

读书笔记

读书笔记

摘要

介绍

相关工作研究背景

相关研究的简要回顾，当前研究对先前研究的拓展

该研究的三个贡献

相关工作

水质预测的常用方法

时间序列预测的基于注意力的RNN模型

模型设计和实验

数据集

符号规定

模型算法

Spatial attention-空间注意力

Temporal attention-时间注意力

Spatio-temporal joint attention-时空联合注意力

实验设计和结果

超参数设置：

评估指标-metrics

对比的模型

在评估指标（RMSE；MAPE；MAE）对比

所有模型在short-term和long-term的预测效果对比

对比时间注意，时空联合注意的预测效果

所有模型随着预测时间步增加RMSE和MAE的变化

结果总结：

由实验结果得出的结论

模型可解释性

参数敏感性

总结和未来展望

总结

未来工作

问题回答

摘要

这是一篇研究多元时间序列预测任务的论文，具体实践上用来预测养殖鱼塘中的溶解氧。

该论文研究基于注意力的递归神经网络对溶解氧的短期（1小时，2小时）和长期（8小时，24小时）预测。

比较了只有空间注意力的Input Attn，只有时间注意力的temporal Attn，时空独立注意力的DARNN和GeoMAN，以及时空联合注意力spatio-temporal Attn来预测溶解氧，实验结果表明基于注意力的RNN可以在短期和长期预测中实现更准确的溶解氧预测，证明了计算时空相关性及时空联合注意力的必要性。

在比较基于注意力的模型的同时，还比较了5种基线方法。

介绍

相关工作研究背景

1. 合适的溶解氧范围对水生物的生长发育十分重要，预测溶解氧有许多意义。

2. 长期预测可以提前很长一段时间预测溶解氧的趋势，从而提供充足的准备时间以确保溶解氧安全，目前方法仅在短期预测中表现良好。

3. 基于注意力的RNN可以动态学习时空关系。

相关研究的简要回顾，当前研究对先前研究的拓展

多变量时间序列的单步预测

地质传感器时间序列的短期预测 [GeoMAN](#)

受他们的工作启发，该论文分析了基于注意力的RNN中时空关系的特征表示。将最先进的基于注意力的RNN方法发展为溶解氧预测的多步骤预测。提出了tempral-Attn模型，该模型更关注长期依赖性，Spatio-temporal-Attn模型（同时学习时空关系的影响）。

现有的DARNN和GeoMAN首先在同一时间对不同属性进行关系学习（空间注意力），然后在时间维度上进行关系学习。相反，本研究构建注意机制来同时学习时间和空间关系。为了更好地捕捉长期预测中的长时间依赖性，构建了一种提取时间信息的注意力机制，包括时间注意力机制和额外的LSTM层。

该研究的三个贡献

- 1. 分析基于注意力的RNN中时空关系的特征表示，并将其发展为溶解氧预测的多步骤预测。
- 2. 提出了两种基于注意力的RNN结构，分别增强了时间关系（tempral-Attn），并同时学习了时空关系（Spatio-temporal-Attn）
- 3. 在真实世界数据集上的实验表明，基于注意力的RNN可以实现更准确的溶解氧预测，尤其是在长期预测中。tempral-Attn，Spatio-temporal-Attn具有很强的可解释性，在溶解氧预测中具有较弱的参数敏感性

相关工作

分析水质预测的常用方法和时间序列预测的基于注意力的RNN模型

水质预测的常用方法

水质预测的典型方法分为三类：基于数据预处理的方法；基于模型的方法；混合方法

class	subclass/explanation	reference	特点
基于数据预处理的方法	基于数据分解的方法；基于降维的方法	(Arya and Zhang, 2015 ; Cheng et al., 2018 ; Li et al., 2018) ;(Yingyi et al., 2018)	1. 小波分解可以将变化剧烈且不规则的单变量序列或多变量分解为几个相对规则的序列，操作步骤复杂； 2. PCA等基于降维的方法排除了对预测结果影响较弱的外部因素，避免低相关性外部因素的影响，并加快模型的训练速度。
基于模型的方法	基于超参数优化的方法（使用粒子群优化（PSO）等优化算法）；基于模型结构优化的方法（神经网络的结构优化）	(Liu et al., 2014 ; Liu et al., 2013) ;(Khan and Valeo, 2017 ; Ta and Wei, 2018)	可以在一定程度上提高预测性能，但也不能同时捕捉空间相关性和时间关系
混合方法	将数据预处理与最优模型参数或结构相结合	(Huan et al, 2018 ; Shi et al, 2019 ; Yu et al., 2016)	1.数据预处理可以平滑数据趋势，提取数据变化的潜在规律，减少不相关属性的影响； 2.可以更容易地学习序列的时空特征,但只集中在空间相关性和时间关系之间的一个方面

