



化工进展
Chemical Industry and Engineering Progress
ISSN 1000-6613, CN 11-1954/TQ

《化工进展》网络首发论文

题目： 基于智能化工大模型的中国甲醇价格分析与预测
作者： 王文洋，罗玉平，余佳洵，周吉彬，叶茂，刘中民
DOI： 10.16085/j.issn.1000-6613.2024-1284
收稿日期： 2024-08-05
网络首发日期： 2024-12-06
引用格式： 王文洋，罗玉平，余佳洵，周吉彬，叶茂，刘中民. 基于智能化工大模型的中国甲醇价格分析与预测[J/OL]. 化工进展.
<https://doi.org/10.16085/j.issn.1000-6613.2024-1284>



网络首发：在编辑部工作流程中，稿件从录用到出版要经历录用定稿、排版定稿、整期汇编定稿等阶段。录用定稿指内容已经确定，且通过同行评议、主编终审同意刊用的稿件。排版定稿指录用定稿按照期刊特定版式（包括网络呈现版式）排版后的稿件，可暂不确定出版年、卷、期和页码。整期汇编定稿指出版年、卷、期、页码均已确定的印刷或数字出版的整期汇编稿件。录用定稿网络首发稿件内容必须符合《出版管理条例》和《期刊出版管理规定》的有关规定；学术研究成果具有创新性、科学性和先进性，符合编辑部对刊文的录用要求，不存在学术不端行为及其他侵权行为；稿件内容应基本符合国家有关书刊编辑、出版的技术标准，正确使用和统一规范语言文字、符号、数字、外文字母、法定计量单位及地图标注等。为确保录用定稿网络首发的严肃性，录用定稿一经发布，不得修改论文题目、作者、机构名称和学术内容，只可基于编辑规范进行少量文字的修改。

出版确认：纸质期刊编辑部通过与《中国学术期刊（光盘版）》电子杂志社有限公司签约，在《中国学术期刊（网络版）》出版传播平台上创办与纸质期刊内容一致的网络版，以单篇或整期出版形式，在印刷出版之前刊发论文的录用定稿、排版定稿、整期汇编定稿。因为《中国学术期刊（网络版）》是国家新闻出版广电总局批准的网络连续型出版物（ISSN 2096-4188，CN 11-6037/Z），所以签约期刊的网络版上网络首发论文视为正式出版。

文章类型：研究开发

DOI: 10.16085/j.issn.1000-6613.2024-1284

基于智能化工大模型的中国甲醇价格分析与预测

王文洋^{1,2}, 罗玉平¹, 余佳洹¹, 周吉彬², 叶茂², 刘中民²

(¹大连海事大学航运经济与管理学院, 辽宁 大连 116023; ²中国科学院大连化学物理研究所, 辽宁 大连 116023)

摘要: 甲醇作为一种多用途化工产品和低碳清洁燃料, 其价格波动对全球化工产业链和能源市场具有重要影响, 然而现有时间序列预测方法在捕捉甲醇价格的非平稳性和高波动性特征方面存在显著局限。为精准预测中国甲醇价格, 本文基于国内首个智能化工大模型, 首先全面整合公开数据库中与中国甲醇市场具有相关性的 27 个领域的 290 余万条时间序列数据, 迁移训练首个用于甲醇价格预测的生成式预训练时间序列预测模型——生成式预训练甲醇价格预测 (CEGPT-Price Forecaster for Methanol, CEGPT-PF-M) 模型; 其次, 本文应用最大互信息系数算法, 从非公开商业数据库中筛选出 10900 条与中国甲醇价格高度相关的指标数据, 构建私有数据库, 并基于此数据库对 CEGPT-PF-M 模型进行参数微调, 以实现对中国甲醇价格的最佳预测效果; 最后, 在影响因素分析方面, 本文基于私有数据库构建影响因素指标体系, 从宏观和微观双层面分析外生变量对中国甲醇价格的影响程度。实证结果表明, CEGPT-PF-M 模型在中国甲醇价格预测任务中的准确性、解释性和可扩展性, 均显著优于现有模型。本文的研究结论为甲醇生产商、煤炭供应商和政策制定者提供有效参考, 同时也为化工产品价格研究提供新视角和新方法。

关键词: 甲醇价格预测; Transformer 架构; 智能化工大模型; 迁移学习

中图分类号: TQ-9; F222 **文献标志码:** A

Analysis and forecasting of Chinese methanol price based on the intelligent chemical engineering large language model

WANG Wenyang^{1,2}, LUO Yuping¹, YU Jiahuan¹, ZHOU Jibin², YE Mao², LIU Zhongmin²

(¹School of Maritime Economics and Management, Dalian Maritime University, Dalian 116023, Liaoning, China;

²Dalian Institute of Chemical Physics, Chinese Academy of Sciences, Dalian 116023, Liaoning, China)

Abstract: As a multi-purpose chemical product and low-carbon clean fuel, the price fluctuations of methanol impact the global chemical industry chain and energy market. However, existing time series forecasting methods fail to capture the non-stationary and high volatility characteristics of methanol prices. In order to accurately predict methanol price in China, this article initially proposes the CEGPT-Price Forecaster for Methanol (CEGPT-PF-M) model based on the first intelligent chemical engineering large language model in China. It first comprehensively integrates more than 2.9 million time series data in the public database in 27 fields related to the

收稿日期: 2024-08-05; **修改稿日期:** 2024-11-12。

基金项目: 教育部人文社会科学基金 (22YJC910011); 中国博士后科学基金 (2023M733444); 辽宁省人工智能领域科技创新重点研发计划 (2023JH26/10200012); 国家自然科学基金 (22308348); 辽宁滨海实验室资助项目 (LBLF-2023-01)。

第一作者: 王文洋 (1991—), 副教授, 硕士生导师, 研究方向为统计分析、机器学习与人工智能等。E-mail: wangwenyang@dlnu.edu.cn。

通信作者: 叶茂, 研究员, 博士生导师, 研究方向为催化反应工程、多相流模型与测量和人工智能。E-mail: maoye@dicp.ac.cn。

methanol market and transfer-trains the baseline CEGPT-PF-M; secondly, this paper applies the maximum mutual information coefficient algorithm to extract data from non-public commercial databases, 10,900 index data that are highly related to Chinese methanol price are screened out, a private database is constructed, and the parameters of the CEGPT-PF-M model are fine-tuned based on this database to achieve the best prediction effect on Chinese methanol price; finally, in terms of factor analysis, this article builds an influencing factor index system based on a private database to analyze the impact of exogenous variables on Chinese methanol price from both macro and micro levels. Empirical results show that the accuracy, interpretability, and scalability of the CEGPT-PF-M model in the Chinese methanol price prediction task are significantly more reasonable than existing models. The research conclusions of this article provide a practical reference for methanol producers, coal suppliers, and policymakers, and also provide new perspectives and methods for chemical product price research.

Keywords: methanol price forecasting; Transformer architecture; intelligent chemical engineering large language model; transfer learning

1 引言

传统范式下化工新技术研发进程缓慢。由于缺乏对化工多尺度复杂过程的精确理论描述，新技术研发依赖逐级放大，研发周期长、耗资高、市场风险大。近年来，以 ChatGPT^[1]为代表的大语言模型技术为化工技术开发提供数据驱动新范式，有望改变长期以来我国化工设计依赖国外工业软件的状况。中国科学院大连化学物理研究所（以下简称大连化物所）低碳催化与工程研究部团队结合大连化物所丰富的化工应用场景和 630 余万条研发数据，基于 Transformer 架构^[2]，利用华为昇腾人工智能基础软硬件平台，开发国内首个智能化工大模型，为推动化工研发新范式的建立和化工工业软件的国产自主化奠定重要基础。研究团队围绕智能化工大模型，已开展一系列工作：（1）开发化工数据处理平台，实现对多源异构化工数据的高效处理；（2）构建化工领域知识图谱框架，实现基于大模型的化工领域知识自动标注和结构化处理；（3）围绕智能化工大模型，团队构建国内首个化工设计—仿真优化—知识归纳的多智能体协同设计平台，实现化工工艺流程研发效率 10+倍提升。同时，Transformer 架构在自然语言处理^[3]和长序列预测任务^[4]中的迅猛发展，激发了本研究团队将智能化工大模型扩展应用至时间序列数据分析和预测领域的浓厚兴趣。

甲醇是生产甲醛、甲基叔丁基醚、乙酸和二甲醚的重要原料，也可用作发动机和燃料电池的燃料^[5]。然而，针对甲醇市场和价格的研究相对匮乏。甲醇主要生产工艺包括煤制甲醇^[6]（Coal-to-Methanol, CTM）、天然气制甲醇^[7]（Natural Gas-to-Methanol, NTM）和焦炉煤气制甲醇^[8]（Coke Oven Gas-to-Methanol, CGTM）。中国能源结构独特，即石油和天然气资源匮乏，但煤炭资源丰富^[9]。因此，中国近 58%的甲醇通过 CTM 工艺生产^[10]。在低碳政策需求和复杂多变的市场环境下，深入分析各市场和变量对中国甲醇价格的影响，并提出精准、高效且适应市场变化的甲醇价格预测方法，可为投资者的投资策略、企业经营的发展布局、政府实现碳达峰及碳中和目标提供重要参考。传统的因果分析方法等统计模型（Statistical Models, SMs）常被用于能源产品价格预测^[11-17]。然而，甲醇价格数据性质独特，难以采用传统时间序列分析模型进行研究。一方面，甲醇价格数据不具有传统化工品的价格走势趋势。2008 年金融危机时期，其价格大跌；2019 年重大公共卫生事件时期，其价格反而大涨。另一方面，甲醇价格数据不具有传统能源产品的时间序列数据性质，例如其不具备显著的波动聚集效应（详见 4.1 数据描述）。因此，SMs 难以准确捕捉甲醇价格的非线性特征从而进行准确预测^[18]。Prophet 模型^[19]、时间序列递归神经网络^[20]、人工智能^[21]、卷积神经网络^[22]（Convolutional Neural Networks, CNN）等机器学习（Machine Learning, ML）模型亦被广泛用于价格预测。虽然传统 ML 模型非线性拟合效果良好，但因其可引入数据体量有限，在训练过程中对输入数据的微小变化异常敏感而导致模型稳定性不高（即模型参数估计一致性低）。此外，某些 ML 模型（如深度神经网络）结构不稳定且可解释性差^[23]，难以量化关键解释变量^[24]，导致特征变量对目标变量的影响程度和作用机理难以展现。因此，本文基于智能化工大模型，融合超大且全面的训练数据集，针对中国甲醇价格数据，提出全新时间序列预测模型，可有效解决传统 SMs 准确性不足和 ML 模型稳定性不足问题。同时，基于智能化工大模型的预测模型凭借 Transformer 架构的自注

