

Прогнозирование концентраций газов на основе нейросетевого моделирования

Д.В. Вегера, А.С. Забавин, А.А. Новикова, И.С. Пархоменко, Е.О. Похващев

Тихоокеанский государственный университет, Хабаровск

Аннотация: В статье рассматривается применение рекуррентной нейронной сети в задаче прогнозирования загрязняющих веществ в воздухе на основе смоделированных данных в виде временного ряда. Для построения прогноза используются модели нейронной рекуррентной сети с долгой краткосрочной памятью (Long Short-Term Memory - LSTM). Однонаправленной LSTM (далее просто LSTM), а также и двунаправленной LSTM (Bidirectional LSTM, далее Bi-LSTM). Оба алгоритма были применены для температуры, влажности, концентрации загрязняющих веществ и других параметров, учитывая, как сезонные, так и краткосрочные изменения. Сеть Bi-LSTM показала лучшую производительность и наименьшие ошибки.

Ключевые слова: экологический мониторинг, анализ данных, прогнозирование, рекуррентные нейронные сети, долгая краткосрочная память, однонаправленная, двунаправленная.

I. Введение

Прогнозирование концентраций загрязняющих веществ в атмосфере является важной задачей для обеспечения экологической безопасности и контроля качества воздуха. Точное предсказание концентраций газов позволяет своевременно принимать меры по снижению негативного воздействия на окружающую среду и здоровье человека. Одним из ключевых факторов, влияющих на концентрацию загрязняющих веществ, являются метеорологические условия.

В последние годы методы машинного обучения, в частности нейронные сети, активно применяются для решения задач прогнозирования в экологической сфере благодаря их способности учитывать сложные нелинейные зависимости в данных. Рекуррентные нейронные сети хорошо подходят для задач, требующих знания контекста и связей между элементами последовательности.

В работе [1] представлены результаты прогнозирования концентрации загрязняющих веществ с использованием рекуррентной нейронной сети с долгой краткосрочной памятью (Long Short-Term Memory - LSTM) на примере города

Хабаровска. В данной статье проводится сравнительный анализ двух подходов на основе нейронных сетей LSTM и двунаправленной LSTM (Bidirectional LSTM, далее Bi-LSTM). Эти модели были выбраны благодаря их способности эффективно работать с временными рядами и учитывать долгосрочные зависимости в данных. Цель исследования — оценить эффективность LSTM и Bi-LSTM для прогнозирования концентраций загрязняющих веществ с учетом метеорологических условий, и выявить преимущества, недостатки каждой из моделей. Результаты работы могут быть использованы для разработки более точных систем мониторинга и прогнозирования качества воздуха.

Статья организована следующим образом. Раздел 2 представляет описание методов моделирования, используемые в статье, а раздел 3 содержит анализ и оценку экспериментов. Заключение, итоги и потенциальные направления будущих исследований представлены в разделе 4.

II. Описание методов моделирования

Модели LSTM

Применение долгой краткосрочной памяти [2] для прогнозирования метеорологических и загрязняющих показателей эффективна благодаря способности сети обрабатывать временные ряды с долгосрочными зависимостями. LSTM, как разновидность рекуррентных нейронных сетей (recurrent neural network - RNN), успешно справляется с задачами прогнозирования температуры, влажности, концентрации загрязняющих веществ (например, PM_{2.5}, NO₂) и других параметров, учитывая, как сезонные, так и краткосрочные изменения.

Модели LSTM способны извлекать сложные временные закономерности из исторических данных, что делает их особенно полезными для анализа многомерных временных рядов, где традиционные методы, такие как ARIMA или линейная регрессия, часто оказываются недостаточно гибкими. Применение LSTM в метеорологии и экологическом мониторинге позволяет не только

повысить точность прогнозов, но и своевременно выявлять аномалии, что способствует улучшению качества управления окружающей средой и принятия решений в условиях изменяющегося климата.

Структура LSTM состоит из трёх компонент: forget gate (f_t), input gate (i_t) и output gate (o_t) (рис.1) [3, 4].

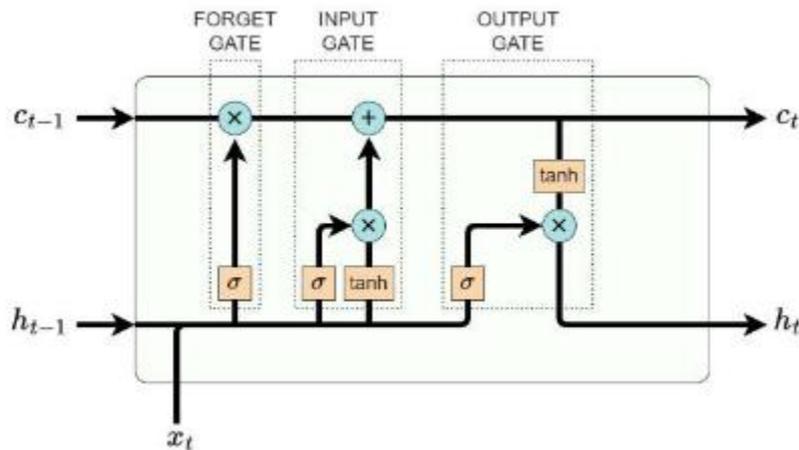


Рис. 1. – Ячейка слоя LSTM

Формально структуру LSTM можно представить следующим образом:

$$f_t = \sigma(w_f \times [h_{t-1}, x_t] + b_f) \quad (1)$$

$$i_t = \sigma(w_i \times [h_{t-1}, x_t] + b_i) \quad (2)$$

$$o_t = \sigma(w_o \times [h_{t-1}, x_t] + b_o) \quad (3)$$

$$\tilde{c}_t = \tanh(w_c \times [h_{t-1}, x_t] + b_c) \quad (4)$$

где w представляет матрицу весов, b_i , b_f , b_o , b_c представляют векторы смещения, x_t — вход на временном шаге, h_{t-1} — выход LSTM на предыдущем цикле, а σ — символ функции активации сигмоида. Задача *forget gate* заключается в вычислении предыдущих значений памяти, которые будут удалены из ячейки. Также *input gate* определяет новый вход в состояние ячейки. Состояние ячейки рассчитывается, как описано в уравнении (5):

$$c_t = \bar{f}_t \cdot c_{t-1} + i_t \cdot \tilde{c}_t \quad (5)$$

где символ \bar{f}_t представляет произведение Адамара. Затем выход сети LSTM h_t рассчитывается следующим образом:

$$h_t = o_t \times \tanh(c_t) \quad (6)$$

Затем выход LSTM \tilde{y}_i рассчитывается следующим образом

$$\tilde{y}_t = w_y h_t \quad (7)$$

где w_y – проекционная матрица для уменьшения размерности h_t .

Модели Bi-LSTM

Архитектура нейронной сети, называемая двунаправленной рекуррентной нейронной сетью (bidirectional RNN - BRNN), предназначена для обработки последовательных данных. Чтобы сеть могла использовать информацию как из прошлого, так и из будущего контекста при прогнозировании, BRNN обрабатывают входные последовательности как в прямом, так и в обратном направлении [5].

Двунаправленный слой в рекуррентных нейронных сетях — это слой, который позволяет обрабатывать последовательности данных в двух направлениях: вперед (от начала к концу) и назад (от конца к началу), что достигается за счет использования двух параллельных RNN (например, LSTM), одна из которых обрабатывает данные в прямом направлении, а другая — в обратном. Затем выходы этих двух сетей объединяются (например, путем конкатенации, суммирования или усреднения), что позволяет модели учитывать контекст как из прошлого, так и из будущего для каждого элемента последовательности. Для понимания контекста и улучшения точности.

На рисунке 2 представлена архитектура такой сети. Среднеквадратичная ошибка (mean squared error - MSE) [6, 7] широко используется для оценки точности моделей. MSE представляет собой разницу между предсказанными и фактическими значениями.

$$MSE = \frac{1}{N} * \sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (8)$$

где N – количество элементов в выборке, \hat{y}_i – реальное значение, а y_i – предсказанное моделью.

