



中国科技期刊卓越行动计划项目入选期刊

# 控制与决策

CONTROL AND DECISION

## 基于多尺度时空图神经网络的污染物浓度预测

廖海斌, 袁理, 龚颢巍

引用本文:

廖海斌, 袁理, 龚颢巍. 基于多尺度时空图神经网络的污染物浓度预测[J]. *控制与决策*, 2024, 39(4): 1396–1402.

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.13195/j.kzyjc.2022.1942>

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

#### 基于卷积长短时记忆神经网络的城市轨道交通短时客流预测

Metro short-term traffic flow prediction with ConvLSTM

控制与决策. 2021, 36(11): 2760–2770 <https://doi.org/10.13195/j.kzyjc.2020.0501>

#### 一种基于深度学习的时间序列预测方法

A time series prediction method based on deep learning

控制与决策. 2021, 36(3): 645–652 <https://doi.org/10.13195/j.kzyjc.2019.0809>

#### 基于强化学习的倒立摆分数阶梯度下降RBF控制

Reinforcement learning based fractional gradient descent RBF neural network control of inverted pendulum

控制与决策. 2021, 36(1): 125–134 <https://doi.org/10.13195/j.kzyjc.2019.0816>

#### 基于FWADE-ELM的短时交通流预测方法

Short-term traffic flow forecasting based on hybrid FWADE-ELM

控制与决策. 2021, 36(4): 925–932 <https://doi.org/10.13195/j.kzyjc.2019.1103>

#### 基于改进堆叠自动编码器的循环冷却水系统工艺介质温度预测控制方法

Predictive control method of process medium temperature in circulating cooling water system based on improved stacked auto encoders

控制与决策. 2020, 35(12): 2835–2844 <https://doi.org/10.13195/j.kzyjc.2019.0694>

# 基于多尺度时空图神经网络的污染物浓度预测

廖海斌, 袁理<sup>†</sup>, 龚颖巍

(武汉纺织大学 电子与电气工程学院, 武汉 430200)

**摘要:** 基于深度学习的细粒度污染物浓度预测是一种新兴且具有前景的方法, 如何充分利用气象、空间和时间等3大信息是其关键. 为了协同融合3大信息, 提出一种基于多尺度时空图神经网络的污染物浓度预测模型. 该模型利用空气质量模型动态构建多尺度的时空图神经网络, 学习污染物之间的动态时空关系. 具体为: 利用图神经网络学习污染物之间的多尺度空间关系, 采用空气质量模型HYSPLIT构建图的结点和边属性, 通过基于注意力机制的GRU (gate recurrent unit) 学习污染物浓度之间的时序关系. 该模型不仅充分考虑了气象、空间和时间3大影响因素, 还将3个因素联动起来统一到一个框架内协同学习. 该方法与传统的机理模型方法相比具有灵活部署、易于实施的特点. 实际项目数据集和公开数据集上的实验表明: 与现有先进的基于图神经网络的方法相比, 该方法预测的污染物浓度平均绝对误差降低了0.6左右, 对称平均绝对百分比误差降低0.005左右.

**关键词:** 污染物浓度预测; 时空数据; 深度学习; 机理模型; 图神经网络

中图分类号: TP391

文献标志码: A

DOI: 10.13195/j.kzyjc.2022.1942

引用格式: 廖海斌, 袁理, 龚颖巍. 基于多尺度时空图神经网络的污染物浓度预测 [J]. 控制与决策, 2024, 39(4): 1396-1402.

## Pollutant concentration forecast based on multiscale spatiotemporal graph neural network

LIAO Hai-bin, YUAN Li<sup>†</sup>, GONG Hao-wei

(School of Electronic and Electrical Engineering, Wuhan Textile University, Wuhan 430200, China)

**Abstract:** Fine-grained pollutant concentration forecast based on deep learning is a new and promising method, and how to make full use of meteorological, spatial and temporal information is the key point. In order to cooperatively fuse the three pieces of information, we propose a pollutant concentration forecasting model based on a multiscale spatiotemporal graph neural network. This model uses the air quality model to dynamically construct the multiscale spatiotemporal graph neural network to learn the dynamic spatiotemporal relationship between pollutants. Specifically, the graph neural network is used to learn the multiscale spatial relationship between pollutants, the air quality model hybrid single-particle lagrangian integrated trajectory (HYSPLIT) is used to construct the node and edge attributes of the graph, and the attention mechanism-based gate recurrent unit (GRU) is used to learn the temporal relationship between pollutant concentrations. The model not only fully considers the three influencing factors of meteorology, space and time, but also integrates the three factors into a framework for collaborative learning. Compared with the traditional mechanism model methods, the proposed method has the characteristics of flexible deployment and easy implementation. Experiments on real project datasets and public databases show that the mean absolute error of pollutant concentration is reduced by about 0.6 and the symmetric mean absolute percentage error is reduced by about 4% compared with the existing advanced method based on graph neural networks.

