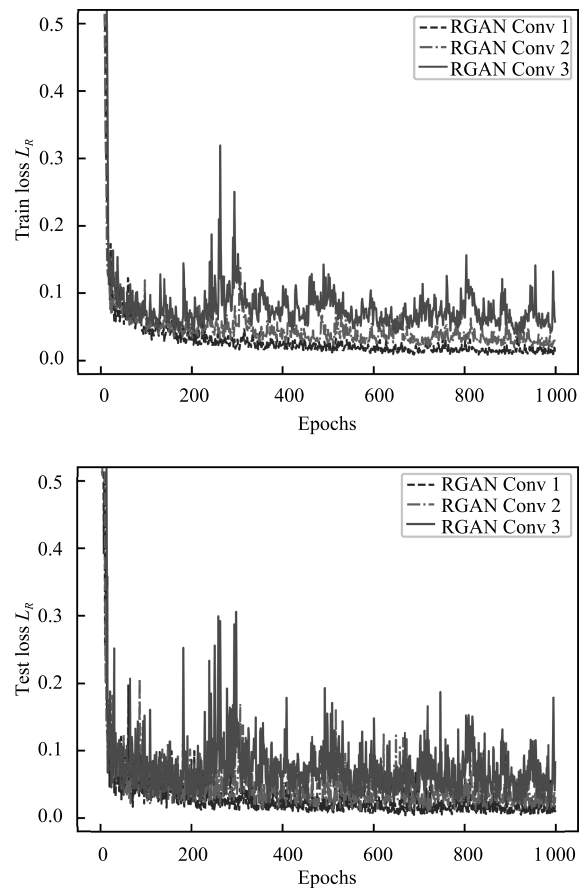


图2 基于不同特征层 RGAN 回归模型 R 的表现  
Fig.2 Performance of regression model R of RGAN based on different feature maps

## 2 实验与方法

### 2.1 实验数据的获得

本实验所用原油样本均来自中国某石油化工实际生产过程, 采用核磁共振分析仪测定样品的核磁共振氢谱, 共采集 479 组数据, 如图 3 所示, 横坐

标为化学位移值, 纵坐标为峰强度. 对应的原油物性总氢, 通过实验室标准方法测取, 其取值范围为 12.95%~13.96%. 所有核磁共振氢谱谱图及物性信息均不经过预处理, 仅归一化至  $[-1, 1]$ .

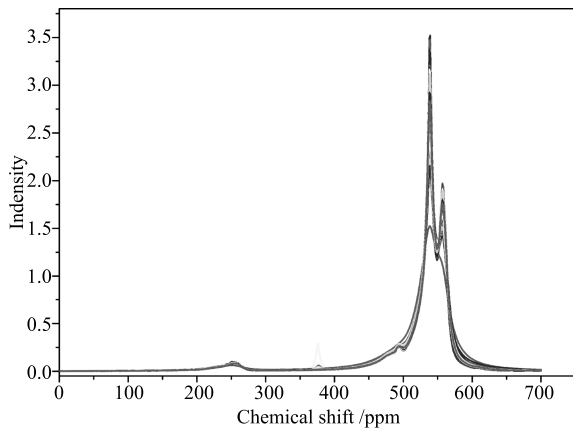


图3 原油样本核磁共振氢谱  
Fig. 3  $^1\text{H}$  nuclear magnetic resonance spectra of crude oil samples

## 2.2 回归模型定量分析的评价参数

为了评估回归模型  $R$  的模型预测精度及泛化能力, 本文采用相关系数与均方误差. 相关系数越大, 均方误差越小, 模型性能越好. 计算公式如下:

$$r = \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})(y_{i,p} - \bar{y}_p)}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} \sqrt{\sum_{i=1}^n (y_{i,p} - \bar{y}_p)^2}} \quad (7)$$

