

白晓鑫,郭向阳,吴春玲,等.基于 CNN-Transformer 融合框架的柴油车氨排放预测方法 [J]. 中国环境科学, 2025,45(3):1231-1240.

Bai X X, Guo X Y, Wu C L, et al. Research on diesel vehicle NH₃ emission prediction method based on CNN-Transformer fusion framework [J]. China Environmental Science, 2025,45(3):1231-1240.

基于 CNN-Transformer 融合框架的柴油车氨排放预测方法

白晓鑫^{1*},郭向阳¹,吴春玲^{1,2},王凤滨¹,李旭¹,刘卫林¹ (1.中汽研汽车检验中心(天津)有限公司,天津 300300; 2.天津大学机械工程学院,天津 300072)

摘要: 本研究提出了一种基于卷积神经网络(CNN)和 Transformer 融合框架的柴油车 NH₃ 排放预测模型.该模型充分结合了 CNN 的局部特征提取能力和 Transformer 的全局依赖关注能力,实现了对实际行驶条件下柴油车 NH₃ 排放的高精度预测.研究以一辆 N₃ 类柴油车的实际道路排放测试数据为基础,采用 Pearson 相关系数法进行特征筛选,并利用贝叶斯优化算法对模型关键超参数进行调整,以提升模型性能.此外,应用 SHAP 算法量化了影响 NH₃ 排放的关键因素.结果表明,所提模型在独立数据集上能够高精度预测柴油车实际道路行驶中的 NH₃ 浓度排放,其预测的 NH₃ 浓度与实际测量值的 R²、平均绝对误差(MAE)和均方误差(MSE)分别达到 0.986、0.663 和 2.285,预测性能显著优于传统的随机森林(RF)模型、长短期记忆(LSTM)神经网络模型以及 Transformer 模型.研究为在用柴油车 NH₃ 排放监测提供了一种高效可靠的方法,同时为深入理解影响柴油车实际道路 NH₃ 排放的关键因素提供了新的研究思路.

关键词: 柴油车; 排放; NH₃; 卷积神经网络; Transformer

中图分类号: X511 文献标识码: A 文章编号: 1000-6923(2025)03-1231-10

Research on diesel vehicle NH₃ emission prediction method based on CNN-Transformer fusion framework. BAI Xiao-xin^{1*}, GUO Xiang-yang¹, WU Chun-ling^{1,2}, WANG Feng-bin¹, LI Xu¹, LIU Wei-lin¹ (1.CATARC Automotive Test Center (Tianjin) Co., Ltd., Tianjin 300300, China; 2.School of Mechanical Engineering, Tianjin University, Tianjin 300072, China). *China Environmental Science*, 2025,45(3): 1231~1240

Abstract: In this study, a diesel vehicle NH₃ emission prediction model based on the fusion framework of Convolutional Neural Network (CNN) and Transformer is proposed. The model was developed by integrating the local feature extraction capability of CNN with the global dependency modeling capability of Transformer, enabling the highly accurate prediction of NH₃ emissions from diesel vehicles under real road driving conditions. The study was conducted based on the actual on-road emissions test data of an N₃-class diesel vehicle. Feature screening was performed using the Pearson correlation coefficient method, and the key hyperparameters of the model were optimized through the application of the Bayesian algorithm, which enhanced its performance. Additionally, the SHapley Additive exPlanations (SHAP) algorithm was utilized to identify the pivotal factors influencing NH₃ emissions. The results indicated that the proposed model achieved highly accurate predictions of NH₃ emissions from diesel vehicles in real road driving conditions when tested on an independent dataset. The R², MAE, and MSE values of the predicted NH₃ concentration compared to the actual measured values were 0.986, 0.663, and 2.285, respectively, which were significantly superior to those obtained by the traditional Random Forest (RF) model, the Long Short-Term Memory (LSTM) neural network model, and the Transformer model. This study provided an efficient and reliable method for monitoring NH₃ emissions from in-use diesel vehicles and offered a novel perspective for elucidating the principal factors influencing NH₃ emissions from diesel vehicles on the road.

Key words: diesel vehicles; emission; NH₃; convolutional neural network; transformer

城市化进程的加速与机动车保有量的急剧增长导致了一系列环境问题,其中柴油车排气污染物对空气质量的影响尤为显著,对公众健康构成了潜在威胁^[1].在众多排气污染物中,NH₃ 因其特殊的化学性质而备受关注.NH₃ 不仅直接危害人体呼吸系统,更能通过复杂的大气化学反应参与细颗粒物(PM_{2.5})的生成过程,进而加剧雾霾天气的形成^[2].近年来,多项研究表明^[3-5],机动车已成为城市地区 NH₃ 排放的

主要来源之一.值得注意的是,柴油车 NH₃ 排放主要来源于其尾气后处理系统的选择性催化还原(SCR)装置^[6].SCR 技术虽然有效降低了氮氧化物(NO_x)的排放,但在工作过程中也会导致部分 NH₃ 的额外释放.因此,加强对柴油车 NH₃ 排放的监管变得愈发

收稿日期: 2024-08-20

基金项目: 国家重点研发计划(2022YFC3701800)

* 责任作者, 工程师, baixiaoxin@catarc.ac.cn

迫切。

为了有效控制柴油车 NH_3 排放对环境的危害,全球主要法规体系已对此提出了严格的监管要求。我国现行的重型车国六排放标准 GB17691-2018^[7]明确规定了柴油发动机台架排放测试的 NH_3 排放限值。然而,大量研究表明^[8-10],实验室台架测量结果与真实道路条件下的 NH_3 排放水平存在显著差异。相关研究^[8]使用便携式傅里叶变换红外线光谱分析仪(FTIR)对一辆配备氧化性催化器(DOC)-SCR-颗粒捕集器(DPF)后处理系统的柴油车进行实际道路排放试验,结果显示,受环境温度、驾驶特征及 SCR 性能等因素影响,车辆在实际驾驶条件下的 NH_3 排放因子约为实验室测试的 2 倍。鉴于此,2024 年 5 月 8 日发布的欧七排放标准前瞻性地引入了便携式排放测试系统(PEMS),用于评估柴油车实际道路行驶 NH_3 排放,并设定了具体限值要求^[11]。然而,PEMS 测试是在环境条件、行驶工况比例等受控条件下进行的,难以全面反映车辆在多样化驾驶行为和工况下的 NH_3 排放状况^[12]。此外,受试验成本和时间等因素限制,PEMS 测试难以实现对在用柴油车 NH_3 排放的全面监测。

