

DOI:10.11737/j.issn.1003-0239.2024.03.003

基于自注意力机制的深度学习海洋三维温度场预测

岳伟豪^{1,2}, 徐永生^{2,3,4*}, 朱善良¹

(1. 青岛科技大学, 山东 青岛 266061; 2. 中国科学院海洋研究所, 山东 青岛 266071; 3. 中国科学院大学, 北京 100094; 4. 青岛海洋科技中心, 山东 青岛 266000)

摘要: 目前主要从时空角度出发对海洋三维温度场进行预测, 却忽略了相邻位置的海温相关关系。为弥补这一不足, 构建一种融合了自注意力记忆模块与卷积式长短时记忆神经网络(ConvLSTM)模型的SA-ConvLSTM三维温度场预测模型, 不仅可以从历史三维温度场中提取海温时空特征, 还能获取并记忆相邻点位置信息, 从而实现对三维温度场时空变化的把握。实验结果表明: 相较于ConvLSTM模型, SA-ConvLSTM模型在滑动预测与多步长递归预测实验下的均方根误差和平均绝对误差提升约14%, 且整体预测效果均优于基线模型、长短时记忆神经网络模型和ConvLSTM模型。

关键词: 海水温度; 三维温度场预测; 自注意力记忆机制; SA-ConvLSTM; 多步长递归预测

中图分类号: P731.31 **文献标识码:** A **文章编号:** 1003-0239(2024)03-0022-11

0 引言

海水温度是表示海水热力状况的一个物理量, 常作为研究水团性质、描述水团运动的基本指标, 是农业、渔业和旅游业的“风向标”^[1-3]。海水温度异常会导致各种自然灾害和极端天气事件、改变部分地区的降水分布、减少作物产量、严重威胁人民生命安全, 并造成巨大经济损失^[4-5]。近年来, 全球变暖状况愈演愈烈^[6-7], 海水中水团混合、湍流、涡流等都受到不同程度影响, 水团间动量、能量以及热量传递加剧, 各水团密度也随之变化, 使得海水温度变化更为复杂。因此, 掌握海水温度变化规律、精准预测未来海水温度不仅是海洋研究的重要方向, 也会对国家经济、人民生活等产生巨大影响。

目前, 海水温度预测依照理论基础的不同主要分为两种方法^[8]。一种是基于传统物理海洋的数值模型, 按照给定的初始条件、假定若干边界条件并运用大量物理等式方程来描述温度变化规律, 从而

对未来温度进行预测^[9]。该方法的缺点是等式方程过于复杂繁琐, 耗费大量时间以及计算资源, 而且只能针对某一特定区域开展。近年来, 随着计算机和互联网的广泛应用, 产生和记录的数据量呈爆炸式增长, 人类正式进入大数据时代。基于大数据分析的数据驱动模型, 即机器学习模型逐渐成为海水温度预测的热点。数据驱动方法可以根据大量历史数据来学习数据中潜在的规律并根据“所学知识”预测未来温度, 在拥有大量优质历史数据及计算资源的基础上, 它能够准确预测大尺度水温并实现快速迭代, 为海洋基础性研究、认识海洋环境变化做出重要贡献。

ZHANG等^[10]用长短时记忆神经网络(Long Short Term Memory, LSTM)预测海表面温度。YANG等^[11]使用全连接式LSTM与卷积神经网络融合(Combined Fully Connected Long Short Term Memory and Convolutional neural network, CFCC-LSTM)预测海表面温度。学者们在海表面温度预

收稿日期: 2023-02-22。

基金项目: 崂山实验室科技创新项目(LSKJ202201406); 国家自然科学基金(41906027); 国家自然科学基金联合基金项目(U22A20587); 国家自然科学基金-山东联合基金重点项目(U1406401); 中国科学院战略先导计划(XDB42000000)。

作者简介: 岳伟豪(1999-), 男, 硕士, 主要从事海洋温盐预测研究。E-mail: 2021090023@mails.qust.edu.cn

*通信作者: 徐永生(1970-), 男, 研究员, 博士, 主要从事物理海洋和海洋遥感方面研究。E-mail: yongsheng.xu@qdio.ac.cn

测方面取得巨大进展,但研究过程存在共同的不足,即预测时片面考虑空间位置的单个点,忽略温度在垂直方向上的影响作用。虽然海洋在垂直方向的深度远不及其水平跨度,但是由于热盐环流的存在,海洋内部在垂直方向会进行热量、物质交换,导致海水温度受到影响,预测准确性降低。因此,在使用数据驱动模型预测海水温度时,应同时考虑水平、垂直方向的影响作用,学习海水温度的时空变化规律。SHI等^[12]提出一种深度学习模型,即卷积式长短时记忆神经网络(Convolutional Long Short Term Memory, ConvLSTM)用于降水预报,该模型将LSTM中的乘积操作改为卷积运算,使模型能够获取到时空三维信息,解决降水预报的空间局限难题,在空间预测方面具有巨大优势。此后,学者们根据ConvLSTM模型的基本思想提出了一系列模型对海水温度进行预测^[13-15],但ConvLSTM及其改进模型的本质仍是循环神经网络(Recurrent Neural Network, RNN),无法获取空间不同位置输入信息的相关关系,且长时间序列数据输入网络时仍会出现预测效果下降等问题。

自注意力(Self-Attention, SA)机制的提出使得模型能够获取输入数据的全局依赖关系^[16],在机器翻译、计算机视觉等领域取得重要性突破,此后学者提出众多改进模型以提升计算效率和设计不同类型的注意力机制^[17-19]。基于SA机制在聚合空间特征方面的优势,LIN等^[20]结合自注意力机制与ConvLSTM提出自注意力卷积式长短时记忆神经网络(Self-Attention Convolutional Long Short Term Memory, SA-ConvLSTM)模型并应用于移动手写体数字、交通流量等时空预测领域。由于海洋三维温度预测问题也属于时空预测问题,所以本文使用SA-ConvLSTM模型以提升海洋三维温度场预测精度。

1 研究区域、数据

本文选取南太平洋为研究区域,经纬度范围为 $40^{\circ}\sim 60^{\circ}\text{S}$, $100^{\circ}\sim 160^{\circ}\text{W}$ 。因该研究区域处于三大洋在南半球的交汇处,拥有不同于其他大洋的重要洋流,即南极绕极流(Antarctic Circumpolar Current, ACC)^[21],其动力学过程比较复杂,因此国际水文地理组织将其划分为独立于其他四大洋之外的第五