Средняя абсолютная ошибка (mean absolute error MAE) — это метрика, используемая для оценки точности модели, которая измеряет среднее абсолютное отклонение предсказанных значений от фактических.

$$MAE = \frac{1}{N} * \sum_{i=1}^N |y_i - \hat{y}_i| \quad (9)$$

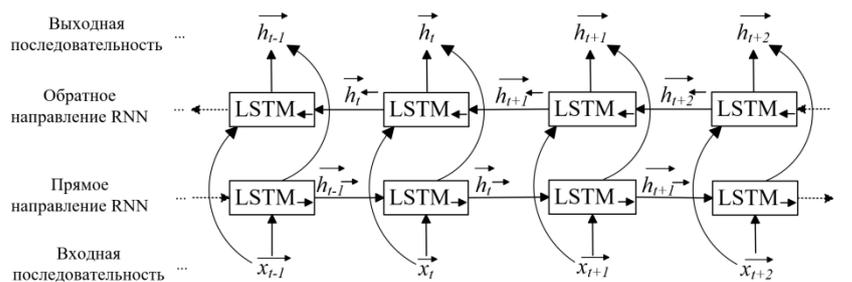


Рис 2. – Архитектура двунаправленной LSTM-сети

III. Результаты и анализ исследования

В данном исследовании используются:

на входе сети данные о температуре воздуха T , уровне влажности P и уровне давления;

на выходе в целях прогнозирования используются смоделированные в программном комплексе Matlab концентрации газов CO , CO_2 , N_2O , SO_2 .

Модели рекуррентной нейронной сети была разработана с использованием библиотеки Keras [8-10], которая является открытой и реализована на языке Python. Keras предоставляет удобный интерфейс для работы с искусственными нейронными сетями, что упрощает процесс создания и настройки моделей.

Архитектуры моделей представлены в таблицах № 1 и № 2.

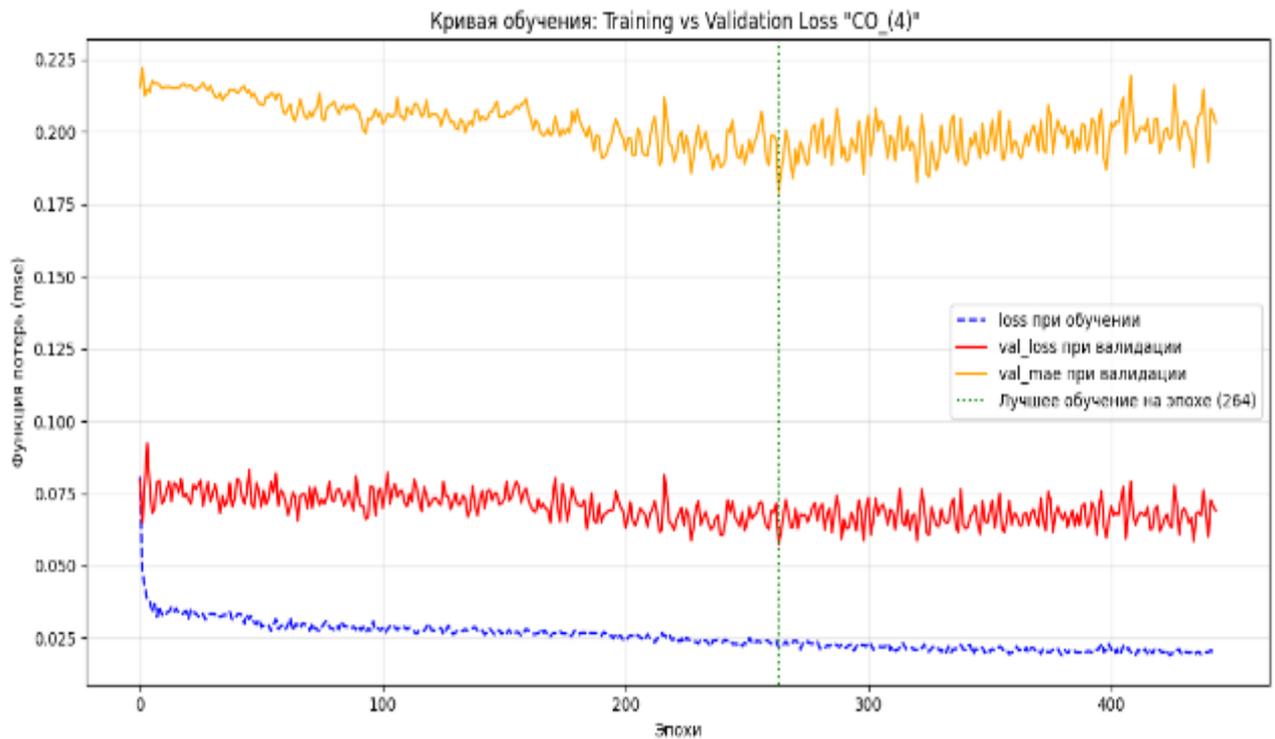
Графики "Кривая обучения: Training vs Validation Loss" для LSTM (рис. 3-6) и для двунаправленной Bi-LSTM (рис. 11-14) демонстрируют динамику изменения функции потерь (MSE) и средней абсолютной ошибки (MAE) в процессе обучения модели для прогнозирования концентрации газов. На графиках представлены кривые потерь на обучающей (training loss) и

валидационной (validation loss) выборках, а также MAE на валидации (val_mae). Снижение потерь на выборках свидетельствует об успешном обучении модели. Однако увеличение val_loss указывает на начало переобучения. Лучшее обучение подтверждается минимальными значениями val_loss и val_mae.

Таблица № 1

Архитектура RNN LSTM

№	Название слоя	Параметры
1	Input (7, 3)	
2	LSTM (7, 50)	1080
3	Dropout (7, 50)	0
4	LSTM (32)	20200
5	Dropout (50)	0
6	Dense (1)	51



Сеть обрабатывает последовательности с помощью однонаправленного LSTM, добавляет регуляризацию (Dropout), затем повторяет выход первого слоя и преобразует для получения финального выхода.