鉴于现有监管措施的局限性,建立整车实际道路 NH_3 排放预测模型成为 NH_3 排放监管的重要研究方向。然而,准确预测柴油车 NH_3 排放仍面临诸多挑战。首先, NH_3 排放受发动机工况、SCR 系统性能以及环境温度等多因素影响,这些因素间存在复杂的非线性关系^[13]。其次,传统的排放预测方法往往依赖于简化模型或经验公式,难以全面捕捉 NH_3 排放的动态特性^[14-15]。近年来,深度学习方法在排放预测领域展现出巨大潜力。CNN 因其强大的特征提取能力,已被广泛应用于时序数据分析^[16]。而 Transformer 模型凭借其优异的长程依赖建模能力,在序列预测任务中取得了显著成果^[17]。然而,单一模型往往难以同时兼顾局部特征提取和全局依赖建模,限制了其在复杂排放预测任务中的表现。为解决上述问题,本研究提出了一种创新的 CNN-Transformer 融合网络框架,用于柴油车实际道路 NH_3 排放预测。通过实车测试数据,验证了所提方法的有效性和优越性,以期为未来柴油车 NH_3 排放控制与监管提供科学依据和方法参考。

1 柴油车实际道路行驶 NH_3 排放特征

1.1 试验车辆与设备

为探究柴油车在实际道路行驶条件下的 NH_3 排放特征,为构建准确、可靠的排放预测模型奠定坚实的数据基础,本研究选取一辆符合国六排放标准的 N_3 类重型柴油车进行了实际道路排放测试。测试车辆配备了一台排量为 5.193L、额定功率为 165kW 的柴油发动机,采用了 DOC+DPF+SCR 的后处理技术组合。

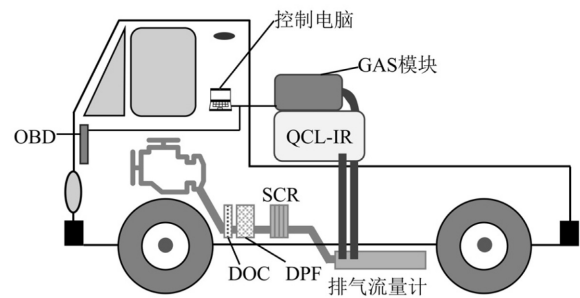


图 1 PEMS 安装示意

Fig.1 Schematic diagram of PEMS installation

测试采用 HORIBA 公司研发的 OBS-ONE 车载排放测试系统。该系统主要由排气污染物测量模块、排气流量计、数据通讯模块和环境监控模块组成,能够实时获取车辆运行状态、尾气中主要污染物浓度、排气流量、外界环境参数和车辆位置信息等数据。同时,该系统与车载诊断(OBD)接口连接,可实时读取发动机及尾气后处理装置的关键运行参数,如发动机指示转矩、摩擦转矩和转速等。使用 OBS-ONE-XL 量子级联激光器红外光谱仪(QCL-IR)测量尾气中的 NH_3 浓度,其有效测量范围覆盖 $0\sim 1500\times 10^{-6}$ 体积分数。经验证,QCL-IR 的测量结果与实验室固定式傅里叶变换红外光谱仪设备测量结果^[8]具有非常好的一致性。这些多维数据为全面分析 NH_3 排放特征及构建预测模型提供了可能。

1.2 柴油车实际道路 NH_3 排放特点

图 2 呈现了冷启动条件下测试车辆在实际道路行驶期间的瞬时 NH_3 排放特征。结果显示,在整个市区工况期间,由于车辆 SCR 系统未达到有效工作温度, NH_3 排放基本为零。随着车辆进入市郊路段,发动机负荷增加导致排气温度上升。当排气温度达到尿

素水解温度时,SCR 系统开始正常工作,尾气中随即检测到 NH_3 排放.值得注意的是,市郊工况下的 NH_3 排放水平显著低于高速工况.这主要是因为市郊工况下发动机负荷较低,导致排气温度和 NO_x 排放量较低,从而减少了 SCR 系统中 NH_3 的生成和泄漏.

图 2 所示为行驶条件对 NH_3 排放的显著影响.在动态驾驶和加速等瞬态工况下, NH_3 排放量明显增加.这可能是由于瞬态工况下 NO_x 排放急剧增加,以及 SCR 控制系统难以精确调节尿素喷射量所致.这一观察结果与先前的研究发现一致^[10],进一步证实了实际道路行驶条件对柴油车 NH_3 排放的重要影响.

基于上述分析,本研究在选择 NH_3 排放预测模型的输入特征时,重点考虑了以下几个方面:(1)排气温度:直接影响 SCR 系统的 NO_x 转化效率及 NH_3 的泄漏.(2)发动机负荷和 NO_x 排放量:与 NH_3 的产生和泄漏密切相关.(3)车辆行驶工况相关参数:反映实际道路行驶条件对 NH_3 排放的影响.

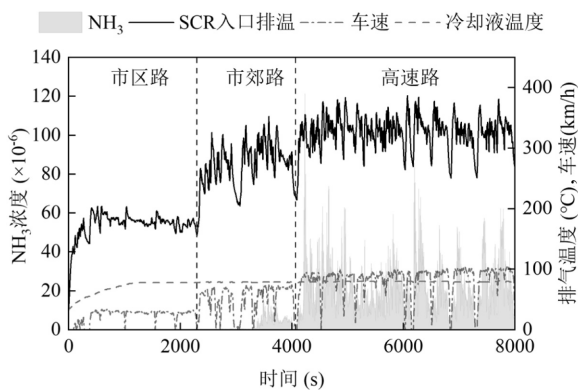


图 2 实际道路行驶 NH_3 排放特征

Fig.2 Real-world NH_3 emissions characteristic

2 CNN-Transformer 融合框架介绍

本文提出了一种新型柴油车 NH_3 排放预测模型,模型利用了 CNN 和 Transformer 的互补优势,其结构如图 3 所示.该模型主要由 3 个关键组件构成:CNN 特征提取模块、Transformer 序列处理模块和输出层.首先,输入的时间序列数据通过 CNN 模块进行处理,以提取空间特征向量.为了进一步提升模型的特征提取能力,在设计中堆叠了多个卷积层.这种深层结构使得模型能够更全面地学习和理解复杂的实际道路 NH_3 排放特性.随后,这些提取的特征

被输入到具有多头自注意力机制的 Transformer 模块中,以充分挖掘时间维度的信息,同时获取潜在的时空相关性.最后,通过全连接层将 Transformer 的输出映射到一维输出,即模型预测的 NH_3 浓度.