**Keywords:** pollutant concentration forecast; spatiotemporal data; deep learning; mechanism model; graph neural network

## 0 引言

空气中污染物浓度含量涉及到公共健康, 如何利用大量历史监测数据构建污染物浓度预测模型, 成为

大气环境保护领域的一个热门研究话题. 污染物浓度预测是一个非常复杂的系统工程. 一方面, 污染物浓度与排放源有关, 具有时序性和周期性; 另一方面,

收稿日期: 2022-11-10; 录用日期: 2023-04-03.

基金项目: 国家自然科学基金项目(61701174); 江西省主要学科学术和技术带头人培养计划——领军人才项目(20204BCJ22014).

责任编辑: 孙宗耀.

<sup>†</sup>通讯作者. E-mail: 2022048@wtu.edu.cn.

污染物在空气中存在扩散和沉降等物理和化学变化,受气象和地理位置影响较大;此外,污染物浓度还具有突发性,如突发性污染泄露事件会导致空气中污染物浓度急剧上升。

现有的污染物浓度预测方法主要有机理模型和机器学习两大类。机理模型方法<sup>[1-3]</sup>主要利用大气物理和化学反应对空气污染物的排放、扩散过程建模,从而进行污染物浓度预测。如:高斯系模型 AERMOD 和 ADMS (atmospheric dispersion modeling system)、拉格朗日系模型 CALPUFF (California puff) 和 HYSPLIT 等<sup>[1]</sup>,以及第3代空气质量模型 CMAQ (community multiscale air quality)、WRFChem (weather research and forecasting model coupled to chemistry)、CAMx (comprehensive air quality model with extensions) 和 NAQPMS (nested air quality prediction modeling system) 等<sup>[2]</sup>。但是,机理模型存在诸如精准度不高、模型输入苛刻和应用环境受限等问题。如:AERMOD是一种经验模型,主要适用于小尺度空气扩散模拟和预测。而基于第3代空气质量模型的污染物浓度预测方法虽然可以进行城市级大尺度污染浓度预测,但需要有全面准确的源清单和气象场数据作为输入,才能进行预测,其应用受限。

随着深度学习的兴起,基于机器学习的空气质量预测受到越来越多的关注<sup>[4-6]</sup>。此类方法利用大量历史观测数据进行训练学习,找出污染物浓度变化规律,从而进行污染物浓度预测。如:Zhang等<sup>[7]</sup>提出的结合 CNN (convolutional neural network) 与 LSTM (long short-term memory) 的污染物浓度预测方法,取得了较好的效果;Du等<sup>[8]</sup>采用一维 CNN 捕捉局部时间趋势、双向 LSTM 提取长时间时序特征,从而构建混合神经网络进行污染物浓度预测;Liang等<sup>[9]</sup>提出了一种基于 LSTM 的编-解码污染物浓度预测框架 GeoMAN,并使用注意力机制捕获不同站点之间空间影响关系;Yi等<sup>[10]</sup>提出了 DeepAir 模型为多源数据构建子网络,并使用融合网络整合不同子网络结果得出最终预测值。以上方法利用 LSTM 可以很好地捕获时间相关性,但他们对空间关系的捕获却明显不足。虽然利用 CNN 可以建立空间关系,但其构建的是一种静态空间关系,站点之间是固定的距离关系。由于受气象和地形影响,站点之间的空间关系并不是一种简单的静态距离关系,而是一种动态关系。另外,城市中站点分布具有不均匀和稀疏性,因此在构建 CNN 时需要进行插值处理,导致产生大量虚拟的站点,从而影响结果分析。

相对而言,基于图的方法可以天然地避免上述不足,这是因为图具有构建非欧几里得实体分布的能力,可以很好地捕获空间关系。因此,为了弥补上述方法对空间关系学习不足的问题,基于图神经网络的方法被成功应用于污染物浓度预测中。Qi等<sup>[11]</sup>利用图卷积网络学习站点之间的空间关系,利用 LSTM 学习站点不同时刻的时间相关性,从而构建一种综合预测模型 GC-LSTM (graph convolution embedded long short-term memory);Lin等<sup>[12]</sup>通过扩散卷积运算代替 GRU (gate recurrent unit) 中的矩阵乘法进行序列建模,并结合图卷积操作构建 GC-DCRNN (diffusion convolutional recurrent neural network for graph) 进行污染物浓度预测;Xu等<sup>[13]</sup>提出了一种基于分层图神经网络的编-解码网络结构 HighAir 进行污染物浓度预测。

以上基于图神经网络的方法利用图结构较好地构建了站点之间的空间关系,但他们对图结构中边的构建不够充分,如文献[13]只是简单地利用距离和风向相似度构建边权重。为了更好地构建边关系,Wang等<sup>[14]</sup>提出了一种基于领域知识的图神经网络模型,他们利用领域知识(风速、风向、距离、平流系数)构建边权重,以便更好地学习 PM<sub>2.5</sub> 浓度空间变化关系。虽然上述文献利用了领域知识,但只是简单罗列了部分影响因子,还是不够充分。站点之间的污染影响关系是由气象条件(风速、风向、压强、湿度和边界层高度等)和地形地貌综合决定的,是一个复杂过程,需要使用真正的领域模型进行分析。