表1 RGAN 网络结构及超参数

Table 1 The network structure and hyperparameters of RGAN

Operation	Kernel	Strides	Feature maps	BN	Nonlinearity
$G(z) - 121 \times 1$ Input					
Linear(Reshape)	N/A	N/A	256	×	ReLU
Transposed Convolution	$5 \times 1$	$2 \times 1$	128	✓	ReLU
Transposed Convolution	$5 \times 1$	$2 \times 1$	64	✓	ReLU
Transposed Convolution	$5 \times 1$	$2 \times 1$	1	×	TANH
$D(x) - 1 \times 688 \times 1$ Input					
Convolution ( $M$ )	$10 \times 1$	$2 \times 1$	64	×	Leaky ReLU
Convolution	$10 \times 1$	$2 \times 1$	128	✓	Leaky ReLU
$C - 1 \times 177 \times 1$ Input					
Convolution	$10 \times 1$	$2 \times 1$	256	✓	Leaky ReLU
Fully Connected	N/A	N/A	1024	✓	Leaky ReLU
Fully Connected	N/A	N/A	1	×	NONE
$R(M) - 1 \times 344 \times 64$ Input					
Convolution	$10 \times 1$	$1 \times 1$	128	✓	Leaky ReLU
Fully Connected	N/A	N/A	1024	✓	Leaky ReLU
Fully Connected	N/A	N/A	1	✓	TANH
Optimizer	Adam ( $\alpha = 2 \times 10^{-4}$ , $\beta_1 = 0.9$ , $\beta_2 = 0.999$ )				
Batch size	32				
Iterations	1000				
Leaky ReLU slope	0.2				
Weight, bias initialization	Isotropic Gaussian ( $\mu = 0$ , $\sigma = 0.02$ )				

$$MSE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_{i,p} - y_i)^2 \quad (8)$$

式中,  $n$  为测试样本集中样本数目,  $y_i$ ,  $y_{i,p}$ ,  $\bar{y}$  和  $\bar{y}_p$  分别表示测试样本集中第  $i$  个样本对应物性的化学值、模型预测值、样本集的物性化学值均值和模型预测值均值.

## 2.3 RGAN 的实现

根据 RGAN 的目标函数及基本思想, 分为三个部分构造: 1) 生成模型  $G$ , 输入为服从分布均值为 0、方差为 0.3 的高斯噪声  $z$  及  $[-1, 1]$  间均匀分布的条件变量  $c$ . 采用三个反卷积层, 卷积核大小均为  $5 \times 1$ , 中间层和输出层的激活函数分别采用 ReLU 及双正切函数; 2) 判别网络  $D$  采用卷积神经网络, 卷积核大小为  $10 \times 1$ , 条件变量  $c$  与上层输出合并输入最后一个卷积层, 中间层均采用 Leaky ReLU 函数作为激活函数, 输出层为线性函数; 3) 回归模型  $R$  与  $D$  共享首个卷积层, 输出层的激活函数为双正切函数.  $G$ ,  $D$  与  $R$  的中间层均采用批标准化, 训练过程中, 超参数  $\lambda$  分别设置为  $\{0, 0.001, 1\}$ , 批次大小为 32, 优化器为 ADAM, 学习率为  $2 \times 10^{-4}$ ,  $G$ ,  $D$  与  $R$  交替训练, 经过约 200 周期, RGAN 训练过程趋于稳定, 具体模型结构参数见表 1.

## 3 讨论与分析

### 3.1 回归模型 $R$ 与生成模型 $G$ 的影响

RGAN 引入一个额外的超参数  $\lambda$ , 目的是使得

回归模型估计的互信息下界值可以有效作用于生成模型中, 并且超参数  $\lambda$  的取值对谱图生成与回归预测十分重要. 当超参数  $\lambda = 0$ , RGAN 退化为 WGAN, 而回归模型 R 仅仅利用了判别模型的首层潜在特征, 而无法作用于生成模型 G. 当超参数  $\lambda$  不为零时, 回归模型 R 对 G 的条件变量与生成样本的互信息估计并最大化, 使得生成模型 G 生成与条件变量相关且类似于真实样本, 同时由于对抗性质, G 迫使判别模型 D 提高性能, 并使得 D 特征层能够与条件变量相关, 从而利于基于 D 首层潜在特征建立的回归模型 R, 因此在 R, G 与 D 形成相互促进过程中, 各自模型的性能得到优化, 不仅增强了生成模型 G 的稳定性, 而且提高了回归网络 R 的预测性能.

超参数  $\lambda$  对生成 G 的影响如图 4 所示, RGAN 生成模型 G 的损失函数在初期波动随  $\lambda$  值的增大而变得剧烈, 原因在于在回归模型的约束作用增强使得生成模型能够对生成空间进行有效搜索, 然后经过短暂调整后快速收敛至上界值, 而随着训练的进行, 判别模型“突然记起”某些特征, 使得分辨真

实样本与生成样本十分容易, 因此生成模型的损失函数出现会骤降, 同时由于对抗性质, 生成模型随后学习到如何生成这些特征以“欺骗”判别模型以恢复原来达到纳什均衡, 此外, 生成模型由于回归模型 R 的作用的增大, 其稳态偏差与骤降范围均较小, 其恢复能力增强.

