

基于一种样本卷积和交互网络模型的空气质量预测

覃业梅^{1,2}, 胡博颀¹, 冯懿归^{1,3}, 周帆¹, 赵慎^{1,2}

(1. 湖南工商大学智能工程与智能制造学院, 湖南 长沙 410205;

2. 湘江实验室, 湖南 长沙 410205;

3. 国防科技大学计算机学院, 湖南 长沙 410073)

摘要: 空气质量预测是治理和减轻空气污染的有效手段。为了提高预测精度, 构建了一个新的空气质量预测模型, 即样本卷积和交互网络 (sample convolutional and interaction network, SCINet) 模型。该模型由多个 SCI-Block 按照完全二叉树结构排列而成, 通过翻转奇偶分裂重新排列生成一个新的序列, 该结构能够更好地捕捉多变量大气污染物彼此间复杂的依赖关系和局部趋势。因为大气污染物监测数据具有季节性和随机性, 所以使用两个 SCINet 进行叠加, 既能扩大卷积运算的接受域, 又能实现多分辨率分析。此外, 通过模型深度及超参数调优, 使其更加拟合空气质量时序数据特征, 能够有助于提取目标变量的时间关系特征。最后, 通过北京 PM_{2.5} 数据集和北京多站点空气质量数据集进行实证研究, 结果表明, SCINet 模型具有更高的预测精度, 在短期预测中其均方根误差对比模型中表现最佳的 DAQFF 模型减少了 31.59%, 在长期预测中减少了 24.36%。

关键词: 空气质量预测; SCINet; 卷积神经网络; 时间序列

中图分类号: TP183, X831

文献标志码: A

doi: 10.11959/j.issn.2096-6652.202428

Air quality forecasting based on a sample convolution and interaction network model

QIN Yemei^{1,2}, HU Boju¹, FENG Yigui^{1,3}, ZHOU Fan¹, ZHAO Shen^{1,2}

1. School of Intelligent Engineering and Intelligent Manufacturing, Hunan University of Technology and Business, Changsha 410205, China

2. Xiangjiang Laboratory, Changsha 410205, China

3. College of Computer Science, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China

Abstract: Air quality forecasting is an effective means of managing and mitigating air pollution. To enhance prediction accuracy, a new air quality prediction model, namely the sample convolutional and interaction network(SCINet), is introduced in this paper. The model is composed of multiple SCI-Blocks arranged in a complete binary tree structure. Whereafter, the time series is rearranged through flipping odd-even splits, and a new sequence is generated, which is able to capture the complex dependencies and local trends of multivariate atmospheric pollutants better. Given the seasonality and randomness of monitoring data for atmospheric pollutant, the paper employs two SCINets for stacking, which not only expands the receptive field of convolutional operations, but also enables multi-resolution analysis. Furthermore, through the optimization of model depth and hyperparameters, the model may fit the temporal characteristics of air quality time series data better, which is helpful to extract the temporal relationship features of the target variable. In the end, the Beijing PM_{2.5} dataset and the Beijing multi-site air quality dataset are utilized to evaluate the effectiveness of SCINet. The results show that SCINet has higher prediction accuracy, whose the root mean square error (δ_{RMSE}) is reduced by 31.59%

收稿日期: 2024-03-08; 修回日期: 2024-08-12

通信作者: 冯懿归, 1506501484@qq.com

基金项目: 湖南省教育厅科学研究重点项目 (No.21A0381, No.23A0464); 湘江实验室重大项目 (No.22XJ01002, No.23XJ02006)

Foundation Items: The Major Project Fund of Key Scientific Research Project of Education Department of Hunan Province (No.21A0381, No.23A0464), The Key Projects of Xiangjiang Laboratory(No.22XJ01002, No.23XJ02006)

in short-term prediction and 24.36% in long-term prediction compared with the best-performing DAQFF model.

Key words: air quality forecasting, SCINet, CNN, time series

0 引言

随着工业化和城市化进程的推进, 空气污染问题显著加剧, 它不仅对生态环境造成了破坏, 还增加了呼吸系统疾病的发病率。我国为了解决空气污染问题, 作出“碳达峰”和“碳中和”的重大战略决策, 并进一步实施了预防和管理两项基本措施。所以, 空气质量监测成为治理空气污染问题的关键环节。目前, 许多城市已经设立了实时空气质量监测站, 主要用于监测 $\text{PM}_{2.5}$ 等污染物的浓度, 以便对空气质量水平进行评估。

针对空气质量预测问题, 许多学者利用传统方法和深度学习方法进行了相关研究^[1-2]。其中, 传统方法主要构建物理模型和统计模型来实现预测。基于大气动力学和环境科学的物理模型是较早用于空气质量预测的方法之一, 该方法首先通过分析各种因素对空气质量的影响建立空气动力学模型, 然后计算污染物的时空分布, 再对模型进行求解。吴钰等^[3]基于集合均方根卡尔曼滤波的源清单反演方法, 结合WRF-CMAQ方法对污染物排放浓度进行预测。Liu等^[4]利用WRF-CMAQ模型预测了空气质量指数和污染浓度水平, 结果表明该模型在综合分析方面表现突出。Wang等^[5]将CAMQ和KOB模型结合, 提出了一种无监督混合模型, 有效地降低了CAMQ模型的预测误差。尽管物理模型在空气质量预测中起着至关重要的作用, 但也存在着一些局限性, 如物理模型的建立需清楚地了解每个变量对目标值的影响, 且空气质量预测问题是一个非线性问题, 其模型求解复杂度较高, 通常对模型进行简化后求解, 然而简化模型会导致预测精度的降低。

为了克服物理模型的局限性, 许多学者将统计模型引入空气质量预测中, 通过建立污染物浓度与气象场之间的统计关系来进行空气质量的预测。王玲等^[6]提出了一种分层贝叶斯时空组Lasso变量选择的空气质量预测模型, 该方法在变量选择阶段和预测阶段考虑了时空相关性。郭利进等^[7]利用自回归滑动平均(auto-regressive moving average, ARMA)模型为卡尔曼滤波建立数学模型, 提出了将径向基函数(radial basis function, RBF)神经网络融合于

卡尔曼滤波, 实现了新的融合算法, 对空气质量进行预测。Mani等^[8]开发了多线性回归(multiple linear regression, MLR)模型和自回归综合移动平均(autoregressive integrated moving average, ARIMA)来预测未来空气质量。Sharma等^[9]开发了在线序列极限学习机(OS-ELM)算法与改进的自适应噪声完全集合经验模态分解(ICEEMDAN)相结合的统计模型对空气质量进行预测。然而, 统计模型也存在一定的局限, 当其训练的数据不足时, 往往会导致模型性能不佳, 当训练数据较大时, 又会导致计算时间增加, 而且统计模型在预测异常现象时预测效果相对较差。

