

中国科学技术大学

工程硕士学位论文



机动车高时空分辨率 CO₂ 排放清单 的构建方法研究

作者姓名： 马明珅

类别领域： 计算机技术

校内导师： 赵云波 教授

实践导师： 王燕军 正高级工程师

完成时间： 二〇二六年五月十七日

University of Science and Technology of China

A dissertation for master's degree



**Research on Methods for
Constructing a High
Spatiotemporal Resolution
Vehicular CO₂ Emission
Inventory**

Author: Mingshen Ma

Speciality: Computer Technology

Supervisor: Prof. Yunbo Zhao

Practice supervisor: Senior Engineer Yanjun Wang

Completion date: May 17, 2026

中国科学技术大学学位论文原创性声明

本人声明所呈交的学位论文，是本人在导师指导下进行研究工作所取得的成果。除已特别加以标注和致谢的地方外，论文中不包含任何他人已经发表或撰写过的研究成果。与我一同工作的同志对本研究所做的贡献均已在论文中作了明确的说明。

作者签名： 马明坤

签字日期： 2026年5月25日

中国科学技术大学学位论文授权使用声明

作为申请学位的条件之一，学位论文著作权拥有者授权中国科学技术大学拥有学位论文的部分使用权，即：学校有权按有关规定向国家有关部门或机构送交论文的复印件和电子版，允许论文被查阅和借阅，可以将学位论文编入《中国学位论文全文数据库》等有关数据库进行检索，可以采用影印、缩印或扫描等复制手段保存、汇编学位论文。本人提交的电子文档的内容和纸质论文的内容相一致。

控阅的学位论文在解除后也遵守此规定。

☒公开 ☐控阅（ 年）

作者签名： 马明坤

导师签名： 袁波

签字日期： 2026年5月25日

签字日期： 2026年5月25日

摘要

机动车尾气排放是城市移动源 CO₂ 排放的重要组成，精准刻画其时空分布特征，是实现城市交通碳减排精准管控、推动“双碳”目标落地实施的重要前提。高时空分辨率的机动车 CO₂ 排放清单，既是交通碳排放精细化核算的重要基础，也是减排政策实施效果量化评估的关键支撑，更可为城市大气污染物与温室气体协同管控、碳减排政策优化制定提供数据驱动的核心依据。然而，路段级、小时级高分辨率排放清单的编制，仍面临两大核心技术瓶颈：一是真实行驶工况下的 CO₂ 排放因子难以精准获取，现有方法难以有效捕捉多维影响特征间的高阶交互关系，排放因子预测精度仍有待提升；二是城市大规模异质路网的全路段交通速度难以实现高精度预测，现有方法普遍忽略道路层级的固有差异，难以兼顾路网异质性与全局交通流的时空依赖关系，无法为全网精细化碳排放核算提供可靠支撑。

在此背景下，本文针对上述两大核心瓶颈，分别提出了相应的预测方法，并将二者与排放清单编制框架进行系统耦合，形成了机动车高时空分辨率 CO₂ 排放清单的新型构建方法体系；在此基础上，以济南市为典型案例开展工程验证与多尺度时空特征分析。主要研究工作如下：

（1）针对实际行驶工况下，CO₂ 排放因子预测存在多维特征交互复杂、传统集成模型动态工况适应性不足等问题，本文提出一种基于深度特征交互与集成学习的预测方法。该方法通过堆叠 Transformer 搭建注意力增强特征交互模块，挖掘多维度行驶特征的非线性关联；结合 XGBoost 与 CatBoost 异构树模型构建并行预测分支；设计工况感知自适应融合网络实现权重动态分配，突破传统集成模型固定权重的适配局限。基于 5 辆国六轻型汽油车实际行驶排放测试的数据开展实验验证，结果表明本方法的核心评价指标均优于现有基线方法。

（2）针对时空图神经网络处理大规模异质路网时，普遍忽略道路层级固有差异、难以有效捕捉全局交通流时空相关性的核心痛点，本文提出一种面向大规模异质路网的层级感知交通速度预测方法。该方法通过道路层级嵌入模块实现路网异质性特征的精准表征，结合部分层级全局上下文模块阻断低信噪比路段的噪声传播，并进一步构建动态跨等级注意力模块显式建模不同等级道路间的交通流传播规律，同时引入时空适配策略兼顾长周期规律捕捉与节点分布差异适配。基于济南市全域路网 41099 个路段节点的数据集开展实验验证，结果表明本方法的核心评价指标均优于现有基线方法，尤其在快速路、高速公路等高等级道路上的精度提升效果更为显著。

(3) 基于上述两种方法的研究成果, 本文以济南市为典型案例完成了机动车高时空分辨率 CO_2 排放清单的编制, 并开展多尺度时空特征分析。基于宏观交通流模型将预测得到的路段平均速度转换为交通流量, 结合卡口监测数据校准, 修正凌晨时段流量的系统性高估偏差; 耦合本地四类典型车型的车队结构与对应排放因子, 采用自下而上方法逐路段、逐时段核算排放量, 编成全路网路段级、小时级高分辨率排放清单。基于该清单, 从行政区、路段、 $1\text{ km}\times 1\text{ km}$ 网格三个空间尺度开展系统分析, 揭示了机动车碳排放“工作日双峰、周末单峰”的时间规律, 以及高排放区沿城市主干道与过境高速集聚的空间格局; 同时通过与近年城市机动车排放清单的对比, 从方法范式、时空分布特征与车型贡献结构三个维度论证了本文清单结果的合理性。

关键词: 排放清单; 排放因子; 时空图神经网络; 集成学习

ABSTRACT

Motor vehicle exhaust emissions contribute greatly to CO₂ emissions from urban mobile sources. Accurately characterizing their spatiotemporal distribution is an important prerequisite for refined urban transportation carbon reduction management and for advancing the “dual carbon” goals. A high-spatiotemporal-resolution motor vehicle CO₂ emission inventory serves as a critical foundation for fine-grained transportation carbon accounting, a key support for quantitative evaluation of emission reduction policy effectiveness, and a core data-driven basis for coordinated control of urban air pollutants and greenhouse gases as well as optimization of carbon reduction policies. However, the compilation of link-level, hourly high-resolution emission inventories still faces two fundamental technical bottlenecks. First, CO₂ emission factors under real-world dynamic driving conditions are difficult to obtain accurately, as existing methods struggle to capture high-order interactions among multidimensional influencing features. Second, high-accuracy traffic speed prediction across all links of large-scale heterogeneous urban road networks remains challenging, as existing methods generally overlook inherent road hierarchy differences and fail to account for both network heterogeneity and global spatiotemporal dependencies of traffic flow, thus failing to provide reliable support for network-wide refined carbon emission accounting.

Against this background, this study addresses the two core bottlenecks by developing corresponding prediction methods, and systematically couples them with a emission inventory compilation framework, thereby forming a novel methodology for high-spatiotemporal-resolution motor vehicle CO₂ emission inventories. On this basis, the city of Jinan is taken as a representative case study for engineering validation and multi-scale spatiotemporal characteristic analysis. The main research work is as follows:

(1) To address the complex multidimensional feature interactions and limited adaptability of conventional ensemble models to dynamic driving conditions in CO₂ emission factor prediction under real-world driving conditions, this study proposes a prediction method based on deep feature interaction and ensemble learning. The method employs stacked Transformers to build an attention-enhanced feature interaction module that uncovers nonlinear associations among multidimensional driving features, incorporates XGBoost and CatBoost as heterogeneous tree-based parallel prediction branches, and designs a driving-condition-aware adaptive fusion network for dynamic weight allocation, overcoming the fixed-weight limitation of conventional en-

semble models. Experimental validation on Real Driving Emission test data from five China-VI-compliant light-duty gasoline vehicles shows that the core evaluation metrics of the proposed method outperform those of existing baseline methods.

(2) To address the common neglect of inherent road hierarchy differences and the difficulty in capturing global spatiotemporal correlations of traffic flow when spatiotemporal graph neural networks are applied to large-scale heterogeneous road networks, this study proposes a hierarchy-aware traffic speed prediction method for large-scale heterogeneous road networks. The method achieves precise characterization of network heterogeneity through a road hierarchy embedding module, suppresses noise propagation from low signal-to-noise-ratio segments via a partial hierarchical global context module, and constructs a dynamic cross-level attention module to explicitly model traffic flow propagation patterns across different hierarchy levels. A spatiotemporal adaptation strategy is further introduced to capture long-term periodic patterns while accommodating node-level distribution discrepancies. Experimental validation on a dataset covering Jinan’s full road network of 41,099 link nodes shows that the core evaluation metrics of the proposed method outperform those of existing baseline methods, with particularly notable accuracy gains on high-hierarchy roads such as expressways and freeways.