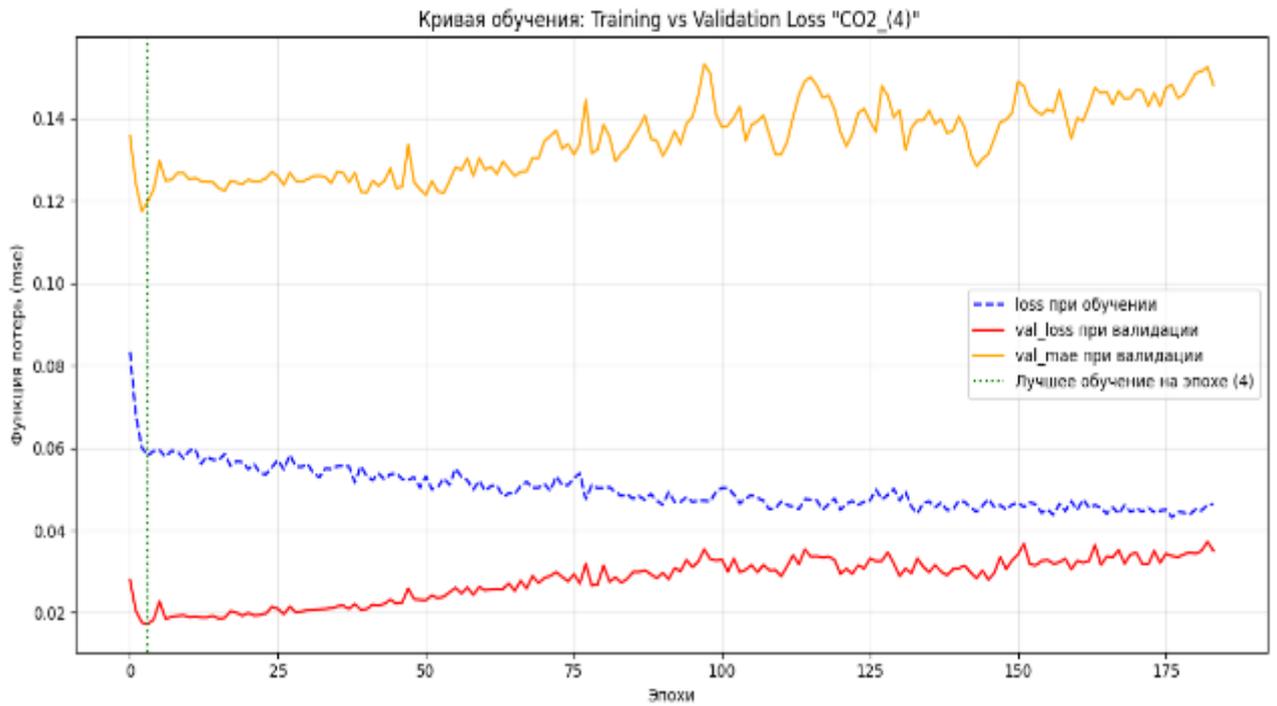


Рис. 3. – Кривая обучения: Training vs Validation Loss CO (LSTM)

Рис. 4. – Кривая обучения: Training vs Validation Loss CO₂ (LSTM)

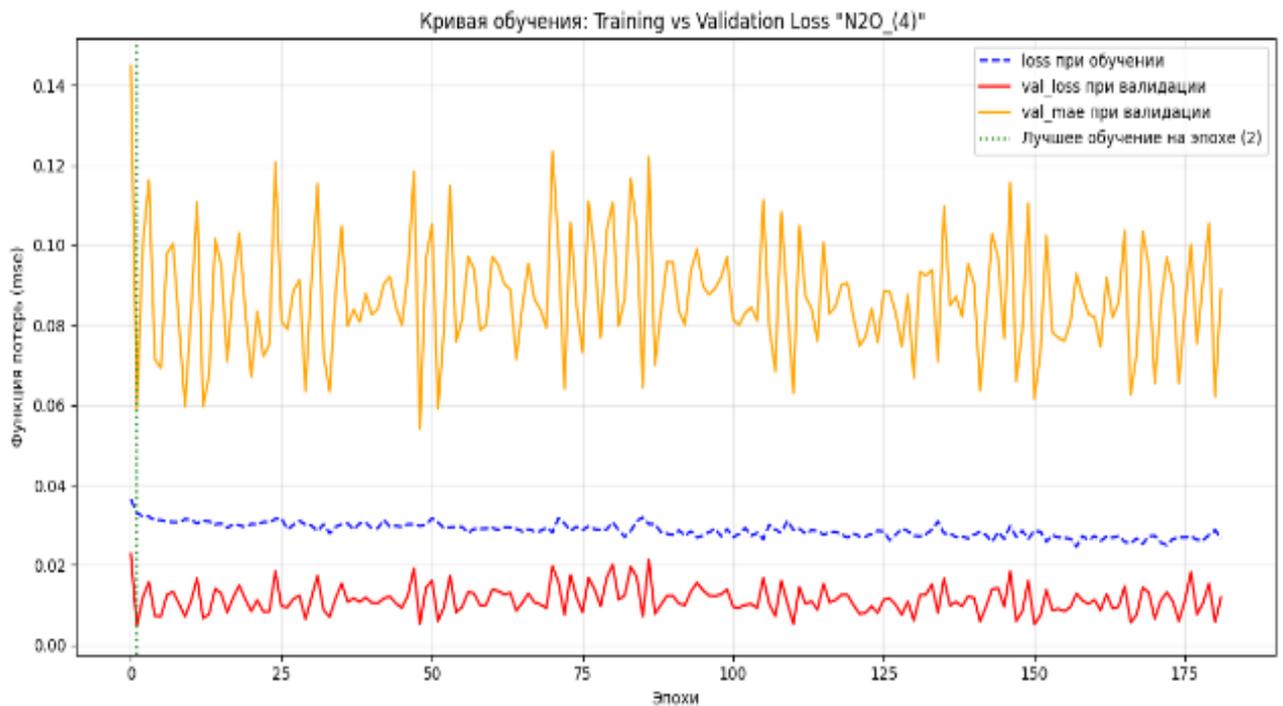


Рис. 5. – Кривая обучения: Training vs Validation Loss N₂O (LSTM)

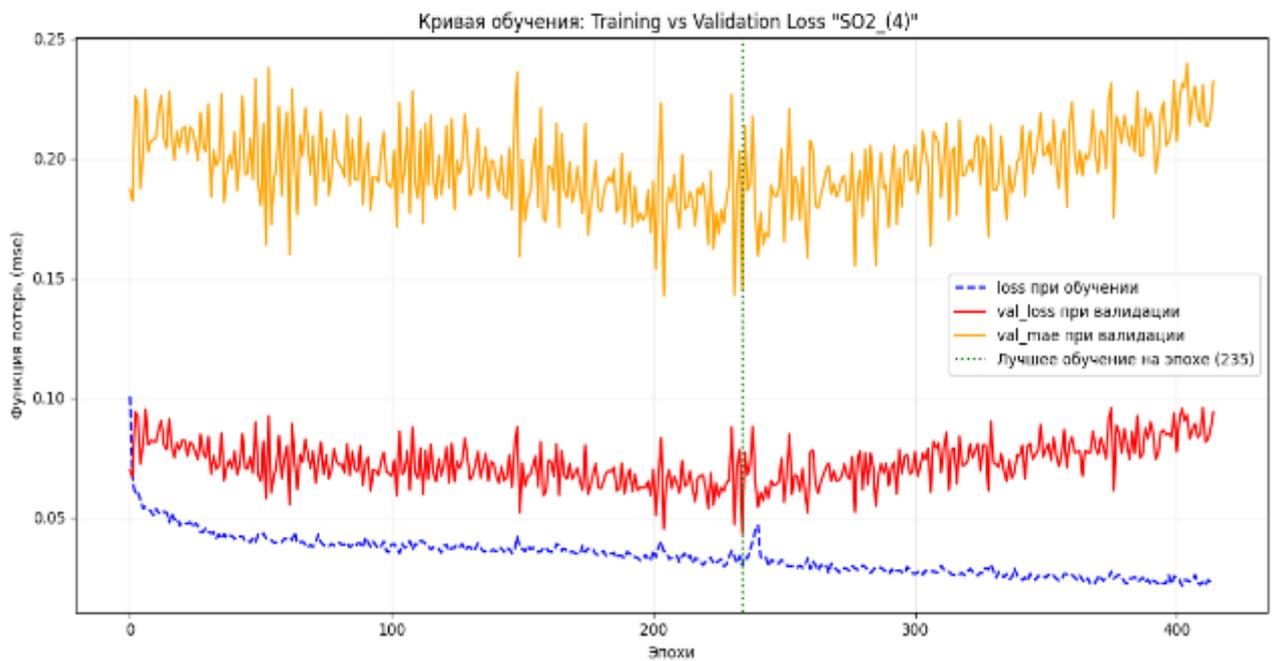


Рис. 6. – Кривая обучения: Training vs Validation Loss SO₂ (LSTM)
Результаты прогнозирования модели LSTM представлены на рисунках 7-10.