注意力机制，可显著增强模型长期依赖关系捕捉能力，并通过模块化设计（解码器和编码器）提升模型灵活性、稳定性和可扩展性。

基于智能化工大模型（L₁级底层大语言模型）的化工领域知识高覆盖性、物理化学理论高理解性和逻辑推理整合能力高智能性，本文面向中国甲醇价格预测与影响因素分析问题，全面整合可获取且公开的甲醇上游（包括石油和煤炭等）、甲醇下游（丙烯和甲醛等）、大宗化工品、市场情绪和金融等全领域时间序列数据，迁移开发生成式预训练时间序列预测模型——生成式预训练甲醇价格预测（CEGPT-Price Forecaster for Methanol, CEGPT-PF-M）模型（L₂级应用层模型），能够精准预测中国甲醇价格，为众多市场参与者的决策制定进行指导，填补甲醇价格预测在数据和模型两个层面的研究空白。此外，本文基于CEGPT-PF-M，使用最大互信息系数算法（Maximal Information Coefficient, MIC）^[25]从非公开商业数据库中与中国甲醇价格高度相关的外生变量，搭建私有数据库，进而对CEGPT-PF-M进行参数微调，以增强模型编码器和解码器的数据处理能力，进一步提升模型参数估计准确度和参数估计的收敛速度。

本文突破现有甲醇价格预测模型在数据规模、准确率、解释性和效率方面的局限，具体表现在：（1）数据规模层面：从公开、非商业且可获取的数据库中，将27个相关领域的时序数据作为智能化工大模型迁移训练的训练数据集，共12515个特征变量、290余万条数据，训练参数量达204万个；本工作亦从非公开商业数据库中，选择与中国甲醇价格紧密相关的数据序列（与基础训练集不重复）作为模型微调数据集，共42个特征变量、10900条数据，微调参数量近1万个，占总参数的0.49%。CEGPT-PF-M基于与甲醇相关的全领域数据集完成迁移训练、微调和优化，数据规模最庞大且最全面。（2）模型效果层面：与现有模型依赖特征组合和权重调整不同，CEGPT-PF-M模型具有自注意力机制，不仅能捕捉局部特征，还能全局学习时间序列长距离依赖关系，确保预测结果的准确性和稳定性。（3）解释性层面：本工作在智能化工大模型底层架构中融入SHAP（SHapley Additive exPlanations）^[26]模型，支持输出外生变量对目标变量的贡献度，使模型决策过程透明。（4）模型效率层面：CEGPT-PF-M基于智能化工大模型搭建，并在大规模数据集上完成特征表示学习，可对甲醇价格时间序列预测问题进行零样本（Zero-shot）或少样本（Few-shot）学习。同时，对其他相关化工品价格可以进行Zero-shot直接预测，避免模型重构，显著提升预测效率。

综上所述，本文面向甲醇价格提出国内首个基于大语言模型的预测模型，旨在准确捕捉中国甲醇价格波动，以满足不同市场参与者对甲醇价格的预测需求。本文结构如下：第2章回顾和总结化工产品价格预测和Transformer架构应用相关文献；第3章介绍本文模型构建方法；第4章为本文数据描述和实证分析结果；第5章总结本文研究结论并提出未来研究展望。

2. 文献综述

作为全球最大甲醇生产国，中国甲醇价格对全球化工品和能源市场影响显著。准确预测中国甲醇价格对于相关产业发展和政府决策意义重大。甲醇价格研究脉络和本文研究框架如图1所示。

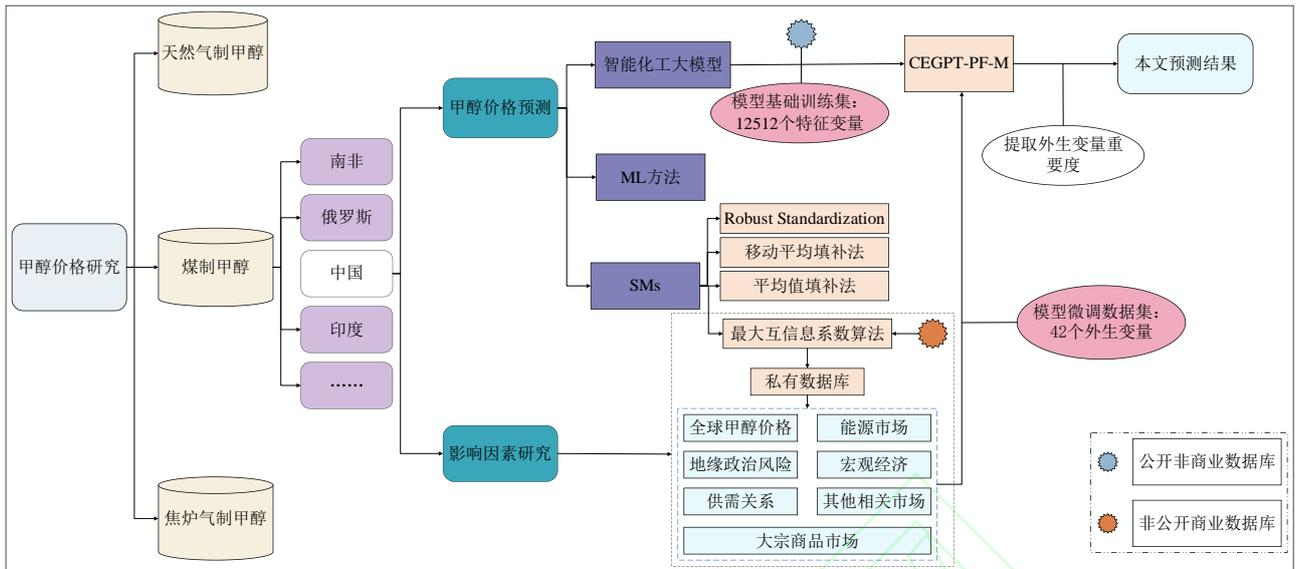


图 1 甲醇价格研究脉络与本文研究框架图

2.1 化工产品价格预测研究

目前，学术界对能源与化工产品的价格预测研究主要集中在原油^[27-32]、天然气^[33-37]和电力^[38-39]等传统能源领域，对甲醇价格研究相对较少。其中，典型研究包括采用长期结构建模技术（Long Run Structural Modelling, LRSM）探讨天然气价格对甲醇价格的影响^[40]。结果显示，天然气价格与甲醇价格存在显著协整关系：在欧洲和美国，天然气价格是甲醇价格波动的主要驱动因素；而在远东地区，天然气需求对甲醇价格的影响更大。应用分数积分广义自回归条件异方差模型（Fractionally Integrated Generalized Autoregressive Conditional Heteroskedasticity, FIGARCH）对伊朗原油价格和甲醇价格关系展开研究发现^[41]，甲醇市场波动和原油价格对甲醇价格的冲击具有持久性和显著性。亦有研究表明，将煤炭价格、石油价格、工业生产者价格指数和进出口数量作为解释变量，使用广义自回归条件异方差模型（Generalized Autoregressive Conditional Heteroskedasticity, GARCH），结合专家经验对甲醇价格进行预测，其平均绝对百分比误差（Mean Absolute Percentage Error, MAPE）较传统模型降低 2.91%^[42]。其他相关研究包括矢量误差修正模型（Vector Error Correction Model, VECM）的应用证实原油价格在欧洲乙烯价格预测方面具有显著解释作用^[43]；将自回归差分移动平均模型（Autoregressive Integrated Moving Average, ARIMA）与人工神经网络（Artificial Neural Network, ANN）结合，构建 ARIMA-ANN 组合模型预测苯乙烯价格时，均方误差（Mean Square Error, MSE）较 ARIMA 和 ANN 分别下降 42.05%和 5.05%^[44]；经改进遗传算法优化的长短期记忆网络（Long Short-term Memory, LSTM）模型用于中国聚乙烯和聚丙烯价格预测时，该模型捕捉化工产品价格变化特征和波动趋势时效果显著，相对于支持向量机和 LSTM，MSE 分别降低 38.85%、89.44%^[45]；采用随机森林算法构建甲醇期货价格预测模型，并基于 Aberration 策略设计交易规则，实现了高于同期 10 年期国债收益率 1.2 倍以上的年化收益率^[46]。甲醇与相关化工产品价格预测研究总结见表 1。

表 1 甲醇与相关化工品价格预测研究文献总结

研究对象	预测模型	模型类型
甲醇 ^[40]	LRSM	计量经济学模型
甲醇 ^[41]	FIGARCH	计量经济学模型
甲醇 ^[42]	GARCH+专家经验	混合模型
乙烯 ^[43]	VECM	计量经济学模型
苯乙烯 ^[44]	ARIMA-ANN	混合模型
聚乙烯 ^[45]	LSTM	ML 模型

2.2 Transformer 应用研究

近期研究成果证实 Transformer 架构在序列建模领域优势显著^[2, 47-48]。在能源领域, PVTransNet-EDR 模型^[49]用于光伏发电功率预测, 平均绝对误差 (Mean Absolute Error, MAE) 较 LSTM 模型降低 48.3%; 基于改进变分模态分解 (Variational Mode Decomposition, VMD) 和 Transformer^[50]混合深度学习 (Deep Learning, DL) 模型用于短期光伏功率预测, 模型在有效性、准确性、稳健性和泛化能力方面显著优于 LSTM 和 CNN 等 ML 模型; Powerformer^[51]用于风能预测, 相较于 LSTM 和门控循环单元 (Gated Recurrent Unit, GRU), 其预测误差分别降低 10.41% 和 9.73%。在医学领域, CNN-Transformer 交互模型实现 IgA 肾病病理的有效分级预测^[52]。在交通领域, LSTTN^[53]用于交通流预测, 相对于简单 ML 模型, 其性能提高 5.63%—16.78%; Transformer 还被用于出租车轨迹预测, TrAISformer 的平均海灵克斯距离误差 (Average Hausdorff Distance Error, AHD)^[54]在三种数据集上分别下降 3.68%、2.77%、4.71%^[55]。在生物领域, 基于 Transformer 架构的人工智能模型用于毒性预测^[56]。在环境领域, Transformer 被用于 PM_{2.5} 浓度预测^[57]和地下水位预测^[58], 其性能优于 CNN 和前馈神经网络 (Feed-forward Neural Networks, FNN); MVMD-Transformer 用于水流预测时, 其纳什—苏特克利夫系数达到 0.85, 综合表现显著优于 LSTM 模型^[59]。在金融领域, 基于 Transformer 架构的混合神经网络模型, 用于金融市场的波动预测^[60]。在工程领域, IPSO-LSTM-Transformer (ILT) 模型用于大坝变形预测, 与传统粒子群优化算法相比, ILT 模型显著提升模型寻优精度和收敛速度^[61]。在航空领域, STL-transformer-ARIMA 模型被用于航空故障事件预测, 相较于时序卷积网络和 LSTM, 此模型 MAE 降低 10.4%, MAPE 降低 9.7%^[62]; Transformer-Encoder-LSTM 模型用于飞机轨迹预测, 其平均位移误差减小到 0.22, 显著优于 CNN-LSTM Attention 模型的 0.35^[63]; Transformer-GRU 网络用于 4D 航迹预测, 其误差较 LSTM 模型下降 50%^[64]。此外, Autoformer^[65]在能源、交通、经济、天气和疾病五个领域中预测性能卓越, 在六类基准测试中, 其准确率最高, 相对提升 38%。Informer^[66]通过引入 ProbSparse 自注意力机制、自注意力提取以及生成式解码器, 显著提升模型推理速度和预测精度, 为解决长序列预测问题提供新方案。LogSparse Transformer^[67]在有限内存条件下提高预测准确率。LogTrans^[68]在视觉比较和定量评估方面优于其他先进结构, 性能优势明显。