时间序列预测的基于注意力的RNN模型

由于基于注意力的RNN方法可以学习动态时空关系，它在时间序列预测中表现出了最好的性能

DARNN和GeoMAN通过注意力机制同时为不同属性分配权重。由于**注意力权重意味着属性对预测结果的影响**，因此这种注意力机制被称为空间注意力机制。此外，由于时间关系隐含在RNN单元的隐藏状态中，因此它们还**动态地对RNN单元隐藏状态进行加权，以确保选择性地获得所有时间依赖性**，这被称为时间注意机制。因此，基于注意力的RNN适合于复杂时空中的溶解氧预测关系。此外，它是一种**端到端的预测方法**，具有易操作性和良好的适用性。

当前基于注意力的RNN模型**不能同时学习**空间和时间关系的影响，以增强时空关系的联系。提出了Spatio-temporal-Attn模型来同时学习时空关系的注意力权重；提出tempral-Attn模型来分别增强时间关系。

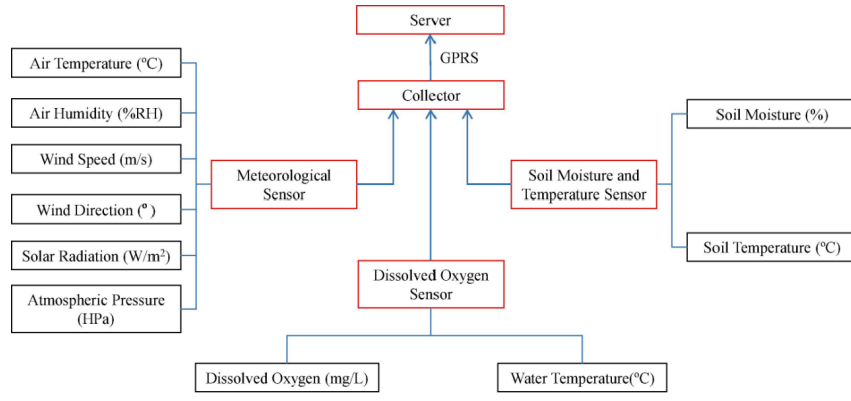
模型设计和实验

数据集

数据集来源：浙江淡水渔业研究所的一个900平方米的池塘中收集的，池塘中有大约3000只杂交养殖的鱼。

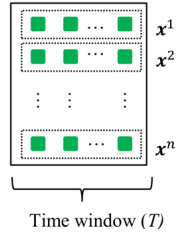
数据集信息：两个水质参数、两个土壤参数和六个气象参数，共十个参数；采用线性插值处理缺失的数据；数据采集频率为10分钟，每次采集10个参数，共有5006组数据；前4000组数据作为训练集，其余数据作为测试集。

数据的具体测量和传输方法：

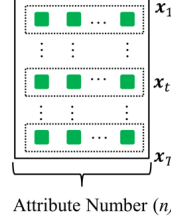


符号规定

k-th external attributes:
 $\mathbf{x}^k = (x_1^k, x_2^k, \dots, x_T^k)^T \in R^T$



all external attributes
 $\mathbf{X} = (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_T)^T \in R^{n \times T}$



dissolved oxygen series within window size T
 $\mathbf{Y} = (y_1, y_2, \dots, y_T)^T \in R^T$

the predicted dissolved oxygen value in the next time steps
 $\hat{\mathbf{Y}} = (y_{T+1}, y_{T+2}, \dots, y_{T+t})^T \in R^t$



$$\hat{\mathbf{Y}} = F(y_1, \dots, y_T, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_T)$$