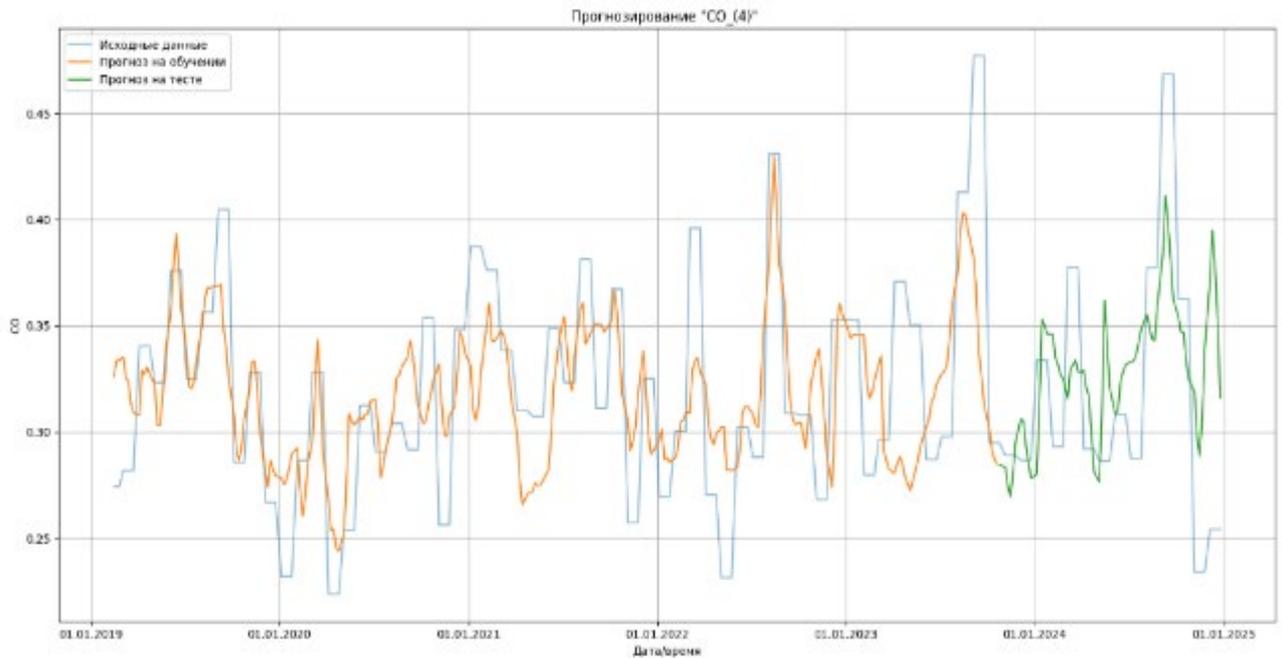


Рис. 7. – Результаты прогнозирования CO (LSTM)

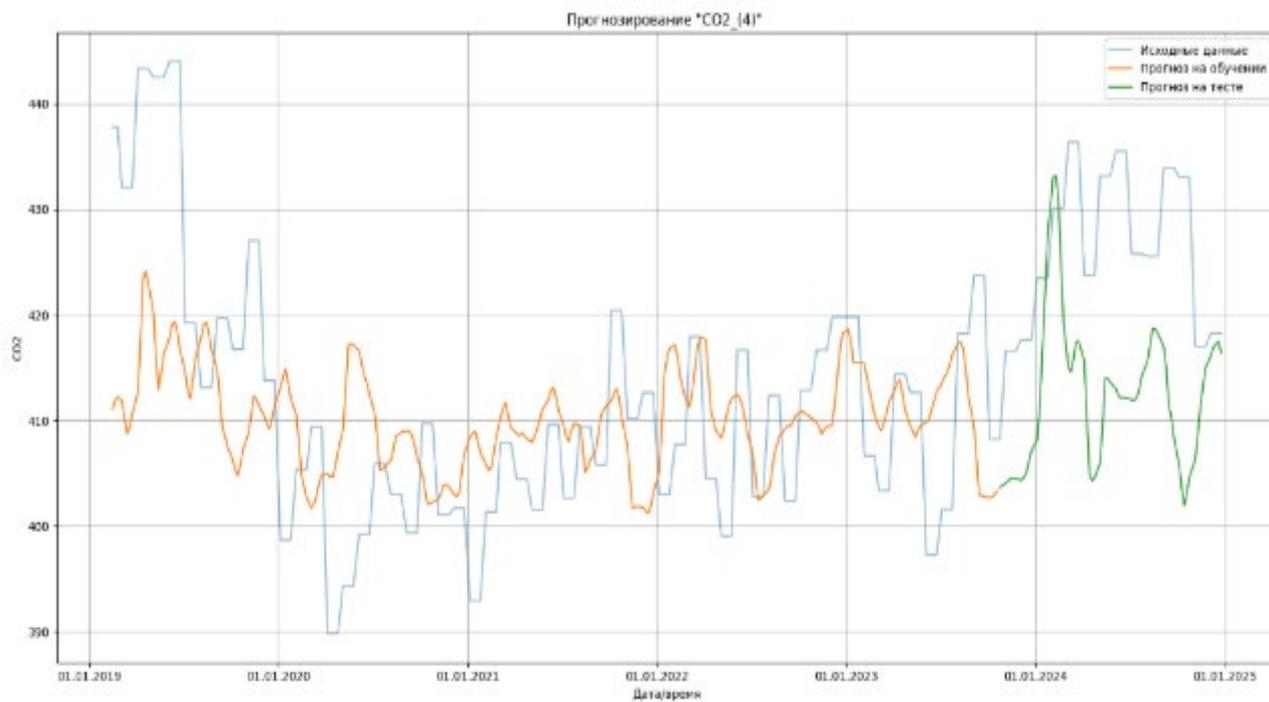


Рис. 8. – Результаты прогнозирования CO₂ (LSTM)

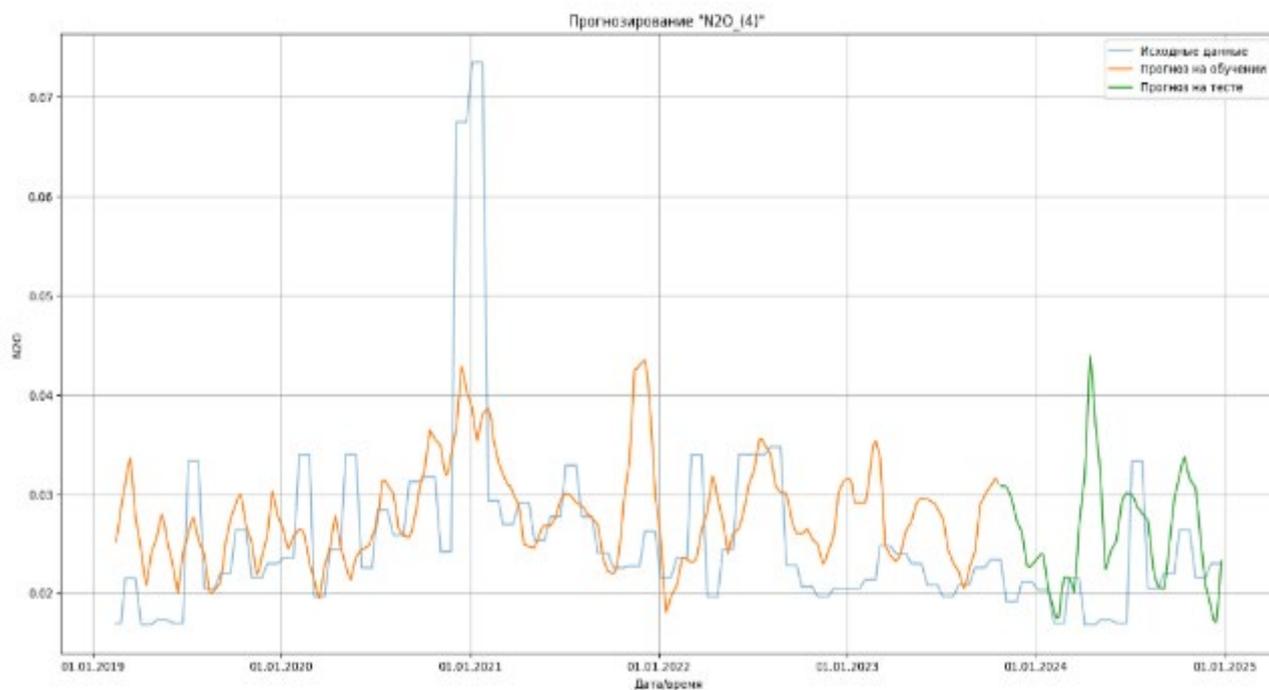


Рис. 9. – Результаты прогнозирования N₂O (LSTM)