Transformer 在各领域应用总结见表 2。

表 2 Transformer 应用研究总结

应用领域	目标	模型名称
能源领域 ^[50]	短期光伏功率预测	VMD 和 Transformer 混合模型
交通领域 ^[53]	交通量预测	LSTTN
医学领域 ^[55]	肾病病理分级预测	CNN-Transformer
生物领域 ^[56]	毒性预测	基于 Transformer 架构的人工智能模型
环境领域 ^[59]	水流预测	MVMD-Transformer
金融领域 ^[60]	金融市场的波动性预测	基于 Transformer 架构的混合神经网络模型
工程领域 ^[61]	大坝变形预测	IPSO-LSTM-Transformer
航空领域 ^[62]	航空故障事件预测	STL-transformer-ARIMA
化工领域 (本文)	甲醇价格预测	CEGPT-PF-M

综上所述, 从研究对象角度分析, 现有能源价格研究主要集中在原油、天然气、电力等传统能源产品。随着社会发展与低碳政策推进, 甲醇价格研究已势在必行。从研究方法角度分析, 尽管已有多种模型被应用于各领域能源和化工品的价格预测任务中, 但在面对复杂市场动态和多变经济环境时, 往往表现出模型预测精度低和解释性不足等问题。基于 Transformer 架构的预测模型正在成为主流研究模型框架。因此, 本文面向中国甲醇价格预测领域, 提出并搭建基于智能化工大模型的时间序列预测模型—CEGPT-PF-M, 在准确率、解释性、预测效率等方面优势显著。

3. 模型介绍

CEGPT-PF-M 算法构建流程如图 2 所示。

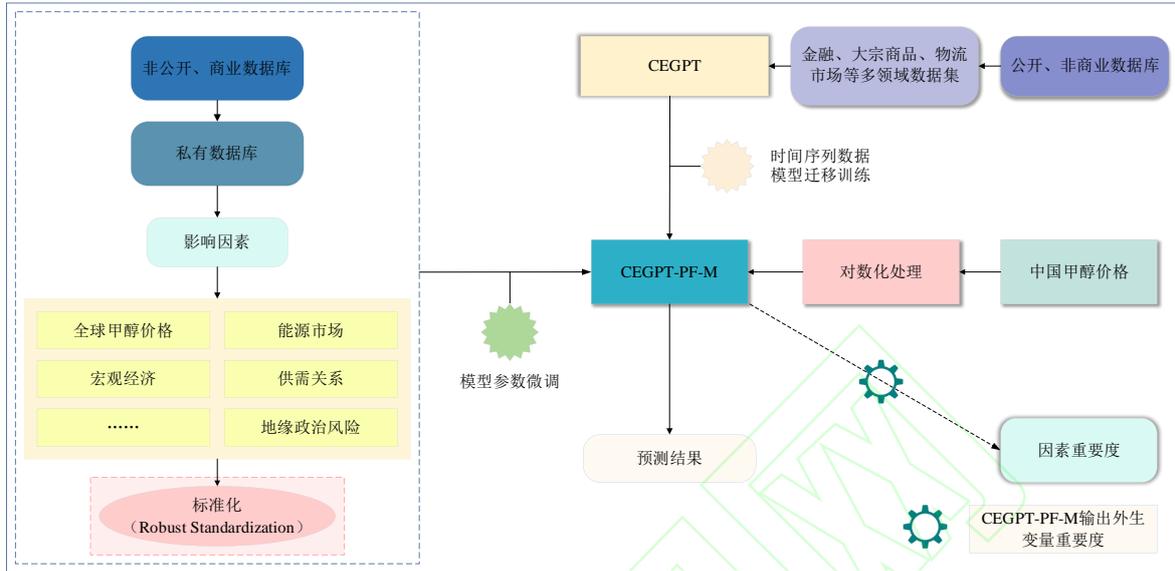


图 2 CEGPT-PF-M 模型构建流程图

3.1 预测性能评价指标

本文采用 MAE、MAPE、均方根误差 (Root Mean Square Error, RMSE) 和 R^2 四种不同评价指标评估模型预测性能。MAE、MAPE、RMSE、相对误差 (Mean Error, ME)、误差均值标准差 (Standard Deviation of Error, SDE) 和 R^2 的定义分别如式(1)–(6)所示:

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

$$MAPE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left| \frac{\hat{y}_i - y_i}{y_i} \right| \quad (2)$$

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

$$ME = \frac{|y - \bar{y}|}{|y|} * 100\% \quad (4)$$

$$SDE = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i - ME)^2} \quad (5)$$

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

其中, y 为实际值, \hat{y} 为预测值, \bar{y} 为实际值的均值, y_i 和 \hat{y}_i 为 i 时刻的实际值和预测值, n 为测试集样本容量。MAE 度量预测值与真实值间的平均误差, 可直接反映模型的整体预测性能, 但对极端值不敏感; MAPE 揭示预测误差在不同量级数据上的相对大小, 可比较模型在不同规模数据集上的性能; 而 RMSE 可衡量模型对异常值的敏感度和稳定性。

3.2 CEGPT-PF-M 模型算法

CEGPT-PF-M 模型如下算法 1 所示：

算法 1：CEGPT-PF-M 时间序列预测算法

Input: 外生变量 $X = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ 、中国甲醇价格 y 。

Step1: 数据预处理, 即外生变量进行 Robust Standardization 处理, 目标变量取对数, 并划分训练集和测试集。

Step2: 定义 Transformer 模型结构: 构建 Transformer 模型的编码层、解码层和线性层, 选择 MSE、MAE 和 RMSE 等作为模型损失函数, Adam 作为模型优化器。

Step3: 输入嵌入层, 将 X 与 y 每个时间点的数据转化为 d 维向量表示。

Step4: 位置编码, 即求位置向量 PE ;

对于每个位置 pos 和维度索引 i :

如果 i 为偶数:

$$PE_{(pos, 2i)} = \sin\left(\frac{pos}{10000^{\frac{2i}{d}}}\right),$$

如果 i 为奇数:

$$PE_{(pos, 2i+1)} = \cos\left(\frac{pos}{10000^{\frac{2i}{d}}}\right),$$

Step5: 嵌入层向量与位置向量相加, 将最终向量输入编码器。

Step6: 编码器将输入序列转化为固定长度向量, 映射为连续表示的上下文向量 (能够概括整个输入序列语义信息), 并输入至智能化工大模型的解码器^①。

Step7: 解码器将上下文向量转化为输出序列^② (生成目标序列预测值, 形式为非数值化信息)。

Step8: 计算损失: 选择最优损失函数进行损失计算;

Step9: 模型训练:

- 初始化: 动态参数 θ 、学习率 α 、一阶和二阶矩估计指数分别为 β_1 和 β_2 、稳定项 ϵ 、迭代次数 T_{max} 。
- for $t = 1$ to T_{max} do:

- a. 计算当前批次的损失函数 $L(\theta_t)$ 对参数 θ 的梯度 $g_t = \nabla_{\theta} L(\theta_t)$;
- b. 更新一阶矩估计 $m_t = \beta_1 m_{t-1} + (1 - \beta_1) g_t$;
- c. 更新二阶矩估计 $v_t = \beta_2 v_{t-1} + (1 - \beta_2) g_t^2$;
- d. 偏差校正:

$$\text{计算一阶矩估计的偏差校正 } \hat{m}_t = \frac{m_t}{1 - \beta_1^t};$$

$$\text{计算二阶矩估计的偏差校正 } \hat{v}_t = \frac{v_t}{1 - \beta_2^t};$$

- e. 更新参数 $\theta_t = \theta_{t-1} - \alpha \frac{\hat{m}_t}{\sqrt{\hat{v}_t} + \epsilon}$;

end for

Step10: 保存模型, 基于测试集进行测试;

Step11: 智能化工大模型解码器的输出经过线性变换后, 得到最终预测值。

注: ①其结构由多个相同的层堆叠而成, 每层包含多头注意力机制、残差连接 (解决退化问题)、归一化 (防止梯度消失或梯度爆炸) 和 FNN;

②其结构较编码器, 每层多一个掩码多头注意力机制 (保持序列因果关系并防止信息泄露)。

CEGPT-PF-M 模型基于智能化工大模型完成时间序列数据的迁移训练与微调, 使模型实现跨领域知识迁移, 不仅能高效处理不同频率、不同特征的时序数据, 还具有对多种输入尺寸和预测范围的强大适应能力。CEGPT-PF-M 模型的关键优势在于多头注意力机制, 模型可捕捉远距离的时间依赖关系, 从而在长时间序列预测中表现出色。CEGPT-PF-M 以误差最小化为目标, 遵循在大规模数据集上训练大型 Transformer 模型的通用原则, 其架构专门针对宏观经济、能源市场及大宗商品市场等多领域的时间序列数据进行训练、微调和优化。CEGPT-PF-M 模型框架见图 3。

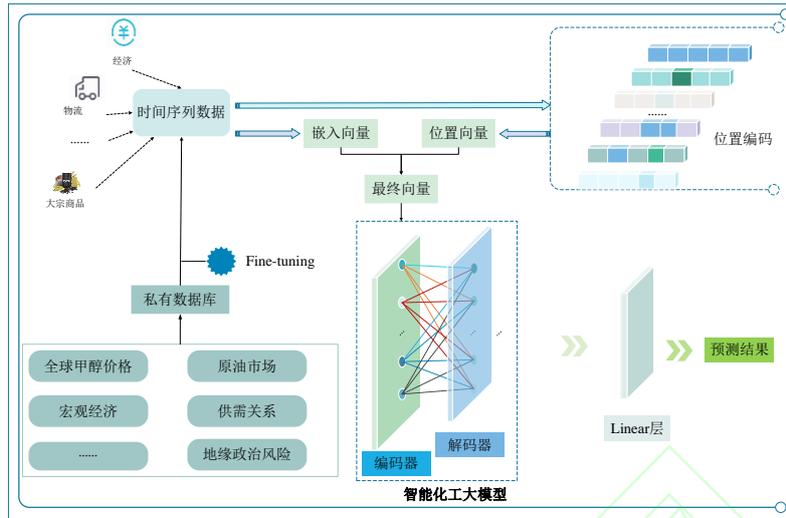


图 3 CEGPT-PF-M 模型构建框架图

4. 实证分析

4.1 数据描述

中国甲醇价格走势如图 4 所示。鉴于相关数据可获取性，本文将因变量甲醇价格数据样本集设定为 2005-01 至 2024-04 之间的月度数据（CEGPT-PF-M 的迁移训练和参数微调所用的自变量数据为全样本数据，囊括所有可获得的时间长度）。由于数据存在少量缺失值，本文对单个数据缺失，采用平均值填充法^[69]进行填补；对于少量连续数据缺失，本文使用移动平均法^[70]完成数据填补。为综合评估模型预测性能，保留时间序列数据的规律性，本文按时间顺序将数据集以 9:1、8:2 和 7:3 划分训练集和测试集。