随着计算机技术的发展, 深度学习在图像处理^[10]、机器视觉^[11]、自然语言处理^[12]、时间序列分析^[13-15]等多个领域得到了广泛应用。近年来, 许多经典深度学习被用于解决多元时间序列分析问题^[16-19]。Zhou等^[20]在Transformer模型基础上提出了Informer模型, 以更好解决长时间序列预测问题。Deng等^[21]将结构学习方法和图神经网络结合, 提出了一种检测多元序列数据异常值的方法。此外, 许多学者也将深度学习应用到空气质量预测的时间序列分析中。李明明等^[22]运用EOF分解诊断分析方法, 对 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度时空变化特征进行了研究, 同时利用随机森林模型分析了气象因子的重要性, 建立基于CNN-LSTM神经网络的 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度预测模型。Chen等^[23]提出了用于空气质量预测的新型多图卷积神经网络, 将图卷积网络的融合矩阵输入门循环单元中以捕获时间依赖性。Gilik等^[24]提出将卷积神经网络与长短期记忆深度神经网络结合, 有效提取空气质量数据中的时空关系。廖海斌等^[25]提出一种基于多尺度时空图神经网络的污染物浓度预测模型, 利用图神经网络学习污染物之间的多尺度空间关系, 通过基于注意力机制的GRU学习污染物浓度之间的时序关系。

然而, 上述深度学习模型在有效捕捉和学习多变量空气质量数据中局部趋势和内部依赖关系上表现不佳。因此, 本文构建样本卷积和交互网络(SCINet)模型^[26]来捕捉空气质量数据的时序特征和随机特征, 以解决多元空气质量预测的复杂性问题, 从而提高空气质量的预测精度。

本文的内容安排如下：第1节介绍空气质量预测的背景和国内外研究现状；第2节介绍SCINet模型结构；第3节介绍实验结果与分析；第4节总结全文并展望。

1 问题描述

空气质量预测是城市大气污染治理研究中的一个关键领域，目的是通过对大气污染物的浓度进行观测、分析和模型预测，提前了解未来时间点空气质量的变化趋势。空气污染物主要包括CO、NO_x、碳氢化合物、SO_x和颗粒物（PM）。目前对空气质量预测的研究主要集中在PM_{2.5}上，图1所示为2010年1月1日至1月31日北京每小时的PM_{2.5}浓度。

从图1可看出，PM_{2.5}浓度呈现强非线性和随机性。在对空气质量进行预测时，需要考虑影响目标污染物^[27-28]的变量，以及变量之间的内部依赖关系。空气质量通常受PM_{2.5}浓度、CO₂浓度、温度、湿度和降水量等因素的影响。以北京的PM_{2.5}数据集为例，计算PM_{2.5}浓度与其他变量之间的皮尔森相关系数，结果如表1所示。

由表1可知，露点、温度、风向、风速对PM_{2.5}的影响均显著，尤其风速对PM_{2.5}的影响最为显著。多元空气质量数据中的相互依赖关系如图2所示。从图2中可以观察到各观测点之间存在着相互依赖关系，即相邻节点的趋势会影响后续时间节点的数据。所以，捕捉并有效分析空气质量数据的局部趋势特征也是空气质量预测工作中需要解决的一个重要问题。

表1 北京PM_{2.5}数据集中PM_{2.5}浓度与其他变量的皮尔森相关系数

变量	皮尔森相关系数
露点	0.166748
温度	-0.087319
大气压强	-0.045969
风向	-0.168043
风速	-0.238035
降雪量	0.019132
降雨量	-0.049241

降雨量、降雪量和大气压强与PM_{2.5}浓度之间的皮尔森相关系数均小于0.05，表明两者间相关性较弱，但需要注意的是，这些因素仍可能对PM_{2.5}浓度产生一定的影响。因此，有效利用空气质量数据中各因素间的相关性对于提高空气质量预测精度也至关重要。

由此，本文构建样本卷积和交互网络（SCINet）模型解决空气质量预测问题。SCINet是由Liu等^[26]提出的一种时间序列预测模型，该模型将SCI-Block按照完全二叉树进行堆叠构成树状结构，这种结构使得SCINet在不同层级上逐步提取和细化特征，能够在每一层捕捉到不同的时间尺度信息，也避免了在层级处理过程中丢失重要的特征信息。为了加强模型对长期依赖关系的捕捉能力，可通过堆叠多个SCINet网络来增加模型的深度，扩展了卷积运算的接受域，还增强了模型的特征表达能力和泛化能力，能够更有效地捕获序列的动态变化。这一结构能有效应对空气质量数据的强非线性和强随