(3) Building on the research results of the two core methods and taking Jinan as a representative case study, this study compiles a high-spatiotemporal-resolution motor vehicle CO₂ emission inventory and conducts multi-scale spatiotemporal characteristic analysis. Predicted link-level average speeds are converted to traffic volumes using a macroscopic traffic flow model, with checkpoint monitoring data incorporated to correct the systematic overestimation during early morning hours. The fleet composition of four typical local vehicle categories and their corresponding emission factors are coupled, and a bottom-up approach computes emissions on a link-by-link, hour-by-hour basis, yielding a network-wide, link-level, hourly high-resolution inventory. Based on this inventory, systematic analysis at three spatial scales, namely administrative district, road link, and 1 km × 1 km grid, reveals the temporal pattern of motor vehicle carbon emissions characterized by weekday bimodal and weekend unimodal profiles, together with spatial concentration of high-emission zones along urban arterial roads and transit freeway corridors. Furthermore, comparison with published inventories validates the results in methodology, spatiotemporal patterns, and vehicle-type contribution.

KEY WORDS: Emission Inventory, Emission Factor, Spatio-temporal graph neural network, Ensemble learning

目录

第 1 章 绪论	1
1.1 研究背景与意义	1
1.2 国内外研究现状	3
1.2.1 CO ₂ 排放因子预测方法研究	3
1.2.2 交通速度时空预测方法研究	5
1.2.3 机动车排放清单编制方法研究	7
1.3 本文主要工作	8
1.4 本文组织结构	9
第 2 章 相关理论与方法基础	11
2.1 梯度提升树算法	11
2.1.1 梯度提升框架	11
2.1.2 极限梯度提升算法	12
2.1.3 类别提升算法	12
2.2 时空图神经网络	13
2.2.1 图卷积神经网络	13
2.2.2 时域卷积网络	15
2.3 注意力机制	16
2.3.1 缩放点积注意力	17
2.3.2 多头注意力	17
2.4 排放核算框架与交通流理论	18
2.4.1 自下而上的排放核算框架	18
2.4.2 基于 VSP 的微观排放因子计算方法	19
2.4.3 Van Aerde 宏观交通流模型	20
2.5 数据集介绍	21
2.5.1 济南市路网监控卡口数据	21
2.5.2 济南市路网浮动车数据	22
2.5.3 济南市路网地图数据	22
2.6 本章小结	22
第 3 章 基于深度特征交互与集成学习的 CO₂ 排放因子预测与分析	24
3.1 数据采集与处理	24
3.1.1 数据采集	24

3.1.2	数据处理	26
3.1.3	特征确定	27
3.2	基于深度特征交互与集成学习的 CO ₂ 排放因子预测方法	28
3.2.1	注意力增强特征交互模块	29
3.2.2	异构预测与工况感知自适应融合模块	30
3.2.3	模型训练策略	31
3.3	实验结果与分析	32
3.3.1	数据集描述	32
3.3.2	实验设置与评价指标	34
3.3.3	整体预测性能评价	34
3.3.4	模型消融实验	35
3.3.5	预测值与真实值对比	36
3.4	模型可解释性与机制分析	37
3.4.1	基于 SHAP 的特征物理驱动机制分析	37
3.4.2	自适应融合网络的动态调度分析	39
3.5	本章小结	40
第 4 章	面向大规模异质路网的层级感知交通速度预测方法	41
4.1	交通状态预测问题定义与数据预处理	41
4.1.1	交通状态预测问题的形式化定义	41
4.1.2	城市路网拓扑构建与简化	41
4.1.3	跨模态特征融合与时空张量生成	43
4.2	融合层级感知与节点自适应的时空图预测方法	44
4.2.1	局部时空特征提取层	46
4.2.2	道路层级嵌入模块	47
4.2.3	部分层级全局上下文模块	48
4.2.4	动态跨等级注意力模块	50
4.2.5	时间上下文门控模块	52
4.2.6	节点感知归一化	52
4.2.7	计算复杂度分析	53
4.3	实验结果与分析	54
4.3.1	实验设置与评价指标	54
4.3.2	整体预测性能评价	55
4.3.3	模型消融实验与道路层级性能分析	57
4.4	本章小结	59

第 5 章 排放清单编制与多尺度时空特征分析	60
5.1 排放清单核心数据生成	60
5.1.1 交通流量推演与修正	60
5.1.2 基于速度区间的 CO ₂ 排放因子生成	62
5.2 排放量核算与清单编制	63
5.2.1 车队结构与排放因子	63
5.2.2 CO ₂ 排放量计算方法	64
5.2.3 CO ₂ 排放清单编制结果	64
5.3 机动车 CO ₂ 排放清单可视化	65
5.3.1 城市行政区排放清单可视化	65
5.3.2 城市路段排放清单可视化	66
5.3.3 城市网格排放清单可视化	67
5.4 排放清单合理性对比分析	68
5.5 本章小结	70
第 6 章 总结与展望	71
6.1 本文工作总结	71
6.2 未来工作展望	72
参考文献	73
致谢	78
在读期间取得的科研成果	79

插图和附表清单

图 2.1	梯度提升框架迭代过程	12
图 2.2	单层 GCN 邻域聚合过程	13
图 2.3	双向扩散卷积过程	14
图 2.4	因果卷积与空洞卷积感受野示意图	16
图 2.5	GLU 门控时域卷积模块	16
图 2.6	缩放点积注意力流程	17
图 2.7	多头注意力结构	18
图 2.8	路网监控卡口	21
图 3.1	RDE 测试实验装置图	24
图 3.2	RDE 测试路线图	26
图 3.3	注意力增强特征交互深度集成学习方法框架图	29
图 3.4	预测值与真实值曲线对比图	36
图 3.5	预测值与真实值散点对比图	37
图 3.6	基于 CatBoost 的 SHAP 特征重要性排序	38
图 3.7	各特征对 CO ₂ 排放预测影响的 SHAP 蜂群图	38
图 3.8	自适应融合权重分布 (均值 $\pm$ 标准差)	39
图 4.1	层级感知与节点自适应的时空图卷积网络结构图	45
图 4.2	门控扩张卷积与自适应扩散图卷积模块	46
图 4.3	道路层级嵌入模块	48
图 4.4	常规全局建模与部分层级全局上下文机制对比	49
图 4.5	动态跨等级注意力模块图	50
图 5.1	工作日与周末 24 小时车流量占比分布	62
图 5.2	济南市工作日与周末小时尺度 CO ₂ 排放分布	65
图 5.3	济南市行政区——车型 CO ₂ 排放分布图	66
图 5.4	济南市行政区——小时 CO ₂ 排放分布图	66
图 5.5	济南市路段 CO ₂ 小时排放分布图	67
图 5.6	济南市网格 CO ₂ 小时排放分布图	68
表 2.1	VSP 区间与操作模式划分	20
表 2.2	济南市路网监控卡口数据样本	21
表 2.3	济南市路网浮动车数据样本	22
表 2.4	济南市路网地图属性数据样本	22

表 3.1	测试车辆参数信息	25
表 3.2	排放因子预测模型输入特征集	27
表 3.3	AFIDE 方法各模块超参数配置	32
表 3.4	数据集特征变量描述性统计	33
表 3.5	各方法的预测性能对比	35
表 3.6	AFIDE 消融实验结果	35
表 4.1	输入特征维度汇总	44
表 4.2	大规模节点场景下的计算复杂度对比	53
表 4.3	各模型在不同预测步长下的整体预测性能对比	56
表 4.4	HiNA-STGCN 消融实验结果	57
表 4.5	常规 HGC 与 Partial HGC 性能对比	58
表 4.6	分道路层级的预测 MAE 对比	58
表 5.1	各等级道路 Van Aerde 模型标定参数	61
表 5.2	基于速度区间的轻型汽油车 CO ₂ 排放因子	63
表 5.3	济南市四类机动车保有量及车队结构	64
表 5.4	济南市各车型 CO ₂ 日均排放量	65
表 5.5	本章清单与代表性城市机动车排放清单对比	69