## 1 问题定义

时间特征 (TF): TF 包括季度、月度、周日、小时及节假日 5 大特征。其中季度特征的取值范围为 [1, 2, 3, 4], 月度的取值范围为 [1, 2, ..., 12], 周日的取值范围为 [1, 2, ..., 7], 小时的取值范围为 [1, 2, ..., 24], 节假日的取值范围为 [0, 1]。

地理特征 (GF): GF 由站点的地形和土地利用类型特征组成。地形特征由站点的海拔高度表示,将海拔高度分为高(大于 1 300 m)、较高(1 000 ~ 1 300 m)、中(500 ~ 1 000 m)、低(小于 500 m) 4 类,并用 one-hot 编码表示;土地利用类型特征根据站点所处的区域类型(主城区、郊区、山区、工业区、自然保护区)决定,并用 one-hot 编码表示。如:站点  $S_{v,i}$  的海拔高度为 800 m,属于工业区,因此其地理特征表示为  $gf_{v,i} = [1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0]$ 。

HYSPLIT<sup>[5,15]</sup> 是一种用于计算和分析大气污染物输送以及扩散轨迹的专业模型 (<https://www.ready>。

noaa.gov/HYSPLIT\_traj.php). 本文利用 HYSPLIT 建立结点与结点之间的源-受体关系. 利用 HYSPLIT 进行轨迹分析时只需要输入模拟区域的气象数据和模拟的起初点坐标信息即可, 其中气象数据可以从 (ARL) 官网上免费下载 (<https://nomads.ncep.noaa.gov/pub/data/nccf/com/hysplit>).

污染物浓度预测: 给定区域  $R$ 、站点位置  $L$ 、地理特征  $gf$ 、 $\tau_{in}$  时间步内的污染物浓度值  $con$ 、 $\tau_{in} + \tau_{out}$  时间步内的气象特征  $wf$  和时间特征  $tf$ , 污染物浓度预测的任务就是预测下步时间  $\tau_{out}$  内站点的污染物浓度值. 其中:  $\tau_{in}$  表示历史时间窗长度,  $\tau_{out}$  表示预测时间

窗长度.

## 2 模型方法

### 2.1 污染物浓度预测模型框架

为了克服单尺度静态图的不足, 构建一种基于动态和多尺度的时空图神经网络编-解码结构, 如图1所示. 在编码阶段, 利用多尺度图神经网络学习站点污染物之间的空间关系, 利用 GRU 网络学习其时序关系; 在解码阶段, 利用辅助数据和注意力机制加强 GRU 预测学习, 解码出未来的污染物浓度值. 其中多尺度时空图神经网络是污染物浓度预测模型的重点, 如图2所示.