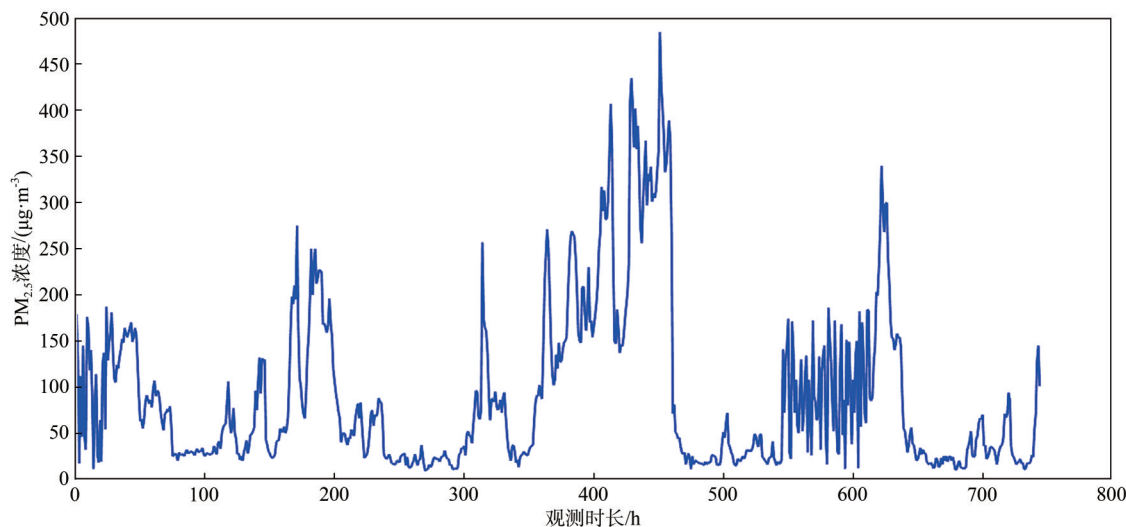


图1 2010年1月北京PM_{2.5}浓度

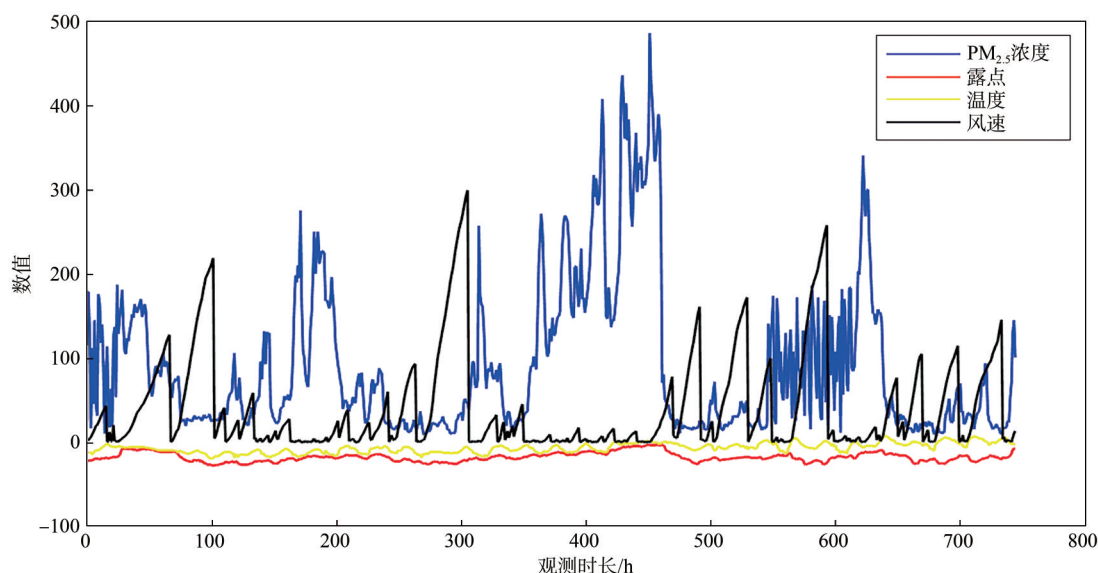


图2 多元空气质量数据中的相互依赖关系

机性。

2 SCINet模型

2.1 总体框架

SCINet模型将SCI-Block按照完全二叉树进行堆叠构成了一种树状结构,其结构如图3(a)所示。SCINet模型使用奇偶分割策略将特征序列 x 分割成多个子序列特征(subsequence characteristics,

SSC)。在第 l 层时,根据完全二叉树的性质得到 2^{l-1} 个子序列。将这一过程在多个层上进行重复,以获得不同分辨率的子序列,从而能够学习到序列的浅层和深层特征。通过这种多分辨率子序列学习方法,SCINet模型能有效地捕获空气质量数据随时间变化的局部趋势特征。

在经过所有SCI-Block之后,最小的子序列被重新排序并连接形成一个新序列,然后通过残差结

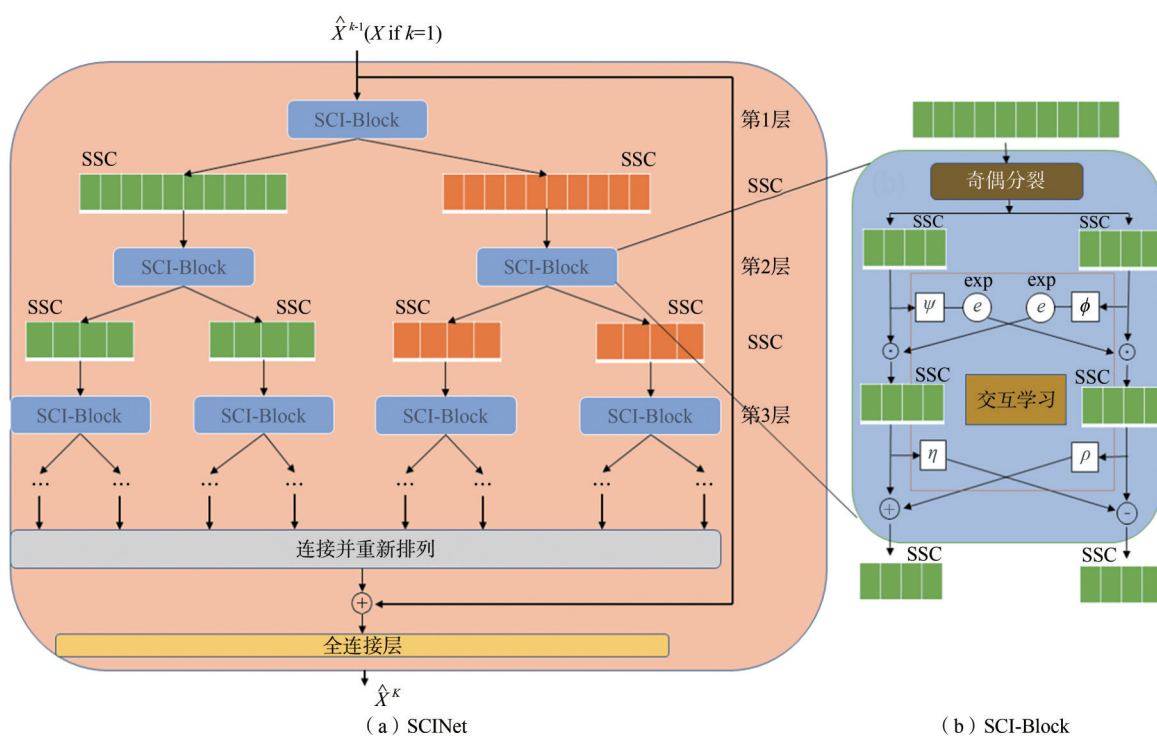


图3 SCINet模型结构

构将其添加到原始序列中进行预测,最后在全连接层进行输出。为了增强SCI-Block的多分辨率学习能力,本文增加了SCI-Block的层数,还通过大量的空气质量数据对SCINet模型进行超参数调整,以更好地拟合空气质量数据。SCINet模型的卷积—交互结构扩展了卷积域,有助于学习空气质量数据中变量之间的内在依赖关系。同时,下采样机制也有助于多分辨率分析学习。

在SCINet的处理过程中,空气质量数据首先经过下采样处理,将连续的序列数据分解为低分辨率的子序列。这种下采样操作有效地减少了模型需要处理的数据量,同时保留了序列中的趋势和周期性特征,去除了冗余的细节和噪声。每个下采样后的子序列通过卷积滤波器来进行特征提取,这些卷积操作能够从数据中识别和提取出有用的信息,进一步减少了模型计算复杂度,增强了数据表征能力。在特征提取完成后,SCINet通过交互学习机制分析和学习子序列之间的特征关系,使得各子序列之间的特征动态交互和互补,增强了模型在同一时间尺度上的表征能力。同时,通过交互学习机制中的非线性转换(如指数变换),子序列能够利用和整合不同时间尺度的信息,从而大幅提高了模型在时间序列预测中的整体性能和精度。

2.2 SCI-Block

当SCINet进行多次下采样分割时,可能会导致信息丢失。为了解决这个问题,SCINet模型在SCI-Block中集成了交互式学习,如图3(b)所示。

在交互式学习中,首先,将卷积核设置为5,并使用一维卷积 φ 和 ψ 分别将初始序列 F 分割为奇子序列 F_{odd} 和偶子序列 F_{even} ,并将其投影到隐藏状态;将隐藏状态的奇偶子序列转换为指数形式,并乘以另一个原始子序列,得到更新后的奇子序列 F_{odd}^S 和偶子序列 F_{even}^S ,如式(1)所示;对式(1)中得到的 F_{odd}^S 和 F_{even}^S 进行相同的操作,分别使用卷积核为7的一维卷积 ρ 和 η 进行运算,将它们投影到隐藏状态,然后与 F_{odd}^S 和 F_{even}^S 进行交叉相加减,得到最后输出的 F'_{odd} 和 F'_{even} ,如式(2)所示。通过这种交互操作,可以传递子序列信息,从而提高卷积特征提取的有效性,使模型能够学习到空气质量数据中固有的依赖关系。

$$\begin{aligned} F_{\text{odd}}^S &= F_{\text{odd}} \otimes \exp(\varphi(F_{\text{even}})), F_{\text{even}}^S = \\ & F_{\text{even}} \otimes \exp(\psi(F_{\text{odd}})) \end{aligned} \quad (1)$$

$$F'_{\text{odd}} = F_{\text{odd}}^S \pm \rho(F_{\text{even}}^S), F'_{\text{even}} = F_{\text{even}}^S \pm \eta(F_{\text{odd}}^S) \quad (2)$$