大洋——南大洋。南大洋完全包围南极大陆,对南极大陆和冰盖起到“隔热”作用;同时,南大洋北接三大洋并贯穿全球大洋及其温盐循环,加之其具有吸热和固碳的特征,因此它对全球碳循环和温度有着重要的调控作用。研究显示,人类活动排放的二氧化碳很大部分被南大洋吸收。南大洋的海冰变化率也对全球大洋温盐环流有重要的驱动作用,被喻为大洋深层环流的“发动机”,在全球大洋深层环流的形成和发展过程中扮演着重要角色。大洋深层环流若发生改变,将导致整个海洋区域海水温度发生显著变化并通过海气相互作用和大气遥相关等过程影响全球气候系统,包括中国局部地区的气候变化。因此,南大洋区域在地球系统和全球变化中有重要作用,研究南大洋可以使人类更好地认识、保护和利用这一海域。

本文使用的数据为全球海洋网格数据集(Barnes Objective Analysis-Array for Real-time Geostrophic Oceanography, BOA-Argo)^[22],该数据集包含全球海洋海面—1 975 m水深范围内的海水温度、盐度等物理海洋环境要素资料,水平分辨率为 $1^{\circ}\times 1^{\circ}$,覆盖范围为 $0^{\circ}\sim 360^{\circ}\text{E}$, $80^{\circ}\text{S}\sim 80^{\circ}\text{N}$,垂向在 $0\sim 1\ 975\ \text{m}$ 水深范围内分为间隔不等的58层,时间自2004年1月—2022年9月,时间分辨率为月。数据下载地址为ftp://data.argo.org.cn/pub/ARGO/BOA_Argo/。本文选取2005年1月—2022年9月共213个月的海温数据,所选研究区域数据的空间维度为(58, 20, 60),58表示深度层层数(depth),20表示纬度数(latitude),60表示经度数(longitude)。

本文将前162个月的海水温度数据划分为训练集,后36个月的海水温度数据划分为测试集,剩余月份则划分为验证集。为了加快神经网络的收敛速度,本文根据训练集中的最大、最小海水温度值对原始数据58个深度层分别进行归一化处理。计算公式为:

$$t_{\text{norm},i} = \frac{t_i - t_{\min,i}}{t_{\max,i} - t_{\min,i}}, \quad i \in \{1, 2, \dots, 58\} \quad (1)$$

式中: $t_{\max,i}$ 与 $t_{\min,i}$ 分别表示第*i*深度层的最大、最小海水温度数据; t_i 表示第*i*深度层的全部海水温度数据; $t_{\text{norm},i}$ 表示归一化后第*i*深度层的全部海水温度数据。将时间步长(*n*)设定为30,通过滑动窗口方法将数据划分为(183, 30, 58, 20, 60),183为样本数(samples),30为时间步长(time step),58为深度层

层数,20为纬度数,60为经度数。在测试时,模型根据训练集所学规律对未来海水温度进行预测,通过反归一化将预测值同步到真实值范围,继而进行误差计算,并比较不同模型的预测效果。

2 方法

在本节中,将依次介绍SA记忆模块、ConvLSTM模型、本文构建的SA-ConvLSTM模型及模块融合以及预测方式和深度学习环境配置。现对本文所有物理量进行说明(见表1)。

表1 文中涉及的各项变量名及含义

Tab.1 The variable names and meanings involved in this paper

变量	变量含义	变量	变量含义
t_i	海水温度	$e_{i,j}$	第 <i>i</i> 与第 <i>j</i> 个点的相似度
$t_{max,i}$	最大海水温度	A_h	全部点构成的相似度
$t_{min,i}$	最小海水温度	Z_i	单个点的空间特征
$t_{norm,i}$	归一化后海水温度	Z	全部点的空间特征
Q_h	全部点生成的查询	X'_i	带有空间特征的输出结果
K_h	全部点生成的键	i	输入门
V_h	全部点生成的值	f	遗忘门
Q_i	单个点生成的查询	o	输出门
K_i	单个点生成的键	C	状态记忆
V_i	单个点生成的值	H	模块输出结果
X_t	模型输入	M	记忆空间特征的状态

2.1 SA机制

SA机制在机器翻译、文本生成等序列任务中表现优异,基本思想是通过计算自身与自身的相关关系得到全局性自身空间的内部表征。SA机制借鉴了人脑处理信息的方式:弱化无效信息、聚焦于关键信息,从而对模型结构进行优化,节省大量计算资源。

图1为SA模块的结构示意图。 X_t 为模型输入; Q_h 为全部点构成的查询(Query); K_h 为全部点构成的键(Key); V_h 为全部点构成的值(Value); A_h 为全部点构成的注意力得分(Attention Score); X'_i 为输出结果;⊗表示矩阵乘法;⊕矩阵逐元素相加。

首先,模型根据输入数据对每一样本的每个位置点生成对应的向量 Q_i 、 K_i 和 V_i ,其中 K_i 与 V_i 是一对键值对,之后通过 Q_i 与第*j*个点的 K_j 计算相似度 $e_{i,j}$:

$$e_{i,j} = Q_i^T K_j = (X_i^T W_q^T)(W_k X_j), \quad i,j \in \{1,2,\dots,N\} \quad (2)$$

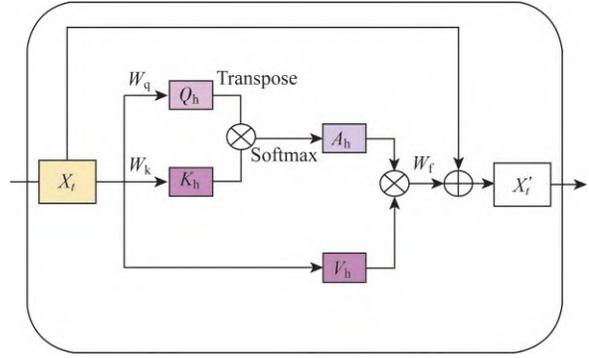


图1 自注意力结构示意图

Fig.1 Schematic of self-attention

式中: X_t 与 X_j 为特征向量; W 为权重,不同下标对应不同权重; N 为输入数据高与宽的乘积。可以使用归一化指数函数(Softmax)生成注意力得分 $\alpha_{i,j}$:

$$\alpha_{i,j} = \frac{\exp e_{i,j}}{\sum_{k=1}^N \exp e_{i,k}}, \quad i,j \in \{1,2,\dots,N\} \quad (3)$$

所有注意力得分可构成 A_h ,然后将注意力得分与每一样本的值相乘得到加权向量,从而得到各点的特征:

$$Z_i = \sum_{j=1}^N \alpha_{i,j} (W_v X_j), \quad i,j \in \{1,2,\dots,N\} \quad (4)$$