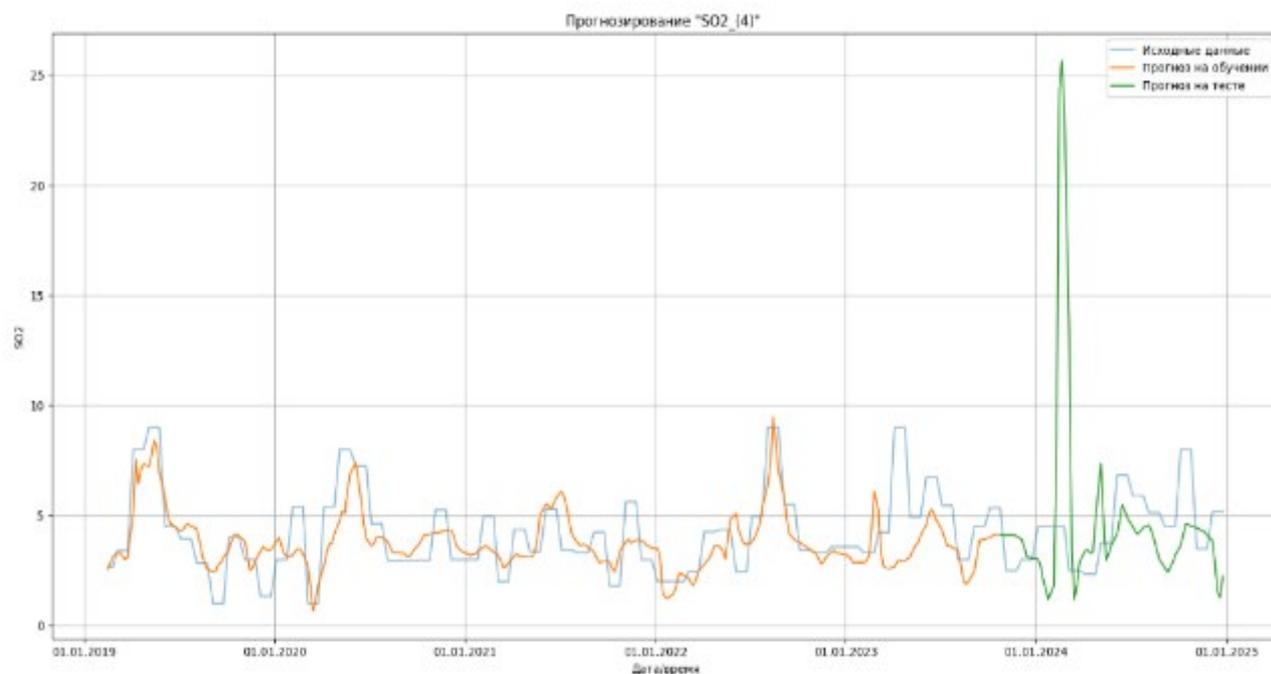


Рис. 10. – Результаты прогнозирования SO₂ (LSTM)

Таблица № 2

Архитектура RNN Bi-LSTM

№	Название слоя	Параметры
1	Input (7, 3)	
2	Bidirectional LSTM (7, 256)	135168
3	Dropout (7, 256)	0
4	LSTM (64)	82176
5	Dense (32)	2080
6	Dense (1)	33

Сеть обрабатывает последовательности с помощью двунаправленного LSTM, добавляет регуляризацию (Dropout), затем использует еще один LSTM и два полносвязных слоя для получения финального выхода.

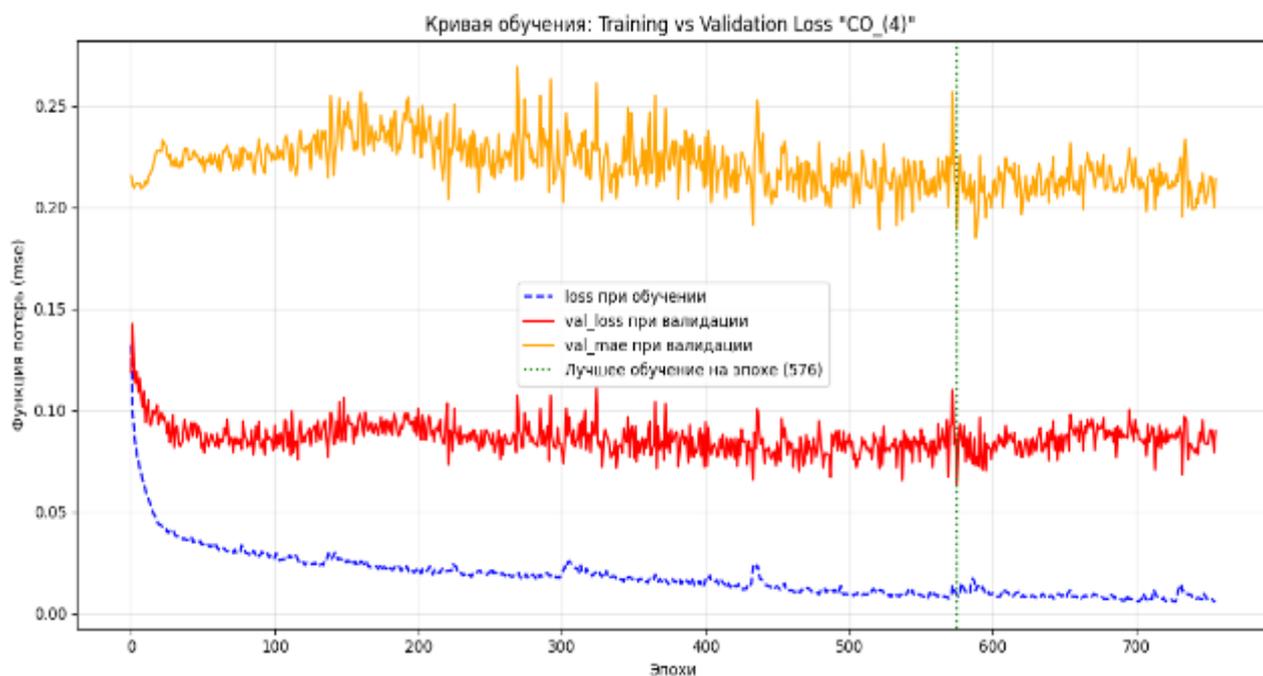


Рис. 11. – Кривая обучения: Training vs Validation Loss CO (Bi-LSTM)