首先，使用 ARCH-LM^[71]检验中国甲醇价格的非线性和高波动性特征（如表 3 所示），中国甲醇价格 ARCH-LM 检验 p 值小于 0.05（显著性水平），即中国甲醇价格存在 ARCH 效应，具有条件异方差和非线性动态特征。对中国甲醇价格进行一阶差分（见图 5），结果显示一阶差分数据波动率差异较大，仍具有非平稳性，即该数据存在二阶或更高阶单位根。因此，中国甲醇价格具有高波动性、非线性和非平稳性特征。中国甲醇价格数据的 Lyapunov 指数为 4.0156，即序列数据为混沌序列，非随机序列。样本描述性统计结果见表 4 和图 6。

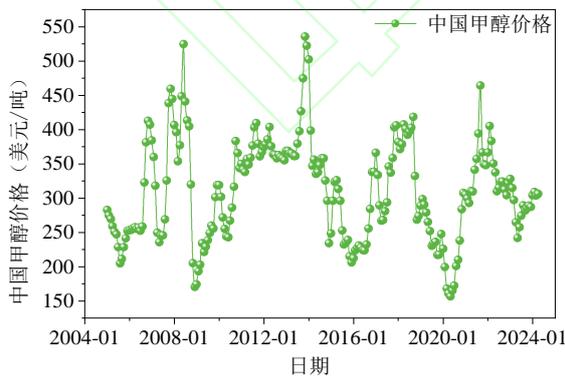


图 4 中国甲醇价格走势图

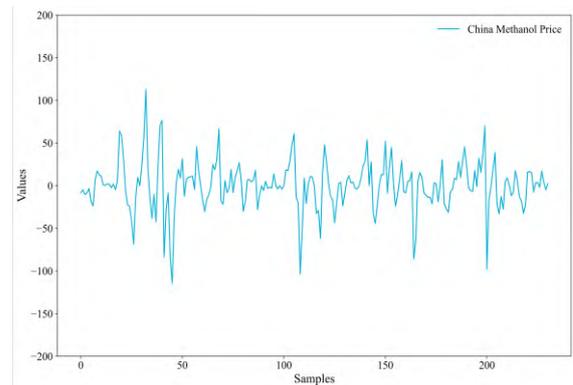


图 5 中国甲醇价格一阶差分图

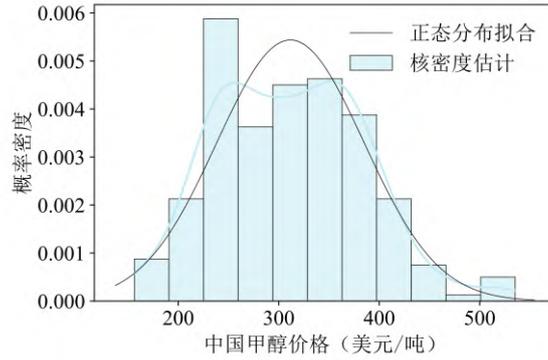


图 6 中国甲醇价格统计分布图

表 3 中国甲醇价格样本数据 ARCH-LM 检验结果

变量	LM 统计量	LM p-value	F 检验统计量	F 检验 p-value
232	35.1702	0.0004399	3.2843	0.0002301

表 4 中国甲醇价格样本数据统计指标

数据总量	平均值	标准差	最小值	最大值	偏度	峰度
232	311.61	73.52	156.28	535.25	0.3029	-0.1473

4.2 私有数据库和影响因素指标体系

本文使用 Robust Standardization 方法^[72]处理数据，确保对异常值具有鲁棒性，定义见式(7)–(8)：

$$x'_t = \frac{x_t - \text{Med}(x_{1:C})}{\text{IQR}(x_{1:C})} \quad (7)$$

$$\text{IQR}(x_{1:C}) = \text{Med}(\{x_{\lceil C/2 \rceil}\}) - \text{Med}(\{x_{\lfloor C/2 \rfloor}\}) \quad (8)$$

其中， $\text{Med}(x_{1:C})$ 为序列中位数， $\text{IQR}(x_{1:C})$ 为序列四分位差， x'_t 为标准化结果， x_t 为实际值， C 为样本容量。本文运用 MIC 算法计算非公开商业数据库中各指标与中国甲醇价格间的相关性，提取 MIC 值大于 0.2 的指标，构建私有数据库，所提取指标 MIC 值见附录 A 表 10。构建影响因素指标体系时，宏观因素包含全球甲醇价格、供需关系、地缘政治风险、能源市场、宏观经济、其他大宗化工品市场与其他相关市场七个维度，微观因素包括中国煤炭产量等 42 个指标。具体指标见表 5。

表 5 中国甲醇价格影响因素指标体系

宏观因素	微观因素	变量名
全球甲醇价格 (C1)	美国海湾地区甲醇价格	x_1
	台湾省甲醇价格	x_2
	鹿特丹港甲醇价格	x_3
地缘政治风险 (C2)	中国地缘政治风险指数	x_4
供需关系 (C3)	中国煤炭产量	x_5
	中国煤炭价格	x_6
	中国煤炭销量	x_7
	中国乙烯产量	x_8
	中国丙烯产量	x_9
	中国甲醛产量	x_{10}

	中国二氯甲烷产量	x_{11}
	中国乙二醇产量	x_{12}
	中国苯乙烯产量	x_{13}
	中国环氧乙烷产量	x_{14}
	中国丙烯酸产量	x_{15}
能源市场 (C4)	全球石油产量	x_{16}
	布伦特石油价格	x_{17}
	天然气价格指数	x_{18}
宏观经济 (C5)	中国制造业采购经理指数	x_{19}
	中国工业生产指数	x_{20}
	中国汇率指数	x_{21}
	中国经济政策不确定性指数	x_{22}
	中国社会消费品零售额 (同比)	x_{23}
	中国社会消费品零售额	x_{24}
	中国工业生产者出厂价格指数 (同比)	x_{25}
	中国采矿业工业生产者出厂价格指数 (同比)	x_{26}
其他大宗化工品市场 (C6)	中国大宗商品价格指数	x_{27}
	橡胶价格指数	x_{28}
	中国环氧树脂价格	x_{29}
	能源价格指数	x_{30}
	聚丙烯价格	x_{31}
	异丁醛价格	x_{32}
	丙烯酸树脂价格	x_{33}
	丁苯橡胶价格	x_{34}
	顺丁橡胶价格	x_{35}
	不饱和树脂价格	x_{36}
	环氧氯丙烷价格	x_{37}
其他相关市场 (C7)	化工行业生产者价格指数	x_{38}
	煤炭行业生产者价格指数	x_{39}
	能源行业生产者价格指数	x_{40}
	纺织行业生产者价格指数	x_{41}
	其他行业生产者价格指数	x_{42}

4.3 甲醇价格预测

将 4.1 中数据应用于算法 1，在不同损失函数下，CEGPT-PF-M 模型的 Few-shot 相比于 Zero-shot 的预测能力比较分析结果如表 6 所示，引入微调数据集的 Few-shot 方法使得模型性能显著提升。根据不同损失函数进行参数微调后，模型预测性能差异显著。其中，将 MSE 作为算法 1 的 step8 中的最优损失函数时，结果最好，其性能相对基础 CEGPT-PF-M 提升 11.57%。不同损失函数下的 CEGPT-PF-M 微调预测性能对比 (9:1)、(8:2) 分别见图 7、图 8。

表 6 不同损失函数下 CEGPT-PF-M 模型 Few-shot 相比于 Zero-shot 的预测性能提升

划分形式	MAE	MSE	RMSE	MAPE	SMAPE
9:1	0.59%	12.16%	6.87%	1.53%	6.86%
8:2	0.86%	10.98%	5.50%	6.34%	3.32%
平均值	0.72%	11.57%	6.18%	3.94%	5.09%

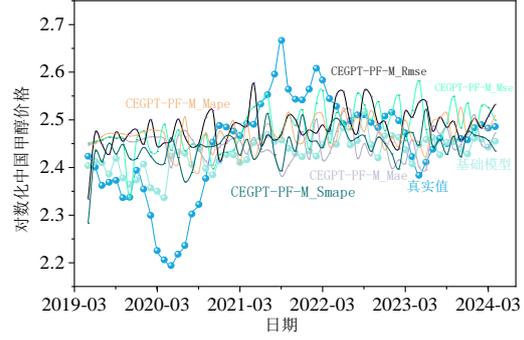
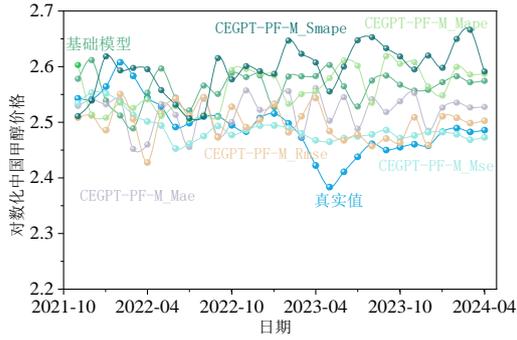


图 7 不同损失函数下 CEGPT-PF-M 预测性能对比 (9:1) 图 8 不同损失函数下 CEGPT-PF-M 预测性能对比 (8:2)

基于最优损失函数微调的 CEGPT-PF-M 模型进行中国甲醇价格预测, 结果见图 9、图 10, 误差评价指标见表 7。表 7 中按 8:2 划分数据时, 预测结果的误差小于 7:3 的数据划分形式。按照 8:2 和 7:3 两种比例对数据进行划分, 结果误差均小于 9:1 划分形式。因此, 从总体趋势上看, 8:2 为训练集和测试集的最优划分比例。此外, 表 7 结果显示, 仅基础训练或仅微调, 模型预测结果的误差值显著高于完成基础训练与微调后的模型。此外, 基于训练集和微调数据集的误差均值标准差亦最小, 显示最终模型的稳定性更强。

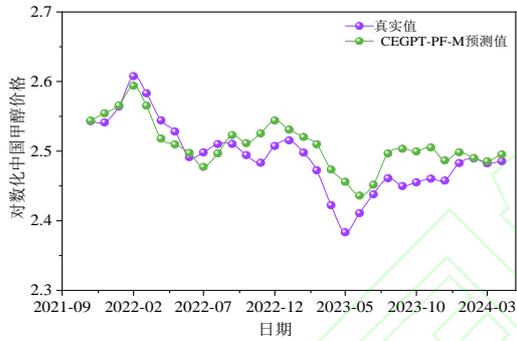


图 9 CEGPT-PF-M 预测效果 (9:1)