第 1 章 绪论

1.1 研究背景与意义

近年来,随着我国城镇化进程不断推进与社会经济高速发展,机动车保有量呈持续高速增长态势。生态环境部发布的《中国移动源环境管理年报(2025)》^[1]显示,截至 2024 年底,我国机动车保有量已达 4.53 亿辆,其中汽车保有量 3.53 亿辆,同比增长 5.1%;全国汽车保有量超百万辆的城市已达 96 个,机动车出行需求持续攀升,进一步加剧了城市路网的运行压力。持续增长的机动车保有量,在保障居民出行便利、支撑城市经济和社会高效运转的同时,也给城市大气污染协同防控与温室气体减排带来了更大的挑战。

交通运输业作为国民经济发展的的重要支柱与基础流通脉络,其碳排放已成为全球性环境挑战。我国拥有全球规模最大的陆路交通体系,客货周转量居全球首位,交通领域碳排放量位居全球第二^[2];该领域是我国第三大碳排放源,碳排放总量占全国总排放量的 12%,其中道路交通作为交通领域碳排放的主要贡献源,占比超 80%,是交通领域碳减排工作的核心攻坚对象^[2]。在人口密集的城市建成区内,机动车排放具有流动性强、时空异质性显著的特征,其排放强度与微观行驶工况密切相关:交通拥堵引发的频繁加减速、怠速等瞬态行驶工况,会显著提升机动车单位行驶里程的 CO₂ 排放强度;与此同时,机动车也是城市大气常规污染物的主要贡献源,其排放管控已成为实现大气污染物与温室气体协同治理的关键抓手。因此,科学精准地量化城市机动车 CO₂ 排放的时空分布特征,既是城市多污染物协同防控工作的重要基础,也是我国应对全球气候变化、推动城市交通领域低碳转型的核心前提。

面对交通领域大气污染防治与碳减排的双重迫切需求,我国在“双碳”战略“1+N”政策体系框架下,先后出台一系列国家级专项规划与技术规范,为交通行业绿色低碳转型与排放精准管控提出了明确要求。《国家综合立体交通网规划纲要》^[3]、《绿色交通“十四五”发展规划》^[4]等核心文件均明确提出,要强化交通碳排放监测核算体系建设,持续提升交通环境治理的精细化水平;生态环境部发布的《大气污染物与温室气体融合排放清单编制技术指南(试行)》^[5],进一步推动了常规大气污染物与温室气体排放清单的协同编制与精准管控。与此同时,各省、市地方人民政府同步出台交通领域专项政策,涵盖新能源汽车推广、运输结构优化、低碳出行引导等多个维度,形成了国家统筹、地方落地的全层级政策实施体系。上述政策导向清晰表明,我国城市交通排放管控模式正从传统基于宏观统计数据的“总量控制”,向基于高时空分辨率数据的“精准管控”加速转型。

城市环境与交通管理部门亟需掌握城市路网尺度的交通活动水平与碳排放时空分布数据，从而精准识别高排放路段与高排放时段等关键节点，并制定更具针对性与差异化的碳减排管控策略。而高时空分辨率的机动车 CO₂ 排放清单，正是实现这一目标的关键数据支撑。

此处所称“排放清单”，是指在特定区域、特定时段内，对机动车 CO₂ 排放量进行系统核算并归集而成的数据集，其内容不仅包含区域排放总量，还涵盖排放发生的时间分布、空间落位以及不同车型、不同道路单元的贡献结构；“高时空分辨率”则是对该数据集时空精细程度的描述，强调排放结果能在更细的时间与空间尺度上被刻画——本文中，时间尺度细化至小时级，空间尺度细化至路段、行政区和 1 km×1 km 网格三类典型单元。由此，高时空分辨率机动车 CO₂ 排放清单可理解为：能够逐小时、逐路段（或空间单元）核算机动车 CO₂ 排放量，并支撑其时空分布特征精细化分析的基础数据集。从核算逻辑上看，机动车 CO₂ 排放量主要由两类核心要素共同决定：一是表征单位行驶里程车辆 CO₂ 排放强度的排放因子，二是反映车辆道路活动规模的交通活动水平（核心为路段交通流量）。因此，排放清单的编制逻辑可概括为“排放量 = 排放因子 × 交通活动水平”，并进一步结合路段长度、车型构成等参数，按路段、按时段累加汇总得到全路网的清单结果。

然而，编制高时空分辨率城市机动车 CO₂ 排放清单，是一项复杂的系统性工作，其核心技术瓶颈集中于排放因子精准估算与交通活动水平高精度感知两个方面，制约了前述精准管控需求的实现：

在排放因子精准估算方面，传统排放核算方法多仅依据平均车速查表确定排放因子，无法反映车辆在实际道路行驶中加减速、怠速等瞬态工况对排放的显著影响，难以满足精细化核算的精度要求。尽管便携式排放测量系统（Portable Emission Measurement System, PEMS）与实际行驶排放（Real Driving Emission, RDE）测试，为获取真实行驶工况下的机动车排放数据提供了可靠技术支撑，但如何从发动机工况、车辆行驶状态等多维运行参数中，有效捕捉多维影响特征间的高阶交互关系，构建高精度的 CO₂ 排放因子预测方法，仍是当前交通碳排放精细化核算领域亟待解决的关键问题。

在交通活动水平高精度感知方面，自下而上的高分辨率排放清单编制，高度依赖全路网覆盖、分时段更新的交通流基础参数。当前广泛使用的浮动车大数据虽能反映城市路网的整体运行态势，但在城市级大规模异质路网上实现全路段交通速度的高精度预测，仍面临严峻的技术挑战：不同等级道路在速度时空分布特征、数据信噪比、交通流演化规律上存在显著差异，现有预测方法普遍忽略道路层级的固有属性差异，难以兼顾路网异质性与全局交通流的时空依赖关系，无法为全路网精细化碳排放核算提供可靠的交通活动数据支撑。

针对上述两大核心技术瓶颈,本研究从排放因子精准获取与大规模异质路网交通速度精准预测两个方面开展系统性方法研究,并在此基础上耦合交通流推演结果、本地车队结构与对应排放因子,采用自下而上的排放核算框架,构建了高时空分辨率机动车 CO₂ 排放清单编制的完整方法体系。本研究可为城市交通碳排放精准管控与减排策略优化提供量化的数据支撑,对推动城市交通领域“双碳”目标落地具有重要的理论价值与实践意义。

1.2 国内外研究现状

1.2.1 CO₂ 排放因子预测方法研究

机动车 CO₂ 排放因子的精准预测,是编制高时空分辨率机动车排放清单的核心基础。传统的排放因子获取多依赖于实验室台架试验,但现有研究表明,标准测试循环难以全面覆盖实际道路的复杂行驶状态,其统计的排放量与真实排放水平存在显著差距^[6]。便携式排放测量系统(PEMS)与实际行驶排放(RDE)测试的引入,为获取真实行驶工况下的排放数据提供了可靠技术手段,也为数据驱动的排放因子预测方法奠定了核心基础。

机动车 CO₂ 排放是受多因素耦合驱动的复杂过程。作为燃料中碳元素完全燃烧的直接产物,CO₂ 排放速率与发动机瞬时燃油消耗量紧密相关。Jimenez-Palacios^[7] 最早提出了机动车比功率(Vehicle Specific Power, VSP)概念,为车辆行驶的瞬态负荷量化提供了有效指标。Zhai 等人^[8] 进一步证实,VSP 作为发动机负荷代理变量,与瞬时排放高度相关。Chen 等人^[9] 则发现,发动机转速、扭矩等内部运行参数直接影响传统内燃机车辆的 CO₂ 排放率。上述研究表明,排放因子预测需综合考虑驾驶工况、发动机状态、环境条件等多维运行参数,对预测模型的多特征交互建模能力提出了更高要求。

早期排放因子预测方法主要分为统计学习方法与物理机理模型两类。前者以历史排放数据为基础,通过回归分析、主成分分析等构建排放因子与影响因素的映射关系,典型代表为 Lasso 回归、岭回归等线性模型,但其对数据平稳性要求高,非线性拟合能力有限^[10]。后者通过构建车辆动力学与燃烧过程的数学模型推算排放量,物理可解释性强,但依赖大量精细化参数的标定,工程落地成本高。随着机器学习技术成熟与算力提升,数据驱动的排放因子预测方法成为该领域主流,按建模范式可分为集成学习、神经网络与异构融合方法三类。

集成学习通过组合多个弱学习器构建强预测模型,在结构化数据建模中展现出了优异的精准度与鲁棒性。Qiao 等人^[11] 基于多种集成学习算法,预测轻型汽油车 RDE 工况下的瞬时粒子数(Particle Number, PN),其中类别提升(Categorical Boosting, CatBoost)算法综合性能最优。Jiang 等人^[12] 采用随机森林算法,量化