其中, F_{odd} 和 F_{even} 分别代表由原始序列分割后的奇偶子序列; F_{odd}^S 和 F_{even}^S 分别代表由奇偶子序列经指数变换和卷积后得到的更新后的奇偶子序列; F'_{odd} 和 F'_{even} 分别代表最终输出的奇偶子序列。

3 实验结果及分析

3.1 数据集

本文利用北京PM_{2.5}数据集和北京多点空气质量数据集进行实验分析和评价。

北京PM_{2.5}数据集:该数据集不仅包含PM_{2.5}浓度值,还包含气象数据的露点、温度、气压、风向、风速、降雪量和降雨量。数据集时间范围为2010年1月1日至2014年12月31日,共43 824条数据。其中,2010年1月1日至2012年12月31日的数据作为训练集,2013年1月1日至2013年12月31日的数据作为验证集,2014年1月1日至2014年12月31日的数据作为测试集。

北京多点空气质量数据集:数据集时间范围为2013年3月1日至2017年2月28日,包含了北京市12个监测站的420 768条数据,各监测站数据中共有10个变量,如PM_{2.5}、PM₁₀、NO₂、CO、O₃、SO₂的浓度,以及温度、降水、压力、风速等。将北京多点空气数据集划分为训练集(80%)、验证集(10%)和测试集(10%)。

3.2 实验环境

本文实验中使用基于PyTorch中的开源深度学习库Scikit-learn来构建深度学习模型、浅层学习模型和SCINet模型。实验在PC服务器上进行,该服务器由Intel(R) Xeon(R) CPU @ 2.30 GHz、NVIDIA Tesla T4 GPU和14 G内存组成。同时,通过计算相应列的平均值,利用插补法来填补缺失数据。此外,超参数的选取往往会影响深度学习模型的性能。为了防止训练过程中的过拟合,在卷积层中加入dropout策略,并设置早期停止准则为5。默认的初始训练参数设置如下:batch size为64,training epoch为100,学习率为0.01,采用Adam优化器。使用均方根误差(δ_{RMSE})和平均绝对误差(δ_{MAE})作为性能指标来评估模型的性能,具体如下。

$$\delta_{\text{RMSE}} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2} \quad (3)$$

$$\delta_{\text{MAE}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_i - \hat{y}_i| \quad (4)$$

其中, i 表示第 i 个时间步的数据; n 表示预测的数据总长度; y_i 表示第 i 个时间步的真实值; $\hat{y}_i$ 表示第 i 个时间步的预测值。

3.3 损失函数计算及调参过程

整个实验以均方误差 (δ_{MSE}) 作为损失函数, 如式 (5) 所示。在模型训练阶段, 利用式 (6) 来确定每个 SCINet 的损失。而为了更好地评估模型整体的预测性能, 将通过累加所有 SCINet 的总损失进行计算, 如式 (7) 所示。

$$\delta_{\text{MSE}} = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (5)$$

$$L_j = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i^j - \hat{y}_i^j)^2 \quad (6)$$

$$L = \sum_{j=1}^K L_j \quad (7)$$

其中, y_i^j 表示第 j 个 SCINet 在第 i 个时间步的真实值; $\hat{y}_i^j$ 表示第 j 个 SCINet 在第 i 个时间步的预测值; L_j 表示第 j 个 SCINet 预测值和真实值的损失; L 表示整个模型的总损失; K 表示模型堆叠 SCINet 的总数。本文采用两个 SCINet 进行堆叠, 每个 SCINet 采用三层 SCI-Block。

在模型进行训练时, 需要考虑模型参数的梯度计算。式 (7) 是所有 SCINet 损失的总和, 其梯度计算可以分解为每个单独 SCINet 层损失梯度的总和, 具体步骤如下。

(1) 对于第 j 个 SCINet, 首先计算出 L_j 相对于该层输出 $\hat{y}_i^j$ 的梯度, 即对式 (6) 求偏导可得每个时间步 i 的梯度, 如式 (8) 所示:

$$\frac{\partial L_j}{\partial \hat{y}_i^j} = \frac{\partial}{\partial \hat{y}_i^j} \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i^j - \hat{y}_i^j)^2 \right) \quad (8)$$

其中, 如果 $\hat{y}_i^j$ 大于 y_i^j , 则梯度为正; 若 $\hat{y}_i^j$ 小于 y_i^j , 则梯度为负。

(2) 使用式 (8) 进行梯度计算, 通过网络的每一层反向传播来更新每一层的权重和偏差。包括在 SCI-Block 中使用的所有卷积和全连接层。

(3) 在计算出梯度后, 根据实验所选择的 Adam 优化算法, 使用式 (9) 对模型参数进行更新调整, 实现最小化总损失 L 。

$$\theta = \theta - \eta \cdot \nabla_{\theta} L \quad (9)$$

其中, θ 表示模型参数; η 表示学习率; $\nabla_{\theta} L$ 表示

损失函数 L 关于参数 θ 的梯度。

通过上述方式, 模型在训练过程中逐步调整参数, 以改善在时间序列预测任务上的性能。这有助于 SCINet 模型捕捉和利用复杂的时间依赖关系, 通过其二叉树结构对数据特征的多层级进行分析和交互, 使得模型在深层网络中维护梯度的稳定传播。同时, 该模型在卷积滤波器中采用了 ReLU 激活函数, 有效预防了梯度消失的问题。

3.4 北京 PM_{2.5} 数据集多步预测结果分析

本文将 SCINet 模型与 3 种经典浅层模型 (SVR-POLY、SVR-RBF 和 SVR-LINEAR)、4 种经典深度学习模型 (长短期记忆 (long short-term memory, LSTM) 网络、门控循环单元 (gated recurrent unit, GRU)、循环神经网络 (recurrent neural network, RNN) 和卷积神经网络 (convolutional neural network, CNN)) 和深度空气质量预测框架 (deep air quality forecasting framework, DAQFF) 性能进行综合比较。SCINet 模型与 CNN 相比, 虽然 CNN 在图像处理领域表现出色, 但是在时间序列预测任务中, 其预测性能往往不理想, 这是因为 CNN 主要捕捉时间序列数据中的局部特征, 而忽略了全局信息。RNN 通过引入循环结构, 允许信息在时间步之间传递, 理论上可以捕捉时间序列中的长期依赖关系。但实际上, RNN 不能并行处理数据, 在处理长期预测任务上时容易遇到梯度消失或爆炸的问题。LSTM 通过引入门控机制解决了 RNN 的长期时间预测问题, 但仍然存在模型结构复杂导致的训练时间长、计算资源消耗大以及处理较长序列时性能不佳等问题。GRU 是一种简化的 LSTM 变体, 通过使用较少的门控机制来减少模型参数, 提高计算效率, 保持捕捉时间序列中长期依赖关系的能力。但由于 GRU 的循环结构, 数据必须按时间顺序逐步进行, 从而限制了并行处理数据的能力, 同时, 在处理长序列时, 会面临梯度消失问题。相比之下, SCINet 通过其多分辨率分析和下采样操作有效缓解了梯度爆炸和消失的问题, 其二叉树结构不仅有助于信息的分层处理和特征的逐级精细化, 还支持并行处理, 显著提高了数据处理效率。此外, SCINet 利用更大的卷积场, 通过在不同分辨率下执行卷积操作来学习时间序列的多尺度特征, 这使得模型能够同时捕捉长期趋势和短期波动, 从而有效提高了预测的准确性和可靠性。本节将对上述模型进行实验对比分析, 验证 SCINet 模