超参数  $\lambda$  对回归模型 R 的影响如图 5 所示, 随  $\lambda$  值的增大, 回归模型 R 初期收敛速度加快, 稳定偏差范围变小, 模型泛化能力得到增强, 从而提高了模型预测精度. 按照一般对等原则, 超参数  $\lambda$  应使得 GAN 目标函数与 R 估计的互信息值数量级一致, 太大的  $\lambda$  会导致生成模型 G 趋于强化条件变量有关的区域, 从而影响谱图生成整体效果以致不利于生成模型 G 与判别模型 D 取得纳什均衡, 此外, 对回归模型 R 也有不利影响, 因此超参数  $\lambda$  的取值往往小于对等原则对应的取值, 使得回归模型对生成过程起辅助作用.

### 3.2 回归模型 R 的预测精度

本文分别构造一个卷积神经网络 CNN 预测模

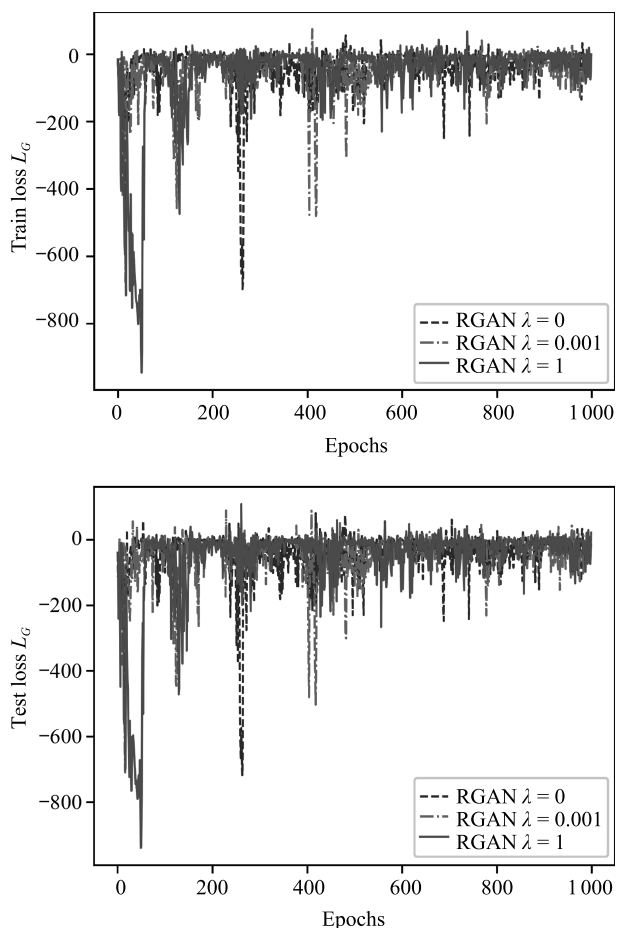


图 4 超参数  $\lambda$  对生成模型 G 的影响

Fig. 4 Effect of hyper parameter  $\lambda$  on generative model G

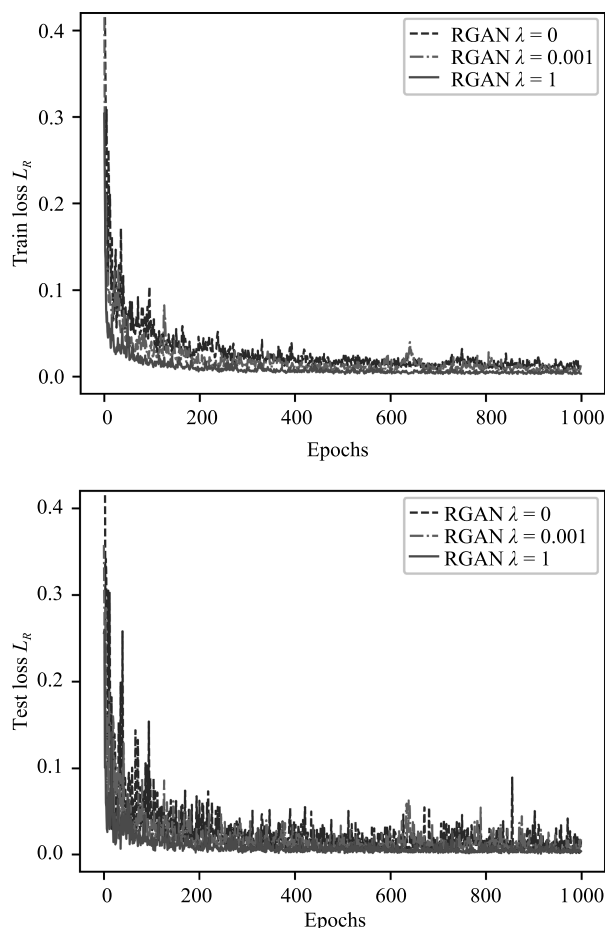


图 5 超参数  $\lambda$  对回归模型 R 的影响

Fig. 5 Effect of hyper parameter  $\lambda$  on regression model R

型和一个预训练模型 CGAN + R. 与 RGAN 结构参数一致, CGAN + R 不同的是在对抗训练过程完成之后, 将 CGAN 的首层特征应用于回归模型 R 中. 设定 CNN 与回归模型结构参数相同, CNN 与 CGAN + R 的优化器及其相关训练参数一致. 结果如表 2 所示, 与 CNN 预测模型相比, RGAN 明显提高了预测相关系数  $R_p$ , 减小了预测集的均方误差 MSEP, 且  $R_p$  和 MSEP 随  $\lambda$  的增大先分别增大、减小, 之后分别减小、增大, 表明  $\lambda$  的取值过大会严重影响对抗过程的进行, 从而不利于回归模型泛化能力的提高. 