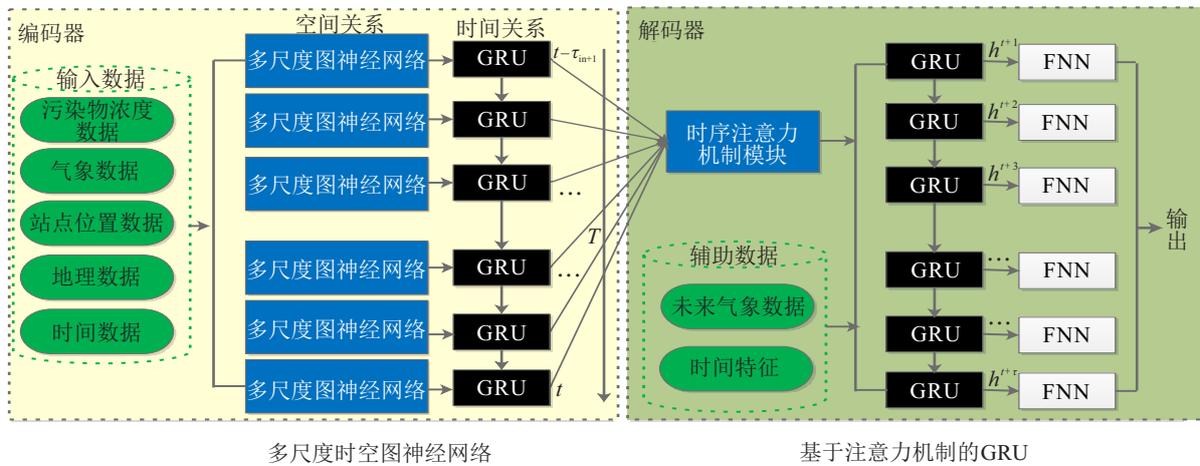


图1 污染物浓度预测模型架构

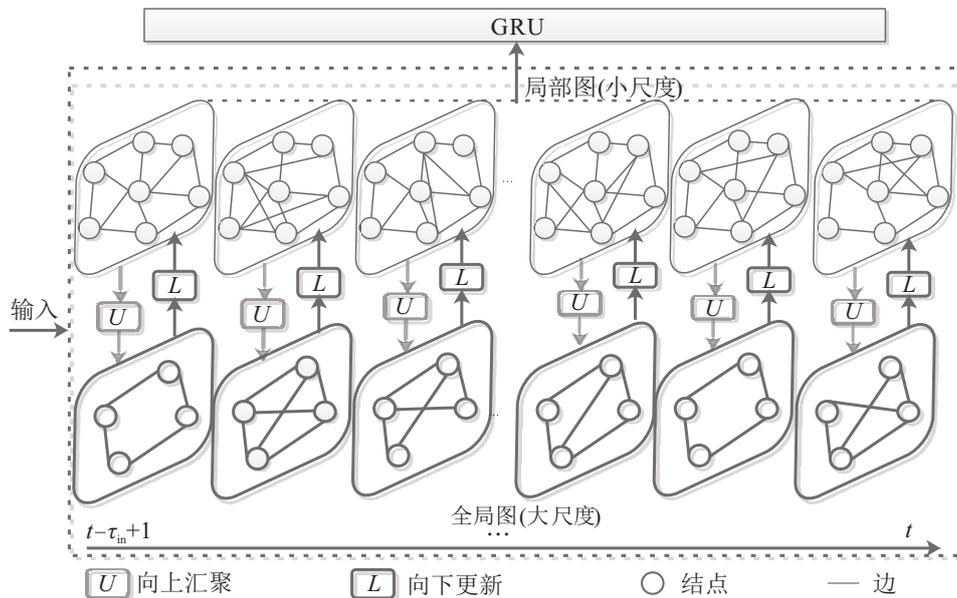


图2 多尺度时空图神经网络结构模型

### 2.2 多尺度时空图神经网络结构

受文献 [13] 启发, 提出多尺度时空图神经网络模型 (MSTGNN), 在其基础上, 本文创新性地利用空气质量模型动态构建图的边关系及属性, 在结点属性中加入时间特征. MSTGNN 分全局级和局部级两

种尺度图结构. 全局图和局部图之间通过消息传递机制进行交互. 局部图信息向上传递给全局图, 而全局图信息反过来向下更新局部图. 在每个时间段中, MSTGNN 将计算每个全局结点属性信息, 并利用其去更新对应的局部结点属性. 通过一轮信息传递

之后,所生成的局部结点属性的时间序列值将被送入GRU进行编码。

以济南市站点污染物浓度预测为例,对济南市中所有大气监测站点未来的污染物浓度进行预测。首先,对城市中所有站点根据其经纬度信息进行聚类,得到  $N$  个类别,即聚类出  $N$  个区域。因此,每个区域可以作为全局图中的一个结点,而区域内各个站点可以作为局部子图结点。由此可以构建多尺度图结构,如图3所示,其中大尺度图为基于区域的全局图,小尺度图为基于站点级的局部子图。

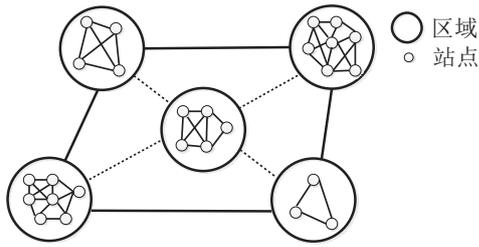


图3 多尺度图结构

1) 结点属性: 对于全局图中的结点,其属性为该结点区域的污染物浓度值;对于局部子图中的结点,其属性为该结点所在站点的污染物浓度值、地理特征和时间特征的组合。

2) 边及属性: 为了利用大气领域知识,采用空气质量模型 HYSPLIT 学习结点与结点之间的关系,以此动态构建连接边。以全局图的边计算为例: 根据聚类出的区域情况将城市进行网格划分,使得每个区域落入唯一的网格内。对于每一个区域(结点  $v_i$  为起点),利用 HYSPLIT 计算出下步时间内以  $v_i$  为起点、以小时为步长的所有轨迹;跟踪每条轨迹穿越结点所在网格的时间,记录除了  $v_i$  外其他结点所在网格穿过的轨迹个数和所需时间,并以此动态构建全局连接边及其属性向量。重复执行直到每个结点都作为起点被分析。站点级局部图的边及属性计算类似。

### 2.3 空间关系学习

MSTGNN 采用消息传递机制可以构建不同尺度的空间关系,消息传递机制主要包括消息聚合和描述更新两个过程。消息聚合表示如下:

$$M_v = \{(x_v, x_n, e_{(v,n)})\}_{n \in N(v)}, \quad (1)$$

$$m_v \leftarrow \psi(M_v). \quad (2)$$

其中:  $M_v$  表示结点  $v$  的所有消息集合,  $x_v$  表示结点  $v$  的属性,  $x_n$  表示结点  $v$  的邻居结点属性,  $e_{(v,n)}$  表示边属性,  $N(v)$  表示结点  $v$  的邻居结点集,  $m_v$  表示结点  $v$  的聚合向量,  $\psi(\cdot)$  表示聚合函数。具体的消息聚合方式是从局部子图向全局图聚合(可以参考文献[13])。