模型算法

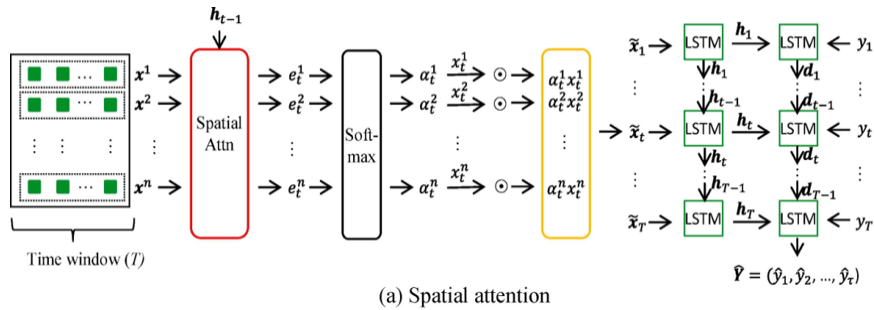
分四部分：Spatial attention-空间注意力，

Spatial attention-空间注意力

可以动态学习溶解氧预测的**外部属性之间的空间相关性**。（外部属性在这里指的是除了溶解氧以外的水质参数）

该模块表示关注**权重总和等于1的外部属性**的影响。（通过softmax来控制权重总和等于1）

不忽略任何外部属性的效果，也不允许相关性低的外部属性干扰溶解氧预测结果。



(a) Spatial attention

$$e_t^k = v_e^T \sigma_c(\mathbf{W}_e [\mathbf{h}_{t-1}; \mathbf{c}_{t-1}] + \mathbf{U}_e \mathbf{x}^k + \mathbf{b}_e) \quad \tilde{\mathbf{x}}_t = (\alpha_t^1 x_t^1, \alpha_t^2 x_t^2, \dots, \alpha_t^n x_t^n)^T$$

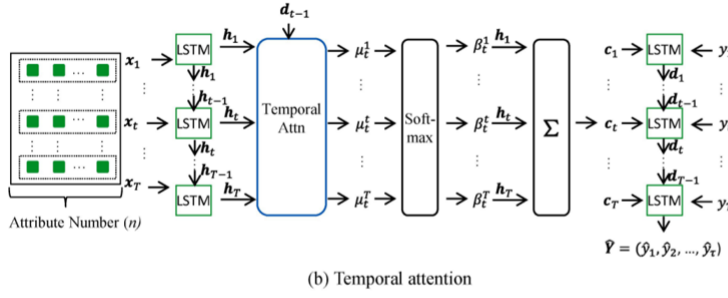
$$\alpha_t^k = \sigma_z(e_t^k) \quad \text{for } i = 1, \dots, n.$$

算法步骤：首先，每个时间步的输入通过前一时间的隐藏状态 (h 和 c) 计算注意力分数 e ，通过 $softmax$ 后计算得到总和为1的注意力权重 α ，最后依据注意力权重分配不同外部属性不同的“空间相关性”得到 \tilde{x} ，在最后通过两层 $LSTM$ 层（分别以 \tilde{x} 和当前溶解氧 y_t ）来预测未来的溶解氧含量 $y_{t+t'}$

Temporal attention-时间注意力

LSTM单元可以通过单元机制存储时间信息并通过门机制控制时间信息的增加或减少来保持长期依赖性。

时间注意力机制用于学习每个时间窗中这些隐藏状态的影响。



$$l_t^j = v_d^T \sigma_c(W_d[d_{t-1}^o; c_{t-1}^o] + U_d h_j + b_d) \quad j \in [1, T]. \quad \tilde{h}_t = (\beta_t^1 h_1, \beta_t^2 h_2, \dots, \beta_t^T h_T)^T$$

$$\beta_t^j = \sigma_z(l_t^j) \quad \text{for } j = 1, \dots, T. \quad c_t = \sum_{j=1}^T \beta_t^j \tilde{h}_j$$

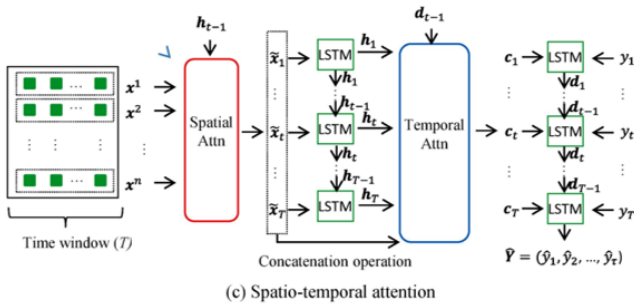
算法步骤: 与空间注意力相似, 当前时间步的注意力分数为 β_t , 计算所有时间步的权重分数来得到当前时间步对其他时间步的注意情况, 从而捕获时间的长期以来关系, 最后用一层LSTM层来预测溶解氧