型性能的有效性和优越性。

3.4.1 短期预测结果分析

本文在北京 $\text{PM}_{2.5}$ 数据集上进行了短期预测实验,模型的预测步长设置为6 h。将 SCINet 模型与浅层模型 (SVR-POLY、SVR-RBF、SVR-LINEAR) 和经典的深度学习模型 (LSTM、GRU、RNN、CNN) 以及 DAQFF 模型相比较,预测结果如表2所示。由表2可知, SCINet 的 δ_{RMSE} 和 δ_{MAE} 均最小。SCINet 相较于 LSTM、GRU、RNN 和 CNN 模型, δ_{RMSE} 分别优化了48.25%、43.45%、48.15%和43.71%, δ_{MAE} 分别优化了40.30%、32.44%、41.06%和33.62%。尽管与前4个经典深度学习模型相比, DAQFF 模型的 δ_{RMSE} 和 δ_{MAE} 值最低,分别为43.49和27.53,但是与 SCINet 模型相比, SCINet 模型在 δ_{RMSE} 方面优化了31.59%,降到了29.75,在 δ_{MAE} 方面优化了4.32%,降到了26.34。由此可得, SCINet 模型在短期空气质量预测任务中表现出了更优的性能。

表2 时间步长为6 h $\text{PM}_{2.5}$ 浓度预测任务的模型误差

模型	北京 $\text{PM}_{2.5}$ 数据集	
	$\delta_{\text{RMSE}}/(\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3})$	$\delta_{\text{MAE}}/(\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3})$
SVR-POLY	56.62	44.94
SVR-RBF	57.66	46.32
SVR-LINEAR	49.82	36.82
LSTM	57.49	44.12
GRU	52.61	38.99
RNN	57.38	44.69
CNN	52.85	39.68
DAQFF	43.49	27.53
SCINet	29.75	26.34

为了更详细、直观地了解不同模型的预测性能,图4(a)、(b)、(c)和(d)中,分别展示了 SVR-LINEAR、LSTM、DAQFF 和 SCINet 模型的 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度预测值与真实值。图4中横轴为观测时间,纵轴为 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度。从实验结果中可得, SVR-LINEAR 模型虽然捕捉到了数据中的大致趋势,但是在急剧变化的 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度波峰和波谷的拟合上,表现出明显的预测偏差。LSTM 模型在预测时能够捕捉到数据中局部趋势,但是处于某些骤变值时,仍存在明显的预测误差。DAQFF 模型在预测波动较大的数值时,虽然能够大致捕捉 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度的变化,但是在某些局部区间,如时间点500至1 000之间,模型的预测值与真实值之间存在明显偏差。

而 SCINet 模型有着更为准确的预测精度,尤其是在波峰和波谷时段,比如在时间点500至1 000之间的波峰与波谷,与其他模型相比, SCINet 表现出更高的精度。SCINet 不仅能更好地拟合 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度的数据,而且还有效地捕获 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度随时间变化的局部趋势特征。由此可得, SCINet 模型在多步预测性能上优于其他深度学习模型,且具有较好的短期综合多步预测性能。

3.4.2 长期预测结果分析

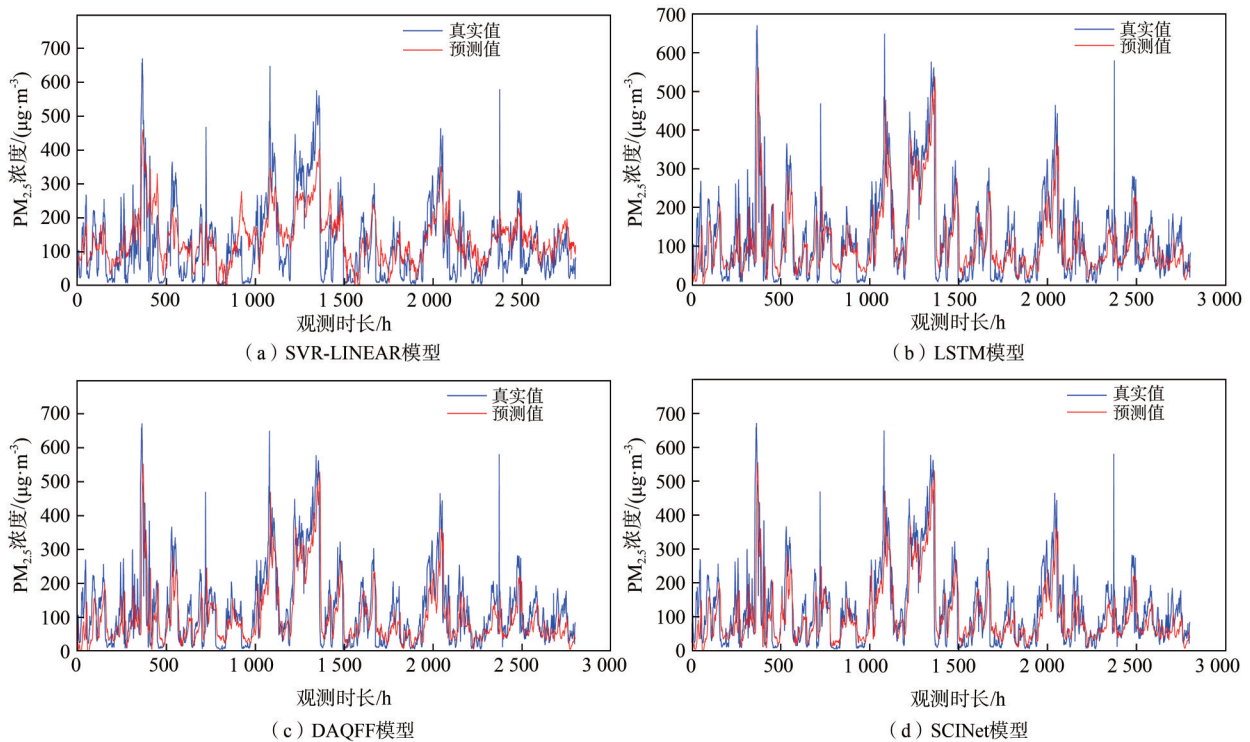
为了评估 SCINet 模型的长期空气质量预测性能,本小节对北京 $\text{PM}_{2.5}$ 数据集进行了长期预测实验,将预测步长设置为24 h,结果如表3所示。从表3可以得出,随着预测时间的增加, δ_{RMSE} 和 δ_{MAE} 值也会相应增加,这符合一般正常规律。虽然 DAQFF 模型的 δ_{RMSE} 和 δ_{MAE} 误差都要小于浅层模型和4种经典深度学习模型,但是 SCINet 模型在1~3 h、4~6 h、7~12 h 和13~24 h 4个时间段都优于其他模型。具体而言,在这4个时间段内, SCINet 模型与 DAQFF 模型的误差相比, δ_{RMSE} 分别降低了23.90%、29.42%、26.94%和24.36%; δ_{MAE} 分别降低了3.02%、1.78%、0.82%和0.67%。上述分析表明, SCINet 模型在长期预测方面的表现要优于 DAQFF 模型和其他模型。