所有点的特征 Z_i 构成 Z ,经过运算后得到的加权向量便包含了训练样本的有效信息。最终将全部加权向量与输入信息相加,得到具有全局信息的输出结果:

$$X'_t = W_t Z + X_t, \quad t \in \{1,2,\dots,n\} \quad (5)$$

2.2 ConvLSTM模型

卷积神经网络(Convolution Neural Network, CNN)在计算机视觉领域应用广泛,在图像识别、异常行为检测、行为认知、姿态估计等任务中表现优异。卷积运算与卷积核的存在使得CNN拥有处理网格结构数据的能力,因此CNN可以对BOA-Argo数据进行特征提取并学习数据在空间维度上的规律。

LSTM以RNN为基础架构增加门单元和状态记忆两个模块。门单元通过学习选择需要遗忘、记忆、表达的信息并将信息传递到状态记忆模块,这使得LSTM能够记忆、处理更多有效信息;状态记忆模块则根据门单元传递的信息在原有状态的基础上小幅修改,不断获取新信息,舍弃无效旧信息,有

效缓解时间步长较大时的梯度消失或爆炸问题,更有效地学习数据在时间维度上的变化规律。

最终,将LSTM中的乘积操作转化为卷积运算,完成ConvLSTM模型的构建。构建方法为:

$$i_t = \sigma(W_{xi} * X_t + W_{hi} * H_{t-1} + W_{ci} \circ C_{t-1} + b_i) \quad (6)$$

$$f_t = \sigma(W_{xf} * X_t + W_{hf} * H_{t-1} + W_{cf} \circ C_{t-1} + b_f) \quad (7)$$

$$C_t = f_t \circ C_{t-1} + i_t \circ \tanh(W_{xc} * X_t + W_{hc} * H_{t-1} + b_c) \quad (8)$$

$$o_t = \sigma(W_{xo} * X_t + W_{ho} * H_{t-1} + W_{co} \circ C_t + b_o) \quad (9)$$

$$H_t = o_t \circ \tanh(C_t), \quad t \in \{1, 2, \dots, n\} \quad (10)$$

式中: X_t 为输入数据; H_{t-1} 为隐藏状态; C_{t-1} 为状态记忆; b 为偏差,不同下标对应不同偏差; i_t 为输入门; f_t 为遗忘门; o_t 为输出门;*代表卷积运算,是对LSTM的改进之处; \circ 代表哈达玛积(Hadamard Product)。与LSTM相比,ConvLSTM模型的输入数据转变为三维温度数据,能够对空间特征进行提取;同时完整保留LSTM的门机制和状态记忆,因此在长时间序列预测任务中能够记忆更多有效信息,预测效果比LSTM更胜一筹。

2.3 SA-ConvLSTM模型

ConvLSTM模型的核心思想仍然是RNN,即时间序列数据根据时间戳(Time Stamp)依次输入至模型中,模型通过输入数据 X_t 与 $t-1$ 时刻的状态 C_{t-1} 、 H_{t-1} 进行学习并生成新的状态。但在海水温度预测任务中,不仅相邻位置的海水温度密切相关,海洋中的波浪、洋流等水团运动也会导致不相邻位置的海水温度具有一定关系。因此,本文在SA机制的核心思想上,额外加入用于记忆空间位置关系的自注意力记忆模块(Self-Attention Memory Module, SAM)用于海水温度预测任务。

图2为自注意力记忆模块,其中: M_{t-1} 为 $t-1$ 时刻的自注意力记忆状态; \odot 表示通道连接(Channel Concatenate); \otimes 表示矩阵乘法; \oplus 矩阵元素相加; \circ 表示哈达玛积。该模块是在SA机制的基础上增加记忆模块。根据 M_{t-1} 生成对应的键值对 K_m 、 V_m 。与SA机制不同的是,SAM使用输入信息 X_t 所生成的 Q_h 与 K_h 、 K_m 计算相似度最终得到 Z_h 、 Z_m ,将二者合并为 Z 后得到输出结果 H_t ,生成对应门控单元。计算公式为:

$$i'_t = \sigma(W_{iz} * Z + W_{ih} * H_t + b_i) \quad (11)$$

$$g'_t = \tanh(W_{gz} * Z + W_{gh} * H_t + b_g) \quad (12)$$

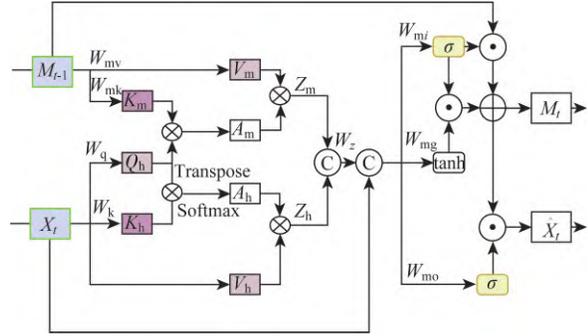


图2 自注意力记忆模块

Fig.2 Self-Attention Memory Module

$$o'_t = \sigma(W_{oz} * Z + W_{oh} * H_t + b_o) \quad (13)$$

从而根据 i'_t 、 g'_t 、 o'_t 对自注意力记忆状态、输出结果进行更新得到 M_t 和 \hat{H}_t 。计算公式为:

$$M_t = (1 - i'_t) \circ M_{t-1} + i'_t \circ g'_t \quad (14)$$

$$\hat{H}_t = o'_t \circ M_t, \quad t \in \{1, 2, \dots, n\} \quad (15)$$

将SAM模块加入到ConvLSTM模型,形成SA-ConvLSTM(见图3)。与ConvLSTM模型相比,增加的SAM模块(蓝色部分)为 H_t 添加空间位置信息并输出最终结果。

2.4 预测方式

本文使用滑动窗口算法对海洋三维温度场进行训练。在训练过程中,模型通过学习第 $i-n+1$ 时刻(n 为时间步长)— i 时刻的水温变化规律及空间位置关系预测第 $i+1$ 时刻(未来时刻)的海水温度,之后沿时间轴移动以预测下一时刻(第 $i+2$ 时刻)—训练集最后时刻的水温。在测试过程中,预测时刻水温将被视为真实水温进行多步递归预测,图4为训练过程的框架图。图中, X_t 为第 $i-n+1$