Spatio-temporal joint attention-时空联合注意力

通过空间注意力机制将注意力权重分配给原始属性来表示空间相关性,

通过时间注意力机制将注意力权重分配给空间注意力中的隐藏状态来表示时间关系,

--->通过同时学习空间相关性和时间相关性来学习联合时空关系, 时空联合注意



$$l_t^j = v_d^T \sigma_c(W'_d[d_{t-1}^o; c_{t-1}^o] + U'_d[\tilde{x}_t; h_j] + b'_d) \quad j \in [1, T].$$

$$\gamma_t^j = \sigma_z(l_t^j) \quad \text{for } j = 1, \dots, T.$$

$$\tilde{h}_t = (\gamma_t^1 h'_1, \gamma_t^2 h'_2, \dots, \gamma_t^T h'_T)^T$$

$$c_t = \sum_{j=1}^T \gamma_t^j \tilde{h}_j$$

算法步骤: 通过空间注意力得到捕获了空间注意力的 x' , 之后通过时间注意力得到 c 。联合了上面的Temporal attention和Spatial attention。

实验设计和结果

超参数设置:

learning rate = 0.001

batch_size = 128

hidden_size (隐藏层的大小), window_size(滑动窗口大小) --在parameter sensitivity 讨论

短时间预测 ($t' = (5, 10)$) 长时间预测 $t' = (50, 120, 300)$

评估指标-metrics

评估指标: root mean squared error -- RMSE; mean absolute percentage error -- MAPE; mean absolute error -- MAE

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\hat{y}_t^i - y_t^i)^2}$$

$$MAPE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{|\hat{y}_t^i - y_t^i|}{y_t^i}$$

$$MAE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |\hat{y}_t^i - y_t^i|$$

对比的模型

五种基线方法：

- SVM回归算法SVR
 - SVR-Linear: linear function kernel
 - SVR-rbf: radial basis function kernel
- MLP : 128个神经元组成的单隐藏层的MLP模型
- LSTM: LSTM模型的隐藏大小为128
- Encoder-decoder model : 最初用于机器翻译；将编码器和解码器的隐藏大小设置为128。<https://arxiv.org/abs/1406.1078>

五种基于注意力的RNN方法

- DA - RNN : <https://doi.org/10.24963/ijcai.2017/366>
- GeoMAN : <https://doi.org/10.24963/ijcai.2018/476>
- input-Attn : <https://doi.org/10.24963/ijcai.2017/366>
- Temporal-Attn 时间注意
- Spatio-temporal-Attn 时空联合注意

在评估指标 (RMSE; MAPE; MAE) 对比

short-term ($\tau = 5, 10$)

Table 2
Performance comparison of ten models (time step τ is equal to 5).

Models	RMSE	MAPE	MAE
SVR-linear	0.3193	0.9445	0.2074
SVR-rbf	0.3101	1.0442	0.2076
MLP	0.3223	0.9417	0.2088
LSTM	0.3041	0.8925	0.1972
Encoder-decoder	0.3114	1.1286	0.1965
Input-Attn	0.2932	1.0576	0.1855
DARNN	0.2909	0.9638	0.1759
GeoMAN	0.2646	1.0046	0.1706
Temporal-Attn	0.2804	1.1127	0.1780
Spatio-temporal-Attn	0.2646	1.0245	0.1703

Table 3
Performance comparison of ten models (time step τ is equal to 10).

Models	RMSE	MAPE	MAE
SVR-linear	0.3966	3.8620	0.2793
SVR-rbf	0.3636	5.6833	0.2610
MLP	0.4031	5.0272	0.2857
LSTM	0.3594	5.0335	0.2523
Encoder-decoder	0.3190	1.3245	0.2118
Input-Attn	0.3106	0.9945	0.1997
DARNN	0.2787	0.9220	0.1713
GeoMAN	0.2571	0.9709	0.1675
Temporal-Attn	0.2750	1.1397	0.1781
Spatio-temporal	0.2609	0.9949	0.1683

long-term ($\tau = 50, 120, 300$).

Table 4
Performance comparison of ten models (time step τ is equal to 50).

Models	RMSE	MAPE	MAE
SVR-linear	0.6913	1.6606	0.5137
SVR-rbf	0.6909	3.6734	0.5436
MLP	0.6885	1.6225	0.5377
LSTM	0.6954	3.1182	0.5287
Encoder-decoder	0.4339	1.3923	0.2904
Input-Attn	0.3976	1.2987	0.2776
DARNN	0.2715	0.8597	0.1737
GeoMAN	0.2452	1.0555	0.1627
Temporal-Attn	0.2563	1.1240	0.1711
Spatio-temporal	0.2581	1.0704	0.1677

Table 5
Performance comparison of ten models (time step τ is equal to 120).