描述更新表示如下:

$$\begin{cases} x'_v \leftarrow \phi_1(m_v, x_v), & \text{in global graph;} \\ x'_{v,i} \leftarrow \phi_2(m_{v,i}, x_{v,i}, u_v), & \text{in partial graph.} \end{cases} \quad (3)$$

其中:  $\phi_1$ 、 $\phi_2$  表示更新函数,  $m_{v,i}$  表示结点  $v$  所在区域中第  $i$  结点的聚合向量,  $x_{v,i}$  表示结点  $v$  所在区域中第  $i$  结点的属性。

### 2.4 时间依赖关系学习

为了捕获时间依赖关系,本文采用编-解码结构,如图1所示。编码器中的GRU使用  $\tau_{in}$  时间段内的局部结点属性时间序列  $X_{v,i} = \{x_i^{t-\tau_{in}+1}, x_i^{t-\tau_{in}+2}, \dots, x_{v,i}^t | 1 \leq v \leq N, 1 \leq i \leq |S_v|\}$ ,  $X_{v,i}$  作为输入,编码器中GRU的最终状态作为解码器的输入。解码器中GRU的输入不仅包含编码器的输出还包含局部子图中结点在  $\tau_{out}$  时间段内的气象特征和时间特征。解码器中GRU的输出作为全连接网络(FNN)的输入,FNN输出局部子图中结点  $\tau_{out}$  时间段内的污染物浓度值。

为了更好地利用时序特性,利用注意力机制记录每一时刻的隐藏状态,训练时分析当前隐藏状态与之前不同时刻隐藏状态之间的关联,为其赋予不同的注意力权重。因此,在解码阶段利用注意力隐状态、 $t$  时刻的气象参数  $wf_t$  和时间特征  $tf_t$  对隐状态  $h_t$  进行更新。

## 3 实验分析

### 3.1 数据集

1) 济南数据集: 是一个在实际项目中收集的城市场级数据集。济南市共有 130 个空气监测站点,每个站点每小时输出一次污染物的浓度值和气象参数。共收集济南市 130 个空气监测站点在 2019 年 1 月~2022 年 1 月历时 3 年的历史监测数据作为训练和测试集。

将 130 站点聚类划分为 13 个区,由 13 个区组成全局图,每个区作为全局图中的一个全局结点。而每一个区中的站点又组成一个局部子图,区里的站点作为局部子图的结点。

2) 长三角城市群数据集包括上海和杭州等 10 个城市。通过 air pollution prediction system (<http://airprediction.urban-computing.com>) 地理特征(GF),收集相应站的历史污染物浓度值和气象参数,即 2019 年 1 月~2022 年 1 月共 3 年的历史监测数据作为训练和测试集。长三角城市群中每一个城市是一个全局图结点,城市中的每个站点是相应局部子图的结点。

地理特征通过地图引擎AMAP (<https://lbs.amap.com/api/webservice/guide/api/search/>) 获取, 其感知半径为 1000 m. 气象预测数据从 ARL (<https://nomads.ncep.noaa.gov/pub/data/>) 下载.

### 3.2 实验设置

在训练阶段使用 Adam 优化算法自适应调整学习率  $\text{batch-size} = 128$ ,  $\text{epoch} = 500$ . 本实验采用 PyTorch<sup>[16]</sup> 深度学习框架, 使用 PyTorch geometric library<sup>[17]</sup> 实现图神经网络, 使用 Pysplit<sup>[5]</sup> 实现 HYSPLIT 轨迹分析和边权重构建.

算法通过 MAE (平均绝对误差) 和 SMAPE (对称平均绝对百分比误差) 两个指标进行评价. 由于人们最关心的是 PM<sub>2.5</sub> 和 O<sub>3</sub> 指标, 将围绕这两个指标预

测进行实验. 在实验中, 使用前 48 h 数据作为输入值, 选择后 1、6、12、18、24、36 和 48 小时的预测值作为输出值进行评价.

### 3.3 多因素分析实验

为了验证不同因素对预测结果的影响, 本节进行消融实验. 其中: --wdf 表示使用随机生成的气象特征取代未来气象特征, --tf 表示使用随机生成的时间取代真实时间特征, --gf 表示使用随机生成的地理特征取代真实地理特征. 表 1 和表 2 分别给出了在济南数据集上 PM<sub>2.5</sub> 和 O<sub>3</sub> 的浓度预测结果比较. 另外, 图 4 描绘了济南市某站点 2020 年 1 月 2 日 00:00 ~ 2020 年 1 月 3 日 23:00 连续 48 h 的 PM<sub>2.5</sub> 和 O<sub>3</sub> 浓度预测值与其对应真实值的情况.