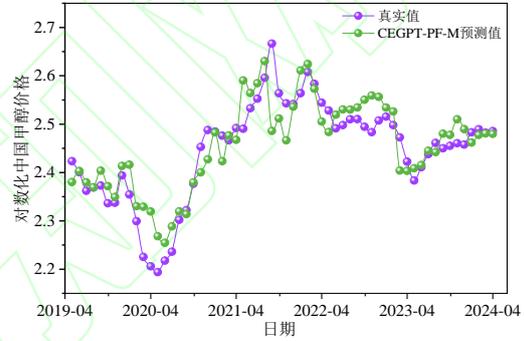


图 10 CEGPT-PF-M 预测效果 (8:2)

表 7 CEGPT-PF-M 预测性能评价指标

划分形式	类型	MAE	RMSE	MAPE	R ²	误差均值标准差
9:1	训练集	0.1108	0.1227	5.52%	0.9132	0.0612
8:2		0.0819	0.1147	3.28%	0.9219	0.0758
7:3		0.0978	0.1230	4.21%	0.9110	0.0915
9:1	微调集	0.3145	0.3564	10.61%	0.7154	0.1201
8:2		0.2982	0.3095	8.59%	0.7529	0.1312
7:3		0.3047	0.3418	10.03%	0.7391	0.1526
9:1	训练集+微调数据集	0.1040	0.1165	4.21%	0.9478	0.0521
8:2		0.0732	0.1023	3.08%	0.9656	0.0364
7:3		0.0817	0.1107	3.26%	0.9526	0.0880

为进一步验证模型有效性, 本文基于 CEGPT-PF-M 的零样本学习能力 (Zero-shot), 对乙醇、乙烯、丙烯和聚乙烯化工品价格进行免训练的直接预测, 旨在检验模型的稳健性与泛化能力, 模型性能评价指标见表 8。结果显示, CEGPT-PF-M 在零样本学习能力下, 预测其他化工品价格时 R² 分布于 (0.8814, 0.9201) 区间内, 预测性能良好, 模型泛化能力突出。同时, 将本文研究结果与现有典型模型进行比较分析, 结果显示, 本文模型预测性能具有显著优势, 详见附录 A 表 13。9:1 和 8:2 两种划分形式下, 模型预测结果的残差分布见图 11。按 9:1 划分数据时, 误差分布于 (-0.0726, 0.0261) 区间内, 中位数为 -0.0145, 均值为 -0.0165, 方差为 0.0006, 在该划分比例下模型误差主要集中在负值区域; 在 8:2 划分形式下, 误差分布于 (-0.1136, 0.0181) 区间内, 中位数为 -0.0172, 均值为 -0.0098, 方差为 0.0022, 误差波动有所增加。

表 8 CEGPT-PF-M (Zero-shot) 对其他化工品预测性能评估指标

模型	指标名称	MAE	RMSE	MAPE	R ²	误差均值标准差
CEGPT-PF-M	乙醇	0.1600	0.1385	5.12%	0.9123	0.0936
	乙烯	0.1257	0.1425	5.5%	0.8814	0.1089
	丙烯	0.1565	0.1307	4.99%	0.9201	0.0806
	聚乙烯	0.1790	0.1423	5.35%	0.9005	0.0968

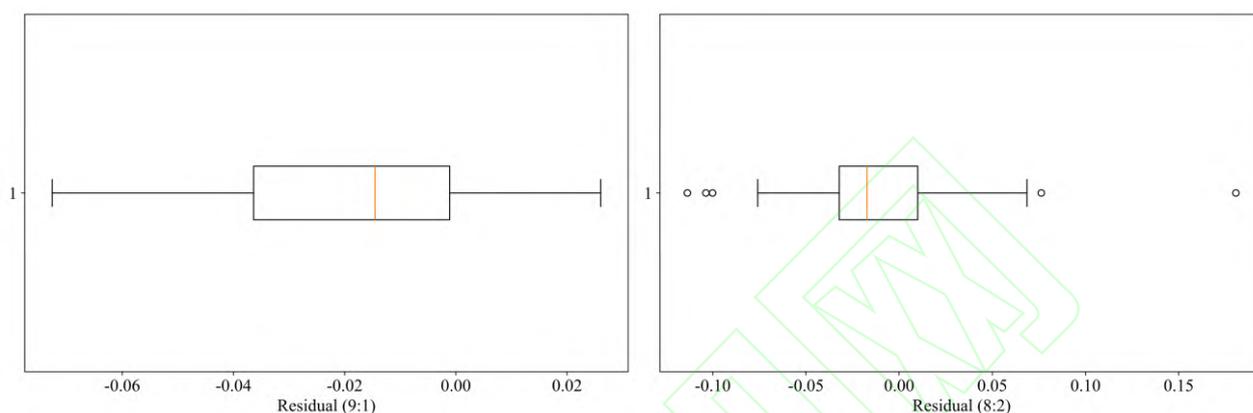


图 11 预测结果残差分布

4.4 因素重要度分析

SHAP 分析结果如图 12 所示。宏观视角下，全球甲醇价格对中国甲醇价格的重要性最为显著，表明中国甲醇市场与全球市场间存在高度关联性，反映出中国甲醇市场已深度融入全球市场体系。其次是供需关系，表明市场供给与需求平衡态在甲醇价格预测中扮演着关键角色。其他大宗化工品市场、其他相关市场和能源市场的重要度较高，反映出甲醇价格与其他化工产品以及相关市场之间存在显著联动效应，例如乙烯、丙烯等大宗化工品的产量和价格变动可能会通过产业链传导影响甲醇价格。同时，橡胶、塑料等相关市场的波动亦可通过替代效应或市场情绪传导对甲醇价格产生影响。相比之下，地缘政治风险对中国甲醇价格的影响最小。综上所述，影响中国甲醇价格预测的宏观因素表现出层次化特征，即全球甲醇价格和供需关系最主要，其次是化工品相关市场的联动效应。能源市场、宏观经济和地缘政治风险虽重要度相对较低，但仍在甲醇价格形成机制中不可忽视。宏观因素重要度值见附录 A 表 11。

微观视角下 SHAP 分析结果如图 13 所示。台湾省甲醇价格重要度值居首位，表明区域市场价格对中国甲醇价格具有显著指示作用。其次是中国乙烯、丙烯产量，此两项指标的高重要度反映出甲醇下游产品需求情况对甲醇价格的重要影响。煤炭行业生产者价格指数的重要度较高，即作为甲醇主要原料（供给），煤炭价格波动对中国甲醇价格预测影响显著。综上所述，影响中国甲醇价格预测的微观因素呈现多元化特征，涵盖直接相关的区域市场价格、上下游产品供需和宏观经济指标等多个方面，其复杂的影响机制反映出甲醇市场与整体经济和能源市场的紧密联系。微观因素重要度值如附录 A 表 12 所示。

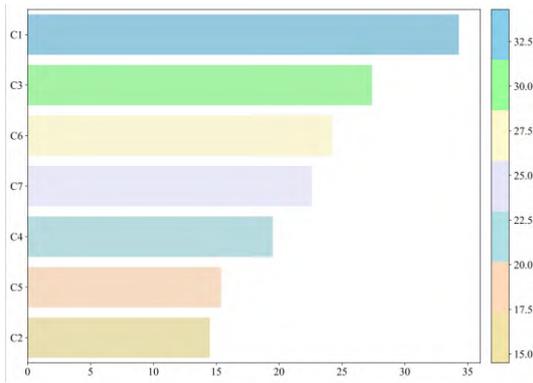


图 12 宏观因素重要度

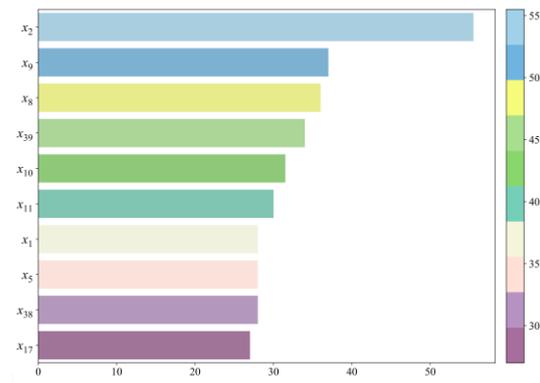


图 13 微观因素重要度

4.5 模型对比实验与敏感性分析

将 ARIMA 为代表的 SMs, ANN 为代表的 ML 模型, 以及 Autoformer 为代表的基于 Transformer 架构的预测模型与本文 CEGPT-PF-M 的预测性能进行对比分析。为降低不同数据划分形式导致的预测差异问题, 本文对四种划分形式 (9:1、8:2、7:3 和 6:4) 下的预测结果误差取平均值。结果显示, CEGPT-PF-M 在准确率方面显著优于 SMs 和 DL 方法。模型复杂度方面, CEGPT-PF-M 是基于智能化工大模型进行迁移训练和参数微调所得, 而智能化工大模型为已训练完成的成熟模型, 迁移训练和微调本质上是对智能化工大模型的扩展应用, 并不涉及模型重构, 因此复杂度可控。迁移训练和微调过程涉及的参数数量分别为 204 万和 1 万左右, 数量显著高于其他主流模型。然而, CEGPT-PF-M 模型无需考虑时间序列长度和频率分解等问题, 因此面对长序列或多任务时, 其效率性较高。此外, 将 CEGPT-PF-M 对其他化工品价格进行再次迁移训练和参数微调时, 所需调整的参数数量将大大降低 (本团队前期工作显示, 预测甲醇下游的乙烯和丙烯价格研究中, 需要调整的参数数量分别为 97 个和 88 个), 即模型的扩展复杂度低。各模型的性能可视化对比见图 14, 该图所示结果基于四种数据划分形式下误差指标的平均值计算得出。值为正表示模型的误差高于 CEGPT-PF-M, 值为负表示误差低于 CEGPT-PF-M, 值的绝对大小表示误差相较于本文模型的百分比差异。现有模型与 CEGPT-PF-M 预测性能对比如表 9 所示。

本文逐一剔除特征变量, 以 MAE 变化量评估模型对关键输入变量的敏感度。结果显示, 剔除各指标后, MAE 均升高, 特别体现在剔除台湾省甲醇价格、中国丙烯产量、中国乙烯产量和化工行业生产者价格指数等指标中, 相关结果与 SHAP 解释性分析一致。敏感性分析结果见附录 A 表 14。敏感性分析结果亦显示各变量敏感性差别不显著, 即模型稳健性较高。