Models	RMSE	MAPE	MAE
SVR-linear	0.6235	1.5493	0.4845
SVR-rbf	0.7390	1.7539	0.4830
MLP	0.6189	1.5423	0.4827
LSTM	0.6555	1.7519	0.4488
Encoder-decoder	0.4341	2.2548	0.3314
Input-Attn	0.3843	1.4212	0.2722
DARNN	0.2484	1.0620	0.1625
GeoMAN	0.2616	1.0247	0.1777
Temporal-Attn	0.2492	1.0431	0.1641
Spatio-temporal	0.2575	1.0233	0.1677

Table 6
Performance comparison of ten models (time step τ is equal to 300).

Models	RMSE	MAPE	MAE
SVR-linear	1.0426	2.5407	0.7914
SVR-rbf	1.2239	2.9400	0.8417
MLP	1.0283	2.4727	0.7872
LSTM	1.1899	2.7426	0.8081
Encoder-decoder	0.5586	2.6869	0.4436
Input-Attn	0.4937	1.9654	0.3653
DARNN	0.2614	1.2793	0.1797
GeoMAN	0.3638	1.6072	0.2729
Temporal-Attn	0.2577	1.0699	0.1726
Spatio-temporal	0.2565	1.3046	0.1729

所有模型在short-term和long-term的预测效果对比

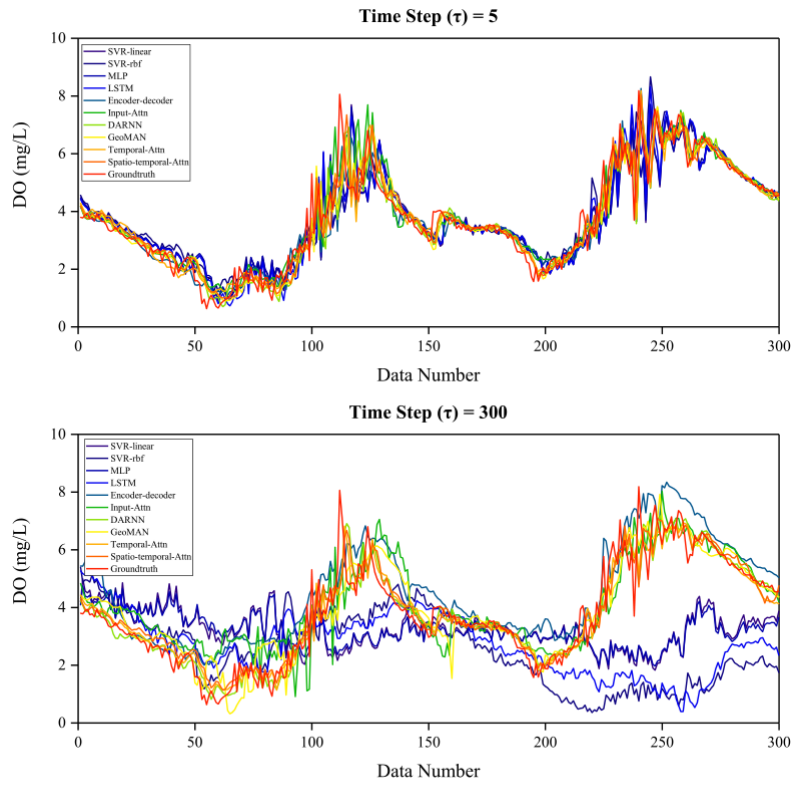


Fig. 3. Dissolved oxygen prediction curves of ten models with different time steps.

对比时间注意，时空联合注意的预测效果

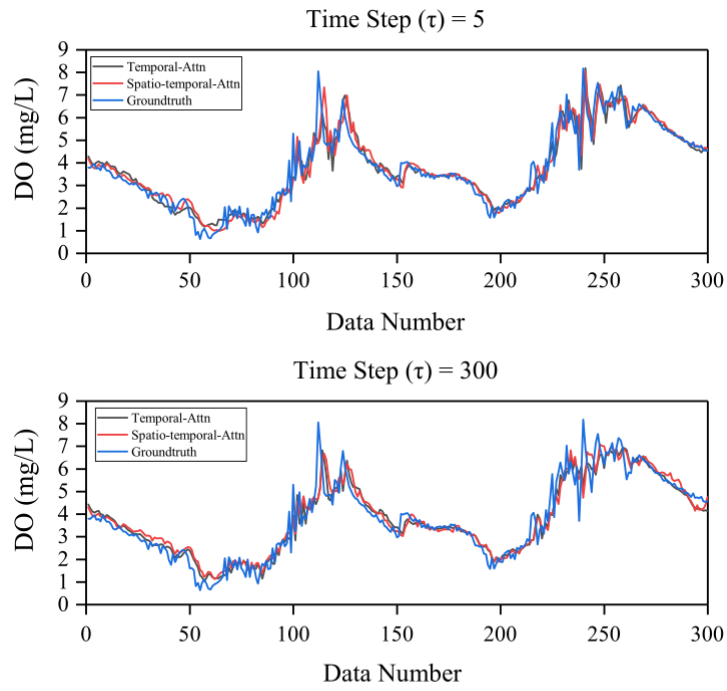


Fig. 4. Dissolved oxygen prediction curves of the proposed models with different time steps.