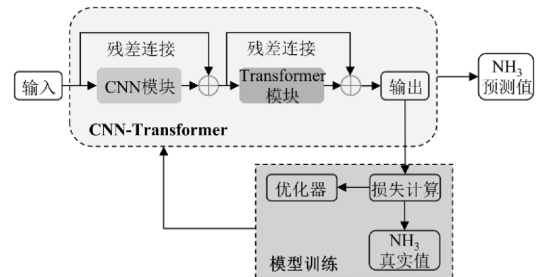


图 3 CNN-Transformer 模型整体框架

Fig.3 Overall framework of the CNN-Transformer model

2.1 CNN 模块

采用 CNN 专注对输入数据进行局部特征提取.CNN 架构通常包含卷积、池化和全连接等关键层级^[18].其中,卷积层作为 CNN 的核心组件,通过特定的数学运算从输入数据中捕获空间结构信息.具体而言,卷积核在输入数据上移动,对感受野内的数据执行点积运算并加入偏差,从而生成特征图.这一过程可用式(1)表示.池化层位于卷积层之后,用于对特征图进行降维,有效减少网络参数量和计算复杂度.网络末端的全连接层则将前述提取的特征进行展平和非线性转换,最终输出分类结果.

$$y_i = f\left(\sum_{j=1}^D X_{i+j} \otimes W_j + b\right) \quad (1)$$

式中: y_i 为输出特征图中位置 i 的值; f 为激活函数,用于卷积运算后进行非线性变换; D 为卷积核的大小; X_{i+j} 为输入序列中从位置 i 开始的一个局部窗口; j 为卷积核内的位置索引; W_j 为卷积核中位置 j 的值; b 为偏置.

本研究构建的 CNN 模块结构如图 4 所示.该模块采用了双层一维卷积架构,通过多层卷积和池化操作,能够有效捕获数据中的短程空间依赖关系和局部特征,为后续的时序建模提供丰富的特征表示.模块的工作流程如下:首先,通过第一卷积层对输入数据进行初步特征提取.使用修正线性单元(ReLU)激活函数引入非线性变换,增强模型的表达能力.随后,第二卷积层对初级特征进行进一步提取,捕获更复杂的数据模式.再次应用 ReLU 函数,强化特征的

非线性表示.这种双层卷积结构显著扩大了模块的感受野,有助于从输入数据中提取更丰富、更具代表性的特征.为了优化特征表示并增强模型的泛化能力,本模块还包含了最大池化层(Max-Pooling)和批量归一化(BN)层等关键组件.最大池化层用于降低特征维度,同时保留最显著的特征信息,提高计算效率和模型的空间不变性.而BN层用于特征标准化处理,这有助于加快训练速度并缓解梯度消失等深度学习中的常见问题^[19].

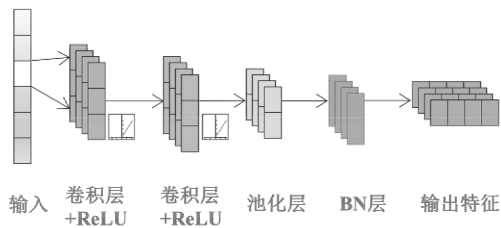


图4 CNN 特征提取模块结构
Fig.4 CNN block structure diagram

2.2 Transformer 模块

虽然 CNN 在提取数据局部特征方面表现出色,但在处理具有长时间依赖关系的柴油车实际道路运行数据时,其效果往往不尽如人意.相比之下,Transformer 作为当代机器学习领域最强大的模型之一,凭借其独特的结构设计,能够有效捕捉数据中的长程依赖关系,从而获得更深入的特征表示^[20].因此,本研究引入 Transformer 编码器模块,使得模型可以兼顾全局特征和各数据维度的局部特征,显著增强模型对长距离依赖关系的感知能力,从而有效提升 NH₃ 排放预测的准确性.

本研究采用的 Transformer 编码器层主要由两个核心组件构成:多头自注意力机制(MSA)和前馈神经网络(FNN).此外,为了优化模型训练过程和提高泛化能力,引入了层归一化(LN)和 Dropout 机制.整体结构如图 5 所示.

自注意力机制是 Transformer 网络的核心创新,其设计灵感来源于人类选择性关注信息的认知过程.这一机制使得模型能够自适应地将计算资源分配到输入序列中最关键的部分,从而提高信息提取的效率和质量,进而改善模型的整体性能.自注意力机制的计算过程可以概括为以下步骤:(1)输入转换:将输入序列 X 通过三个不同的线性变换,分别生成

查询(Q)、键(K)和值(V)向量.这一过程可表示为式(2);(2)注意力分数计算:通过 Q 与 K 的点积运算,计算注意力分数,并进行缩放以稳定梯度;(3)权重分配:使用 softmax 函数将注意力分数转换为概率分布,作为各个值向量的权重;(4)加权求和:将权重与 V 进行点乘,得到最终的注意力输出.这一过程可以用式(3)概括.

$$\begin{cases} Q = XW_Q \\ K = XW_K \\ V = XW_V \end{cases} \quad (2)$$

$$\text{Attention}(Q, K, V) = \text{softmax}\left(\frac{QK^T}{\sqrt{d_k}}\right)V \quad (3)$$

式中: W_Q 、 W_K 和 W_V 分别是对应的权重矩阵; d_k 是键向量的维度.

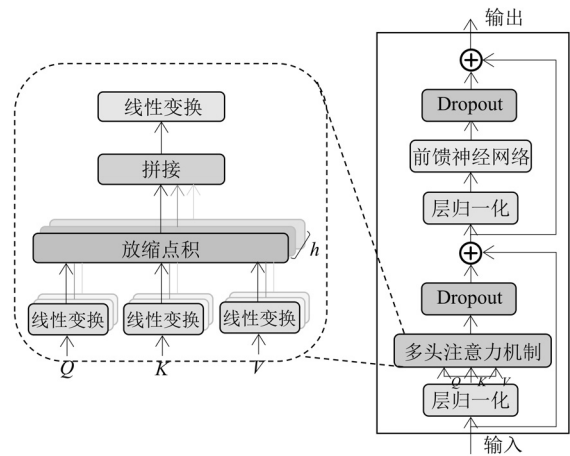


图5 Transformer 编码器结构图
Fig.5 Transformer block structure diagram

Transformer 进一步将自注意力机制扩展为多头注意力机制.通过将 Q 、 K 和 V 向量分别映射到多个子空间,并在每个子空间独立计算注意力,最后将结果拼接并线性变换,使得模型能够同时关注输入序列的不同特征和位置.多头注意力的计算可表示为:

$$\text{MultiHead}(Q, K, V) = \text{Concat}(\text{head}_1, \dots, \text{head}_N)W^O \quad (4)$$

$$\text{head}_i = \text{Attention}(QW_i^Q, KW_i^K, VW_i^V) \quad (5)$$

式中: head_i 表示第 i 个头的自注意力分布; W_i^Q 、 W_i^K 和 W_i^V 表示第 i 个头的线性投影参数矩阵; W^O 表示输出投影的参数矩阵.