表 9 现有模型与 CEGPT-PF-M 预测性能对比

类别	模型	模型评判标准			
		MAE	RMSE	MAPE	R ²
SM	ARIMA	0.1927	0.1850	3.57%	0.7683
	SARIMA	0.1523	0.1652	3.75%	0.8195
ML	LSTM	0.1479	0.1899	8.58%	0.8277
	GRU	0.1224	0.1518	7.49%	0.8616
	XGBoost	0.1632	0.1977	8.41%	0.8110
	ANN	0.1065	0.1159	3.49%	0.8720
	CNN	0.1163	0.1245	6.16%	0.8657
	SVM	0.1150	0.1181	5.71%	0.8669
	LogSparse-Transformer	0.1019	0.1093	3.87%	0.8864
Transformer	Autoformer	0.1090	0.1171	4.56%	0.8701
	Informer	0.1047	0.1159	3.97%	0.8805
	LogTrans	0.1052	0.1131	3.69%	0.8774
	本文	CEGPT-PF-M	0.0859	0.1072	3.53%

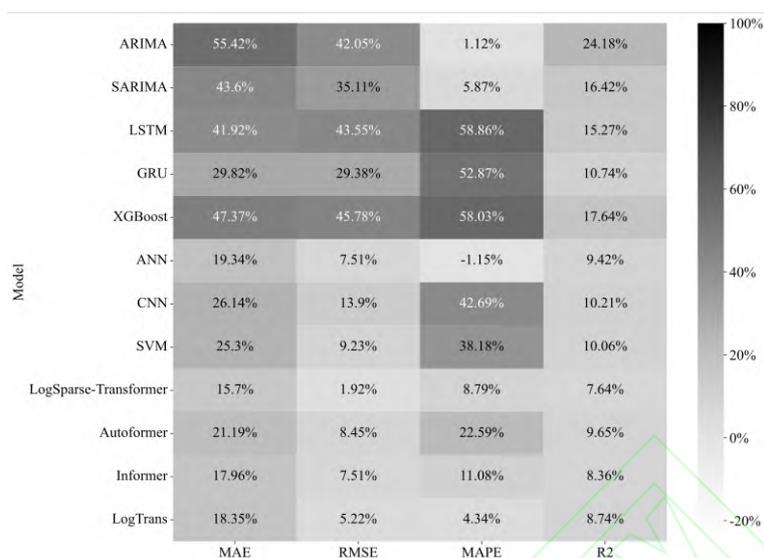


图 14 模型性能对比图

5 结论与展望

5.1 结论

准确预测中国甲醇价格不仅对甲醇生产商、煤炭供应商、甲醇下游产品相关企业和投资者进行风险管理、供应链优化和国际贸易至关重要，还为政府制定相关政策提供关键指导。基于本研究团队开发的国内首个智能化工大模型，本工作对其进行迁移训练并构建首个用于化工品价格分析与预测的大语言模型：CEGPT-PF-M，得出以下结论：

(1) CEGPT-PF-M 基于智能化工大模型搭建，并在大规模时间序列数据集上完成特征表示迁移学习，可对甲醇价格时间序列预测问题进行零样本（Zero-shot）（模型直接预测）或少样本（Few-shot）（参数微调后预测）学习。相比于传统时间序列预测模型，本文所提方法预测准确度显著提升，并且在扩展应用中可以避免模型重构，显著提升模型效率，是化工品市场的首个生成式预训练时间序列预测模型。通过结合甲醇市场的供需情况、中国经济形势等多方面因素进行综合分析，CEGPT-PF-M 能够有效预测中国甲醇价格走势，准确性优势显著。

(2) Transformer 架构是 CEGPT-PF-M 的基础模型，其强大的序列建模能力可灵活地融合多种数据源（如历史价格、供需数据、宏观经济指标等），从而提供更全面的预测视角。Transformer 架构的自注意力机制支持 CEGPT-PF-M 动态调整对不同时间点信息的关注度，更高效地应对市场波动和突发事件对价格的影响。实验结果显示，CEGPT-PF-M 的预测性能超越现有 SMs、ML 和 Transformer 模型。同时，借助 SHAP 工具，CEGPT-PF-M 在解释性层面亦表现出色。

(3) 鉴于现有文献对中国甲醇价格研究存在空白以及其在化工领域的显著需求，本文所提 CEGPT-PF-M 模型对甲醇生产工厂制定生产计划、优化库存管理、降低生产成本以及识别价格波动的潜在风险具有重要参考意义。对于甲醇下游的新兴产业，如选择甲醇燃料船舶的航运公司，CEGPT-PF-M 模型不仅能辅助其合理规划燃料采购、锁定低价、降低运营成本，还有助于公司在船队管理和航线选择上进行战略决策，从而提高运营效率；对于甲醇衍生品交易者，通过精准价格预测，交易者可制定有效买卖策略，提高交易收益，还有助于交易者理解市场动态，识别价格驱动因素，从而明智化投资决策。

(4) 在中国甲醇价格影响因素分析层面，本文量化全球甲醇价格、宏观经济和其他大宗化工品市场等宏观因素和美国海湾地区甲醇价格、天然气价格指数、布伦特原油价格等微观因素对中国甲醇价格的影响程度。其中，在宏观层面，全球甲醇价格对中国甲醇价格的影响显著强于地缘政治风险等宏观因素；在微观层面，台湾甲醇价格、中国乙烯产量以及中国丙烯产量对中国甲醇价格影响最为显著。

5.2 甲醇价格波动应对策略

中国甲醇价格预测和分析研究中，本文从宏观和微观层面分析各变量对甲醇价格的影响。基于本文分析结果，从管理学角度为甲醇生产商、煤炭供应商和甲醇下游市场提供相关管理建议。

(1) 甲醇生产商

甲醇生产商应重点关注供需关系和能源市场变化。中国煤炭产量、中国乙烯产量、中国丙烯产量和中国甲醛产量在甲醇价格预测任务中，对中国甲醇价格影响最为显著，因此，可根据上述变量的波动情况，灵活调整库存水平、生产计划和定价策略。此外，全球石油产量和天然气价格指数对甲醇价格亦有直接影响，生产商应密切关注能源指标走势，并优化能源采购策略，降低生产成本。其中，中国丙烯产量对甲醇价格的影响尤为显著，生产商应加强对石油市场的监测，利用金融工具进行风险对冲，稳定生产成本。

(2) 煤炭供应商

鉴于全球甲醇价格对中国甲醇市场的显著影响，煤炭商应密切关注国际甲醇市场动态。建议建立健全的全球市场监测机制，及时掌握国际甲醇价格走势，以此为依据调整生产和销售策略。同时，考虑到中国作为全球主要甲醇生产国和消费国的地位，煤炭商可探索参与国际甲醇期货交易，以对冲价格风险，提高企业的抗风险能力。其次，煤炭商需深入分析甲醇市场的供需关系，煤炭商不仅关注自身产业，还要全面了解甲醇产业链的上下游情况。建议煤炭商与甲醇生产企业建立战略合作关系，共同预测市场需求变化，协调生产计划，以确保煤炭供应能够及时满足甲醇生产需求，同时避免供给过剩导致的价格波动。

(3) 甲醇下游市场

供需关系是影响甲醇价格的重要因素。下游市场应加强对国内外甲醇供需情况的监测，尤其是生产装置的开工率、停产检修情况以及新产能的投放等信息。通过精准的供需预测，以准确把握市场节奏，优化生产和销售计划。此外，其他大宗化工品市场和其他相关市场亦对中国甲醇价格影响显著，下游市场应密切关注与甲醇产业链相关的产品价格和需求变化，及时调整自身市场策略，避免因相关市场波动而产生连锁反应。

5.3 展望

基于当前研究成果，可在以下方向进一步展开探索。

(1) CEGPT-PF 具有扩展应用至乙醇、丙烯、原油和天然气等价格预测领域的的能力。

(2) 特征工程方面，引入更丰富的宏观经济指标、市场情绪数据（如新闻情感分析）、国际市场数据等，丰富模型的输入特征，提高预测的准确性，并全面分析各因素对甲醇价格的影响程度。

(3) 将经济学理论与甲醇价格预测相结合，如供需理论、市场结构分析与生成式预训练模型相结合，详细解释外生变量对中国甲醇价格的影响机理，构建更具解释力和预测力的模型。

致谢

本研究得到教育部人文社会科学基金（22YJC910011）、中国博士后科学基金（2023M733444）、辽宁省人工智能领域科技创新重点研发计划（2023JH26/10200012）、国家自然科学基金（22308348）和辽宁滨海实验室资助项目（LBLF-2023-01）的资助。

参考文献

- [1] BROWN Tom B., MANN Benjamin, RYDER Nick, et al. Language models are few-shot learners[EB/OL]. 2020, arXiv:2005.14165.
- [2] VASWANI Ashish, SHAZEER Noam, PARMAR Niki, et al. Attention is all you need[C]//Advances in Neural Information Processing Systems, 2017.
- [3] DEVLIN Jacob, CHANG Mingwei, LEE Kenton, et al. BERT: Pre-training of deep bidirectional transformers for language understanding[EB/OL]. 2018: 1810.04805.
- [4] KUNZ Manuel, BIRR Stefan, RASLAN Mones, et al. Deep learning based forecasting: A case study from the Online fashion industry[M]//Palgrave advances in the economics of innovation and technology. Cham: Springer Nature Switzerland, 2023: 279-311.