与预训练模型 CGAN + R 相比, RGAN ( $\lambda = 0$ ) 联合训练对应于动态寻优过程, 在 G 与 D 相互对抗的过程中, 判别模型 R 以次梯度逼近于全局最优解, 使得 RGAN ( $\lambda = 0$ ) 的预测效果略优于预训练模型. 在数据集不进行相关预处理的情况下, SVM 与 PLS 应用于原油物性预测模型的建立, PLS 的预测性能高于 CNN, 低于 RGAN, 因此 RGAN 通过共享首层特征, 联合训练, 使得回归模型的预测精度及泛化能力得到了有效提升.

### 3.3 NMR 谱图的生成

将服从高斯分布的随机噪声  $z$  及服从均匀分布的条件变量  $c$  分别采样, 作为 RGAN 训练得到生成

表 2 RGAN 与不同预测模型比较

Table 2 Comparison between RGAN and different prediction models

Models	$R_p$	MSEP
SVM	0.573	0.084
PLS	0.755	0.028
CNN	0.727	0.030
CGAN + R	0.756	0.027
RGAN ( $\lambda = 0$ )	0.768	0.026
RGAN ( $\lambda = 0.001$ )	0.787	0.024
<b>RGAN (<math>\lambda = 1</math>)</b>	<b>0.792</b>	<b>0.023</b>
RGAN ( $\lambda = 5$ )	0.776	0.025

模型 G 的输入, G 的输出以谱图的形式展现, 如图 6 所示, 当超参数  $\lambda$  分别为 0, 0.001 与 1 时, 每组共有 320 个  $^1\text{H}$  NMR 谱图生成样本, 不经过任何挑选, 图 6(d) 中真实  $^1\text{H}$  NMR 样本有 479 组. 由于采样的随机性及缺乏相应评价手段, 因此无法对 NMR 谱图生成的真实度进行定量分析, 但可以定性地观察到随着 RGAN 中回归模型 R 对生成模型 G 的作用逐渐增强, 生成的 NMR 谱图在化学位移值 500 左右的区域波形逐渐丰富, 抑制了生成谱图中“假峰”及“杂波”的产生, 因此产生的特征峰更类似