最后,通过一个线性层将 Transformer 编码器的高维特征表示映射到 NH₃ 排放预测值.这一输出层采用线性变换实现,其数学表达式如下:

$$y = W \cdot x + b \quad (6)$$

式中： W 表示权重矩阵； b 为偏置向量； x 为 Transformer 编码器的输出向量； y 为最终预测的 NH_3 排放值。

所提融合框架将 CNN 的局部特征提取和 Transformer 的全局依赖建模相互补充，实现了从局部到全局的多尺度特征提取，能够更全面地描述和预测复杂的 NH_3 排放。

3 基于 CNN-Transformer 融合框架的 NH_3 浓度预测方案

3.1 数据集介绍

本研究的模型构建基于对测试车辆进行的多 次实际道路排放试验数据。为有效捕捉车辆运行工 况及排放特征，同时平衡数据采集量和设备性能，研究采用 1Hz 的采样率，共收集了 23705 组样本。这些数据全面涵盖了重型车辆在各种典型环境及工况 下的性能表现，具体包括：(1)动态工况：涵盖加速、减 速、匀速和怠速等不同行驶状态；(2)道路环境：包括 市区路、市郊路和高速路等多种路况；(3)环境温度： 覆盖低温($<0^\circ\text{C}$)、常温($0\sim 25^\circ\text{C}$)和高温($>25^\circ\text{C}$)等不 同气候条件。

本研究采用分层随机抽样方法，按照 6:2:2 的比 例将数据集划分为训练数据集、验证数据集和测试 数据集，以确保模型训练的有效性和评估结果的可靠 性。

3.2 模型构建过程

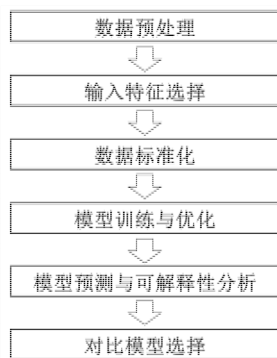


图 6 模型构建过程

Fig.6 The main process of model building

图 6 展示了模型构建的主要流程。首先，对原始 数据进行预处理，包括缺失值和异常值处理。随后，通 过特征选择确定对 NH_3 排放预测最为关键的输入

变量。为确保模型训练的稳定性和收敛性，对选定的 输入特征进行标准化处理。经过上述预处理步骤的 数据随即输入到本研究提出的 CNN-Transformer 融 合框架中进行模型训练和参数优化。为了增强模型 的可解释性，采用 SHAP 算法对模型的预测结果进 行了深入分析，以揭示不同特征对 NH_3 排放的贡献 程度。最后，为了验证所提出方法的有效性和性能优 势，选择了多个在时间序列预测领域广泛应用的基 准模型进行了对比分析。

3.3 数据预处理方法

数据预处理是确保模型性能的关键步骤，本研 究主要进行了异常值检测与处理。采用箱线图法进 行异常值检测^[21]，将小于 $Q1-1.5 \times IQR$ 或大于 $Q3+ 1.5 \times IQR$ 的数据定义为潜在异常值，如图 7 所示。其 中， $Q1$ 、 $Q3$ 分别为数据的第 25%和第 75%分位值， IQR 为四分位距($Q3-Q1$)。对于检测到的潜在异常值， 结合专业知识进行进一步的验证。考虑到试验数据 量有限，将确认的异常值视为缺失值处理，以避免直 接删除可能导致的信息损失。采用 K 近邻(KNN)插 补法填补缺失值，以最大限度地保留数据信息。KNN 方法通过在缺失值附近寻找若干最相似的历史数 据来估算并填补缺失值，能够在保持数据分布特征 的同时，有效处理多变量数据集中的缺失值问题^[22]。 具体的 KNN 插补步骤如下：(1)对于每个包含缺失值 的样本，根据欧氏距离等度量方法选择距离缺失样 本最近的 K 个样本(本研究中 $K=5$)；(2)使用这 K 个 样本数据的加权平均值来填补缺失值，权重与样本间 距离成反比。

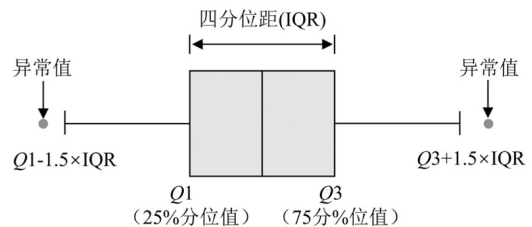


图 7 箱线图示意

Fig.7 Schematic of box plot method

3.4 特征选择与优化

基于前文实际道路 NH_3 排放特征分析和现有 研究^[23,8]对 NH_3 排放影响因素的深入探讨，本研究初 步选择了 13 个潜在特征用于回归建模。这些特征涵

盖了车辆运行状态、发动机参数和后处理系统性能等多个方面,包括:车速、发动机转速、发动机指示扭矩、摩擦扭矩、进气量、燃料流量、排气流量、冷却液温度、SCR 入口排气温度、SCR 出口排气温度、SCR 上游 NO_x 浓度、SCR 下游 NO_x 浓度和 NH₃ 浓度。

为分析特征间的相互关系,以进一步优化模型输入,对选定的特征进行了皮尔逊(Pearson)相关性分析,计算公式如下:

$$\rho = \frac{E[(X_1 - \mu_{X_1})(X_2 - \mu_{X_2})]}{\sigma_{X_1} \sigma_{X_2}} \quad (7)$$

式中: X₁ 与 X₂ 分别表示两个特征数据; μ_{X₁} 与 μ_{X₂} 为特征 X₁ 与 X₂ 的平均值; σ_{X₁} 与 σ_{X₂} 为特征 X₁ 与 X₂ 的方差; E 为数学期望计算。