分析海拔、气象与驾驶工况对 CO_2 排放的非线性影响。Xu 等人^[13] 纳入气象、出行特征、驾驶行为等多维变量,采用极限梯度提升 (eXtreme Gradient Boosting, XGBoost) 算法,构建了出行尺度的 CO_2 与 $\text{PM}_{2.5}$ 排放因子预测模型。Liao 等人^[14] 提出多机器学习算法与 XGBoost 结合的混合模型,用于柴油发动机瞬态排放预测,进一步验证了梯度提升类算法的场景适用性。上述研究表明,以 XGBoost、CatBoost 和随机森林为代表的集成学习算法,在结构化特征挖掘与非线性关系拟合上优势显著,但在特征空间切分过程中,难以端到端建模数值特征间的高阶交互关系。

神经网络通过搭建多层非线性映射结构,可自动提取高维输入数据的深层隐含特征。Seo 等人^[15] 提出人工神经网络 (Artificial Neural Network, ANN) 与车辆动力学模型融合的预测方法,实现了轻型柴油车瞬时 CO_2 与氮氧化物 (NO_x) 排放的联合预测。Zhang 等人^[16] 基于长短期记忆网络 (Long Short-Term Memory, LSTM) 构建轻型柴油卡车 CO_2 排放模型,借助时序建模能力捕捉行驶工况的动态变化特征。Cornec 等人^[17] 对比了查找表法、非线性回归与多层感知机 (Multilayer Perceptron, MLP) 的瞬时排放建模效果,证明 MLP 对异质性强的车辆运行数据具有更优异的泛化能力。Xie 等人^[18] 提出并行注意力长短期记忆网络 (Parallel Attention-based LSTM, PA-LSTM), 融合 PEMS 与车载诊断系统 (On-Board Diagnostics, OBD) 多源数据,通过注意力机制实现多传感器特征自适应加权,预测精度显著优于传统 LSTM 等基线模型。上述研究表明,神经网络在高维非线性特征提取与时序建模上具备天然优势,注意力机制可进一步提升模型对关键特征的感知能力;但现有研究多采用单一网络架构,未能充分挖掘其与集成学习算法在结构化特征处理上的互补潜力。

异构融合方法通过联合不同架构的预测模型,融合各类模型的核心优势以提升预测性能。Hu 等人^[19] 构建门控循环单元 (Gated Recurrent Unit, GRU) 与 XGBoost 的混合模型,用于公交车气态污染物排放预测,在微观瞬时与总体累计尺度的多项评估指标均优于单一基准模型。Yu 等人^[20] 采用遗传算法 (Genetic Algorithm, GA) 优化反向传播 (Back Propagation, BP) 神经网络的权重与阈值,构建了国六轻型车 RDE 场景下的 NO_x 与 PN 预测模型。上述异构融合方法虽在一定程度上弥补了单一模型的性能短板,但融合策略多采用固定权重或简单线性加权方式,无法根据瞬态行驶工况的动态变化,自适应调整各分支模型的贡献权重。

综上所述,现有研究在机动车 CO_2 排放因子预测领域已积累了丰富的理论与工程实践经验,但仍存在以下不足:其一,现有研究多聚焦于集成学习或神经网络的独立优化与应用,深度学习与集成学习异构融合的协同增益尚未被充分挖掘;其二,现有方法对多维输入特征间的高阶交互关系建模不足,难以有

效捕捉转速、扭矩等运行参数的联合非线性效应；其三，现有异构融合方法多采用固定权重融合策略，缺乏根据瞬态工况动态分配模型权重的自适应能力。

1.2.2 交通速度时空预测方法研究

交通速度预测旨在基于路网历史观测数据，预测路网内各路段未来单步或多步时间步长的速度变化趋势，是智能交通系统（Intelligent Transportation System, ITS）的核心基础功能之一。在机动车排放清单编制中，路段平均行驶速度是排放因子计算、交通流量推演的核心输入参数，其预测精度与时空分辨率直接决定了排放清单的精细程度。纵观技术发展脉络，交通速度预测方法可划分为参数统计模型、传统机器学习模型和基于深度学习的时空预测模型三个阶段。

交通速度预测研究初期，参数统计模型占据主导地位。历史平均法（Historical Average, HA）以历史同期数据均值为预测结果，直观简单且计算开销极低，但对交通突发工况的泛化适配能力较差。自回归积分滑动平均模型（Autoregressive Integrated Moving Average, ARIMA）及其季节性变体，通过挖掘时间序列自相关性实现交通数据线性拟合^[21]；卡尔曼滤波凭借动态线性更新特性，广泛应用于交通状态实时动态估计与短时预测^[22]。此类方法有完善的统计学理论支撑，在平稳、低维的单路段时间序列预测中表现稳定；但城市交通速度序列具有强非线性和非平稳特性，易受天气、交通事故、节假日等外部因素干扰，基于线性假设的统计模型难以有效捕捉速度数据的剧烈波动，且绝大多数方法完全忽略了交通流在路网空间维度的传播与关联效应。

为突破参数统计模型对交通数据非线性关系拟合能力不足的核心瓶颈，支持向量回归（Support Vector Regression, SVR）^[23]、K近邻（K-Nearest Neighbors, KNN）^[24]、贝叶斯网络^[25]等传统机器学习方法被逐步引入交通预测领域。SVR通过核函数映射将低维非线性数据转换至高维线性可分空间，实现非线性回归拟合，在中小规模短时交通速度预测中展现出更优的鲁棒性；KNN通过匹配历史数据中的相似交通工况模式实现预测，对局部波动适配能力更强；贝叶斯网络通过概率图模型刻画交通变量间的因果关联与不确定性。但此类方法处理高维路网时空数据时存在明显性能瓶颈：大多将路网各路段节点视为相互独立的预测单元，或仅考虑简单欧氏距离邻近性，无法有效刻画非欧氏路网拓扑结构中隐含的复杂空间依赖关系。

近年来，深度学习方法凭借强大的高维特征提取与非线性拟合能力，为交通速度时空预测带来了突破性进展。时间维度建模上，循环神经网络（Recurrent Neural Network, RNN）及其 LSTM^[26]、GRU^[27]变体，通过门控机制解决了传统 RNN 长时序训练中普遍存在的梯度消失与爆炸问题，可精准捕捉交通速度序列的长程时序依赖，成为时序建模的主流方法。但此类纯时序模型仅能挖掘单

路段时间演化规律，完全忽略了路网拓扑结构中交通流的空间关联与传播特性，无法适配路网级多节点协同预测需求。为此，图卷积网络（Graph Convolutional Network, GCN）^[28] 被引入该领域，催生了时空图神经网络（Spatio-Temporal Graph Neural Network, ST-GNN）研究范式，成为当前交通时空预测的主流技术路径。其中，时空图卷积网络（Spatio-Temporal Graph Convolutional Network, STGCN）^[29] 首次实现图卷积与时间卷积网络（Temporal Convolutional Network, TCN）的端到端耦合，突破传统时序模型的空间建模局限，可在非欧氏路网结构上联合建模时空依赖；扩散卷积循环神经网络（Diffusion Convolutional Recurrent Neural Network, DCRNN）^[30] 引入有向图扩散卷积建模交通流双向传播特性，更贴合城市路网交通流的有向演化规律；Graph WaveNet^[31] 针对固定先验邻接矩阵无法刻画节点潜在关联的缺陷，提出了自适应邻接矩阵学习机制，无需完备路网先验知识即可自动挖掘节点间隐性空间关联，同时结合空洞因果卷积大幅扩展时序感受野，提升了长时序预测精度；自适应图卷积循环网络（Adaptive Graph Convolutional Recurrent Network, AGCRN）^[32] 设计节点自适应参数生成模块，可为不同路段节点生成专属卷积核参数，以实现路网异质节点个性化时空模式的精准建模，在多个公开基准数据集上均取得领先预测性能。

尽管 ST-GNN 范式已成为交通时空预测的主流技术路径，在标准测试场景中取得了优异的预测效果，但现有方法面向城市级大规模异质路网的实际应用时，仍存在三大局限^[33]。

第一，同质节点建模假设无法适配路网结构的异质性。现有模型普遍将路段节点视为同质实体，仅通过拓扑邻接关系建模空间依赖，忽略了道路等级属性蕴含的强先验知识。不同等级道路在设计时速、通行能力、管控规则与交通流演化规律上存在本质差异，基于共享参数的统一化节点表征与卷积操作难以适配该异质性，会直接导致低等级道路预测精度显著下降。