实验结果表明, SCINet 模型通过下采样—卷积交互架构有效扩展了卷积运算的接受域,能够实现多分辨率分析。与传统的空气质量预测方法和经典的深度学习模型相比,这种独特的架构有助于提取特征并提高预测性能,使得 SCINet 模型在长期和短期空气质量预测任务中都有优异的表现。

3.5 北京多点数据集上多种污染物多步预测结果分析

考虑到空气污染物中除 $\text{PM}_{2.5}$ 外,还有 PM_{10} 、 SO_2 、 NO_2 、 O_3 等多种污染物,为了进一步分析 SCINet 模型在空气质量预测中的有效性,本文在北京多点空气数据集上使用 SCINet 模型同时对多种污染物浓度进行预测,将预测时长设为6 h,实验结果见表4所示。

从表4中可以观察到在4种污染物中, SCINet 模型在预测 SO_2 方面表现最好。同时,也注意到同一城市不同地区的空气质量存在显著差异,各地区的预测效果也相应不同。其中,对怀柔站和定陵站的 PM_{10} 、 SO_2 、 NO_2 和 O_3 污染物浓度预测结果最为理想。根据多污染物、多点的多步预测结果,可以

图4 时间步长为6 h下各模型4个月的PM_{2.5}浓度预测值与真实值表3 时间步长为24 h下PM_{2.5}浓度预测任务的模型误差

模型	$\delta_{RMSE}/(\mu g \cdot m^{-3})$				$\delta_{MAE}/(\mu g \cdot m^{-3})$			
	1~3 h	4~6 h	7~12 h	13~24 h	1~3 h	4~6 h	7~12 h	13~24 h
SVR-POLY	48.99	64.26	75.70	84.91	39.14	50.74	59.71	66.92
SVR-RBF	51.15	64.18	75.46	84.92	41.76	50.88	59.57	67.02
SVR-LINEAR	38.69	60.96	76.24	85.60	27.31	46.32	60.10	67.04
LSTM	45.88	57.51	69.52	79.15	35.31	40.32	48.76	57.17
GRU	47.32	57.90	69.57	79.23	37.01	40.98	48.77	57.25
RNN	49.50	65.27	77.06	80.56	38.89	50.49	59.88	59.18
CNN	45.95	59.76	70.83	79.18	35.62	43.74	51.21	57.91
DAQFF	34.35	52.64	66.14	77.38	20.91	34.15	44.93	54.58
SCINet	26.14	37.15	48.32	58.53	20.28	33.54	44.56	54.21

为大气污染防治提供更详细、更精确的指导。

同样, 为了进一步评估SCINet模型对各种污染物的长期预测特性, 将预测步长设置为24 h, 并在北京多点空气数据集上使用SCINet模型分别预测PM₁₀、SO₂、NO₂和O₃的浓度, 实验结果见表5~8。

从表5~8结果可得, 对SO₂浓度预测时, 各站点的短期误差在7上下浮动, 其中怀柔站和天坛站预测效果最佳, δ_{RMSE} 分别为4.26和4.22, δ_{MAE} 分别为4.02和3.92。对NO₂浓度预测时, 定陵站的 δ_{RMSE} 为10.85, δ_{MAE} 为10.15。表明了SCINet模型在针对不同污染物进行短期预测时, 通常表现出较

表4 时间步长为6 h下多污染物预测任务的模型误差

站点	$\delta_{RMSE}/(\mu g \cdot m^{-3})$				$\delta_{MAE}/(\mu g \cdot m^{-3})$			
	PM ₁₀	SO ₂	NO ₂	O ₃	PM ₁₀	SO ₂	NO ₂	O ₃
奥体中心	45.98	18.33	34.69	28.15	42.19	17.93	32.66	25.54
昌平	34.94	16.32	30.05	26.90	30.79	15.66	28.20	24.86
定陵	31.88	13.14	28.60	23.04	28.63	12.79	27.58	20.53
东四	31.88	13.85	24.59	26.98	49.34	13.23	22.73	24.76
官园	46.60	16.33	22.75	31.14	42.14	15.71	20.96	28.78
古城	56.59	15.91	24.80	23.93	51.59	15.44	22.78	21.96
怀柔	34.80	10.70	20.83	26.95	30.56	10.36	19.22	24.72
农展馆	46.91	17.37	24.68	26.74	42.52	16.87	22.87	24.42
顺义	44.59	15.34	27.80	28.39	40.49	14.62	26.02	25.44
天坛	42.85	14.11	24.78	28.89	38.45	13.66	22.92	26.42
万柳	45.27	16.31	25.14	26.77	41.48	15.79	23.22	24.50
万寿西宫	47.22	13.75	24.77	24.89	43.33	13.21	22.85	22.86

低的 δ_{RMSE} 和 δ_{MAE} 值, 反映了模型能够稳定捕捉污染物浓度的波动, 在处理不同类型的污染物时表现出较强的适应性和鲁棒性。这能够帮助政策制定者和环境管理部门从短期预测的结果中及时获得数据支持, 以便于迅速响应环境变化并采取相关措施。

同时, SCINet在长期预测中能够有效捕捉污染物浓度的趋势变化, 尽管误差相对于短期预测时有所增加, 但对SO₂和NO₂的浓度进行长期预测时仍表现出色。例如, 在13~24 h期间怀柔站预测

表5 时间步长为24 h下PM₁₀浓度预测任务的模型误差

站点	$\delta_{\text{RMSE}}/(\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3})$				$\delta_{\text{MAE}}/(\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3})$			
	1~3 h	4~6 h	7~12 h	13~24 h	1~3 h	4~6 h	7~12 h	13~24 h
奥体中心	36.94	45.39	54.70	64.97	34.73	43.34	51.12	59.47
昌平	30.62	36.89	44.61	54.24	28.33	34.74	41.12	49.31
定陵	23.31	30.56	39.58	49.36	21.23	28.68	36.59	45.29
东四	53.79	13.85	24.59	26.98	49.34	13.23	22.73	24.76
官园	31.87	44.70	56.46	68.95	29.10	42.35	52.38	62.99
古城	46.44	53.96	62.44	73.17	43.58	51.25	57.87	66.29
怀柔	34.48	40.67	48.91	58.54	32.34	38.70	45.57	53.40
农展馆	38.63	43.89	53.16	63.69	32.70	41.79	49.43	57.70
顺义	34.93	43.59	51.83	60.19	32.93	42.91	50.26	58.64
天坛	30.27	43.04	55.01	67.24	27.46	40.68	51.12	61.38
万柳	37.94	44.61	52.77	63.04	35.77	42.59	49.21	57.57
万寿西宫	39.28	47.17	56.74	68.00	37.16	45.23	53.19	62.19