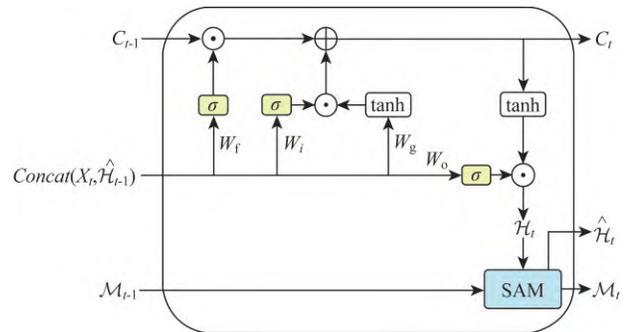


图3 SA-ConvLSTM结构示意图

Fig.3 Schematic of SA-ConvLSTM cell

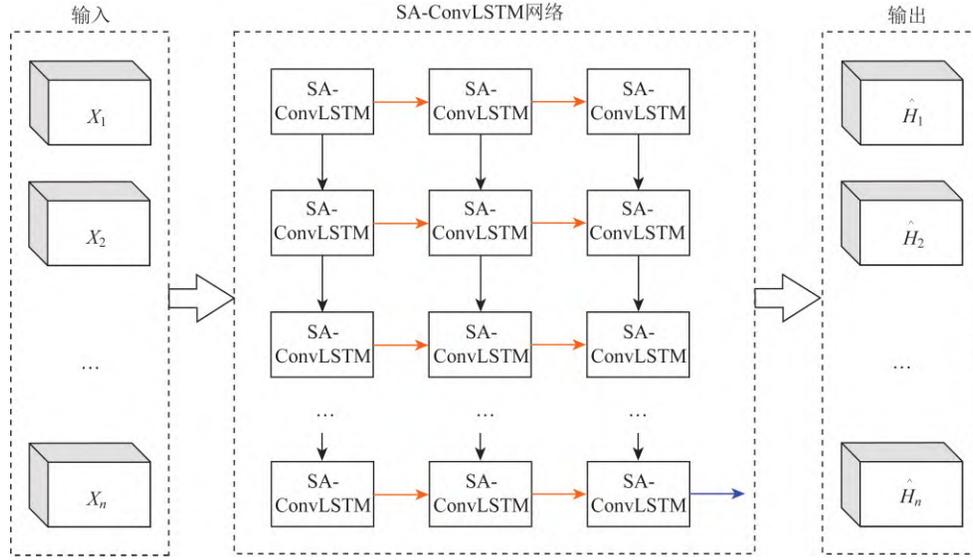


图4 SA-ConvLSTM模型的训练框架图

Fig.4 The training framework of SA-ConvLSTM model

时刻的海水温度; X_n 为第 i 时刻的海水温度, 维度均为 $(58, 20, 60)$; \hat{H}_1 为带有空间位置信息第 $i - n + 1$ 时刻的隐藏状态, 可视为第 $i - n + 2$ 时刻的预测海温值, \hat{H}_i 则被视为是第 $i + 1$ 时刻的预测海温值。当模型输出预测值后, 使用均方误差 (Mean Square Error, MSE) 作为损失函数计算预测值与真实海水温度之间的误差并通过自适应矩估计 (Adaptive Moment Estimation, Adam) 优化器进行优化, 初始学习率设置为 0.001, 隐藏层设置为 $[64, 64, 58]$, 卷积核大小设置为 3, 训练次数 epoch 为 500。MSE 损失函数公式为:

$$\text{MSE} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N (t_{\text{pred},j} - t_{\text{true},j})^2 \quad (16)$$

本文的深度学习环境配置为: Intel (R) Core (TM) i9-10940X CPU @ 3.30 GHz, 64 G 内存, Python 3.8.3. 所用框架为 Pytorch (GPU), 显卡为 NVIDIA GeForce RTX 3090 图形卡。

3 实验与讨论

3.1 实验设置

为验证模型性能, 本文分别以滑动预测以及多步递归两种预测方法开展三维温度场预测实验, 通过对比其他基准模型说明 SA-ConvLSTM 三维温度预测模型在长时间海洋三维温度序列预测的效果。

对于滑动预测方法, 本文使用 LSTM、ConvLSTM、基线模型 (Persistence) 作为基准模型验证模型性能。由于 Persistence 模型是将上一月的真实温度值作为预测值, 与时间序列预测问题中的线性模型作用一致, 因此可以直观地看出其他模型是否优于简单的线性模型。对于多步递归预测方法, 本文将预测步数 m 设置为 $1 \sim 12$, 即根据 30 个月的水温数据使用不同模型预测未来 m 个月的海水温度, 将预测准确度作为衡量模型性能的标准。从空间角度出发, 对所选研究区域的海温分 4 个不同季节的深度剖面进行比较分析, 进一步证明模型的性能。

本文使用平均绝对误差 (Mean Absolute Error, MAE)、均方根误差 (Root Mean Square Error, RMSE)、归一化均方根误差 (Normalized Root Mean Square Error, NRMSE) 与决定系数 (Coefficient of Determination, R^2) 作为衡量模型性能指标。具体公式为:

$$\text{MAE} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N |t_{\text{pred},j} - t_{\text{true},j}| \quad (17)$$

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N (t_{\text{pred},j} - t_{\text{true},j})^2} \quad (18)$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{j=1}^N (t_{\text{pred},j} - t_{\text{true},j})^2}{\sum_{j=1}^N (t_{\text{true},j} - \bar{t}_{\text{true},j})^2} \quad (19)$$

$$NRMSE = \frac{\sqrt{\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N (t_{pred,j} - t_{true,j})^2}}{t_{max,i} - t_{min,i}}, i \in \{1, 2, \dots, 58\} \quad (20)$$

式中: $t_{pred,j}$ 、 $t_{true,j}$ 分别为第 j 个点的预测海水温度、真实海水温度; N 为输入数据长与宽的乘积; $t_{max,i}$ 与 $t_{min,i}$ 表示第 i 深度层的最大、最小海水温度数据; $\bar{t}_{true,j}$ 为真实海水温度的均值。

3.2 实验结果与分析

3.2.1 滑动预测结果

使用训练完成的模型对测试集 36 个月的海洋三维温度场进行预测。首先, 计算出预测结果与真实

水温的平均误差, 其中 SA-ConvLSTM 三维温度场预测模型与真实值的平均 RMSE 为 0.40 °C, 相较于 ConvLSTM 预测值与真实值的平均 RMSE (0.47 °C) 提升约 15%, 较 LSTM 的平均 RMSE (0.55 °C) 提升约 27%。接着, 比较不同模型在不同深度下的 NRMSE 空间分布, 并展示预测结果与真实海水温度的对比。受篇幅限制, 58 个深度层难以全部展示, 因此本文选取特定深度层作为结果展示。图 5 为不同模型在测试集不同深度层下的 NRMSE 空间分布图。从不同模型来看, 从左至右蓝色区域面积逐渐变大, 即 NRMSE 值逐渐减少, 证明这 4 种模型的预测性能依次提高。Persistence 模型简单地将上一月的海水温度数据作为预测值, 是一种线性拟合, 实际上没有进