图 8 展示了不同特征间的相关性矩阵.由图可以看出,进气量、燃料流量和排气流量之间存在高度相关性.同时,SCR 入口排气温度和 SCR 出口排气温度也表现出较强的线性关系.因此,在特征工程中删除了 SCR 出口排气温度、进气量和燃料流量,以减少特征可能提供的冗余信息,降低模型复杂度。

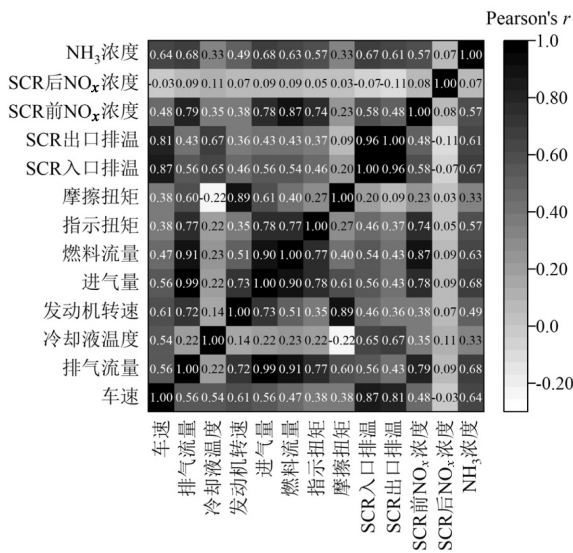


图 8 各参数间相关性

Fig.8 Correlation between parameters

3.5 数据标准化与时序样本生成

为降低输入特征间量纲差异对模型性能的影响,并加快网络权重参数的收敛,本研究采用 Z-score 标准化方法对训练集输入特征数据进行预处理.这种方法将每个特征转换为均值为 0、标准差为 1 的

标准正态分布数据,既保持了原始数据的分布特征,又使不同量纲的特征具有可比性.标准化处理的数学表达式如下:

$$x_{norm,i} = \frac{x_i - \bar{x}}{\sigma} \quad (8)$$

式中: x_{norm,i} 为标准化后的第 i 个数据; x_i 为原始的第 i 个数据; \bar{x} 为特征数据的平均值; σ 为特征数据的标准差.为防止数据泄露并确保模型泛化能力的准确评估,使用训练集得到的标准化参数对测试集进行相同的标准化处理。

考虑到 NH₃ 排放具有明显的时序依赖特性,研究采用滑动窗口技术生成时序样本,以充分利用数据的时序信息,提高模型的预测精度.其中,滑动窗口的大小选择为 10,步长为 1.样本生成过程可以表示为:

$$X_i = [x_{i-9}, x_{i-8}, \dots, x_{i-1}, x_i] \quad (9)$$

$$y_i = y_i$$

式中: X_i 是第 i 个的输入特征向量(包含前 9 个时间步和当前时间步的所有特征); y_i 为第 i 个 NH₃ 浓度值。

3.6 模型训练与评估

3.6.1 模型训练 模型训练采用交叉熵损失作为损失函数,并利用 AdamW 优化器更新模型的可学习参数^[24].AdamW 优化器结合了 Adam 优化器和权重衰减,不仅具有自适应学习率的优势,还能通过权重衰减有效防止过拟合.采用带热重启的余弦退火策略(Cosine annealing)对学习率进行调整^[25],以确保训练过程中的平稳收敛和性能提升.余弦退火策略按照式(10)调整学习率,学习率调整结果如图 9 所示.

$$\eta_t = \eta_{min} + 0.5(\eta_{max} - \eta_{min}) \cdot (1 + \cos(\pi \cdot \frac{t}{T})) \quad (10)$$

式中: η_t 为当前步骤的学习率; η_{min} 为设定的最小学习率; η_{max} 为设定的最大学习率; t 为当前训练步骤; T 为总训练步骤。

此外,在训练过程中引入了早停策略,并采用了 L2 正则化和丢弃率(Dropout)技术,以控制模型复杂度并增强模型的泛化能力。

3.6.2 模型优化与性能评估 在模型构建过程中,优化算法超参数是确保模型性能优越的关键步骤.本研究采用了贝叶斯优化算法^[26]结合 K 折交叉验证^[27]的方法来调整模型超参数,以获得最佳预测性能.表 1 详细列出了 CNN-Transformer 模型关键超参

数的优化结果。

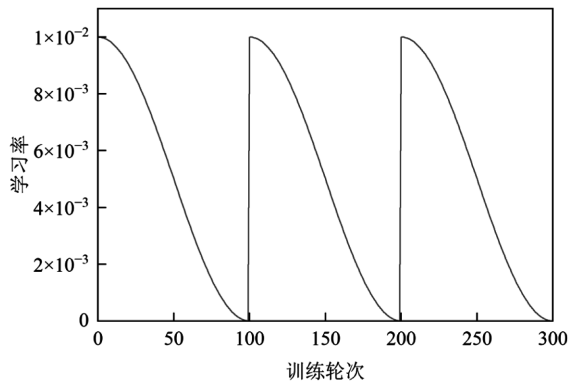


图9 余弦退火学习率调整示意

Fig. 9 Schematic diagram of cosine annealing learning rate

表1 模型关键超参数优化结果

Table 1 Optimization results of main hyperparameters

超参数	设置
Conv1 卷积核大小(Kernel Size)	3
Conv2 卷积核大小(Kernel Size)	5
Transformer 编码层数	2
Transformer 注意力头数	6
FNN 隐藏层维度	102
初始学习率	0.01
批量大小	32
Dropout 率	0.3
L2 正则化参数	1×10^{-4}

为全面评估模型的预测性能,本研究采用 3 个互补的评估指标:决定系数(R^2)、平均绝对误差(MAE)和均方误差(MSE).其中, R^2 反映模型预测结果与实际测量值的整体吻合程度, R^2 越接近 1,则自变量对因变量的解释能力越强.MAE 用于衡量模型预测的平均偏离程度,其对异常值不敏感,可以提供稳健的误差估计.MSE 通过计算预测误差的平方平均值量化预测值与真实值间的偏差.相比 MAE,MSE 更能识别显著偏差.MAE 与 MSE 越小,则表明模型的预测准确性越高.综合使用这 3 个指标可以从不同角度评估模型性能,既考虑整体拟合程度,又关注误差的大小和分布特征.这些评价指标的具体计算方法分别见式(11)~(13).