第二，全局图聚合机制难以适配城市级大规模路网的高噪声特性。现有 ST-GNN 模型多基于数百至数千节点的小规模基准数据集验证，而城市级路网往往包含上万个路段节点，且呈高噪声、低信噪比特征的低等级支路占比较高。现有模型的全局信息聚合机制在此场景下会导致“噪声淹没”：低等级路段的随机噪声会通过图卷积的全局信息传递扩散至全路网，严重干扰主干道路稳定交通流时空模式的特征学习，最终导致模型整体预测性能显著退化。

第三，缺乏跨等级道路交通流交互规律的显式建模。城市路网是多层级耦合的复杂系统，不同等级道路间的交通流溢出、转移与分流效应是全路网交通状态演化的核心驱动因素。现有方法多仅基于拓扑邻接关系建模局部空间依赖，对跨层级交通流交互特性的捕捉能力不足，无针对性显式建模模块，难以刻画城市路网交通流的全局演化规律。

1.2.3 机动车排放清单编制方法研究

机动车排放清单是定量表征特定区域、特定时段内机动车污染物排放总量及时空分布特征的基础数据集，是解析大气污染成因、量化交通活动环境影响、制定精准减排管控政策的核心科学支撑^[34]。根据数据来源、核算粒度与技术框架的差异，机动车排放清单编制方法可分为自上而下法与自下而上法两大类。

自上而下法以宏观统计数据为核心，主要面向国家级与省级等大尺度排放总量评估场景，通常基于统计年鉴中的机动车保有量、燃油消耗量、年均行驶里程等汇总型数据，并结合区域平均排放因子核算年度排放总量。在该方法于我国的相关研究与应用中，郝吉明等人^[35]较早开展中国机动车排放量核算，奠定了我国机动车宏观排放清单的研究基础；伏晴艳等人^[36]以上海市为研究案例，拓展了该方法在特大城市交通排放特征解析中的应用场景。在此基础上，Wu 等人^[34]系统梳理了我国机动车排放管控体系的发展脉络，为该方法的本土化深化应用提供了框架参考；Zheng 等人^[37]基于同类宏观核算框架，量化评估了清洁空气行动计划对我国人为源排放总量的管控成效，验证了该方法在大尺度政策效果评估中的适用性。该方法计算流程简便、数据获取门槛低，可满足大尺度环境统计与宏观减排政策评估的核心需求；但其核心缺陷在于默认区域内机动车行驶特征均一，无法准确描述排放的空间异质性与时间动态特征，难以支撑城市交通排放管控的空间落位与精准施策。

近年来，随着交通感知技术与计算能力的快速发展，以路网微观交通活动数据为核心、基于逐路段逐时段累计核算排放量的自下而上法，逐渐成为城市高时空分辨率排放清单编制的主流技术范式。该方法的核算精度取决于两大核心要素：覆盖全路网的动态交通流数据（含路段流量与行驶速度）和适配本地工况的高精度排放因子。在排放因子层面，核算方法已从早期基于平均车速的静态查表模型（如 MOBILE^[38]、COPERT^[39]），演进为基于比功率（VSP）等瞬态工况参数的动态模型（如 MOVES^[40]）。在清单编制实践层面，Wang 等人^[41]率先提出排放因子模型与交通需求模型耦合的网格化核算方法，以北京市轻型汽油车为研究对象，编制了 1 km×1 km 分辨率的城市排放清单，为国内高分辨率清单研究提供了方法范式。胥耀方等人^[42]基于北京 16 辆轻型车的 PEMS 实测数据，针对 CO₂ 排放对 VSP 区间进行了本土化重划分，为机动车碳排放清单编制中排放因子的本地化参数体系建设提供了关键支撑。但现有研究多直接套用通用排放因子数据库或异地标定参数，针对不同城市车队结构、排放标准与行驶工况特征的系统性本土化校准仍有明显短板，易给清单核算结果引入系统性偏差。

在交通活动数据获取层面，浮动车轨迹大数据、智能交通系统（ITS）等多源感知手段的快速普及，为高时空分辨率排放清单的编制提供了坚实的数据基础。

Zhang 等人^[43] 耦合排放因子模型与微观交通仿真模型，编制了城市路段级高分辨率排放清单，实现了交通管控措施减排效果的定量评估；Zhang 等人^[44] 基于南京市 ITS 多源监测数据，编制了路段级、小时级的城市动态排放清单，系统揭示了机动车排放的时空异质性特征；Deng 等人^[45] 基于 190 亿条货车全轨迹数据，提出了全样本枚举核算方法 TrackATruck，发现传统基于代理变量的空间分配方法在核心货运通道上的排放低估幅度可达 2 至 10 倍。上述研究表明，多源实时交通数据能够显著提升排放清单的时空分辨率与核算精度，但相关研究在数据完整性方面仍面临共性瓶颈：浮动车数据仅能反映部分样本车辆的行驶状态，需借助统计学习方法或空间插值才能推演得到全路网的交通流量与车队组成；现有城市交通监测设施多集中于主干道、快速路等核心路网，低等级道路普遍缺乏有效的流量与速度观测数据，多数研究只能通过简化流量假设填补数据空白，不可避免地引入核算误差，制约了微观排放模型的精度发挥^[46]。

综上所述，尽管自下而上的高分辨率机动车排放清单编制理论框架已较为成熟，是当前城市机动车排放精准管控相关研究的主流方法，但在全路网的规模化实际应用中，仍存在很多局限：现有研究在排放因子的本地化校准上仍有明显不足，多直接采用通用排放参数，未结合城市本地车队结构、行驶工况完成系统性适配，易给核算结果带来系统性偏差；同时全路网交通活动数据的覆盖不够完整，现有监测多集中于城市主干道与快速路，低等级道路缺乏有效的实测数据，常规的数据补全方式易引入额外误差，无法充分发挥微观排放模型的精度优势。

1.3 本文主要工作

机动车高时空分辨率 CO_2 排放清单，是实现城市交通碳排放精准管控的核心量化支撑。然而，该类清单的编制面临两大核心瓶颈：一是排放因子的精准获取困难，二是大规模异质路网的交通速度感知困难。针对以上问题，本文融合实际行驶排放测试数据、路网拓扑数据、浮动车数据等多源数据，围绕高分辨率机动车排放清单构建方法中的排放因子预测、交通速度预测与排放清单编制三个方面开展系统性方法研究，并以济南市为典型案例完成方法的工程验证。本文主要工作如下：

(1) 提出了基于深度特征交互与集成学习的机动车 CO_2 排放因子预测方法。针对实际道路瞬时 CO_2 排放预测中，多维行驶特征间交互关系复杂、传统集成模型在动态驾驶工况下泛化适应性受限的问题，本文提出了一种融合深度特征交互与异构集成学习的预测方法。该方法通过多头自注意力机制挖掘多维行驶特征间的高阶非线性关联，引入两类异构梯度提升树模型进行并行预测，并设计工况感知的自适应权重分配网络，动态调整各分支模型的贡献权重。基于多辆国

六轻型汽油车的实际行驶排放测试数据开展实验,结果表明,所提方法能够有效提升动态工况下 CO_2 排放因子的预测精度,并具备良好的物理可解释性与工况自适应能力。

(2) 提出了面向大规模异质路网的层级感知交通速度预测方法。针对现有时空图神经网络处理城市级大规模异质路网时,普遍忽略道路层级固有差异和全局交通流时空相关性捕捉能力不足的问题,本文提出了一种层级感知与节点自适应的时空图卷积网络。该方法通过道路层级嵌入实现路网异质性的显式表征,设计分级差异化的全局上下文聚合策略抑制低信噪比路段的噪声干扰与无效传播,构建动态跨等级注意力模块建模不同等级道路间的交通流传递规律,并引入时间上下文门控与节点自适应归一化策略适配时空特征差异。在济南市全路网 41099 个路段的大规模数据集上开展实验,结果验证了所提方法在大规模异质路网速度预测任务中的有效性,尤其在快速路、高速公路等高等级道路上的预测精度提升效果更为显著。

(3) 以济南市为典型案例完成了机动车高时空分辨率 CO_2 排放清单的编制,并开展了多尺度时空特征分析。基于前两项研究成果,本文采用自下而上的排放清单编制方法,通过宏观交通流模型实现速度-流量转换,结合卡口数据完成流量校准,并匹配本地车队结构与排放因子,最终编成案例城市全路网路段级、小时级的机动车 CO_2 排放清单。在此基础上,从行政区、路段与 $1\text{km}\times 1\text{km}$ 网格三个空间尺度开展多尺度时空特征分析,并通过与近年已发表的城市高分辨率清单的对比,从方法范式、时空分布特征与车型贡献结构三个维度论证了本文清单结果的合理性,为城市交通碳排放精准管控与减排策略优化提供了量化数据支撑与决策依据。