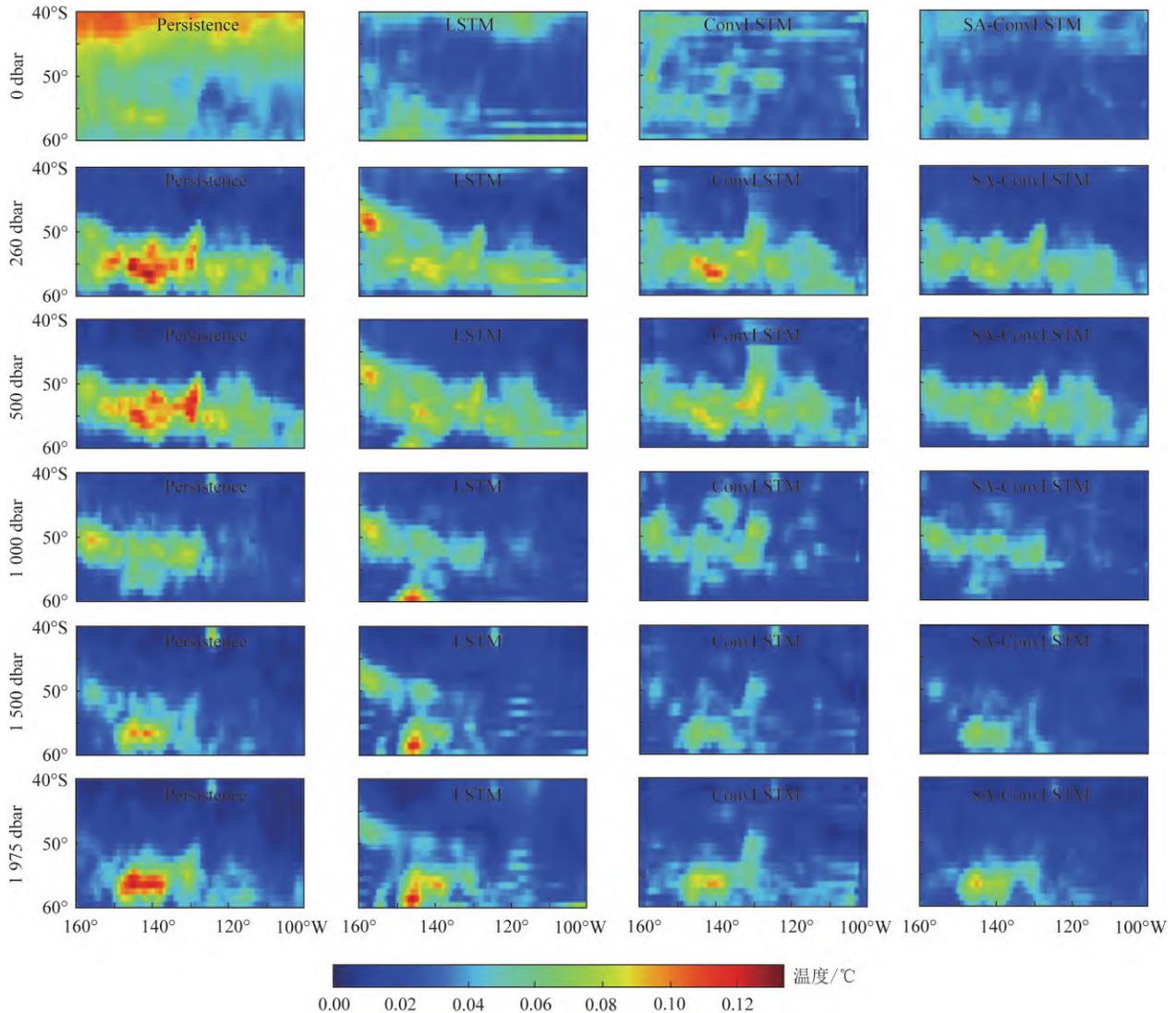


图5 不同模型在不同深度下的NRMSE空间分布
Fig.5 The distribution of NRMSE in different model at different depth

行任何运算,因此相较于其他神经网络模型的预测精度最差;LSTM模型能够学习到海温在时间上的变化规律并对未来海温进行预测,但是受模型单点输入限制无法从历史数据中获取海洋三维温度场的空间信息,加之本文设置的时间序列步长为30,对于LSTM模型来说梯度传导距离较远,难以学习远距离海洋三维温度场的时间依赖关系,故其预测精度比Persistence模型提升较大,却低于其他神经网络模型;ConvLSTM模型将LSTM模型的乘积运算改为卷积操作,使得其不再受制于输入维度并对历史海水温度数据的时空信息进行特征提取,从而将时间序列预测问题转化为时空序列预测问题,其预测精度相对于LSTM模型有较大提升。SA-ConvLSTM

模型以ConvLSTM为基础模型获得历史数据的时空信息,并通过SA机制中的相似性计算与加权运算,可以从大量时空信息中捕捉数据的内部空间相关性并筛选聚焦于少量但重要的信息,从而学习到不同点的空间位置相关关系,所以取得了最精确的预测效果。从不同深度来看,由于受太阳辐射和海气相互作用的影响,海表面温度变化较大,导致难以预测,因此4种模型的预测误差都较大;随着深度的增加,太阳辐射逐渐减少,海水间的热量传递减弱导致温度变化幅度较小,模型预测更加准确。