表 1 基于济南市数据集的 PM<sub>2.5</sub> 预测结果

方法	评价指标	1 h	6 h	12 h	18 h	24 h	36 h	48 h
MSTGNN	MAE	6.25	16.97	22.18	28.23	36.96	46.31	54.69
	SMAPE	0.07	0.10	0.15	0.20	0.26	0.34	0.46
--wdf	MAE	7.11	17.19	23.74	29.47	38.57	47.76	55.83
	SMAPE	0.08	0.11	0.16	0.21	0.28	0.35	0.47
--tf	MAE	6.77	17.16	23.58	28.56	37.99	47.58	55.07
	SMAPE	0.07	0.11	0.16	0.20	0.27	0.35	0.47
--gf	MAE	6.72	16.85	22.59	28.67	37.05	46.59	55.10
	SMAPE	0.07	0.10	0.15	0.20	0.26	0.34	0.46

表 2 基于济南市数据集的 O<sub>3</sub> 预测结果

方法	评价指标	1 h	6 h	12 h	18 h	24 h	36 h	48 h
MSTGNN	MAE	5.11	14.84	18.86	23.72	30.78	39.19	48.07
	SMAPE	0.05	0.08	0.12	0.16	0.22	0.29	0.37
--wdf	MAE	6.02	15.63	20.19	25.06	32.46	41.52	49.78
	SMAPE	0.06	0.09	0.13	0.17	0.24	0.31	0.38
--tf	MAE	5.91	15.36	19.26	24.65	32.17	41.55	50.01
	SMAPE	0.06	0.09	0.12	0.17	0.24	0.31	0.38
--gf	MAE	5.72	15.08	19.41	24.05	30.95	39.26	48.11
	SMAPE	0.05	0.08	0.12	0.16	0.22	0.29	0.37

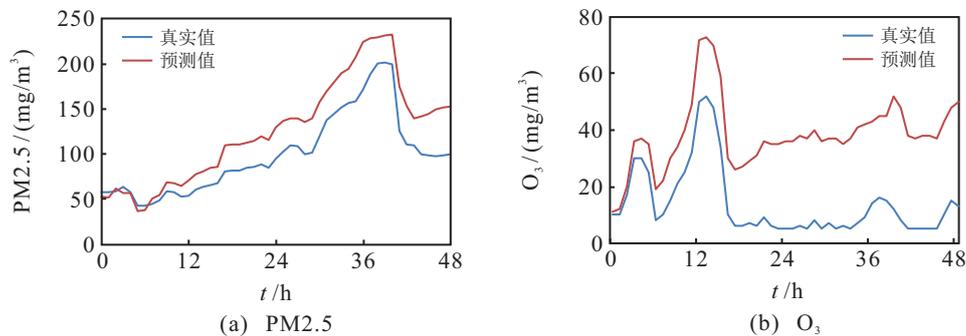


图 4 48 h 预测值与真实值情况

从表 1、表 2 和图 4 中可以看出: 1) MSTGNN 取得的效果最好, 表明本文使用的未来气象特征、时间特征和地理特征可以提高模型的预测能力; 2) 不同因素对模型预测能力影响大小排序为: 气象特征 > 时间

特征 > 地理特征, 验证了气象条件因素是污染物浓度预测的重要影响因子的猜测, 表明模型设计应该首要考虑气象要素; 3) O<sub>3</sub> 浓度预测比 PM<sub>2.5</sub> 容易, 主要是因为 O<sub>3</sub> 和 PM<sub>2.5</sub> 相比, 其更具时期周期性和稳定性,

因此后文都以PM2.5浓度预测进行实验.

### 3.4 模型模块实验

为验证不同模块的作用. 本节将比较MSTGNN及3个变种模型: 1) w/o multiscale表示不使用多尺度图模型, 将基于区域的全局图及其交互表示去除, 即使用普通的单尺度平面图模型表示站点之间的空间关系; 2) w/o HYSPLIT表示不使用HYSPLIT动态构建结点之间的边关系, 直接使用风速和风向构建结点之间边关系; 3) w/o taGRU表示不使用注意力机制的门循环单元模型, 直接使用传统的门循环单元模型代替.

MSTGNN与其变种模型对比结果如表3所示, 可以看出: 1) MSTGNN优于w/o multiscale, 表明采用

多尺度图可以更好地捕获空间关系. 这是因为普通的单尺度图只能捕获站点与站点之间的关系, 而多尺度图不仅可以捕获站点与站点之间的关系, 还可以捕获区域与区域、站点与区域之间的关系, 采用多尺度图的方式学习空间关系对污染物浓度预测是受益的. 2) MSTGNN优于w/o HYSPLIT, 表明采用HYSPLIT构建边关系效果好于直接采用风向与风速的方式. 这是因为专业的空气质量模型能够根据气象条件和地形数据模拟污染物在空气中传输和扩散的过程, 因此利用HYSPLIT构建的边关系具有动态、专业和时序性, 有益于污染物浓度预测. 3) 在解码端使用注意力机制的门循环单元网络, 对更长时间的预测有帮助, 但对于短期预测帮助不大.