所有模型随着预测时间步增加RMSE和MAE的变化

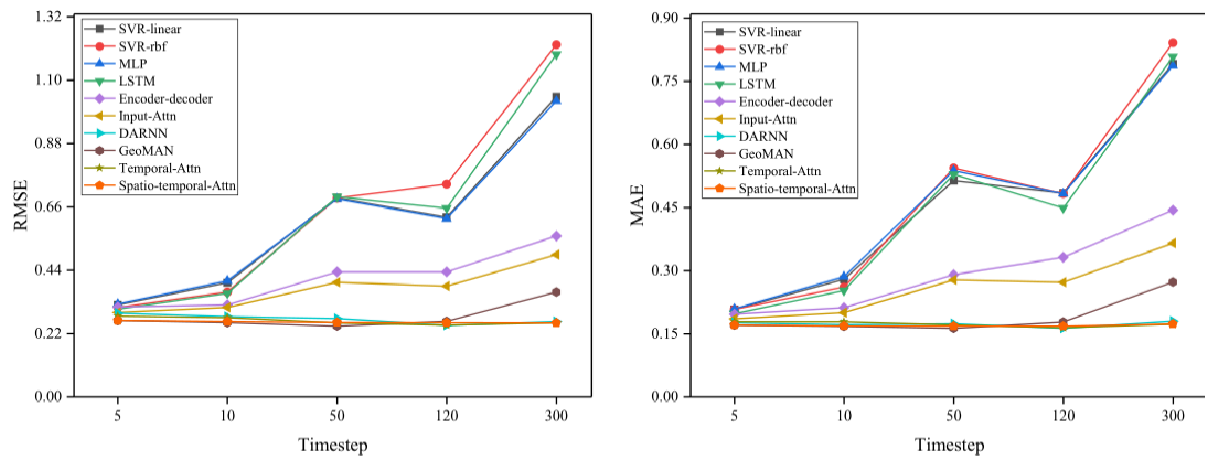


Fig. 5. Performance comparison of ten models with different time steps.

结果总结:

(数据收集的频率为每10分钟, 不同的时间步长分别表示约1小时、2小时、8小时、24小时、48小时的预测结果)

- 1小时或2小时的短期预测, 基线方法之间没有显著的性能差异;
- 基于注意力的RNN模型略优于基线方法, temporal Attn和GeoMAN表现最好;
- Spatio-temporal-Attn相对于DA-RNN提升: 在最短预测 (1小时) --RMSE10%, MAE--3.3% 在最长预测 (48小时) --RMSE2.0%, MAE--1.2%
- Temporal-Attn相对于DA-RNN提升: 在最短预测 (1小时) --RMSE3.7%, MAE--3.3% 在最长预测 (48小时) --RMSE1.4%, MAE--4.1%

由实验结果得出的结论

- 随着时间步长的增加, 所有基线方法的性能都会急剧下降;
- encoder-decoder的方法性能下降缓慢
-->该结构可以更有效地保持时间序列的长期相关性;
- input-Attn没有时间注意力模块, 其在长期预测中的性能比具有时间注意力模块差;
-->时间注意机制有效地保持长期依赖性, 有必要学习编码器中所有隐藏状态的影响。
- Spatio-temporal-Attn方法相对SVR方法和LSTM方法在多方面的有很大的改进
-->基于注意力的RNN方法可以更好地表示和学习时空特征。
- DARNN、temporal-Attn和Spatio-temporal-Attn在所有时间步长相当性能:
-->Spatio-temporal-Attn, temporal-Attn在大多数时间内都略有优势;
-->这表明时间相关性的提取在长期预测中更为重要;
-->学习时空关系非常重要, 尤其是同时学习时空关系的影响。

模型可解释性

- 空间注意力机制将注意力权重总和分配给外部属性-->动态地表示不同属性之间的空间相关性。
- 时间注意机制学习对LSTM隐藏状态的注意权重-->更好地保持时间依赖性。
- 时空联合注意机制同时聚合外部属性和隐藏状态之间的空间相关性和时间关系学习时空关系。
- 基于注意力的RNN模型通过学习不同属性和不同序列之间的时空关系, 在溶解氧预测中获得了更好的性能, 为该神经网络模型提供了良好的可解释性。
- 时间注意力的对象是编码器级的隐藏状态, 时间注意力权重分布随着超参数 (隐藏大小) 的变化而变化
- 空间属性的维度确定