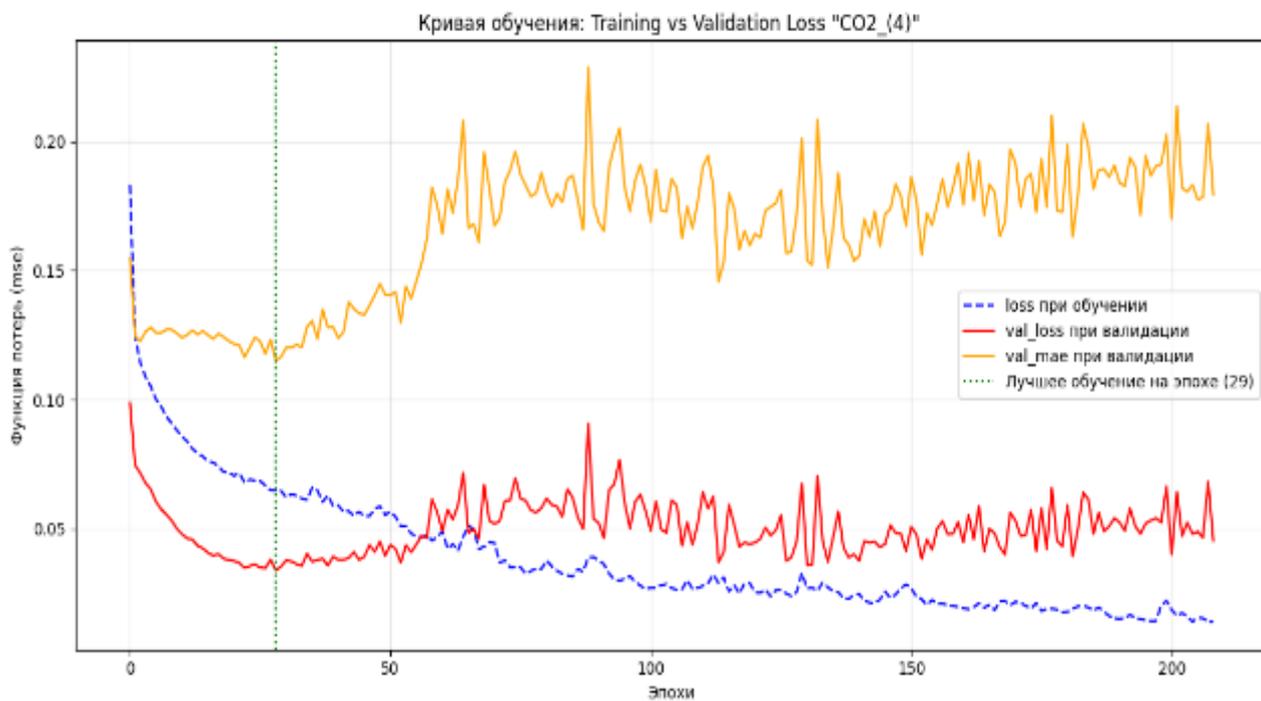


Рис. 12. – Кривая обучения: Training vs Validation Loss CO₂ (Bi-LSTM)

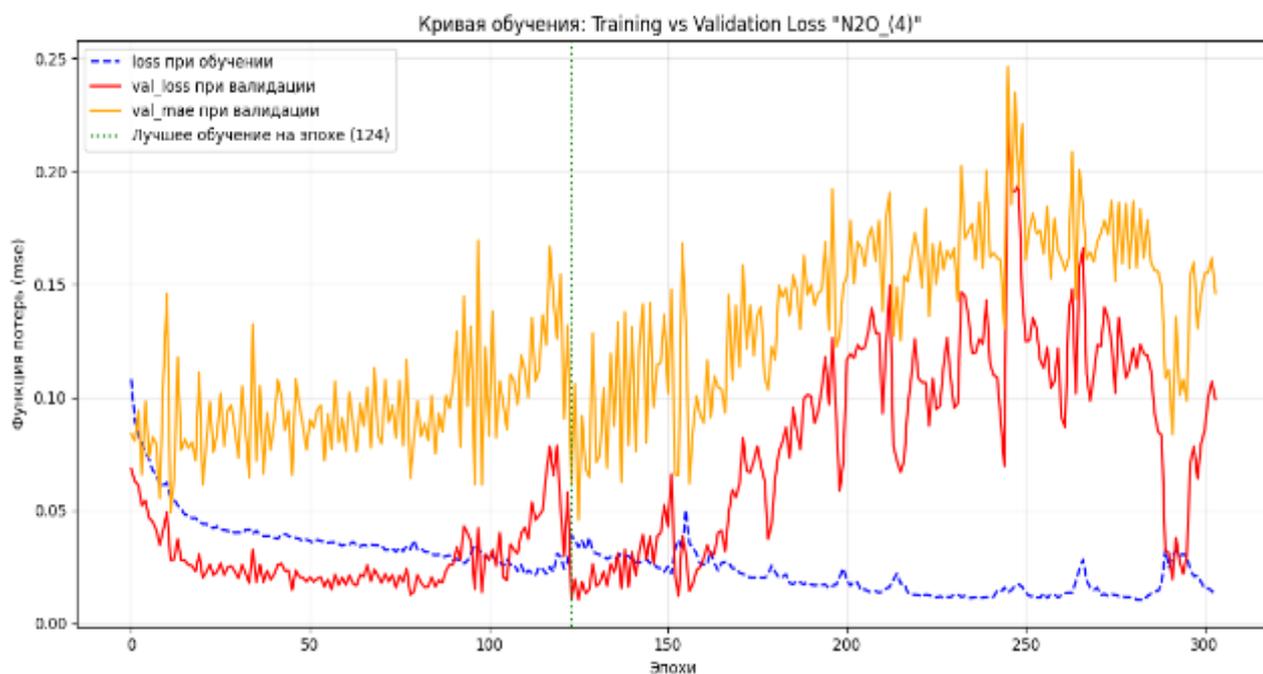


Рис. 13. – Кривая обучения: Training vs Validation Loss N₂O (Bi-LSTM)

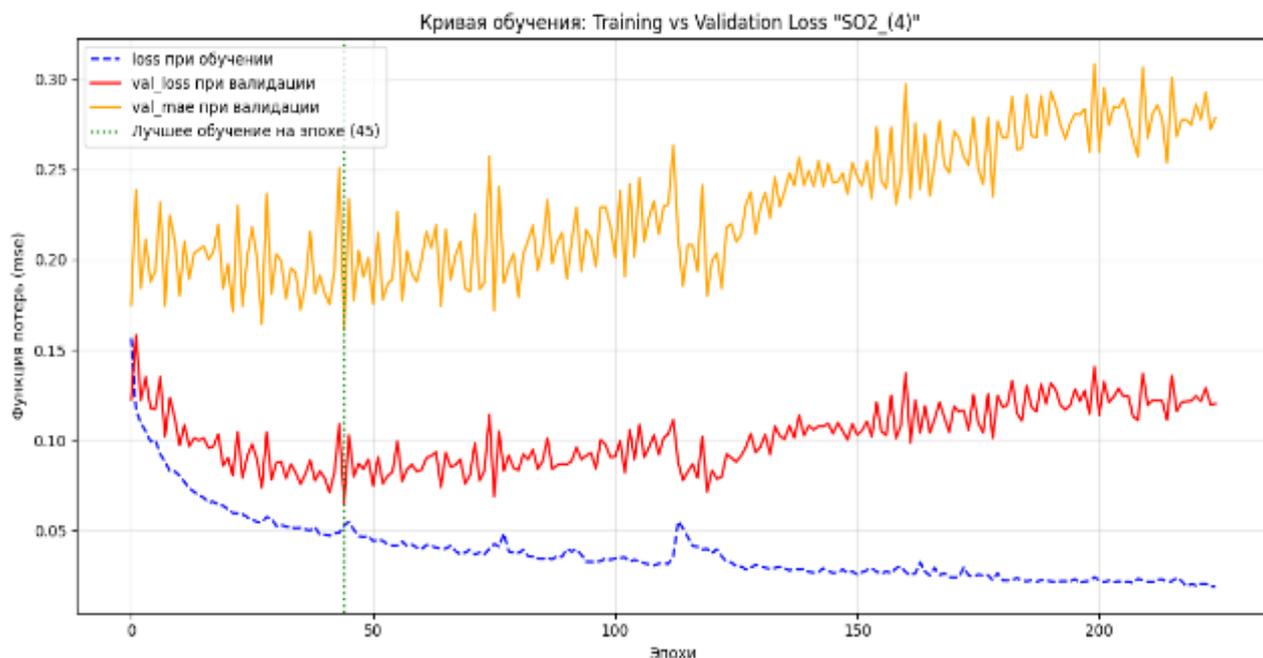
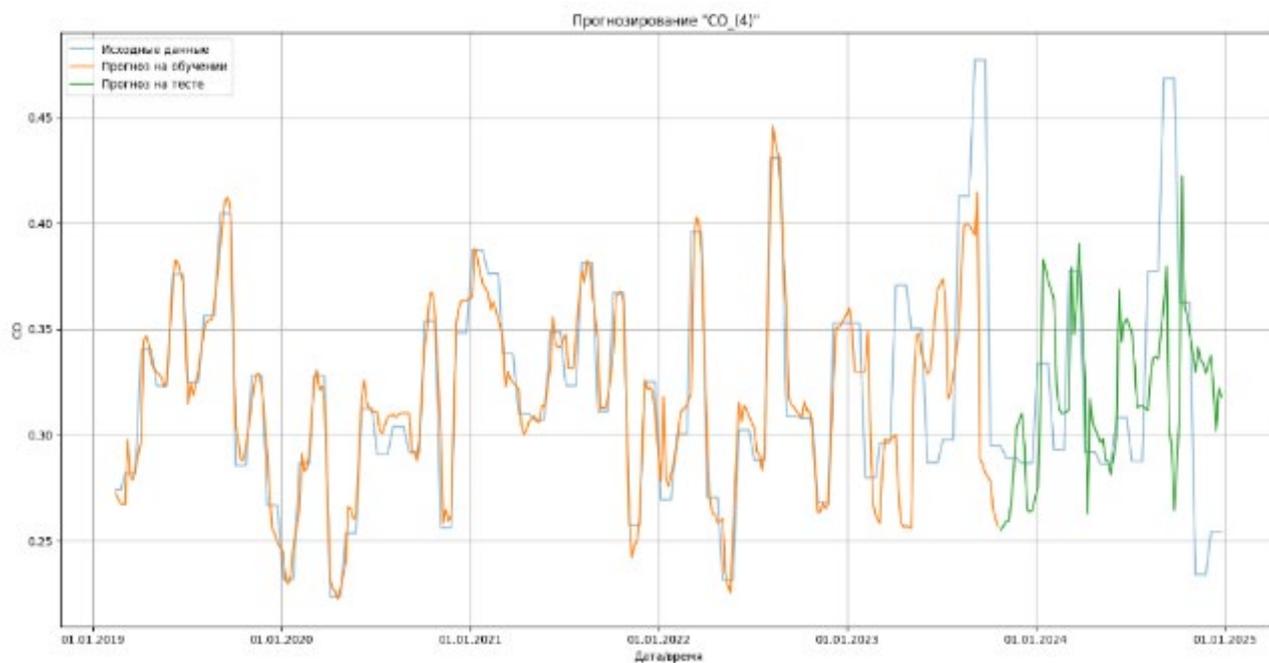