表3 基于济南市数据集的不同模型比较结果

方法	评价指标	1 h	6 h	12 h	18 h	24 h	36 h	48 h
MSTGNN	MAE	6.25	16.97	22.18	28.23	36.96	46.31	54.69
	SMAPE	0.07	0.10	0.15	0.20	0.26	0.34	0.46
w/o multiscale	MAE	7.12	17.10	23.59	28.02	34.95	48.02	53.58
	SMAPE	0.08	0.12	0.16	0.21	0.26	0.36	0.47
w/o HYSPLIT	MAE	7.16	18.06	23.59	28.16	34.76	48.35	53.02
	SMAPE	0.08	0.13	0.16	0.21	0.26	0.36	0.47
w/o taGRU	MAE	6.15	15.65	21.06	27.64	34.96	44.16	53.25
	SMAPE	0.07	0.10	0.14	0.21	0.26	0.33	0.47

### 3.5 与其他方法对比实验

为了验证MSTGNN的先进性, 本节将其与目前先进的方法: HighAir (hierarchical graph neural network-based air quality forecasting method)<sup>[13]</sup>、PM2.5-GNN (domain knowledge enhanced graph neural

network for PM2.5 forecasting)<sup>[14]</sup>、GC-DCRNN<sup>[12]</sup>、GC-LSTM<sup>[11]</sup>、ST-UNet (spatio-temporal U-network for graph-structured time series modeling)<sup>[18]</sup>、STA-LSTM (spatiotemporal attention mechanism based long short-term memory)<sup>[4]</sup>进行比较实验, 比较结果如表4所示.

表4 基于长三角城市群数据集的比较结果

方法	评价指标	1 h	6 h	12 h	18 h	24 h	36 h	48 h
MSTGNN	MAE	7.14	17.46	21.75	27.98	37.87	46.58	55.63
	SMAPE	0.08	0.12	0.14	0.20	0.28	0.35	0.49
HighAir	MAE	7.12	17.83	22.65	27.69	38.85	48.36	55.68
	SMAPE	0.08	0.12	0.15	0.20	0.29	0.36	0.49
PM2.5-GNN	MAE	7.15	18.09	23.14	29.57	37.96	48.99	56.12
	SMAPE	0.08	0.13	0.15	0.21	0.28	0.36	0.50
GC-DCRNN	MAE	7.56	18.56	24.88	30.67	43.26	51.84	60.02
	SMAPE	0.08	0.13	0.17	0.22	0.33	0.45	0.53
ST-UNet	MAE	7.22	18.69	23.36	27.86	40.16	51.97	57.852
	SMAPE	0.08	0.13	0.16	0.20	0.32	0.45	0.51
STA-LSTM	MAE	8.15	19.21	24.62	31.96	42.87	50.68	60.37
	SMAPE	0.09	0.14	0.17	0.23	0.33	0.37	0.53

由表4可知: 1) MSTGNN超越GC-DCRNN、GC-LSTM和ST-UNet, 尤其是在更长时间预测方面先进性更明显, 表明采用多尺度图结构比扁平图结构更优, 其主要是多尺度图结构既考虑了邻近站点对预测站点的局部影响, 又考虑了不同区域对预测站点的全局影响, 更能捕获丰富的空间关系. 2) MSTGNN与

HighAir相比, 综合MAE下降了0.55, 综合SMAPE下降了0.005. 这是因为在空间关系学习方面: MSTGNN使用专业的HYSPLIT模型构建边权重向量, 它综合利用气象和地形条件计算出结点之间的影响关系及具体的影响时间, 使得空间关系的构建更准确和细腻; 而HighAir只是简单地使用风向和

距离粗略地构建边权重向量. 在时间关系学习方面: MSTGNN 加入了时间特征, 并在解码端使用了注意力机制的长短记忆模型; 而 HighAir 只是简单地使用 LSTM 构建时序关系. 3) MSTGNN 超越 PM2.5-GNN. 这是因为 MSTGNN 使用多尺度时空图神经网络, 并综合使用气象数据、地形特征、时间特征和专业模型构建结点和边属性. 而 PM2.5-GNN 只是单尺度时空图神经网络, 在构建边属性时, 虽然利用了领域知识, 但只是简单地罗列了部分影响因子, 还是不够充分, 在构建结点属性时, 只使用了气象数据.

## 4 结论

本文提出了一种基于动态和多尺度的时空图神经网络编解码模型架构, 进行污染物浓度长时间预测. 为了充分学习污染物浓度之间的空间依赖, 利用专业空气质量模型构建动态图结构, 进行空间关系挖掘. 为了充分学习污染物浓度之间的时序依赖, 利用基于注意力机制的 LSTM 进行时间关系挖掘, 同时在图结点属性中加入时间特征, 以便模型更好地捕获时间周期性. 实验结果表明: 在时空图神经网络中考虑气象、地形、时间因素有益于提高预测精度, 其中气象因素提高最为明显; 利用专业的空气质量模型辅助构建图的动态边关系, 有助于更好地挖掘污染物之间的空间关系.