来自单个编码器时间步长的空间注意力权重分布: (从中可以看出模型对摸个外部变量赋予不同的权重, 代表其空间相关性和对预测结果的影响程度)

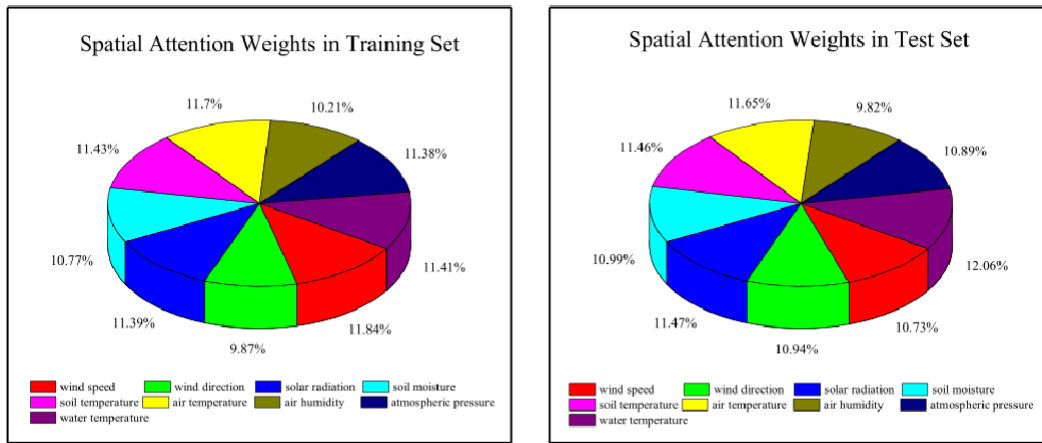


Fig. 6. Spatial attention weight distribution of the Spatio-temporal-Attn method ($\tau = 5$).

参数敏感性

(隐藏层大小和滑动窗口大小)：从中得出所提出的temporal-Attn和Spatio-temporal-Attn对超参数（隐藏层大小和滑动窗口大小不太敏感）

对隐藏层状态大小的敏感性：

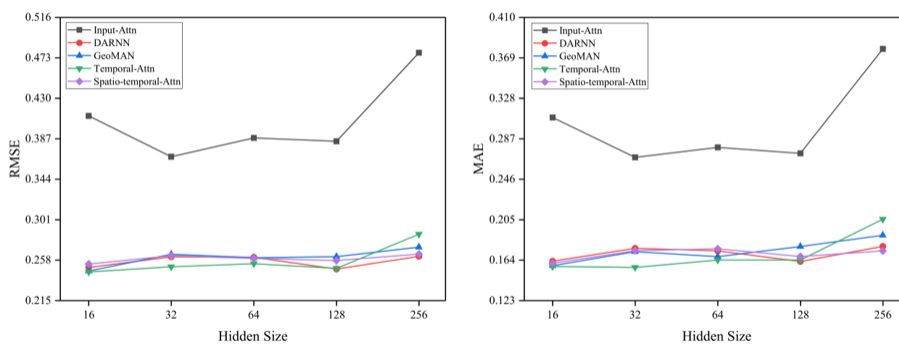


Fig. 7. Performance comparison of attention-based RNN with different hidden sizes.

对滑动窗口大小的敏感性：

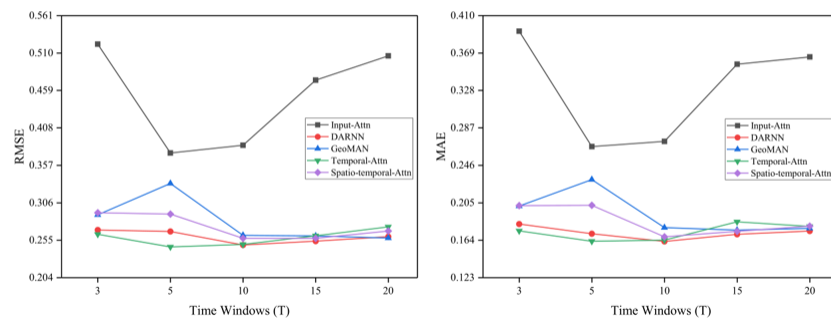


Fig. 8. Performance comparison of attention-based RNN with different time window.