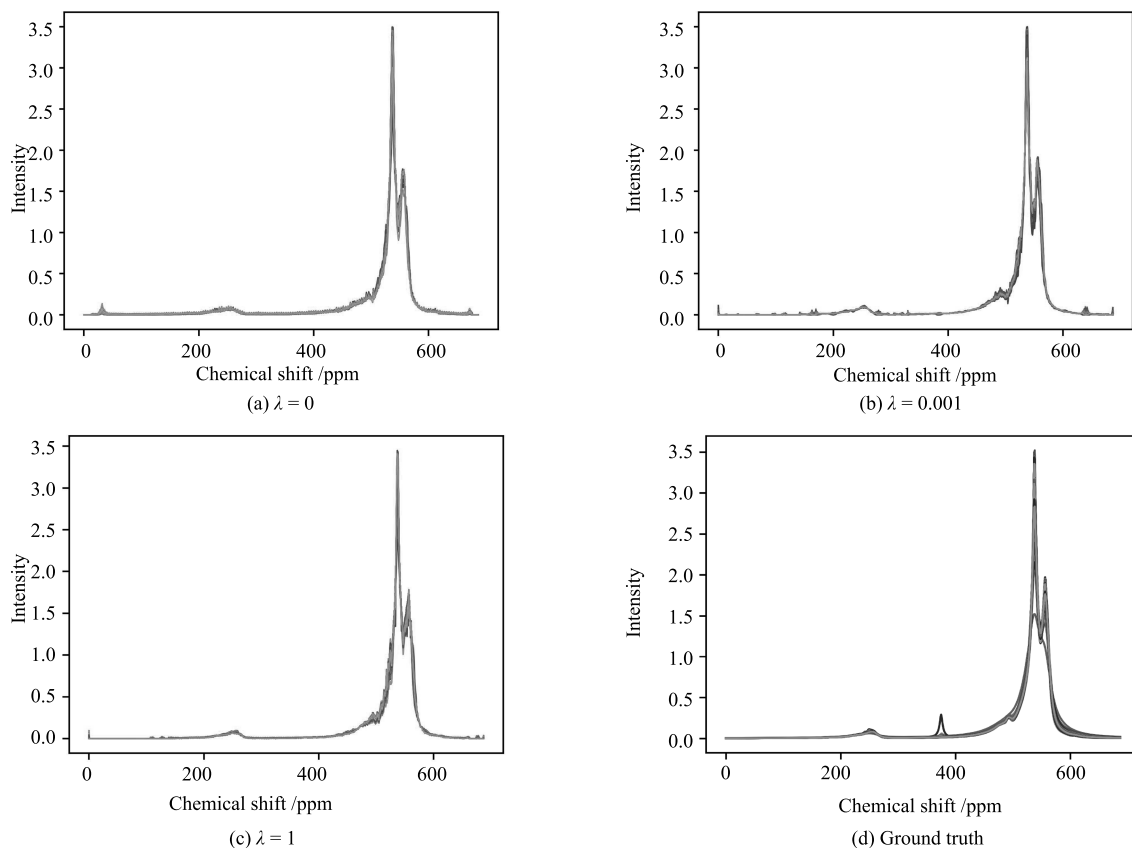


图 6 超参数  $\lambda$  对 NMR 谱图生成的影响

Fig. 6 Effect of hyper parameter  $\lambda$  on generation of  $^1\text{H}$  nuclear magnetic resonance spectrum

于真实谱图, 表明 RGAN 通过回归模型 R 对 G 的约束作用, 使得生成模型 G 的 NMR 谱图生成性能得到了提高.

## 4 结论

近年来, GAN 在图像生成领域中已取得令人瞩目的成就, 本文提出一种新的 GAN 网络的拓展结构—RGAN, 将 GAN 模型由图像领域应用到核磁共振氢谱原油物性定量分析中. RGAN 通过判别模型与生成模型的对抗学习, 使得判别模型提取了 NMR 谱图的一系列的潜在特征, 采用判别模型的首层潜在特征建立回归模型, 提高回归模型预测精度及泛化能力. 通过增加互信息约束, 采用回归模型估计其下界, 生成模型产生更类似于真实的生成样本. RGAN 各模型联合训练, 相互促进, 趋于各自最优. 实验表明, RGAN 提高了原油物性回归模型的预测精度及其稳定性, 同加快了生成模型的收敛速度, 提高了谱图的生成质量.