Рис. 14. – Кривая обучения: Training vs Validation Loss SO₂ (Bi-LSTM)

Результаты прогнозирования модели Bi-LSTM представлены на рисунках 15-18.



РРис. 15. – Результаты прогнозирования CO (Bi-LSTM)

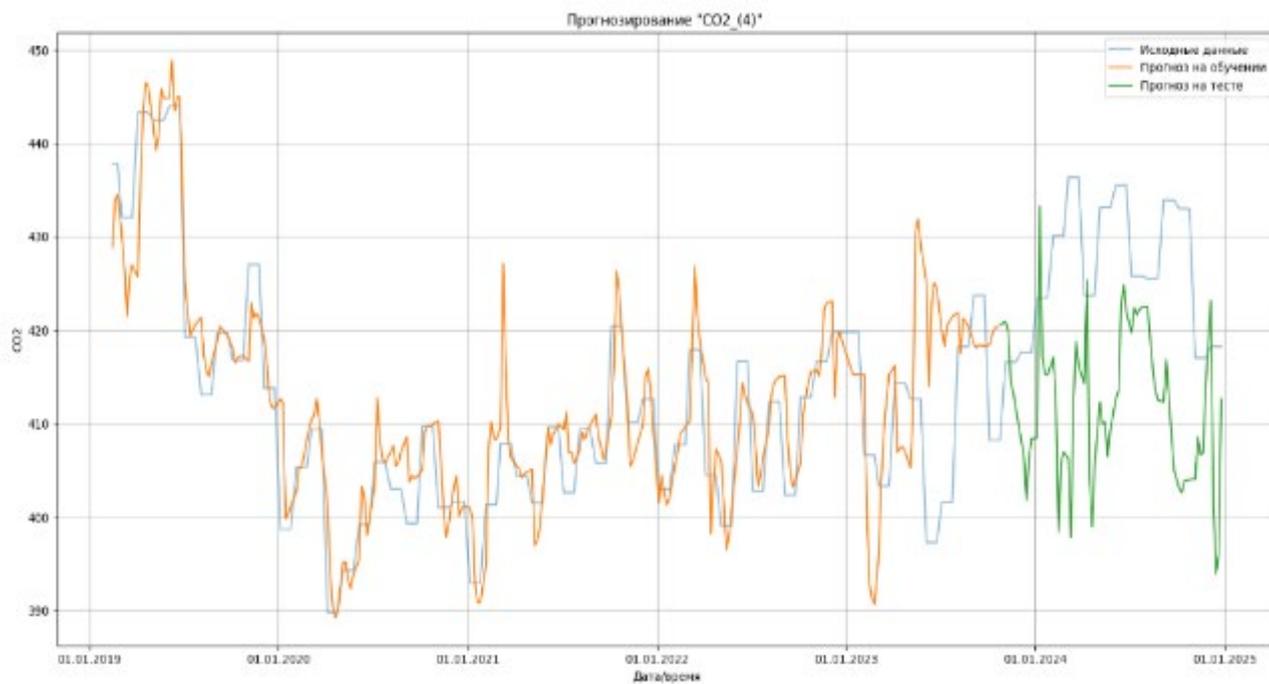


Рис. 16. – Результаты прогнозирования CO₂ (Bi-LSTM)

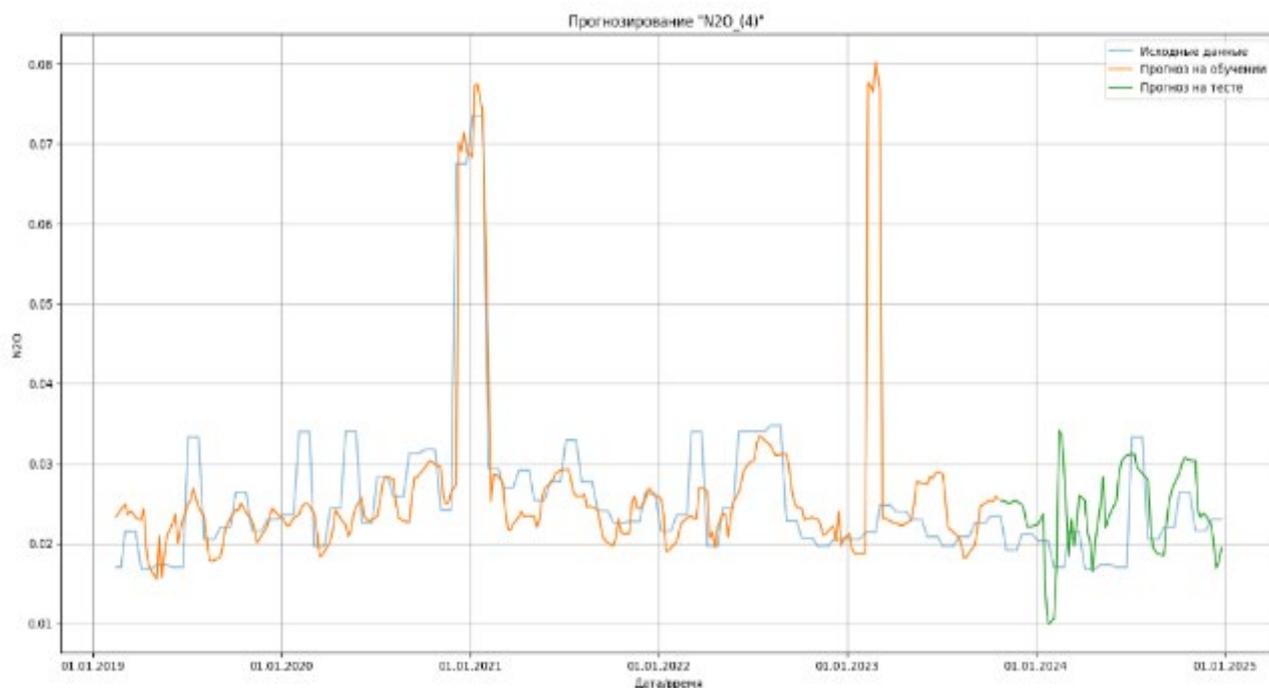


Рис. 17. – Результаты прогнозирования N₂O (Bi-LSTM)