1.4 本文组织结构

本文共分为六章,各章节内容安排如下:

第一章:绪论。本章首先阐述高时空分辨率机动车 CO_2 排放清单构建方法的研究背景与意义,随后从排放因子预测、交通速度预测、机动车排放清单编制三个方面系统综述国内外研究现状,总结现有方法的不足与局限性。最后,明确本文的主要研究内容,并介绍全文的章节组织结构。

第二章:相关理论与方法基础。本章介绍支撑本文研究的理论方法基础,包括梯度提升树算法、时空图卷积网络、注意力机制、机动车排放核算的自下而上框架与宏观交通流模型,并对本文使用的多源交通数据集进行了说明。

第三章:基于深度特征交互与集成学习的 CO_2 排放因子预测与分析。本章首先介绍基于便携式排放测量系统的数据采集方案与预处理流程,然后详细阐

述所提出的融合深度特征交互与异构集成学习的排放因子预测方法的总体架构与核心模块设计。最后，通过模型对比实验与消融实验验证所提方法的有效性，并结合特征归因分析，探讨模型的物理可解释性与工况自适应能力。

第四章：面向大规模异质路网的层级感知交通速度预测方法。本章首先给出交通状态预测问题的形式化定义，介绍路网拓扑构建与时空张量生成等数据预处理流程，然后详细阐述所提出的融合层级感知与节点自适应的时空图卷积网络的总体架构与核心模块设计。最后，在济南市全路网数据集上开展模型对比实验与消融实验，验证了所提方法的有效性与稳健性。

第五章：排放清单编制与多尺度时空特征分析。本章首先基于前两章的研究成果，生成排放清单编制所需的两类核心基础数据：一是利用宏观交通流模型将预测的路段平均速度转换为交通流量，并结合卡口数据进行流量校准；二是基于排放因子预测方法生成分速度区间的 CO_2 排放因子查找表。然后，结合本地四类典型车型的车队结构，采用自下而上方法完成全路网路段级、小时级的机动车 CO_2 排放清单编制；并以济南市为典型案例开展实证分析，从行政区、路段与网格三个空间尺度对排放清单的时空分布特征进行可视化，并通过对比分析验证清单结果的合理性。

第六章：总结与展望。本章总结全文的研究工作与主要结论，并对后续研究方向进行展望。

第2章 相关理论与方法基础

本章介绍支撑本文研究的相关理论与方法基础。首先，介绍梯度提升树算法及其两种代表性实现，为第3章排放因子预测框架提供方法基础。其次，阐述了时空图神经网络的图卷积、时域卷积组件，以及注意力机制的全局信息聚合原理，为第3章和第4章的模型设计奠定算法基础。然后，介绍自下而上的排放核算框架与相关交通流理论，为第5章排放清单的编制提供理论依据。最后，说明本文使用的多源交通数据集。

2.1 梯度提升树算法

梯度提升树是处理结构化表格数据的经典机器学习算法之一，在诸多回归与分类基准任务上展现出了不亚于深度学习模型的预测性能^[47]。与神经网络擅长处理图像、序列等高维连续信号不同，梯度提升树通过逐层贪心分裂构建的决策边界，天然适配异质特征空间，无需复杂的特征预处理即可有效建模非线性映射关系。本节首先介绍梯度提升的一般框架，随后分别阐述本文第3章中涉及到的极限梯度提升算法和类别提升算法。

2.1.1 梯度提升框架

梯度提升 (Gradient Boosting)^[48] 是一种基于加法模型、通过序贯迭代逐步逼近目标函数的集成学习策略。其核心思想为：在每一轮迭代中，沿损失函数的负梯度方向拟合前一轮模型的残差，构建新的基学习器并累加到现有集成模型中。给定训练数据集 $\{(\mathbf{x}_i, y_i)\}_{i=1}^N$ 和可微损失函数 $\mathcal{L}(y, \hat{y})$ ，梯度提升在第 m 轮迭代中拟合的伪残差为：

$$r_{im} = - \left[\frac{\partial \mathcal{L}(y_i, \hat{y}_i)}{\partial \hat{y}_i} \right]_{\hat{y}_i = F_{m-1}(\mathbf{x}_i)} \quad (2.1)$$

其中 $F_{m-1}(\cdot)$ 为前 $m-1$ 轮迭代累积得到的集成模型。随后，以决策树 $h_m(\mathbf{x})$ 作为基学习器拟合本轮伪残差 $\{r_{im}\}$ ，并按如下方式更新集成模型：

$$F_m(\mathbf{x}) = F_{m-1}(\mathbf{x}) + \eta \cdot h_m(\mathbf{x}) \quad (2.2)$$

其中 $\eta \in (0, 1]$ 为学习率，用于控制单棵决策树对集成模型的贡献幅度，以缓解过拟合风险。

上述迭代过程如图2.1所示：模型从初始预测 F_0 出发，每一轮基于上一轮模型的残差拟合一棵新的回归树，并以学习率 η 将其加入集成，通过 m 轮序贯纠错逐步逼近目标函数。该框架在处理特征异质性强、非线性交互复杂的回归任务

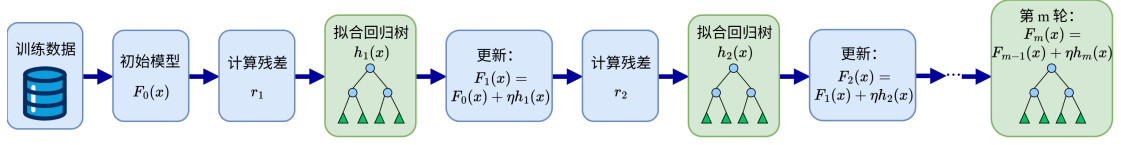


图 2.1 梯度提升框架迭代过程

时具备天然优势。

2.1.2 极限梯度提升算法

极限梯度提升算法（eXtreme Gradient Boosting, XGBoost）^[49]在标准梯度提升框架的基础上，引入结构化正则项，将目标函数定义为损失函数与树结构复杂度的联合优化问题：

$$\mathcal{J}^{(m)} = \sum_{i=1}^N \mathcal{L}(y_i, \hat{y}_i^{(m-1)} + h_m(\mathbf{x}_i)) + \Omega(h_m) \quad (2.3)$$

其中，正则化项 $\Omega(h_m) = \gamma T + \frac{1}{2} \lambda \sum_{j=1}^T w_j^2$ 用于约束决策树的叶子节点数量 T 与叶子权重 w_j 的幅值， γ 和 λ 分别为叶子节点数量惩罚系数与 L_2 正则化系数。XGBoost 对目标函数进行二阶泰勒展开近似，利用损失函数的一阶梯度 g_i 与二阶梯度（海森矩阵对角元素） h_i 指导决策树的分裂与构建：

$$\mathcal{J}^{(m)} \approx \sum_{i=1}^N \left[g_i h_m(\mathbf{x}_i) + \frac{1}{2} h_i h_m^2(\mathbf{x}_i) \right] + \Omega(h_m) \quad (2.4)$$

其中 $g_i = \partial_{\hat{y}} \mathcal{L}(y_i, \hat{y}_i^{(m-1)})$ ， $h_i = \partial_{\hat{y}}^2 \mathcal{L}(y_i, \hat{y}_i^{(m-1)})$ 。二阶导数信息的引入，使 XGBoost 在分裂增益计算中能够充分考虑目标函数的曲率特性，有助于更精准地搜索最优分裂方案，显著提升了模型在非线性回归任务中的拟合效率与收敛性能。

2.1.3 类别提升算法

类别提升算法（Categorical Boosting, CatBoost）^[50]针对标准梯度提升中存在的目标泄漏问题——即伪残差基于全量训练集预测得到、当前模型又由同一训练集构建所引发的梯度估计乐观偏差——提出有序提升策略：通过维护多个基于随机排列的独立模型，确保计算第 i 个样本梯度时仅使用排列中位于该样本之前的数据训练得到的模型进行预测，从根本上打破了上述循环依赖。该策略在理论上保证了梯度估计的无偏性，在样本量有限、特征维度较高的场景下优势尤为突出。此外，CatBoost 采用对称决策树作为基学习器，每一层所有内部节点共享相同的分裂特征与阈值，兼顾了推理效率与正则化能力。