表6 时间步长为24 h下SO₂浓度预测任务的模型误差

站点	$\delta_{\text{RMSE}}/(\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3})$				$\delta_{\text{MAE}}/(\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3})$			
	1~3 h	4~6 h	7~12 h	13~24 h	1~3 h	4~6 h	7~12 h	13~24 h
奥体中心	7.02	8.79	9.79	11.13	6.66	8.49	9.23	10.31
昌平	6.28	7.05	8.16	9.24	5.75	6.59	7.39	8.15
定陵	4.72	5.38	5.99	6.64	4.46	5.12	5.53	5.90
东四	6.79	8.32	10.48	12.18	6.43	7.98	9.85	11.27
官园	7.06	8.01	9.26	10.21	6.62	7.60	8.50	9.12
古城	6.81	7.32	8.74	11.15	6.49	7.02	8.16	10.33
怀柔	4.26	4.65	5.14	5.69	4.02	4.41	4.71	4.98
农展馆	6.45	7.64	9.36	11.17	6.10	7.31	8.77	10.28
顺义	8.62	9.29	10.12	10.91	8.20	8.88	9.36	9.73
天坛	4.22	5.50	6.98	8.48	3.92	5.22	6.45	7.69
万柳	7.01	7.24	8.14	9.70	6.68	6.93	7.60	8.89
万寿西宫	7.88	8.48	8.99	9.38	7.59	8.20	8.46	8.46

表7 时间步长为24 h下NO₂浓度预测任务的模型误差

站点	$\delta_{\text{RMSE}}/(\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3})$				$\delta_{\text{MAE}}/(\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3})$			
	1~3 h	4~6 h	7~12 h	13~24 h	1~3 h	4~6 h	7~12 h	13~24 h
奥体中心	17.74	21.80	25.51	29.25	16.46	20.62	23.51	26.34
昌平	15.00	18.22	20.61	23.82	13.79	17.07	18.68	21.10
定陵	10.85	13.79	17.12	20.83	10.15	13.13	15.97	19.10
东四	16.67	20.30	23.49	26.56	15.65	19.31	21.72	23.81
官园	15.58	18.94	21.94	25.52	14.57	17.98	20.22	22.82
古城	20.41	23.04	26.12	29.84	19.28	21.97	24.19	26.90
怀柔	12.94	15.58	17.58	19.59	11.96	14.62	15.98	17.26
农展馆	16.19	19.86	23.17	25.99	15.15	18.90	21.40	23.29
顺义	13.86	18.39	21.71	24.82	12.72	17.40	19.95	22.10
天坛	15.83	19.24	22.32	25.38	14.71	18.16	20.41	22.48
万柳	19.06	21.83	24.84	27.55	18.00	20.84	22.99	24.71
万寿西宫	16.55	20.83	25.08	28.58	15.48	19.86	23.31	25.80

表8 时间步长为24 h下O₃浓度预测任务的模型误差

站点	$\delta_{\text{RMSE}}/(\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3})$				$\delta_{\text{MAE}}/(\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3})$			
	1~3 h	4~6 h	7~12 h	13~24 h	1~3 h	4~6 h	7~12 h	13~24 h
奥体中心	19.58	23.78	27.45	30.08	18.18	22.44	25.05	26.37
昌平	17.78	20.27	23.15	27.00	16.56	19.08	20.99	23.73
定陵	19.11	23.02	26.67	30.42	17.85	21.08	24.51	27.02
东四	15.65	21.35	25.53	28.42	14.27	20.18	23.52	25.06
官园	19.73	23.65	27.44	30.81	18.50	22.46	25.20	27.04
古城	18.30	20.50	22.66	25.03	17.20	19.42	20.63	21.89
怀柔	17.75	23.11	26.94	29.20	16.44	21.94	24.73	26.10
农展馆	19.21	22.75	26.32	29.28	17.90	21.54	24.09	25.62
顺义	20.79	23.82	26.87	29.48	19.19	22.28	24.24	25.52
天坛	19.46	22.68	25.43	28.33	18.10	21.38	23.09	24.51
万柳	18.38	22.00	24.99	27.12	17.05	20.75	22.68	23.46
万寿西宫	17.76	21.37	25.12	28.46	16.63	20.30	23.10	25.18

NO₂浓度时的 δ_{RMSE} 和 δ_{MAE} 分别为19.59和17.26,在东四站点预测PM₁₀浓度时的 δ_{RMSE} 和 δ_{MAE} 分别为26.98和24.76。结果表明SCINet对多种污染物进行长期预测时的误差相对一致,具有较好的泛化能力,无论是SO₂、NO₂还是O₃和PM₁₀,SCINet都能提供可靠的长期预测结果。SCINet也在不同站点的长期预测中表现良好,说明该模型在多种环境条件下具有较强的适应能力。

综上所述,SCINet模型在短期和长期预测多污染物浓度时都展示了显著的优势。在短期预测中,其高精度和稳定性使得模型能够快速响应和适应污染物的即时变化。在长期预测中,其趋势捕捉能力和数据整合能力帮助模型提供可靠的预测结果,并在多种环境条件下表现出色,进一步验证了模型在处理长期预测任务时的稳健性和准确性。

4 结论

本文构建了一个空气质量预测模型,即SCINet模型,该模型具有卷积交互结构,可以通过扩展卷积域,对空气质量数据进行特征学习,同时能够捕获空气质量数据中变量的内部依赖关系。在模型中,下采样机制有利于多分辨率分析学习,从而有助于识别空气质量数据的局部趋势特征和长期依赖关系。

为了评估SCINet模型的性能,本文在北京PM_{2.5}数据集、北京多点空气数据集上进行实验分析。将该模型与传统浅层模型、经典深度学习模型(LSTM、GRU、RNN和CNN)以及深度空气质量

预测框架 DAQFF 进行了比较。结果表明, SCINet 模型在短期和长期空气质量预测中表现出更好的性能。

尽管 SCINet 模型性能强大, 但也存在一些局限性。该模型未考虑交通状况以及大规模人类活动可能对空气质量异常值的影响。因此, 未来的研究方向将重点放在提高模型对异常值的敏感度, 以进一步提升模型在空气质量预测任务中的性能。

参考文献:

- [1] ZHANG Y, BOCQUET M, MALLET V, et al. Real-time air quality forecasting, part I: history, techniques, and current status[J]. *Atmospheric Environment*, 2012, 60: 632-655.
- [2] ZHANG Y, BOCQUET M, MALLET V, et al. Real-time air quality forecasting, part II: state of the science, current research needs, and future prospects[J]. *Atmospheric Environment*, 2012, 60: 656-676.
- [3] 吴钰, 谢旻, 高阳华, 等. 利用集合均方根卡尔曼滤波反演重庆地区 SO_2 源排放[J]. *环境科学研究*, 2018, 31(1): 25-33.
- [4] WU Z, XIE M, GAO Y H, et al. Inversion of SO_2 emissions over Chongqing with ensemble square root Kalman filter[J]. *Research of Environmental Sciences*, 2018, 31(1): 25-33.
- [5] LIU C F, WU C Y, KANG X Y, et al. Evaluation of the prediction performance of air quality numerical forecast models in Shenzhen[J]. *Atmospheric Environment*, 2023, 314: 120058.
- [6] WANG M L, ZHANG Y M, FUNG J C H, et al. A novel hybrid clustering model of region segmentation to fuse CMAQ simulations with observations[J]. *Atmospheric Environment*, 2022, 278: 119062.
- [7] 王玲, 康子豪. 基于时空组 Lasso 与分层贝叶斯时空模型的变量选择方法[J]. *地球信息科学学报*, 2023, 25(7): 1312-1324.
- [8] WANG L, KANG Z H. Variable selection method based on spatio-temporal group lasso and hierarchical Bayesian spatio-temporal model[J]. *Journal of Geo-Information Science*, 2023, 25(7): 1312-1324.
- [9] 郭利进, 井海明, 南亚翔, 等. 基于卡尔曼滤波融合算法的空气质量指数预测[J]. *环境污染与防治*, 2017, 39(4): 388-391.
- [10] GUO L J, JING H M, NAN Y X, et al. Prediction of air quality index based on Kalman filtering fusion algorithm[J]. *Environmental Pollution & Control*, 2017, 39(4): 388-391.
- [11] MANI G, VISWANADHAPALLI J K, ALEXANDER S A, et al. Prediction and forecasting of air quality index in Chennai using regression and ARIMA time series models[J]. *Journal of Engineering Research*, 2021, 9: 179-194.
- [12] SHARMA E, DEO R C, PRASAD R, et al. A hybrid air quality early-warning framework: an hourly forecasting model with online sequential extreme learning machines and empirical mode decomposition algorithms[J]. *The Science of the Total Environment*, 2020, 709: 135934.
- [13] KRIZHEVSKY A, SUTSKEVER I, HINTON G E. ImageNet classification with deep convolutional neural networks[J]. *Communications of the ACM*, 2017, 60(6): 84-90.
- [14] KARPATHY A, LI F F. Deep visual-semantic alignments for generating image descriptions[C]//*Proceedings of the 2015 IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR)*. Piscataway: IEEE Press, 2015: 3128-3137.
- [15] CHO K, VAN MERRIENBOER B, GULCEHRE C, et al. Learning phrase representations using RNN encoder-decoder for statistical machine translation[EB]. *arXiv preprint*, 2014, arXiv: 1406.1078.
- [16] LIPTON Z C, BERKOWITZ J, ELKAN C. A critical review of recurrent neural networks for sequence learning[EB]. *arXiv preprint*, 2015, arXiv: 1506.00019.
- [17] LÄNGKVIST M, KARLSSON L, LOUTFI A. A review of unsupervised feature learning and deep learning for time-series modeling[J]. *Pattern Recognition Letters*, 2014, 42: 11-24.
- [18] YANG J B, NGUYEN M N, SAN P P, et al. Deep convolutional neural networks on multichannel time series for human activity recognition[J]. *IJCAI International Joint Conference on Artificial Intelligence*, 2015(1): 3995-4001.
- [19] GAMBOA J C B. Deep learning for time-series analysis[EB]. *arXiv preprint*, 2017, arXiv: 1701.01887.
- [20] QI Z A, WANG T C, SONG G J, et al. Deep air learning: interpolation, prediction, and feature analysis of fine-grained air quality[J]. *IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering*, 2018, 30(12): 2285-2297.
- [21] ERAVCI B, FERHATOSMANOGLU H. Diverse relevance feedback for time series with autoencoder based summarizations[J]. *IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering*, 2018, 30(12): 2298-2311.
- [22] WANG J S, SONG G J. A deep spatial-temporal ensemble model for air quality prediction[J]. *Neurocomputing*, 2018, 314: 198-206.
- [23] ZHOU H Y, ZHANG S H, PENG J Q, et al. Informer: beyond efficient transformer for long sequence time-series forecasting[J]. *Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence*, 2021, 35(12): 11106-11115.
- [24] DENG A L, HOOI B. Graph neural network-based anomaly detection in multivariate time series[J]. *Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence*, 2021, 35(5): 4027-4035.
- [25] 李明明, 王小兰, 岳江, 等. 融合 EOF 分解及 CNN-LSTM 神经网络的 $\text{PM}_{2.5}$ 预测[J]. *环境科学*, 2024: 1-16.
- [26] LI M M, WANG X L, YUE J, et al. $\text{PM}_{2.5}$ prediction based on fusion of EOF decomposition and CNN-LSTM neural network [J]. *Environmental Science*, 2024: 1-16.
- [27] CHEN J, YUAN C W, DONG S, et al. A novel spatiotemporal multi-graph convolutional network for air pollution prediction[J]. *Applied Intelligence*, 2023, 53(15): 18319-18332.
- [28] GILIK A, OGRENCI A S, OZMEN A. Air quality prediction using CNN+LSTM-based hybrid deep learning architecture[J]. *Environmental Science and Pollution Research*, 2022, 29(8): 11920-11938.
- [29] 廖海斌, 袁理, 龚颖巍. 基于多尺度时空图神经网络的污染物浓度预测[J]. *控制与决策*, 2024, 39(4): 1396-1402.
- [30] LIAO H B, YUAN L, GONG H W. Pollutant concentration forecast based on multiscale spatiotemporal graph neural network[J]. *Control and Decision*, 2024, 39(4): 1396-1402.
- [31] LIU M H, ZENG A L, CHEN M X, et al. SCINet: time series modeling and forecasting with sample convolution and interaction[EB]. *arXiv preprint*, 2021, arXiv: 2106.09305.
- [32] ZHENG Y, LIU F R, HSIEH H P. U-Air: when urban air quality inference meets big data[C]//*Proceedings of the 19th ACM SIGKDD international conference on Knowledge discovery and data mining*. New York: ACM, 2013: 1436-1444.
- [33] ZHENG Y, YI X W, LI M, et al. Forecasting fine-grained air quality based on big data[C]//*Proceedings of the Proceedings of the 21th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining*. New York: ACM, 2015: 2267-2276.

[作者简介]



覃业梅 (1979-), 女, 博士, 湖南工商大学智能工程与智能制造学院副教授, 电子信息工程系主任, 主要研究方向为时间序列信号分析与预测。



周帆 (2001-), 女, 湖南工商大学智能工程与智能制造学院硕士生, 主要研究方向为时间序列预测。



胡博颀 (1999-), 男, 湖南工商大学智能工程与智能制造学院硕士生, 主要研究方向为时间序列预测。



赵慎 (1983-), 男, 博士, 湖南工商大学智能工程与智能制造学院副教授, 智能科学与技术系主任, 主要研究方向为阵列信号处理。



冯懿归 (1997-), 男, 国防科技大学计算机学院博士生, 主要研究方向为时间序列预测、大模型。