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - y_i)^2}{\sum_{i=1}^n (\bar{y}_i - y_i)^2} \quad (11)$$

$$MSE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - y_i)^2 \quad (12)$$

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_i - \hat{y}| \quad (13)$$

式中: \hat{y}_i 为 NH_3 排放第 i 个预测值, 10^{-6} ; y_i 为 NH_3 排放第 i 个实际测量值, 10^{-6} ; \bar{y}_i 为全部 NH_3 排放测量值的平均值, 10^{-6} ; n 为 NH_3 排放测量值的数量.

3.7 模型可解释性分析

为深入理解各特征对 NH_3 排放预测的影响,本研究利用 SHAP 算法对模型进行了可解释性分析,为揭示模型决策的内在机制和制定有效的排放控制策略提供了有益参考.对于给定的预测实例,SHAP 算法衡量了在所有可能的特征组合中,引入某个特征对模型输出的平均影响^[28].SHAP 值的大小反映了特征对模型决策的重要程度.这种方法不仅考虑了特征的独立作用,还捕捉了特征间的交互效应,从而提供了全面而准确的解释.

3.8 对比模型选择

为验证所提出的 CNN-Transformer 融合框架在柴油车实际道路 NH_3 排放预测中的优势,本研究选择了时序数据预测领域常用的 LSTM 和 RF 模型进行对比实验.同时,为评估 CNN 模块在所提模型中的作用,还进行了使用单独 Transformer 模型的消融实验.在确保所有模型超参数均已优化的基础上进行了对比实验和消融实验.此外,所有模型使用训练数据集和测试数据集相同,并通过前文提及的 3 个评价指标对各模型的性能进行定量评估.

4 结果和分析

4.1 模型预测结果分析

图 10 展示了优化后的 CNN-Transformer 融合框架在独立测试数据集上的预测性能.如图 10(a)所示,绝大多数数据点紧密围绕着理想拟合线 $y=x$ 分布,这表明模型预测值与 QCL-IR 仪器的测量值之间存在极高的线性相关性,其决定系数 R^2 高达 0.986.图 10(b)展示了部分模型预测值与 QCL-IR 仪器测量值的时间序列对比,两条曲线的高度重合进一步验证了 CNN-Transformer 融合模型在重型车辆 NH_3 排放预测方面的优异性能.

4.2 不同模型对比实验分析

为了深入评估各模型的预测效果,选取了具有代表性的时段进行重点分析,结果如图 11 所示.分析表明,RF 模型在预测测试车辆实际道路行驶 NH_3 排

放时表现欠佳,预测值与实际值存在明显偏差. LSTM 模型相较于 RF 模型有所改善,预测曲线整体趋近于真实值,但在低浓度排放数据上仍存在一定误差.

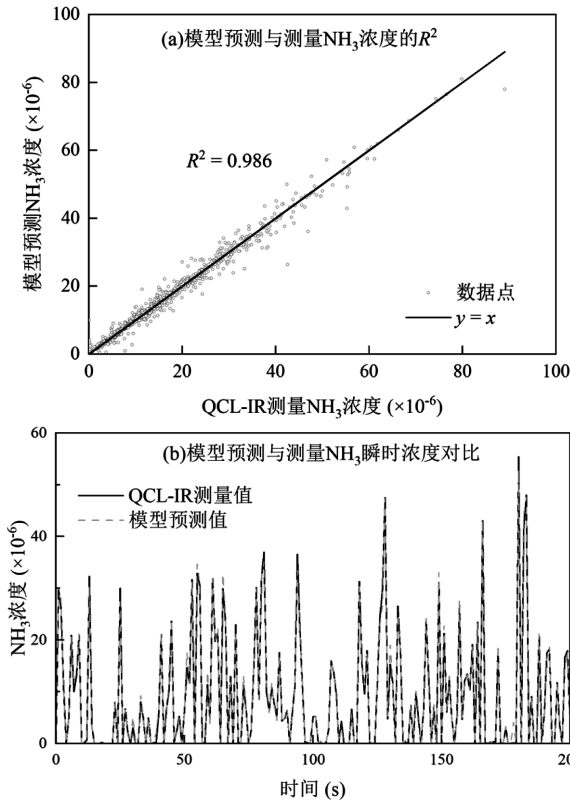


图 10 CNN-Transformer 融合模型预测结果分析
Fig.10 Results of CNN-Transformer fusion model for predicting NH₃ emissions

特别值得注意的是,NH₃ 浓度预测误差主要出现在大多数的波峰和波谷等特殊工况区域.在这些区域,所提出的 CNN-Transformer 融合相比于消融模型 Transformer 表现最为出色,能更准确地捕捉 NH₃ 排放的动态特征.这主要得益于 CNN 对输入数据局部特征的有效提取,有效降低了由于柴油车辆运行条件的急剧变化所引起的预测偏差.

为了量化评估各模型在测试集上的预测效果,采用前文选择的 3 个评估指标进行比较,结果如图 12 所示.由图可以看出,所提出的 CNN-Transformer 融合模型在测试集上的表现优异,其 NH₃ 浓度预测值与真实值的 R²、MAE 和 MSE 分别为 0.986、0.663 和 2.285.与 RF、LSTM 和 Transformer 模型相比,所提模型预测结果的 R² 分别提高了 8.30%、4.49%和 2.55%;MAE 分别降低了 70.50%、60.99%和 56.47%;

MSE 分别降低了 84.64%、75.54%和 64.15%.这充分表明,相比于传统的 Transformer、LSTM 和 RF 模型,所提出的 CNN-Transformer 融合模型能更有效地预测柴油车实际道路行驶中的 NH₃ 排放,预测精度显著提升.