2.2 时空图神经网络

交通流数据具有复杂的时空依赖性：在空间维度上，相邻路段的流量受路网拓扑结构约束，彼此相互关联；在时间维度上，当前流量既受历史状态的惯性影响，又呈现出周期性规律。传统的欧氏空间卷积神经网络难以直接处理路网这类非规则图结构数据，而循环神经网络在长序列建模中存在梯度传播困难的问题。本节介绍处理时空图数据的核心技术组件：图卷积神经网络用于空间依赖建模，时域卷积网络用于时间序列特征提取，两者共同构成第4章时空预测模型的骨干网络。

2.2.1 图卷积神经网络

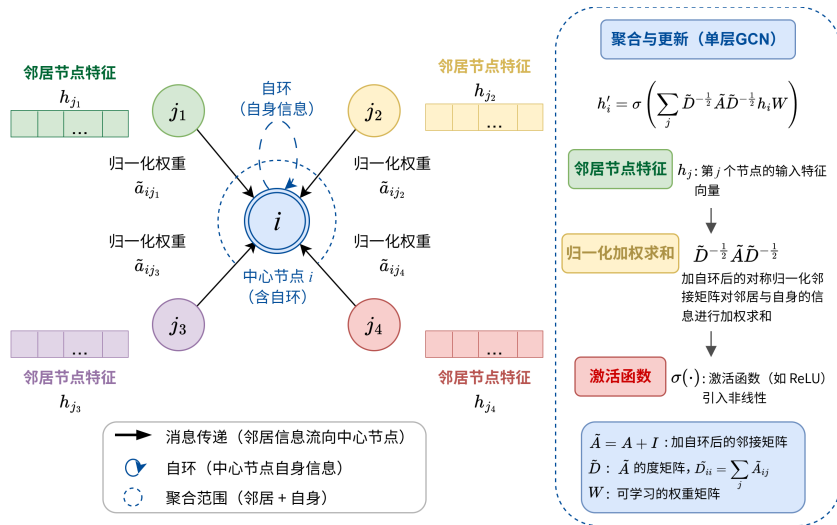
图卷积神经网络（GCN）将卷积运算从规则网格推广到图结构，通过聚合邻域节点信息来提取空间特征。根据实现方式的不同，图卷积神经网络主要分为谱域方法和空域方法，接下来将重点介绍与本研究相关的谱域图卷积网络及其衍生模型。

（1）谱域图卷积网络

谱域图卷积基于图拉普拉斯矩阵的特征分解在频域定义卷积运算，但 $O(N^3)$ 的特征分解复杂度限制了其在大规模路网场景中的应用。经 ChebNet^[51] 多项式近似和 Kipf 等^[28] 一阶截断与重归一化处理后，得到形式简洁、计算高效的单层 GCN 传播规则：

$$\mathbf{H}^{(l+1)} = \sigma \left(\tilde{\mathbf{D}}^{-\frac{1}{2}} \tilde{\mathbf{A}} \tilde{\mathbf{D}}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{H}^{(l)} \mathbf{W}^{(l)} \right) \quad (2.5)$$

其中 $\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{A} + \mathbf{I}$ 为加入自环的邻接矩阵， $\tilde{\mathbf{D}}_{ii} = \sum_j \tilde{\mathbf{A}}_{ij}$ 为对应的度矩阵， $\mathbf{H}^{(l)}$ 为第 l 层的节点特征矩阵， $\mathbf{W}^{(l)} \in \mathbb{R}^{F_l \times F_{l+1}}$ 为可学习的权重参数， $\sigma(\cdot)$ 为非线性激活函数。



单层 GCN 的聚合更新过程如图2.2所示，每个节点通过加自环的对称归一化邻接矩阵对自身与邻居特征加权求和，再经线性变换与非线性激活完成表征更新；堆叠多层 GCN 可逐层扩展感受野，实现对长距离空间依赖的捕捉。

(2) 扩散卷积

标准 GCN 基于对称归一化的邻接矩阵，隐含假设信息在图中双向均匀传播。然而，交通流在路网中的传播具有明显的方向性：下游路段的拥堵会向上游回溯传递，而上游的流量变化也会向下游传递。为此，扩散卷积循环神经网络 (DCRNN)^[30] 提出扩散卷积 (Diffusion Convolution) 模块，将交通流在路网中的传播建模为有向图上的双向扩散过程。

扩散卷积同时考虑前向扩散（沿边方向）和后向扩散（逆边方向），其定义为：

$$\mathbf{Z} = \sum_{k=0}^{K-1} \left(\mathbf{P}_f^k \mathbf{X} \mathbf{W}_{k,1} + \mathbf{P}_b^k \mathbf{X} \mathbf{W}_{k,2} \right) \quad (2.6)$$

其中 $\mathbf{P}_f = \mathbf{A} / \text{rowsum}(\mathbf{A})$ 与 $\mathbf{P}_b = \mathbf{A}^T / \text{rowsum}(\mathbf{A}^T)$ 分别为前向、后向转移矩阵， K 为扩散步数， $\mathbf{W}_{k,1}$ 和 $\mathbf{W}_{k,2}$ 为第 k 步扩散对应的可学习参数。如图2.3所示，目标节点同时聚合来自上游（ $\mathbf{P}_f^k$ 多跳前向扩散）和下游（经 $\mathbf{P}_b^k$ 多跳后向扩散）的信息，实现对交通流双向传播衰减特性的有效刻画。

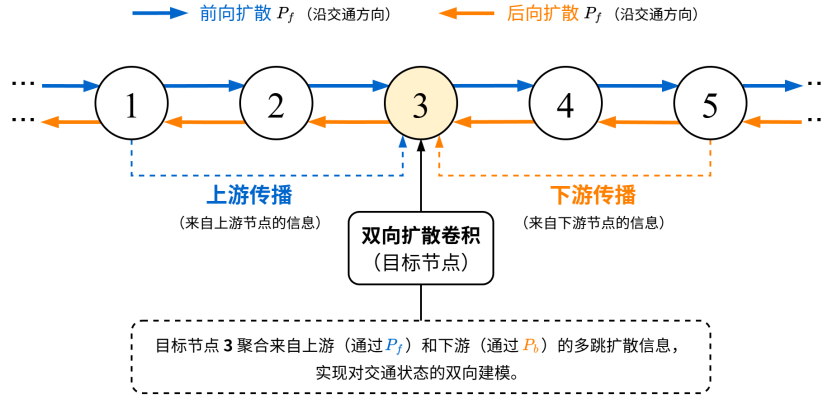


图 2.3 双向扩散卷积过程

(3) 自适应邻接矩阵

传统图卷积依赖预定义的邻接矩阵，通常依据路网物理连接或距离关系构建。然而，静态邻接矩阵难以完全刻画路网中真实的空间依赖关系：地理位置较远但功能相似的道路，其流量模式可能高度相关；而物理相邻但功能迥异的道路，相关性却可能较弱。

为解决这一问题，相关研究提出通过可学习的节点嵌入自动生成自适应邻接矩阵^[31]，其定义为：

$$\mathbf{A}_{adp} = \text{softmax} \left(\text{ReLU}(\mathbf{E}_1 \mathbf{E}_2^T) \right) \quad (2.7)$$

其中 $\mathbf{E}_1, \mathbf{E}_2 \in \mathbb{R}^{N \times c}$ 为可学习的节点嵌入矩阵, c 为嵌入维度。该方法能够以端到端的方式从交通数据中自动挖掘潜在的空间关联, 通常与预定义邻接矩阵互补使用, 以增强模型对复杂空间依赖的建模能力。

2.2.2 时域卷积网络

在时间维度建模中, 循环神经网络 (RNN) 及其变体 LSTM、GRU 虽然应用广泛, 但存在串行计算效率低、长序列梯度传播易消失或爆炸等问题。为解决上述局限, 时域卷积网络 (Temporal Convolutional Network, TCN)^[52] 通过因果卷积和空洞卷积的组合, 在严格保持时序因果性的同时, 实现了高效并行计算和长程时间依赖建模。

(1) 因果卷积

时序预测任务的核心约束是因果性: 时刻 t 的预测仅能依赖 t 及之前的观测值, 严禁使用未来信息。因果卷积 (Causal Convolution) 通过对输入序列进行左侧单侧填充来满足这一约束。对于卷积核大小为 K 的一维因果卷积, 其输出序列的第 t 个元素定义为:

$$(\mathbf{X} * f)(t) = \sum_{k=0}^{K-1} f(k) \cdot \mathbf{X}(t-k) \quad (2.8)$$