## References

- 1 Jackman L M, Sternhell S. *Application of Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy in Organic Chemistry: International Series in Organic Chemistry* (2nd edition). Amsterdam: Elsevier, 2013.
- 2 Simmler C, Napolitano J G, McAlpine J B, Chen S N, Pauli G F. Universal quantitative NMR analysis of complex natural samples. *Current Opinion in Biotechnology*, 2014, **25**: 51–59
- 3 Molina V D, Angulo R, Dueñez F Z, Gunmán A. Partial least squares (PLS) and multiple linear correlations between heithaus stability parameters (P0) and the colloidal instability indices (CII) with the <sup>1</sup>H nuclear magnetic resonance (NMR) spectra of Colombian crude oils. *Energy and Fuels*, 2014, **28**(3): 1802–1810
- 4 Adams A, Piechatzek A, Schmitt G, Siegmund G. Single-sided nuclear magnetic resonance for condition monitoring of cross-linked polyethylene exposed to aggressive media. *Analytica Chimica Acta*, 2015, **887**: 163–171
- 5 Chen J J, Hürlimann M, Paulsen J, Freed D, Mandal S, Song Y Q. Dispersion of T1 and T2 nuclear magnetic resonance relaxation in crude oils. *ChemPhysChem*, 2014, **15**(13): 2676–2681
- 6 Duarte L M, Filgueiras P R, Dias J C M, Oliveira L M S L, Castro E V R, de Oliveira M A L. Study of distillation temperature curves from Brazilian crude oil by <sup>1</sup>H nuclear magnetic resonance spectroscopy in association with partial least squares regression. *Energy and Fuels*, 2017, **31**(4): 3892–3897
- 7 Zhang Y D, Chen S F, Wang S H, Yang J F, Phillips P. Magnetic resonance brain image classification based on weighted-type fractional Fourier transform and nonparallel support vector machine. *International Journal of Imaging Systems and Technology*, 2015, **25**(4): 317–327
- 8 LeCun Y, Bengio Y, Hinton G. Deep learning. *Nature*, 2015, **521**(7553): 436–444
- 9 Goodfellow I J, Pouget-Abadie J, Mirza M, Xu B, Warde-Farley D, Ozair S, et al. Generative adversarial nets. In: *Proceedings of the 27th International Conference on Neural Information Processing Systems*. Montréal, Canada: NIPS, 2014. 2672–2680
- 10 Kingma D P, Rezende D J, Mohamed S, Welling M. Semi-supervised learning with deep generative models. In: *Proceedings of the 27th International Conference on Neural Information Processing Systems*. Montréal, Canada: NIPS, 2014. 3581–3589
- 11 Radford A, Metz L, Chintala S. Unsupervised representation learning with deep convolutional generative adversarial networks. arXiv preprint arXiv: 1511.06434, 2015.
- 12 Springenberg J T. Unsupervised and semi-supervised learning with categorical generative adversarial networks. arXiv preprint arXiv: 1511.06390, 2015.
- 13 Mirza M, Osindero S. Conditional generative adversarial nets. arXiv preprint arXiv: 1411.1784, 2014.
- 14 Zhao J B, Mathieu M, LeCun Y. Energy-based generative adversarial network. arXiv preprint arXiv: 1609.03126, 2016.
- 15 Arjovsky M, Chintala S, Bottou L. Wasserstein gan. arXiv preprint arXiv: 1701.07875, 2017.
- 16 Chen X, Duan Y, Houthoofd R, Schulman J, Sutskever I, Abbeel P. Infogan: interpretable representation learning by information maximizing generative adversarial nets. In: *Proceedings of the 29th International Conference on Neural Information Processing Systems*. Barcelona, Spain: NIPS, 2016. 2172–2180
- 17 Kingma D P, Welling M. Auto-encoding variational Bayes. arXiv preprint arXiv: 1312.6114, 2013.



郑念祖 东北大学流程工业综合自动化国家重点实验室硕士研究生. 2016 年获得东北大学学士学位. 主要研究方向为生成对抗网络, 人工智能与机器学习.

E-mail: skyznz@163.com

(ZHENG Nian-Zu Master student at the State Key Laboratory of Synthetic Automation for Process Industries, Northeastern University. He received his bachelor degree from Northeastern University in 2016. His research interest covers generative adversarial nets, artificial intelligence, and machine learning.)



丁进良 东北大学流程工业综合自动化国家重点实验室教授. 主要研究方向为复杂工业过程的建模与运行优化控制, 计算智能及应用. 本文通信作者.

E-mail: jlding@mail.neu.edu.cn

(DING Jin-Liang Professor at the State Key Laboratory of Synthetic Automation for Process Industries, Northeastern University. His research interest covers modeling and operation optimization control of complex industrial process, computational intelligence and its application. Corresponding author of this paper.)