- [5] 张真, 张凡, 云祉婷. 绿氢在石化和化工行业的减碳经济性分析[J]. 化工进展, 2024, 43(6): 3021-3028.
ZHANG Zhen, ZHANG Fan, YUN Zhiting. Carbon reduction and techno-economic analysis of using green hydrogen in chemical and petrochemical industry[J]. Chemical Industry and Engineering Progress, 2024, 43(6): 3021-3028.
- [6] WANG Xiaomeng, DEMIREL Yaşar. Feasibility of power and methanol production by an entrained-flow coal gasification system[J]. Energy & Fuels, 2018, 32(7): 7595-7610.
- [7] CHEN Zhuo, SHEN Qun, SUN Nannan, et al. Life cycle assessment of typical methanol production routes: The environmental impacts analysis and power optimization[J]. Journal of Cleaner Production, 2019, 220: 408-416.
- [8] NYÁRI Judit, MAGDELDIN Mohamed, LARMI Martti, et al. Techno-economic barriers of an industrial-scale methanol CCU-plant[J]. Journal of CO2 Utilization, 2020, 39: 101166.
- [9] SU Liwang, LI Xiangrong, SUN Zuoyu. The consumption, production and transportation of methanol in China: A review[J]. Energy Policy, 2013, 63: 130-138.
- [10] 中国产业信息网. 2017 年中国甲醇行业发展现状及价格走势分析[EB/OL]. (2018-05-15) [2024-11-08]. <https://www.chyxx.com/industry/201805/640922.html>.
- [11] AL-SHARRAH Ghanima K, ALATIQUI Imad, ELKAMEL Ali. Modeling and identification of economic disturbances in the planning of the petrochemical industry[J]. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2003, 42(20): 4678-4688.
- [12] 原野. 2009 年甲醇市场分析及 2010 年预测[J]. 化工管理, 2010, (2): 56-58.
YUAN Ye. Analysis of methanol market in 2009 and forecast in 2010[J]. Chemical Enterprise Management, 2010, (2): 56-58.
- [13] 殷红, 张霞, 王长波. 基于组合模型的大宗商品价格预测与可视分析——以甲醇价格为例[J]. 东华大学学报(自然科学版), 2017, 43(4): 541-546+551.
YIN Hong, ZHANG Xia, WANG Changbo. Price Forecasting and Visual Analysis of Bulk Commodities Based on Combined Model: A Case Study of Methanol Prices[J]. Journal of Donghua University (Natural Science Edition), 2017, 43(4): 541-546+551.
- [14] NOWNEOW Anuwat, RUNGREUNGANUN Vilas. Poly vinyl chloride pellet price forecasting using ARIMA model[J]. International Journal of Mechanical Engineering and Technology, 2018, 9(13): 224-232.
- [15] 赵鲁涛, 郑志益, 邢悦悦, 等. 2021 年国际原油价格分析与趋势预测[J]. 北京理工大学学报(社会科学版), 2021, 23(2): 25-29.
ZHAO Lutao, ZHENG Zhiyi, XING Yueyue, et al. International crude oil price analysis and projection in 2021[J]. Journal of Beijing Institute of Technology (Social Sciences Edition), 2021, 23(2): 25-29.
- [16] 张金岱. 记忆性特征驱动的成品油价格预测研究[J]. 系统科学与数学, 2022, 42(5): 1300-1313.
ZHANG Jindai. Memory-trait-driven refined oil price forecasting[J]. Journal of Systems Science and Mathematical Sciences, 2022, 42(5): 1300-1313.
- [17] 李慧, 李威龙, 胡一鸣, 等. 2024 年成品油价格分析与趋势预测[J]. 北京理工大学学报(社会科学版), 2024, 26(2): 59-67.
LI Hui, LI Weilong, HU Yiming, et al. Analysis and trend prediction of refined oil price in 2024[J]. Journal of Beijing Institute of Technology (Social Sciences Edition), 2024, 26(2): 59-67.
- [18] STOPFORD Martin. Maritime economics[M]. Routledge, 2013.
- [19] WANG Wenyang, HE Nan, CHEN Muxin, et al. Freight rate index forecasting with Prophet model based on multi-dimensional significant events[J]. Expert Systems with Applications, 2024, 249: 123451.
- [20] LU Minrong, XU Xuerong. TRNN: An efficient time-series recurrent neural network for stock price prediction[J]. Information Sciences, 2024, 657: 119951.
- [21] CHENG Jiyang, TIWARI Sunil, KHALED Djebbouri, et al. Forecasting Bitcoin prices using artificial intelligence: Combination of ML, SARIMA, and facebook prophet models[J]. Technological Forecasting and Social Change, 2024, 198: 122938.
- [22] REZAEI Hadi, FAALJOU Hamidreza, MANSOURFAR Gholamreza. Stock price prediction using deep learning and frequency decomposition[J]. Expert Systems with Applications, 2021, 169: 114332.
- [23] ZHANG Xin, XUE Tianyuan, EUGENE STANLEY H. Comparison of econometric models and artificial neural networks algorithms for the prediction of Baltic dry index[J]. IEEE Access, 2019, 7: 1647-1657.

- [24] SAEED Naima, NGUYEN Su, CULLINANE Kevin, et al. Forecasting container freight rates using the Prophet forecasting method[J]. *Transport Policy*, 2023, 133: 86-107.
- [25] SAEED Naima, NGUYEN Su, CULLINANE Kevin, et al. Forecasting container freight rates using the Prophet forecasting method[J]. *Transport Policy*, 2023, 133: 86-107.
- [26] LUNDBERG Scott, LEE Su-In. A unified approach to interpreting model predictions[EB/OL]. 2017: 1705.07874.
- [27] 孙善辉, 李鸿, 张祖峰. 相空间重构和参数统一求解的石油价格预测[J]. *计算机工程与应用*, 2013, 49(23):247-251.
SUN Shanhui, LI Hong, ZHANG Zufeng. Oil price predicting based on unified solving by phase space reconstruction and parameters[J]. *Computer Engineering and Applications*, 2013, 49(23): 247-251.
- [28] 张学龙, 王云峰, 谢廷宇. 灰色预测模型在石油化工原料价格预测中的应用[J]. *数学的实践与认识*, 2014, 44(16): 31-38.
ZHANG Xuelong, WANG Yunfeng, XIE Tingyu. Application of grey forecasting model on price forecasting of petrochemical materials[J]. *Mathematics in Practice and Theory*, 2014, 44(16): 31-38.
- [29] 董振宇, 冯恩民, 尹洪超, 等. 国际原油价格预测的双层随机整数规划模型、算法及应用[J]. *运筹学学报*, 2015, 19(3): 18-25.
DONG Zhenyu, FENG Enmin, YIN Hongchao, et al. A Bilevel Stochastic Integer Programming Model, Algorithm, and Application for International Crude Oil Price Forecasting[J]. *Journal of Operations Research*, 2015, 19(3): 18-25.
- [30] JHA Nimish, KUMAR TANNERU Hemanth, PALLA Sridhar, et al. Multivariate analysis and forecasting of the crude oil prices: Part I—classical machine learning approaches[J]. *Energy*, 2024, 296: 131185.
- [31] LIU Longlong, ZHOU Suyu, JIE Qian, et al. A robust time-varying weight combined model for crude oil price forecasting[J]. *Energy*, 2024, 299: 131352.
- [32] LI Jingjing, HONG Zhanjiang, ZHANG Chengyuan, et al. A novel hybrid model for crude oil price forecasting based on MEEMD and Mix-KELM[J]. *Expert Systems with Applications*, 2024, 246: 123104.
- [33] 吴东武, 朱帮助. 基于 HAR-RV-CJ 模型的天然气价格预测[J]. *统计与决策*, 2017, 33(23): 83-87.
WU Dongwu, ZHU Bangzhu. Natural gas price forecast based on HAR-RV-CJ model[J]. *Statistics & Decision*, 2017, 33(23): 83-87.
- [34] 王建良, 雷昌然. 基于数据挖掘技术的天然气价格预测方法研究[J]. *中国矿业*, 2020, 29(2): 52-58.
WANG Jianliang, LEI Changran. Research on the forecasting method for natural gas price based on the data mining technique[J]. *China Mining Magazine*, 2020, 29(2): 52-58.
- [35] 裴莹, 李天祥, 王麇清, 等. 基于新闻的国际天然气价格趋势预测方法[J]. *计算机科学*, 2021, 48(S1): 235-239.
PEI Ying, LI Tianxiang, WANG Aoqing, et al. Prediction method of international natural gas price trends based on news[J]. *Computer Science*, 2021, 48(S1): 235-239.
- [36] 周游, 张佳佳, 张良恺, 等. 2024 年国际天然气市场分析与趋势预测[J]. *北京理工大学学报(社会科学版)*, 2024, 26(2): 76-83.
ZHOU You, ZHANG Jijia, ZHANG Liangkai, et al. Analysis and trend forecasting prediction of the international natural gas markets in 2024[J]. *Journal of Beijing Institute of Technology (Social Sciences Edition)*, 2024, 26(2): 76-83.
- [37] TIWARI Aviral Kumar, SHARMA Gagan Deep, RAO Amar, et al. Unraveling the crystal ball: Machine learning models for crude oil and natural gas volatility forecasting[J]. *Energy Economics*, 2024, 134: 107608.
- [38] 李亚鹏, 韩旭, 于旭光, 等. 模型和数据混合驱动的双边协商电力市场合约价格预测方法[J]. *电力系统自动化*, 2022, 46(18): 179-189.
LI Yapeng, HAN Xu, YU Xuguang, et al. Hybrid model-driven and data-driven approach to price forecasting in bilateral contract electricity markets[J]. *Automation of Electric Power Systems*, 2022, 46(18): 179-189.
- [39] LOIZIDIS Stylianos, KYPRIANOU Andreas, GEORGHIOU George E. Electricity market price forecasting using ELM and bootstrap analysis: A case study of the German and Finnish day-ahead markets[J]. *Applied Energy*, 2024, 363: 123058.
- [40] MASI H A Mansur M, ALBINALI Khaled, DEMELLO Lurion. Price dynamics of natural gas and the regional methanol markets[J]. *Energy Policy*, 2010, 38(3): 1372-1378.

- [41] DELAVARI Majid, ALI KHANI Nadiya Gandali, NADERI Esmaeil. Oil and methanol price volatility[J]. Australian Journal of Business and Management Research, 2013, 3(8): 1-10.
- [42] ZHANG Xia, YIN Hong, WANG Changbo, et al. Forecast the price of chemical products with multivariate data[C]//2015 International Conference on Behavioral, Economic and Socio-cultural Computing (BESC). October 30-November 1, 2015. Nanjing, China. IEEE, 2015: 76-82.
- [43] THÖMMES Myriam, WINKER Peter. Multivariate modelling of cross-commodity price relations along the petrochemical value chain[M]//LAUSEN Berthold, VAN DEN POEL Dirk, ULTSCH Alfred, eds. Studies in classification, data analysis, and knowledge organization. Cham: Springer International Publishing, 2013: 427-435.
- [44] GHANAVIEH Ali Ebrahimi. Time series forecasting of styrene price using a hybrid ARIMA and neural network model[J]. Independent Journal of Management & Production, 2019, 10(3): 915-933.
- [45] LU Yachen, TENG Yufan, ZHANG Qi, et al. Prediction model for the chemical futures price using improved genetic algorithm based long short-term memory[J]. Processes, 2023, 11(1): 238.
- [46] 季晨洋, 林杰. 基于随机森林方法的甲醇期货价格预测与交易策略研究[J]. 上海管理科学, 2023, 45(1): 113-118.
JI Chenyang, LIN Jie. Research on methanol futures price forecast and trading strategy based on random forest method[J]. Shanghai Management Science, 2023, 45(1): 113-118.
- [47] POVEY Daniel, HADIAN Hossein, GHAREMANI Pegah, et al. A time-restricted self-attention layer for ASR[C]//2018 IEEE International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing (ICASSP). April 15-20, 2018. Calgary, AB. IEEE, 2018: 5874-5878.
- [48] PARMAR Niki, VASWANI Ashish, USZKOREIT Jakob, et al. Image transformer[C]//Proceedings of the International Conference on Machine Learning. PMLR, 2018: 4055-4064.
- [49] KIM Jimin, OBREGON Josue, PARK Hoonseok, et al. Multi-step photovoltaic power forecasting using transformer and recurrent neural networks[J]. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 2024, 200: 114479.
- [50] WANG Xinyu, MA Wenping. A hybrid deep learning model with an optimal strategy based on improved VMD and transformer for short-term photovoltaic power forecasting[J]. Energy, 2024, 295: 131071.
- [51] MO Site, WANG Haoxin, LI Bixiong, et al. Powerformer: A temporal-based transformer model for wind power forecasting[J]. Energy Reports, 2024, 11: 736-744.
- [52] 牛昊天, 林宇轩, 蔡念, 等. CNN-Transformer 交互模型预测 IgA 肾病病理分级[J/OL]. 计算机工程与应用, 2024, 1-11.
NIU Haotian, LIN Yuxuan, CAI Nian, et al. CNN-Transformer Interactive Model for Predicting IgA Nephropathy Pathological Grading[J/OL]. Computer Engineering and Applications, 2024, 1-11.
- [53] LUO Qinyao, HE Silu, HAN Xing, et al. LSTTN: A Long-Short Term Transformer-based spatiotemporal neural network for traffic flow forecasting[J]. Knowledge-Based Systems, 2024, 293: 111637.
- [54] NGUYEN Duc, FABLET Ronan. TraISformer—A generative transformer for AIS trajectory prediction[EB/OL]. 2021, arXiv:2109.
- [55] 洗浩然, 江昊, 廖娟, 等. 基于 Transformer 的出租车轨迹预测方法研究[J/OL]. 武汉大学学报(工学版), 2024, 1-12.
XIAN Haoran, JIANG Hao, LIAO Juan, et al. Research on Taxi Trajectory Prediction Method Based on Transformer[J/OL]. Engineering Journal of Wuhan University, 2024, 1-12.
- [56] GUSTAVSSON Mikael, KÄLL Styrbjörn, SVEDBERG Patrik, et al. Transformers enable accurate prediction of acute and chronic chemical toxicity in aquatic organisms[J]. Science Advances, 2024, 10(10): eadk6669.
- [57] 刘敏毅, 崔博文, 王宇坤, 等. 基于注意力机制的 Transformer 模型预测 PM2.5 浓度[J/OL]. 环境科学, 2024, 1-15.
LIU Minyi, CUI Bowen, WANG Yukun, et al. PM2.5 Concentration Prediction Based on Transformer Model with Attention Mechanism[J/OL]. Environmental Science, 2024, 1-15.
- [58] SUN Wei, CHANG Li-Chiu, CHANG Fi-John. Deep dive into predictive excellence: Transformer's impact on groundwater level prediction[J]. Journal of Hydrology, 2024, 636: 131250.
- [59] FANG Jinjie, YANG Linshan, WEN Xiaohu, et al. Ensemble learning using multivariate variational mode decomposition based on the Transformer for multi-step-ahead streamflow forecasting[J]. Journal of Hydrology, 2024, 636: 131275.