图6为4种模型在2022年6月各深度层的预测图与真实图的对比,由于所选深度层的海水温度相差较大,若采用同一色条将难以观察部分细节,所

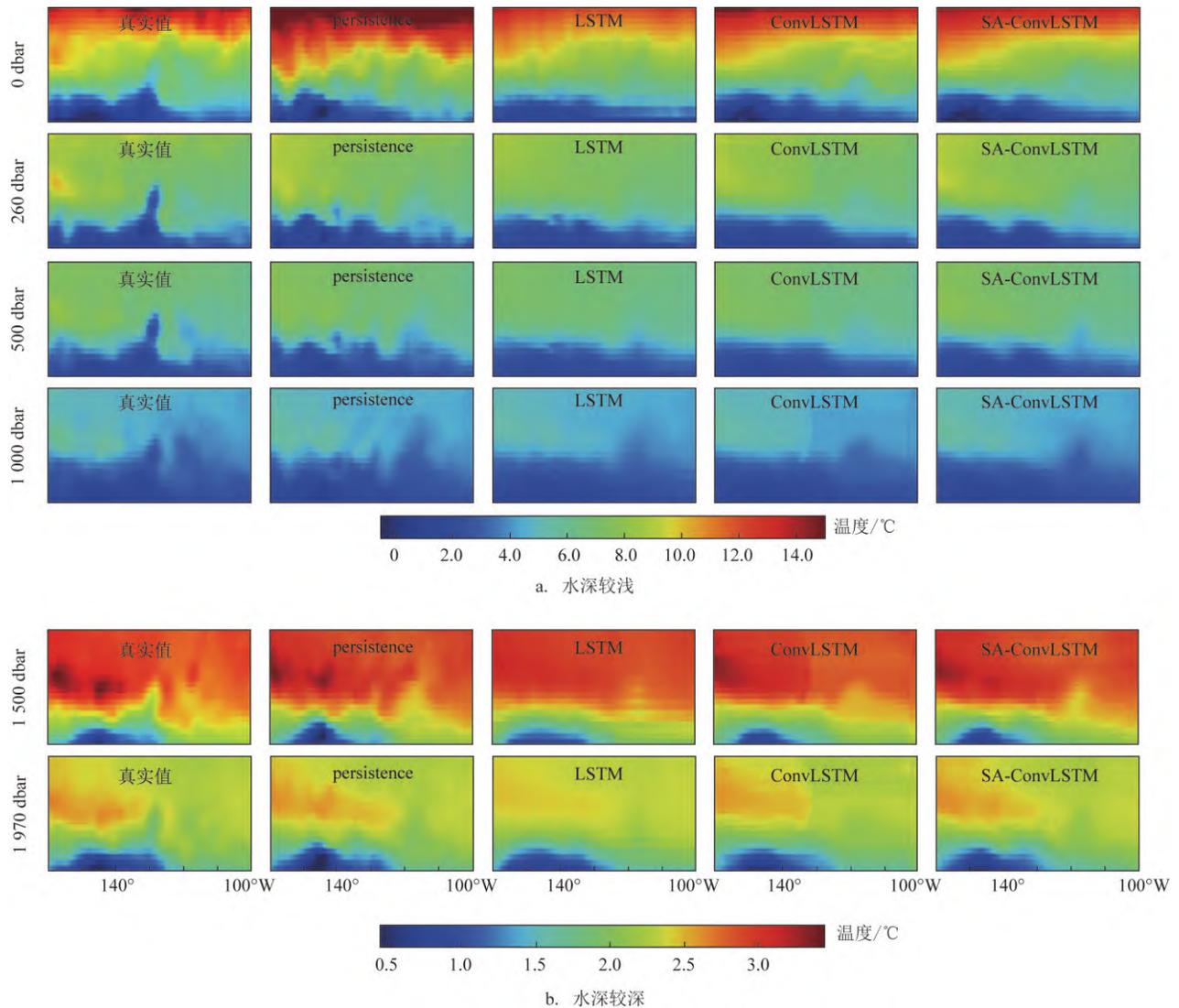


图6 不同模型在不同深度的预测图与真实值对比

Fig.6 Comparison of predicted and actual values by different model at different depth

以分两类对比不同深度下不同模型的预测效果。由图6可以看出4种模型在不同深度的整体预测趋势基本一致,但是在部分细节上表现不同。6月为南半球冬季,海水温度较秋季有所下降,因此Persistence模型预测出的温度较高,表现为海表面的红色区域面积较大且颜色较深、蓝色区域面积较小且颜色较浅,但随着深度增加,其预测图与真实分布图趋于一致;LSTM模型能根据历史数据预测未来温度,但是较远的传导距离使得其预测结果较差,表现为部分红色区域颜色较浅,同样随深度增加预测与真实值逐渐一致;ConvLSTM模型能对空间信息进行提取故其表现优于LSTM模型;SA-ConvLSTM模型由于综合了时空信息并捕捉到了空间相关关系使得预测性能进一步提升,与真实值分布最为接近。

综上分析可知,可知本文构建的SA-ConvLSTM模型在时空序列预测方面具有提取相邻位置点空间特征的优势。

3.2.2 递归多步预测结果

递归预测方法是将第*i*+1时刻的预测值作为输入数据预测第*i*+2时刻的海水温度,根据预测步长重复*m*次。由于输入模型的预测值与真实温度之间存在误差,相对于滑动预测来说,递归预测的误差随步数的增加而逐渐增大。图7为基准模型与SA-ConvLSTM模型的预测效果对比图。当多步预测的步长为9时,SA-ConvLSTM模型与ConvLSTM

模型的平均RMSE相差最大,分别为0.45℃、0.52℃,后者提升约14%。从预测步长角度来看,3个基准模型与SA-ConvLSTM模型的误差随预测步长的增加而逐渐增大,增大幅度不尽相同;当步长增大到一定范围时,还会出现预测误差下降的情况;此外,SA-ConvLSTM模型随步长增加而增加的绝对预测误差较小,证明SA-ConvLSTM三维温度场预测模型在长时间序列预测任务中有较稳定的预测能力。从不同模型来看,本文构建的深度学习模型在不同度量指标下均优于ConvLSTM、LSTM以及Persistence模型,更加贴近真实值,进一步证明SA-ConvLSTM三维温度场预测模型的性能相较于传统方法有明显提升。

图8为预测步长设置为12时,SA-ConvLSTM三维温度场预测模型在4个不同深度、不同季节的误差图。从不同深度来看,SA-ConvLSTM模型与基准模型在海表面的预测误差均达到最大,这可能与海表面复杂多变的海气相互作用有关,之后误差随深度的增加而逐渐减小。从不同季节来看,海表面的预测误差存在明显的季节性,即夏秋两季误差较大、春冬两季误差较小;在其他深度层,这种季节性导致的误差较小,四季误差相差不大。总体而言,SA-ConvLSTM模型在不同深度、不同季节的表现均优于其他基准模型,证明了该模型学习到的空间位置相关关系能够提升海洋三维温度场预测任务的精确度。