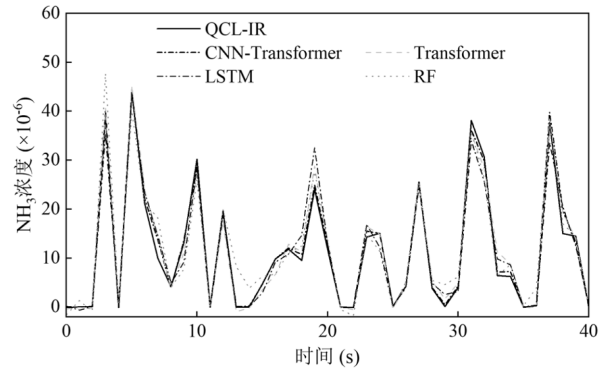


图 11 各模型 NH₃ 排放预测对比
Fig.11 Comparison of NH₃ emissions predictions for different models

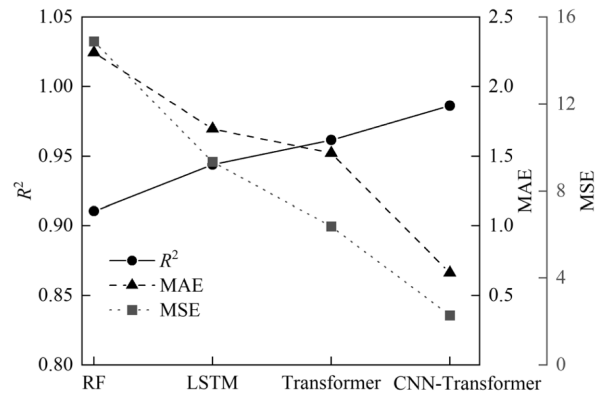


图 12 各模型评价结果对比
Fig.12 Comparison of evaluation results for different models

4.3 模型解释性分析

图 13 为各特征对模型预测结果的贡献度.结果表明,与 SCR 系统相关的特征对 NH₃ 排放预测起着至关重要的作用,特别是 SCR 入口排气温度和 SCR 下游 NO_x 浓度.这一发现与 SCR 系统的工作原理高度契合.SCR 系统通过尿素水溶液热解产生的 NH₃ 来还原尾气中的 NO_x.SCR 反应效率对温度条件极为敏感:过低的温度会导致尿素不完全分解,引发 NH₃ 泄漏;而过高的温度则可能促使 NH₃ 发生二次氧化,生成 NO_x.因此,SCR 入口温度成为控制 NH₃ 排放的决定性因素.同时,SCR 下游 NO_x 浓度作为 SCR 系统还原效率的直接指标,反映了尿素热解产生的

NH_3 利用程度,为 NH_3 排放预测提供了至关重要的信息.这两个参数的高贡献度表明了精确控制 SCR 系统运行条件对减少柴油车实际道路 NH_3 排放的重要性.

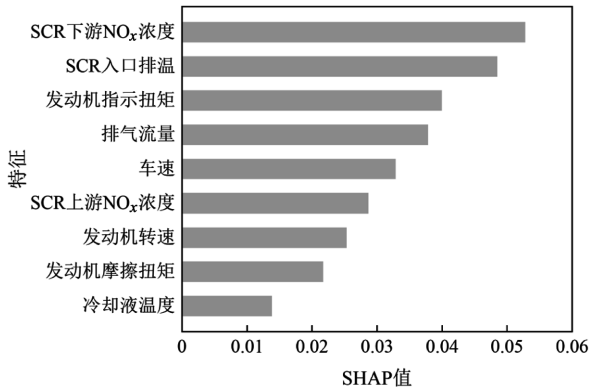


图 13 特征重要性分析

Fig.13 Feature importance analysis

值得注意的是,车速和发动机输出扭矩等动态运行参数的 SHAP 值也相对较高,表明这些因素对准确预测 NH_3 排放同样具有重要影响.这主要是因为这些参数直接决定了发动机负荷和排气动态特性,进而影响 SCR 系统的工作状态和 NH_3 排放模式.这一发现强调了在实际道路工况下,考虑车辆动态运行特性对准确预测和控制 NH_3 排放的必要性.

SHAP 分析结果不仅验证了模型捕捉到了 NH_3 排放机理的关键因素,还为优化 SCR 系统设计和控制策略提供了有力支持.例如,可以基于 SCR 入口温度和下游 NO_x 浓度开发更精细的尿素喷射控制策略,或者结合车速和发动机扭矩信息,设计适应不同工况的智能排放控制系统.

4.4 未来研究方向与挑战

未来研究中将进一步扩大数据样本范围,涵盖不同车型、后处理技术和使用年限的车辆,跨车辆的模型性能评估,以增强模型的普适性和泛化能力.同时,关注评估模型在长期使用过程中的性能变化.通过进行长期跟踪试验,评估模型在车辆老化、SCR 系统性能退化等情况下的预测能力,并探索模型的自适应更新机制.

5 结论

5.1 所提出的 CNN-Transformer 融合框架通过结合多层 CNN 和 Transformer 编码器,并结合贝叶斯算

法和 K 折交叉验证进行超参数精细调优,实现了对柴油车实际道路行驶 NH_3 排放的高精度预测.在测试集上,该模型预测的 NH_3 浓度与实际测量值表现出了良好的一致性, R^2 达到 0.986,MAE 和 MSE 分别为 0.663 和 2.285.

5.2 为评估模型性能,在一致的实验条件下构建了多种预测模型,并进行了对比实验与消融试验.结果表明,CNN-Transformer 融合模型在关键评价指标上显著超越了其他模型.与次优的 Transformer 模型相比,所提模型 R^2 提升 2.55%,而 MSE 和 MAE 分别降低 64.15%和 56.47%,这表明所提模型在捕捉 NH_3 排放复杂动态特征方面的显著优势,尤其是在处理时序数据和长期依赖关系方面的能力.

5.3 通过 SHAP 方法的可解释性分析,揭示了影响柴油车实际道路行驶 NH_3 排放的关键因素.结果表明,SCR 入口排气温度和 SCR 下游 NO_x 浓度对 NH_3 排放预测贡献最大,这与 SCR 系统的工作原理一致.同时,车速和发动机输出扭矩等动态运行参数也显示出较高的重要性,表明考虑实际道路工况对准确预测 NH_3 排放的必要性.这些发现为优化 SCR 系统控制策略和减少 NH_3 排放提供了重要依据.