- [60] MISHRA Aswini Kumar, RENGANATHAN Jayashree, GUPTA Aaryaman. Volatility forecasting and assessing risk of financial markets using multi-transformer neural network based architecture[J]. *Engineering Applications of Artificial Intelligence*, 2024, 133: 108223.
- [61] 翁鸣昊, 项兴华, 陈俊涛, 等. 基于 LSTM 与 Transformer 的大坝变形预测研究[J]. *中国农村水利水电*, 2024(4): 250-257.
WENG Minghao, XIANG Xinghua, CHEN Juntao, et al. Dam deformation prediction research based on LSTM and transformer[J]. *China Rural Water and Hydropower*, 2024(4): 250-257.
- [62] ZENG Hang, ZHANG Hongmei, GUO Jiansheng, et al. A novel hybrid STL-transformer-ARIMA architecture for aviation failure events prediction[J]. *Reliability Engineering & System Safety*, 2024, 246: 110089.
- [63] 李明阳, 鲁之君, 曹东晶, 等. 一种基于 Transformer 编码器与 LSTM 的飞机轨迹预测方法[J]. *航天返回与遥感*, 2024, 45(2): 163-176.
LI Mingyang, LU Zhijun, CAO Dongjing, et al. A predictive aircraft trajectory prediction method based on transformer encoder and LSTM[J]. *Spacecraft Recovery & Remote Sensing*, 2024, 45(2): 163-176.
- [64] 翟文鹏, 宋一峤, 张兆宁. 基于 Transformer-GRU 网络的 4D 航迹预测[J]. *重庆交通大学学报(自然科学版)*, 2024, 43(6): 94-101.
ZHAI Wenpeng, SONG Yiqiao, ZHANG Zhaoning. 4D trajectory prediction based on transformer-GRU network[J]. *Journal of Chongqing Jiaotong University (Natural Science)*, 2024, 43(6): 94-101.
- [65] WU Haixu, XU Jiezhong, WANG Jianmin, et al. Autoformer: Decomposition transformers with auto-correlation for long-term series forecasting[C]//*Advances in Neural Information Processing Systems*, 2021, 34: 22419-22430.
- [66] ZHOU Haoyi, ZHANG Shanghang, PENG Jieqi, 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.
- [67] LI Shiyang, JIN Xiaoyong, XUAN Yao, et al. Enhancing the locality and breaking the memory bottleneck of transformer on time series forecasting[EB/OL]. 2019: 1907.00235.
- [68] NIE Xingqing, ZHOU Xiaogen, LI Zhiqiang, et al. LogTrans: Providing efficient local-global fusion with transformer and CNN parallel network for biomedical image segmentation[C]//2022 IEEE 24th Int Conf on High Performance Computing & Communications; 8th Int Conf on Data Science & Systems; 20th Int Conf on Smart City; 8th Int Conf on Dependability in Sensor, Cloud & Big Data Systems & Application (HPCC/DSS/SmartCity/DependSys). December 18-20, 2022. Hainan, China. IEEE, 2022: 769-776.
- [69] WANG Huan, YUAN Zhaolin, CHEN Yibin, et al. An industrial missing values processing method based on generating model[J]. *Computer Networks*, 2019, 158: 61-68.
- [70] DEMIRHAN Haydar, RENWICK Zoe. Missing value imputation for short to mid-term horizontal solar irradiance data[J]. *Applied Energy*, 2018, 225: 998-1012.
- [71] ENGLE Robert F. Autoregressive conditional heteroscedasticity with estimates of the variance of United Kingdom inflation[J]. *Econometrica*, 1982, 50(4): 987.
- [72] DEKKING Frederik Michel, KRAAIKAMP Cornelis, LOPUHAÄ Hendrik Paul, et al. *A Modern Introduction to Probability and Statistics: Understanding Why and How*[M]//Springer Science & Business Media, 2006.
- [73] 裴钦, 雷昭. 极端学习机算法下甲醇价格的短期与长期预测研究[J]. *黑龙江工业学院学报(综合版)*, 2022, 22(1): 127-132.
PEI Qin, LEI Zhao. On short-term and long-term prediction of methanol price based on extreme learning machine algorithm[J]. *Journal of Heilongjiang University of Technology (Comprehensive Edition)*, 2022, 22(1): 127-132.

表 10 中国甲醇价格与微观因素相关性

变量	MIC 值	变量	MIC 值	变量	MIC 值
x_2	0.8241	x_7	0.4482	x_{41}	0.3733
x_1	0.7731	x_{28}	0.4330	x_{14}	0.3726
x_3	0.5783	x_{27}	0.4281	x_{40}	0.3688
x_{24}	0.5777	x_{11}	0.4227	x_{29}	0.3681
x_{31}	0.5614	x_8	0.4222	x_{39}	0.3592
x_{37}	0.5607	x_9	0.4175	x_{23}	0.3348
x_{17}	0.5509	x_{12}	0.4034	x_{25}	0.3342
x_{36}	0.5468	x_{21}	0.4005	x_{26}	0.3249
x_{35}	0.5329	x_{13}	0.3980	x_{20}	0.3182
x_{30}	0.5267	x_{42}	0.3970	x_{18}	0.3169
x_{34}	0.5191	x_{38}	0.3960	x_6	0.2981
x_{32}	0.4918	x_5	0.3889	x_4	0.2640
x_{33}	0.4587	x_{10}	0.3873	x_{22}	0.2513
x_{16}	0.4583	x_{15}	0.3849	x_{19}	0.2360

表 11 宏观因素重要度 SHAP 值

宏观因素	重要度值
全球甲醇价格 (C1)	34.3
供需关系 (C3)	27.4
其他大宗化工品市场 (C6)	24.2
其他相关市场 (C7)	22.6
能源市场 (C4)	19.5
宏观经济 (C5)	15.4
地缘政治风险 (C2)	14.5

表 12 微观因素重要度 SHAP 值

变量名	重要度值	变量名	重要度值	变量名	重要度值
x_2	55.5	x_{34}	25.0	x_{32}	23.0
x_9	37.0	x_{35}	25.0	x_{30}	22.5
x_8	36.0	x_7	25.0	x_3	19.5
x_{39}	34.0	x_{19}	24.5	x_{25}	16.0
x_{10}	31.5	x_{27}	24.5	x_4	14.5
x_{11}	30.0	x_{28}	24.5	x_6	14.5
x_1	28.0	x_{42}	24.5	x_{21}	13.5
x_5	28.0	x_{37}	24.5	x_{26}	13.5
x_{38}	28.0	x_{29}	24.0	x_{41}	13.5
x_{17}	27.0	x_{12}	24.0	x_{23}	13.0
x_{20}	26.5	x_{13}	24.0	x_{40}	13.0
x_{14}	26.0	x_{36}	24.0	x_{22}	9.5
x_{33}	25.5	x_{18}	23.5	x_{16}	8.0
x_{15}	25.5	x_{31}	23.5	x_{24}	7.0

表 13 CEGPT-PF-M 模型与现有甲醇价格预测模型比较

模型	规模	相对误差	MAPE
CEGPT-PF-M	8:2	0.22%	3.08%

	9:1	0.61%	4.21%
极端学习机算法 ^[73]	长期	0.67%-3.78%	\
	短期	1.6%	\
季节指数法 ^[13]	\	\	4.62%
指数平滑法 ^[13]	\	\	5.19%

表 14 模型敏感度分析 ($\Delta MAE \times 10000$)

变量名	重要度值	变量名	重要度值	变量名	重要度值
x_1	2.5671	x_{15}	2.5018	x_{29}	2.4578
x_2	2.5987	x_{16}	2.3096	x_{30}	2.3663
x_3	2.3595	x_{17}	2.5335	x_{31}	2.4174
x_4	2.3458	x_{18}	2.4381	x_{32}	2.3979
x_5	2.5493	x_{19}	2.4843	x_{33}	2.5229
x_6	2.3397	x_{20}	2.5287	x_{34}	2.5014
x_7	2.4868	x_{21}	2.3395	x_{35}	2.4910
x_8	2.5910	x_{22}	2.3136	x_{36}	2.4386
x_9	2.5914	x_{23}	2.3228	x_{37}	2.4644
x_{10}	2.5892	x_{24}	2.3024	x_{38}	2.5453
x_{11}	2.5674	x_{25}	2.3592	x_{39}	2.5893
x_{12}	2.4561	x_{26}	2.3329	x_{40}	2.3222
x_{13}	2.4519	x_{27}	2.4787	x_{41}	2.3321
x_{14}	2.5232	x_{28}	2.4695	x_{42}	2.4644