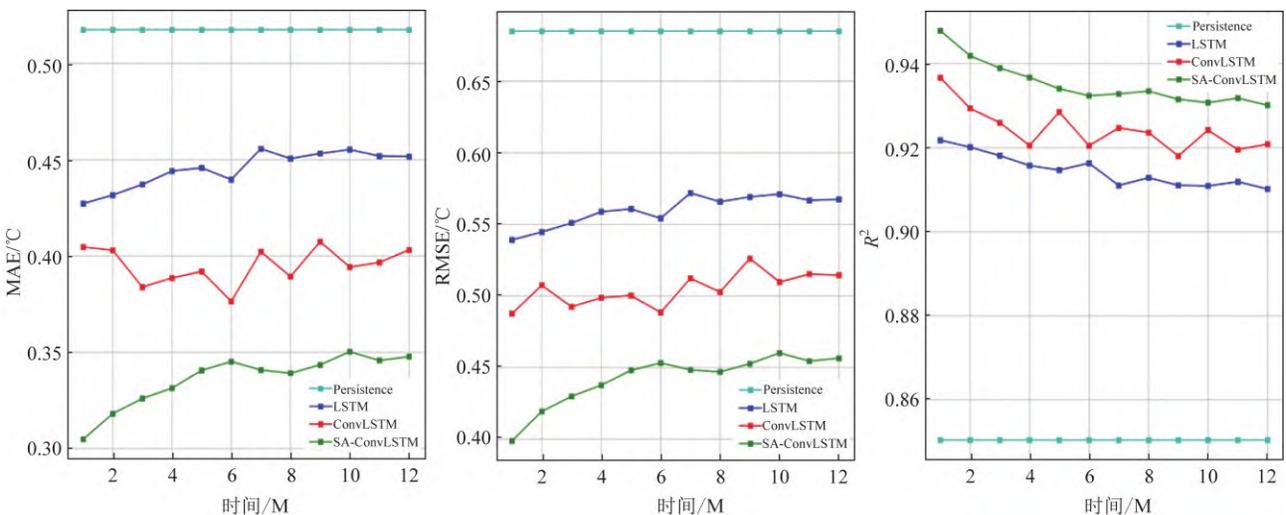
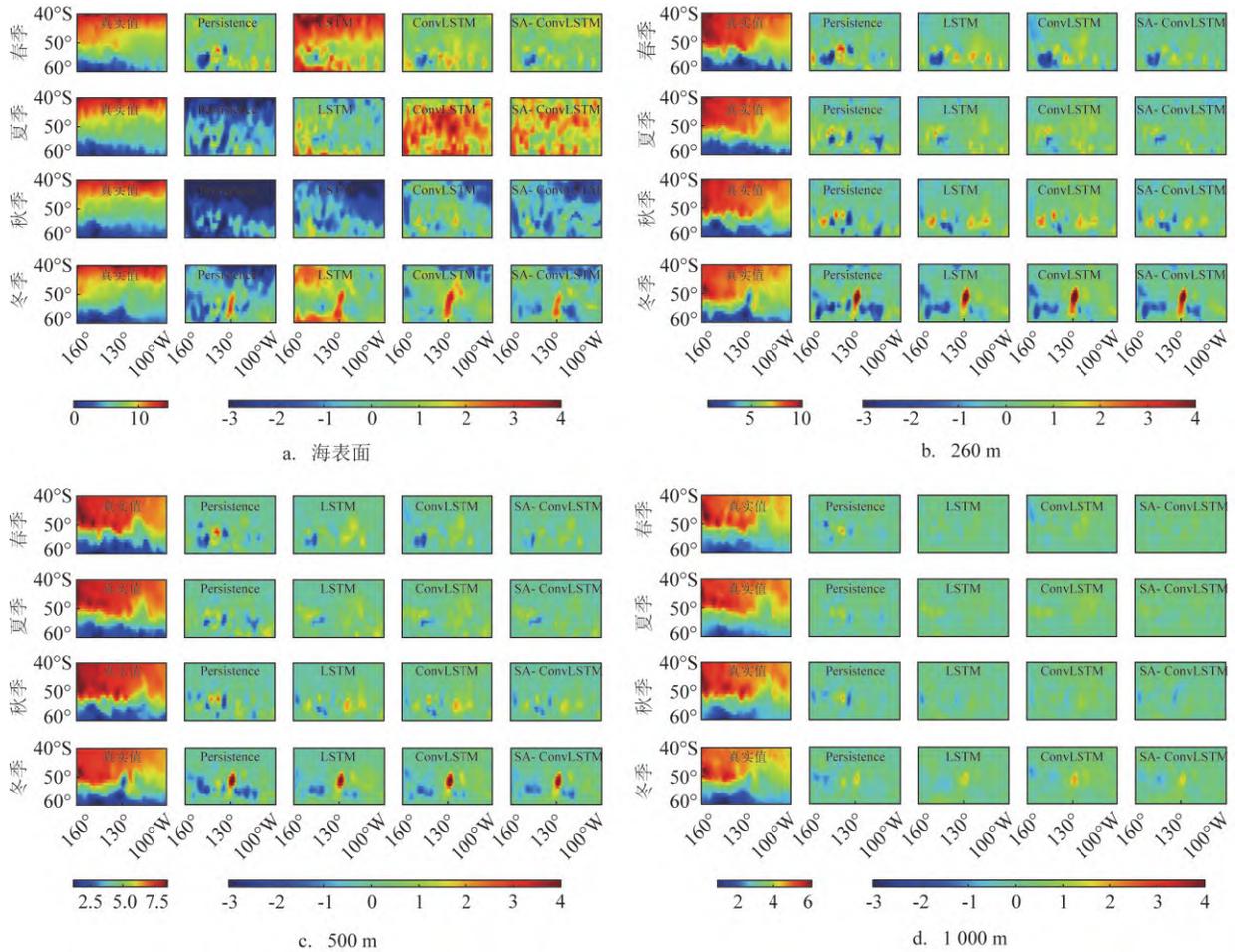


图7 模型在不同预测步长的预测效果对比

Fig.7 Performance comparison of different model in different predicted step



注:春季、夏季、秋季、冬季分别为2021年10月、2022年1月、2022年4月、2022年7月

图8 不同季节、不同深度下真实值与预测值的误差对比(单位:℃)

Fig.8 The error between predicted and actual values in different depth and seasons (unit: ℃)

4 结论

海水温度在海洋学研究中占据重要地位,是影响气候、降水和海洋生态系统的重要参量。为精确预测海水温度,本文使用SA机制与ConvLSTM模型融合的SA-ConvLSTM模型构建三维温度场预测模型。该模型不仅能通过ConvLSTM模型学习到三维温度场的时间变化规律,而且新加入的SA机制能够学习到不同位置间的相关关系,这使得SA-ConvLSTM模型在预测三维海温时比基准模型表现优异,提升幅度较大。本文的实验结果表明,无论在滑动预测还是多步递归预测时,SA-ConvLSTM模型在三维温度场预测的表现均优于ConvLSTM、LSTM及Persistence模型。尽管本文只选取了南太平洋的一部分海域作为研究区域,但是只要有足够

的优质数据支撑,该模型可以适用于更大海域甚至全球海域。不仅如此,该模型还可用于其他海洋参量如盐度等网格数据的预测研究。

目前,本文构建的模型已经较好地解决了各空间点的相关关系问题,但仍有许多问题亟待解决,例如ConvLSTM模型缓解了RNN循环神经网络的梯度消失或梯度爆炸问题,但是没有从根本上解决此类问题,当时间步过长时仍会暴露许多缺陷。因此下一步的研究计划应解决RNN所面临的问题,在这一问题上,ResNet的残差连接思想可能是一种思路^[23]。

参考文献:

[1] AWAL M A, KHAN M A H. Global warming and sea level rising: impact on agriculture and food security in southern coastal region

- of Bangladesh[J]. *Asian Journal of Geographical Research*, 2020, 3(3): 9-36.
- [2] SOLANKI H U, BHATPURIA D, CHAUHAN P. Integrative analysis of AltiKa-SSHa, MODIS-SST, and OCM-Chlorophyll signatures for fisheries applications[J]. *Marine Geodesy*, 2015, 38(S1): 672-683.
- [3] NEUMANN D R. Seasonal movements of short-beaked common dolphins (*Delphinus delphis*) in the north-western Bay of Plenty, New Zealand: Influence of sea surface temperature and El Niño/La Niña[J]. *New Zealand Journal of Marine and Freshwater Research*, 2001, 35(2): 371-374.
- [4] ROPELEWSKI C F, HALPERT M S. Global and regional scale precipitation patterns associated with the El Niño / Southern Oscillation[J]. *Monthly Weather Review*, 1987, 115(8): 1606-1626.
- [5] HAMMER G L, NICHOLLS N, MITCHELL C. Applications of seasonal climate forecasting in agricultural and natural ecosystems [M]. Dordrecht: Springer, 2000.
- [6] BALMASEDA M A, TRENBERTH K E, KÄLLÉN E. Distinctive climate signals in reanalysis of global ocean heat content[J]. *Geophysical Research Letters*, 2013, 40(9): 1754-1759.
- [7] CHENG L J, ZHU J. 2017 was the warmest year on record for the global ocean[J]. *Advances in Atmospheric Sciences*, 2018, 35(3): 261-263.
- [8] WANG Q, LIN J Z, YUAN Y. Salient band selection for hyperspectral image classification via manifold ranking[J]. *IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems*, 2016, 27(6): 1279-1289.
- [9] STOCKDALE T N, BALMASEDA M A, VIDARD A. Tropical Atlantic SST prediction with coupled ocean-atmosphere GCMs[J]. *Journal of Climate*, 2006, 19(23): 6047-6061.
- [10] ZHANG Q, WANG H, DONG J Y, et al. Prediction of sea surface temperature using long short-term memory[J]. *IEEE Geoscience and Remote Sensing Letters*, 2017, 14(10): 1745-1749.
- [11] YANG Y T, DONG J Y, SUN X, et al. A CFCC-LSTM model for sea surface temperature prediction[J]. *IEEE Geoscience and Remote Sensing Letters*, 2018, 15(2): 207-211.
- [12] SHI X J, CHEN Z R, WANG H, et al. Convolutional LSTM network: A machine learning approach for precipitation nowcasting[C]//Proceedings of the 28th International Conference on Neural Information Processing Systems. Montreal: MIT Press, 2015: 802-810.
- [13] ZHANG K, GENG X P, YAN X H. Prediction of 3-D ocean temperature by multilayer convolutional LSTM[J]. *IEEE Geoscience and Remote Sensing Letters*, 2020, 17(8): 1303-1307.
- [14] ZUO X Y, ZHOU X F, GUO D Q, et al. Ocean temperature prediction based on stereo spatial and temporal 4-D convolution model[J]. *IEEE Geoscience and Remote Sensing Letters*, 2022, 19: 1-5.
- [15] XIAO C J, TONG X H, LI D D, et al. Prediction of long lead monthly three-dimensional ocean temperature using time series gridded Argo data and a deep learning method[J]. *International Journal of Applied Earth Observation and Geoinformation*, 2022, 112: 102971.
- [16] VASWANI A, SHAZEER N, PARMAR N, et al. Attention is all you need[C]//Proceedings of the 31st International Conference on Neural Information Processing Systems. Long Beach: Curran Associates Inc., 2017: 6000-6010.
- [17] FU J, LIU J, TIAN H J, et al. Dual attention network for scene segmentation[C]//Proceedings of the 2019 IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition. Long Beach: IEEE, 2019: 3141-3149.
- [18] HUANG Z L, WANG X G, HUANG L C, et al. CCNet: Criss-cross attention for semantic segmentation[C]//Proceedings of the 2019 IEEE/CVF International Conference on Computer Vision. Seoul: IEEE, 2019: 603-612.
- [19] CHEN Y P, KALANTIDIS Y, LI J S, et al. A²-nets: Double attention networks[C]//Proceedings of the 32nd International Conference on Neural Information Processing Systems. Montréal: Curran Associates Inc., 2018: 350-359.
- [20] LIN Z H, LI M M, ZHENG Z B, et al. Self-attention ConvLSTM for spatiotemporal prediction[C]//Proceedings of the 34th AAAI Conference on Artificial Intelligence. New York: AAAI, 2020: 11531-11538.
- [21] ORSI A H, WHITWORTH III T, NOWLIN JR W D. On the meridional extent and fronts of the Antarctic Circumpolar Current [J]. *Deep Sea Research Part I: Oceanographic Research Papers*, 1995, 42(5): 641-673.
- [22] LI H, XU F H, ZHOU W, et al. Development of a global gridded Argo data set with Barnes successive corrections[J]. *Journal of Geophysical Research: Oceans*, 2017, 122(2): 866-889.
- [23] HE K M, ZHANG X Y, REN S Q, et al. Deep residual learning for image recognition[C]//Proceedings of the 2016 IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition. Las Vegas: IEEE, 2016: 770-778.

Three-Dimensional (3-D) ocean temperature field prediction based on deep learning of self-attention mechanism

YUE Weihao^{1,2}, XU Yongsheng^{2,3,4*}, ZHU Shanliang¹

(1. Qingdao university of science and technology, Qingdao 266061, China; 2. The Institute of Oceanology, Chinese Academy of Sciences, Qingdao 266071, China; 3. University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100094, China; 4. Qingdao Marine Science and Technology Center, Qingdao 266000, China)

Abstract: While previous researches on the 3-D ocean temperature field prediction mainly focused on the perspective of spatial and temporal relationship which ignored the relationship of relative location, this article proposes a SA-ConvLSTM 3-D ocean temperature field prediction model which combines self-attention memory module and ConvLSTM. The new model is not only able to extract the spatial-temporal features in historical 3-D ocean temperature fields, but can obtain and record the information of location to learn the laws of seawater in both space and time. The experimental results show that the RMSE and MAE of the SA-ConvLSTM forecasts have approximately increased by 14% in sliding prediction and multi-step recursive prediction, and its overall performance is better than the persistence, LSTM and ConvLSTM model. Our research provides a new idea for the prediction of the 3-D seawater temperature field.

Key words: seawater temperature; 3-D ocean temperature field prediction; self-attention memory; SA-ConvLSTM; multi-step recursive prediction