参考文献:

- [1] 中国移动源环境管理年报(2023 年) [J]. 环境保护, 2024,52(2): 48-62.
China mobile source environmental management annual report (2023) [J]. Environmental Protection, 2024,52(2):48-62.
- [2] Anderson N, Strader R, Davidson C. Airborne reduced nitrogen: Ammonia emissions from agriculture and other sources [J]. Environment international, 2003,29(2/3):277-286.
- [3] Zhang H, Ying Q. Source apportionment of airborne particulate matter in Southeast Texas using a source-oriented 3D air quality model [J]. Atmospheric Environment, 2010,44(29):3547-3557.
- [4] Farren, N J., Davison J, Rose R A, et al. Underestimated ammonia emissions from road vehicles [J]. Environmental science & technology, 2020,54(24):15689-15697.
- [5] 陈培林,肖欣欣,王勤耕.基于卫星观测的 2010~2020 年中国高分辨率 NH_3 排放特征 [J]. 中国环境科学, 2023,43(6):2673-2682.
Chen P L, Xiao X X, Wang Q G, et al. High-resolution characteristics of NH_3 emission from 2010 to 2020 in China based on satellite observation [J]. China Environmental Science, 2023,43(6):2673-2682.
- [6] 白晓鑫,吴春玲,刘卫林,等.柴油车尿素溶液品质在线检测方法研究.汽车实用技术, 2024,49(12):89-94.
Bai X X, Wu C L, Liu W L, et al. Research on online detection method for urea solution quality of diesel vehicle [J]. Automobile Applied Technology, 2024,49(12):89-94.

- [7] GB 17691—2018 重型柴油车污染物排放限值及测量方法(中国第六阶段) [S].
GB 17697—2018 Limits and measurement methods for emissions from diesel-fueled heavy-duty vehicles (China VI) [S].
- [8] Suarez-Bertoa R, Mendoza-Villafuerte P, Riccobono F, et al. On-road measurement of NH_3 emissions from gasoline and diesel passenger cars during real world driving conditions [J]. *Atmospheric Environment*, 2017,166:488–497.
- [9] Zhu H, Ma T, Toumasatos Z, et al. On-road NO_x and NH_3 emissions measurements from in-use heavy-duty diesel and natural gas trucks in the South Coast air Basin of California [J]. *Atmospheric Environment*, 2024,316:120179.
- [10] Mendoza-Villafuerte P, Suarez-Bertoa R, Giechaskiel B, et al. NO_x , NH_3 , N_2O and PN real driving emissions from a Euro VI heavy-duty vehicle. Impact of regulatory on-road test conditions on emissions [J]. *Science of the Total Environment*, 2017,609:546–555.
- [11] European Commission. Proposal for a regulation of the European parliament and of the council on type-approval of motor vehicles and of engines and of systems, components and separate technical units intended for such vehicles, with respect to their emissions and battery durability (Euro 7) [EB/OL]. (2022–11–10)[2024–06–04]. <https://eur-lex.europa.eu/legal-content/EN/TXT/?uri=CELEX%3A52022PC0586>.
- [12] Kousoulidou M, Georgios F, Leonidas N, et al. Use of portable emissions measurement system (PEMS) for the development and validation of passenger car emission factors [J]. *Atmospheric Environment*, 2013,64:329–338.
- [13] Thiruvengadam A, Besch M C, Thiruvengadam P, et al. Emission rates of regulated pollutants from current technology heavy-duty diesel and natural gas goods movement vehicles [J]. *Environmental Science & Technology*, 2015,49(8):5236–5244.
- [14] Huang C, Hu Q, Lou S, et al. Ammonia emission measurements for light-duty gasoline vehicles in China and implications for emission modeling [J]. *Environmental Science & Technology*, 2018,52(19):11223–11231.
- [15] Pla B, Piqueras P, Bares P, et al. NO_x sensor cross sensitivity model and simultaneous prediction of NO_x and NH_3 slip from automotive catalytic converters under real driving conditions [J]. *International Journal of Engine Research*, 2021,22(10):3209–3218.
- [16] Wen L, Li X, Gao L, et al. A new convolutional neural network-based data-driven fault diagnosis method [J]. *IEEE Transactions on Industrial Electronics*, 2017,65(7):5990–5998.
- [17] Vaswani A, Shazeer N, Parmar N, et al. Attention is all you need [J]. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 2017:5998–6008.
- [18] 黄茂庭,徐金明.使用 CNN(卷积神经网络)-LSTM(长短期记忆)联合神经网络预测盾构隧道施工引起的地面沉降 [J]. *城市轨道交通研究*, 2024,27(6):166–171.
- Huang M T, Xu J M. Prediction of land subsidence caused by shield tunnel construction with joint CNN-LSTM neural network [J]. *Urban Mass Transit*, 2024,27(6):166–171.
- [19] Thakkar V, Tewary S, Chakraborty C. Batch Normalization in convolutional neural networks—A comparative study with CIFAR-10 data [C]//2018 fifth international conference on emerging applications of information technology (EAIT). IEEE, 2018:1–5.
- [20] Vaswani A, Shazeer N, Parmar N, et al. Attention is all you need [J]. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 2017,30:5998–6008.
- [21] Williamson D F, Parker R A, Kendrick J S. The box plot: a simple visual method to interpret data [J]. *Annals of internal medicine*, 1989, 110(11):916–921.
- [22] 陈婉娇.缺失数据插补方法及其在医学领域的应用研究 [D]. 广州:华南理工大学, 2020.
Chen W J. Research on application of missing data Imputation in medical field [D]. Guang Zhou: South China University of Technology, 2020.
- [23] He L, Li G, Wu X, et al. Characteristics of NO_x and NH_3 emissions from in-use heavy-duty diesel vehicles with various aftertreatment technologies in China [J]. *Journal of Hazardous Materials*, 2024, 465:133073.
- [24] Chen X, Liang C, Huang D, et al. Evolved optimizer for vision [C]//First Conference on Automated Machine Learning (Late-Breaking Workshop). 2022.
- [25] Loshchilov I, Hutter F. SGDR: Stochastic gradient descent with warm restarts [J]. 2016. DOI:10.48550/arXiv.1608.03983.
- [26] 白晓鑫,吴春玲,景晓军,等.基于 RLS 和 BO 算法的重型车载重估算研究 [J]. *汽车实用技术*, 2023,48(5):56–63.
Bai X X, Wu C L, Jing X J, et al. Research on heavy-duty vehicle mass estimation based on recursive least square and bayesian optimization algorithm [J]. *Automobile Applied Technology*, 2023, 48(5):56–63.
- [27] Jung Y. Multiple predicting K-fold cross-validation for model selection [J]. *Journal of nonparametric statistics*, 2018,30(1):197–215.
- [28] Marçílio W E, Eler D M. From explanations to feature selection: assessing SHAP values as feature selection mechanism [C]//2020 33rd SIBGRAPI conference on Graphics, Patterns and Images (SIBGRAPI). IEEE, 2020:340–347.

作者简介: 白晓鑫(1993-),男,山西阳泉人,工程师,硕士,主要从事重型发动机及整车排放控制研究,发表论文 10 余篇.baixiaoxin@catarc.ac.cn.