## 参考文献(References)

- [1] Jitra N, Pinthong N, Thepanondh S. Performance evaluation of AERMOD and CALPUFF air dispersion models in industrial complex area[J]. *Air, Soil and Water Research*, 2015, 8: 87-95.
- [2] Foroutan H, Wong D C, Pleim J, et al. Towards the next generation air quality modeling system: Current progress on implementing chemistry into MPAS-A[C]. *The 18th Annual WRF User's Workshop*. North Carolina, 2017: 1-2.
- [3] Stein A F, Draxler R R, Rolph G D, et al. NOAA's HYSPLIT atmospheric transport and dispersion modeling system[J]. *Bulletin of the American Meteorological Society*, 2015, 96(12): 2059-2077.
- [4] Zou X Y, Zhao J J, Zhao D, et al. Air quality prediction based on a spatiotemporal attention mechanism[J]. *Mobile Information Systems*, 2021, 2021: 1-12.
- [5] 鹿天柱, 钱晓超, 何舒, 等. 一种基于深度学习的时序序列预测方法[J]. *控制与决策*, 2021, 36(3): 645-652. (Lu T Z, Qian X C, He S, et al. A time series prediction method based on deep learning[J]. *Control and Decision*, 2021, 36(3): 645-652.)
- [6] Wang Y, Song G J, Du L, et al. Real-time estimation of the urban air quality with mobile sensor system[J]. *ACM Transactions on Knowledge Discovery from Data*, 2019, 13(5): 11-19.
- [7] Zhang J B, Zheng Y, Qi D K, et al. DNN-based prediction model for spatio-temporal data[C]. *Proceedings of the 24th ACM SIGSPATIAL International Conference on Advances in Geographic Information Systems*. New York, 2016: 1-4.
- [8] Du S D, Li T R, Yang Y, et al. Deep air quality forecasting using hybrid deep learning framework[J]. *IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering*, 2021, 33(6): 2412-2424.
- [9] Liang Y X, Ke S Y, Zhang J B, et al. GeoMAN: Multi-level attention networks for geo-sensory time series prediction[C]. *Proceedings of the Twenty-Seventh International Joint Conference on Artificial Intelligence*. Stockholm, 2018: 3428-3434.
- [10] Yi X W, Zhang J B, Wang Z Y, et al. Deep distributed fusion network for air quality prediction[C]. *Proceedings of the 24th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery & Data Mining*. New York, 2018: 965-973.
- [11] Qi Y L, Li Q, Karimian H, et al. A hybrid model for spatiotemporal forecasting of PM2.5 based on graph convolutional neural network and long short-term memory[J]. *Science of the Total Environment*, 2019, 664: 1-10.
- [12] Lin Y J, Mago N, Gao Y, et al. Exploiting spatiotemporal patterns for accurate air quality forecasting using deep learning[C]. *Proceedings of the 26th ACM SIGSPATIAL International Conference on Advances in Geographic Information Systems*. New York, 2018: 359-368.
- [13] Xu J H, Chen L, Lv M Q, et al. HighAir: A hierarchical graph neural network-based air quality forecasting method[J/OL]. 2021, arXiv: 2101.04264.
- [14] Wang S, Li Y R, Zhang J, et al. PM2.5-GNN: A domain knowledge enhanced graph neural network for PM2.5 forecasting[C]. *Proceedings of the 28th International Conference on Advances in Geographic Information Systems*. New York, 2020: 163-166.
- [15] Warner M S C. Introduction to PySPLIT: A python toolkit for NOAA ARL's HYSPLIT model[J]. *Computing in Science & Engineering*, 2018, 20(5): 47-62.
- [16] Paszke A, Gross S, Massa F, et al. PyTorch: An imperative style, high-performance deep learning library[J/OL]. 2019, arXiv: 1912.01703.
- [17] Fey M, Lenssen J E. Fast graph representation learning with PyTorch geometric[J/OL]. 2019, arXiv: 1903.02428.
- [18] Yu B, Yin H T, Zhu Z X. ST-UNet: A spatio-temporal U-network for graph-structured time series modeling[J/OL]. 2019, arXiv: 1903.05631.

## 作者简介

廖海斌(1982-), 男, 副教授, 博士, 从事人工智能与大数据、时空数据预测与机器学习技术等研究, E-mail: liao\_haibing@163.com;

袁理(1982-), 男, 特聘教授, 博士, 从事人工智能与大数据、智能检测与大数据挖掘技术等研究, E-mail: 2022048@wtu.edu.cn;

龚颖巍(1998-), 男, 硕士生, 从事模式识别与智能检测的研究, E-mail: 972871710@qq.com.