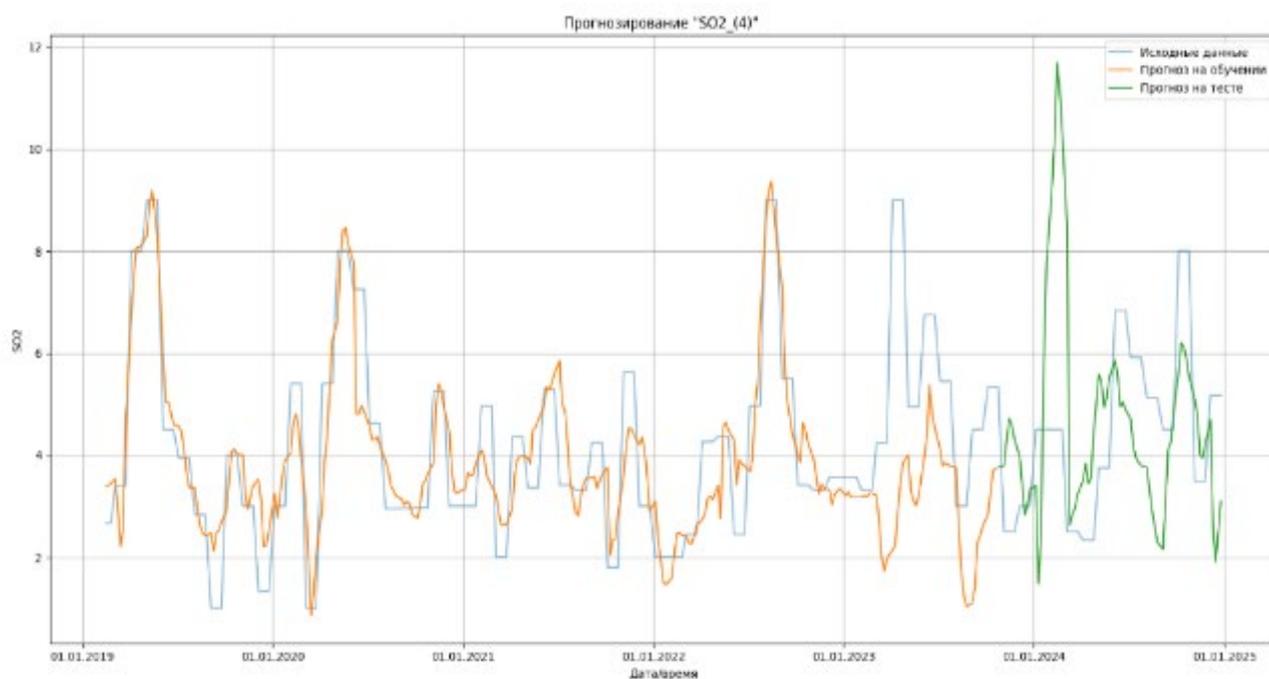


Рис. 18. – Результаты прогнозирования SO₂ (Bi-LSTM)

Заключение

В данной статье проведено исследование применения рекуррентных нейронных сетей для прогнозирования концентраций загрязняющих веществ в атмосфере на основе временных рядов. Были рассмотрены две модели:

однонаправленная LSTM и двунаправленная Bi-LSTM. Обе модели показали свою эффективность в обработке сложных временных зависимостей, характерных для метеорологических данных и данных о загрязнении воздуха. Однако Bi-LSTM продемонстрировала более высокую точность прогнозирования и меньшую ошибку MSE по сравнению с однонаправленной LSTM, что связано с её способностью учитывать контекст как из прошлого, так и из будущего.

Результаты исследования подтверждают, что использование нейронных сетей, особенно двунаправленных архитектур, может значительно улучшить точность прогнозов концентраций загрязняющих веществ, что важно для экологического мониторинга и принятия своевременных мер по снижению негативного воздействия на окружающую среду и здоровье человека. В будущих исследованиях можно рассмотреть применение более сложных архитектур нейронных сетей, а также интеграцию дополнительных данных, таких как информация о выбросах промышленных предприятий или транспортных потоков, для дальнейшего повышения точности прогнозов.

Литература

1. Вегера Д.В., Кудяшов А.А., Новикова А.А. Прогнозирование концентраций газов на основе рекуррентной нейронной сети // Инженерный вестник Дона. 2024. № 7. URL: ivdon.ru/magazine/archive/n7y2024/9359.
2. Hochreiter S., Schmidhuber J. Long Short-Term Memory // Neural Computation. 1997. Vol. 9, No. 8. Pp. 1735–1780.
3. Каллан Роберт. Основные концепции нейронных сетей. Пер. с англ. — М.: Издательский дом «Вильямс», 2001. 289 с
4. Rath A., Sahu S.R. Recurrent Neural Networks for Recommender Systems // Computational Intelligence and Machine Learning. 2020. Vol. 1. Pp. 31–36.

5. Хайкин Саймон. Нейронные сети. Полный курс. пер. с англ. — 2-е изд. — М.: ООО «И.Д. Вильямс», 2006. 1104 с.
6. Круглов В.В., Борисов В.В. Искусственные нейронные сети. Теория и практика. 2-е изд. — М.: Горячая линия – Телеком, 2002. 382 с.
7. Рутковская Д., Пилиньский М., Рутковский Л. Нейронные сети, генетические алгоритмы и нечеткие системы; пер. с польск. И.Д. Рудинского. — М.: Горячая линия – Телеком, 2006. 452 с.
8. Chollet F. Deep Learning with Python. Second Edition. 2021. 504 p.
9. Головкин В.А. Нейронные сети: обучение, организация и применение. — М.: Изд-во журнала «Радиотехника», 2001. 256 с.
10. Rvachev M.M. Neuron as a reward-modulated combinatorial switch and a model of learning behavior // Elsevier: Neural Networks. URL: journals.elsevier.com/neural-networks

References

1. Vegera D.V. Kudyashov A.A., Novikova A.A. Inzhenernyj vestnik Dona. 2024. № 7. URL: ivdon.ru/magazine/archive/n7y2024/9359.
 2. Hochreiter S., Schmidhuber J. Neural Computation. 1997. Vol. 9, No. 8. Pp. 1735–1780.
 3. Callan Robert. Osnovnye kontseptsii neyronnykh setey [Basic Concepts of Neural Networks]. ID. «Vilyams», 2001. 289 p.
 4. Rath A., Sahu S.R. Computational Intelligence and Machine Learning. 2020. Vol. 1. Pp. 31–36.
 5. Haykin Simon. Neyronnye seti. Polnyy kurs [Neural Networks. A Comprehensive Foundation]. 2-е изд., ID. «Vilyams», 2006. 1104 p.
 6. Kruglov V.V. Borisov V.V. Iskusstvennye neyronnye seti. Teoriya i praktika [Artificial Neural Networks. Theory and Practice] 2-е изд. Telekom, 2002. 382 p.
-



7. Rutkovskaya D. Neyronnye seti, geneticheskie algoritmy i nechetkie sistemy [Neural Networks, Genetic Algorithms, and Fuzzy Systems]. Telekom, 2006. 452 p.
8. Chollet F. Deep Learning with Python. Second Edition. 2021. 504 p.
9. Golovko V.A. Neyronnye seti: obuchenie, organizatsiya i primenenie [Neural Networks: Training, Organization, and Application]. Moskva: Izdatel'stvo zhurnala «Radiotekhnika», 2001. 256 p.
10. Rvachev M.M. Elsevier: Neural Networks. URL: journals.elsevier.com/neural-networks.

Дата поступления: 3.02.2025

Дата публикации: 27.03.2025