总结和未来展望

总结

研究了基于注意力的RNN方法在溶解氧短期和长期预测中的有效性。分析了溶解氧序列和外部因素序列之间时空关系的特征表示和学习原理，然后系统地讨论和比较了基于注意力的RNN方法在溶解氧短期和长期预测中的应用，即时空独立注意力（DARNN和GeoMAN）和时空联合注意力（时空Attn）。所提出的temporal-Attn和Spatio-temporal-Attn模型在几乎所有时间步长的预测中都取得了最佳结果。

- 基于注意力的RNN模型在溶解氧的短期和长期预测方面优于所有基线方法，因为时空关系的清晰有效的表示和学习能力。
- 基于时间注意力的RNN模型在溶解氧的长期预测中更准确，这表明在长期预测中保持时间序列的长期依赖性很重要
- 利用注意力机制同时学习时空联合关系是一种有效的方法和思想，可以在不同时间步长的溶解氧预测中获得更好的性能。

未来工作

可以在基于注意力的RNN方法中尝试基于数据预处理的方法和混合方法。此外，同时更好地学习时空关系仍然是一个具有挑战性的问题，解决这一问题的关键是统一溶解氧预测中空间维度和时间维度之间的不一致性。

问题回答

Q1 论文试图解决什么问题？

A1 这是一篇研究多元时间序列预测任务的论文，具体实践上用来预测养殖鱼塘中的溶解氧。

Q2 论文解决的是否是一个新的问题

A2 不是，该论文收到以前研究的启发，通过改进以前的研究来达到更好的溶解氧预测效果。

Q3 这篇论文要验证一个什么样的科学假设？

A3 基于注意力的RNN方法能够学习到时空相关性，由于不能学习时空相关性的基线方法，同时学习时空相关性比分别学习时间相关和空间相关性能实现更好的溶解氧预测。

Q4 有哪些相关研究？如何归类？谁是这一课题在领域内值得关注的研究院？

A4 相关的研究可研关注在多元时间序列预测领域的发展。具体到多元时间序列预测应用与水质参数预测可以分为三大类：基于书籍预处理的方法；基于模型的方法；混合方法。

Q5 论文中提到的解决方案之关键是什么？

A5 关键是空间注意和时间注意的设计，还有时空联合注意的设计。

Q6 论文中的设计实验是如何设计的？

A6 论文对比基线模型和基于注意力的RNN模型在溶解氧预测的效果，先确定一致的评估指标（RMSE,MAPE,MAE），方便量化地对比各模型的能性能，然后对比各模型在短时间预测（预测未来1小时,2小时）和长期预测（未来8小时、24小时，48小时）的效果来证明所提出的方法来在短期预测和长期预测的优越性能。可视化基于注意力的RNN模型的对滑动窗口和隐藏层大小来说明所提出的模型对超参数的不那么敏感性。可视化自单个编码时间步长的空间注意力权重分布，说明模型对不同外部变量赋予了不同的权重，不同权重代表其空间相关性和对预测结果的影响程度，进而说明空间相关性注意的必要性。

Q7 用于定量评估的数据集是什么？代码有没有开源？

A7 数据集收集自浙江淡水渔业研究所的一个900平方米的池塘中收集的，池塘中有大约3000只杂交养殖的鱼；一共两个水质参数、两个土壤参数和六个气象参数，共十个参数；采用线性插值处理缺失的数据；数据采集频率为10分钟，每次采集10个参数，共有5006组数据；前4000组数据作为训练集，其余数据作为测试集。代码没有开源

Q8 论文中的实验及结果有没有很好地支持需要验证的科学假设？

A8 论文的实验及结果能很好地支持需要验证的科学假设。

Q9 这篇论文有什么贡献？

A9 分析基于注意力的RNN中时空关系的特征表示，并将其发展为溶解氧预测的多步骤预测;提出了两种基于注意力的RNN结构，分别增强了时间关系（tempral-Attn），并同时学习了时空关系（Spatio-temporal-Attn）；在真实世界数据集上的实验表明，基于注意力的RNN可以实现更准确的溶解氧预测，尤其是在长期预测中。tempral-Attn，Spatio-temporal-Attn具有很强的可解释性，在溶解氧预测中具有较弱的参数敏感性

Q10 下一步有什么工作可以继续深入？

A10 该论文的方法属于基于模型的方法，并没有利用到基于数据预处理的方法的好处，可以在基于注意力的RNN方法中尝试基于数据预处理的方法和混合方法。此外，同时更好地学习时空关系仍然是一个具有挑战性的问题，解决这一问题的关键是统一溶解氧预测中空间维度和时间维度之间的不一致性。