(2) 空洞卷积

标准因果卷积的感受野随网络层数线性增长, 若要捕捉长程时间依赖, 需堆叠大量网络层或使用大尺寸卷积核, 这会导致参数量和计算量急剧增加。空洞卷积 (Dilated Convolution)^[53] 通过在卷积核采样点之间插入固定间隔, 在不增加参数量的前提下以指数速度扩大感受野:

$$(\mathbf{X} * {}^d f)(t) = \sum_{k=0}^{K-1} f(k) \cdot \mathbf{X}(t-d \cdot k) \quad (2.9)$$

其中 d 为膨胀因子。当 $d = 1$ 时, 空洞卷积退化为标准因果卷积; 当 $d > 1$ 时, 卷积核以间隔 d 对输入进行采样, 即跳过 $d - 1$ 个相邻采样点。

将膨胀因子设置为指数增长序列 (如 $d \in \{1, 2, 4, 8, \dots\}$) 时, 对于卷积核大小为 K 、网络层数为 L 的 TCN, 其感受野大小为:

$$\text{RF} = 1 + (K-1) \sum_{l=0}^{L-1} d_l = 1 + (K-1)(2^L - 1) \quad (2.10)$$

图2.4展示了 $K = 2$ 、 $L = 3$ 时输出节点 y_t 的完整依赖树: 随着层级深入, 空洞率按 $d = 1, 2, 4$ 指数扩张, y_t 的感受野最终覆盖 8 个历史时间步, 同时严格保留因果性约束。这种以对数级层数覆盖极长历史时间窗口的特性, 使 TCN 在长序列建模中兼具效率与精度 (如 $L = 10$ 时感受野可达 1023 个时间步), 且参数量仅为 $O(KL)$, 与标准卷积相当。

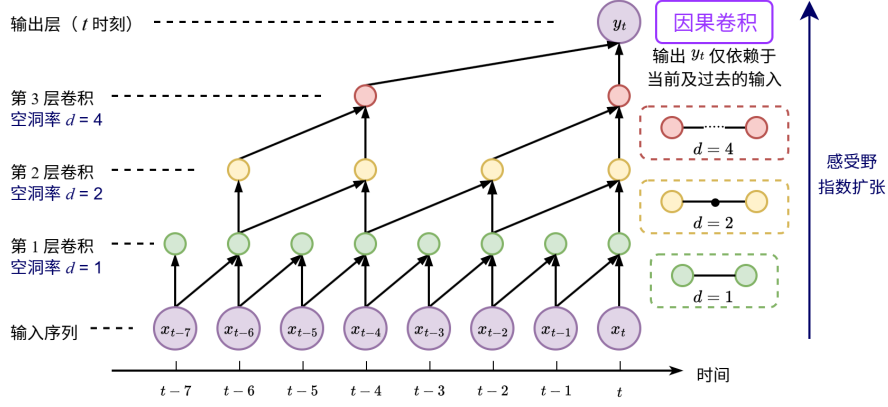


图 2.4 因果卷积与空洞卷积感受野示意图

(3) 门控时域卷积

为进一步增强模型对时序特征的选择性提取能力，TCN 通常结合门控机制。门控线性单元（Gated Linear Unit, GLU）^[54]通过两个并行的空洞卷积分支，实现对时序信息流的自适应筛选与控制：

$$\mathbf{H} = \tanh(\mathbf{W}_1 *_{\mathbf{d}} \mathbf{X}) \odot \sigma(\mathbf{W}_2 *_{\mathbf{d}} \mathbf{X}) \quad (2.11)$$

其中 $\mathbf{W}_1$ 、 $\mathbf{W}_2$ 为两个独立的卷积核参数， $*_{\mathbf{d}}$ 表示膨胀因子为 $\mathbf{d}$ 的空洞卷积， $\odot$ 表示逐元素乘法， $\sigma(\cdot)$ 为 Sigmoid 激活函数。

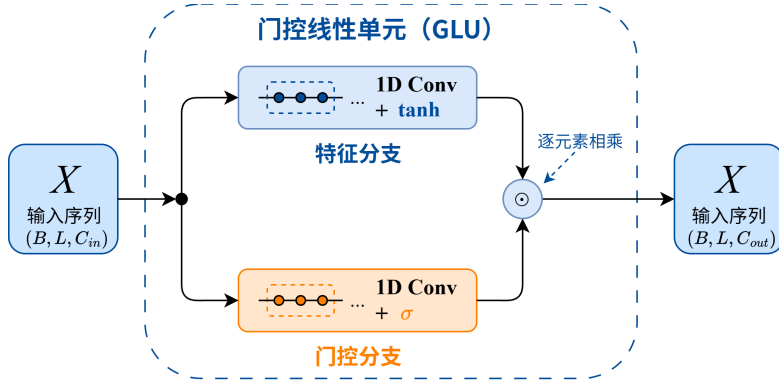


图 2.5 GLU 门控时域卷积模块

GLU 的双分支结构如图 2.5 所示： $\tanh$ 分支负责特征提取， σ 分支输出 $(0, 1)$ 区间的门控权重，二者逐元素相乘实现对时序信息流的自适应筛选，使模型能够抑制无关噪声、精准保留关键时序模式。

2.3 注意力机制

注意力机制（Attention Mechanism）^[55]是一种通过动态计算输入元素间相关性权重实现自适应信息聚合的方法，能够突破传统卷积操作固定邻域或固定核函数的局限，为不同输入位置自适应分配差异化的关注权重。与前文图卷积、时域卷积依赖预定义局部感受野的方式不同，注意力机制通过全局逐对相似度计

算，使模型具备直接建模任意两个输入元素间依赖关系的能力，尤其适合捕捉随时间和系统状态动态变化的关联模式——这类动态依赖难以通过静态图拓扑或固定卷积核精准刻画。在本文中，注意力机制分别应用于第3章排放因子预测模型的特征间高阶交互建模，以及第4章交通速度预测模型的跨等级道路动态关联建模。

2.3.1 缩放点积注意力

缩放点积注意力（Scaled Dot-Product Attention）是注意力机制中最基础、应用最广泛的核心实现形式。其核心思想是：通过查询向量与键向量的点积运算度量输入元素间的相似度，再以归一化后的相似度为权重，对值向量进行加权聚合。给定查询矩阵 $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{N \times d_k}$ 、键矩阵 $\mathbf{K} \in \mathbb{R}^{N \times d_k}$ 和值矩阵 $\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{N \times d_v}$ ，其计算公式为：

$$\text{Attention}(\mathbf{Q}, \mathbf{K}, \mathbf{V}) = \text{softmax}\left(\frac{\mathbf{Q}\mathbf{K}^T}{\sqrt{d_k}}\right)\mathbf{V} \quad (2.12)$$

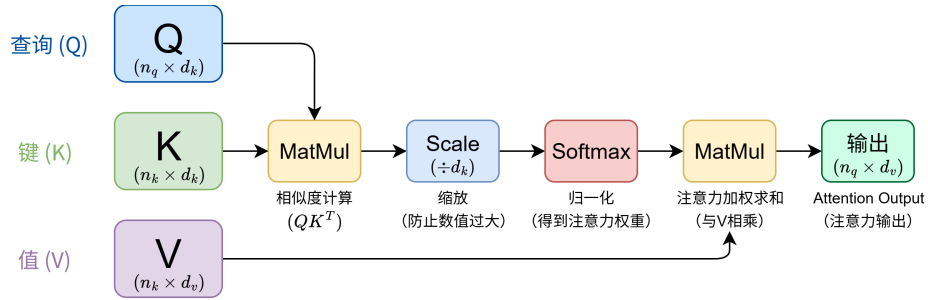


图 2.6 缩放点积注意力流程

整体计算流程如图2.6所示。其中，缩放因子 $\sqrt{d_k}$ 的引入旨在防止特征维度 d_k 较大时点积量级过高，避免 softmax 函数进入梯度极小的饱和区域，保障训练过程的数值稳定性。

当查询、键、值均由同一输入 $\mathbf{X}$ 经不同线性投影得到时，缩放点积注意力即退化为自注意力（Self-Attention），其投影方式为：

$$\mathbf{Q} = \mathbf{X}\mathbf{W}^Q, \quad \mathbf{K} = \mathbf{X}\mathbf{W}^K, \quad \mathbf{V} = \mathbf{X}\mathbf{W}^V \quad (2.13)$$

其中 $\mathbf{W}^Q \in \mathbb{R}^{F \times d_k}$, $\mathbf{W}^K \in \mathbb{R}^{F \times d_k}$, $\mathbf{W}^V \in \mathbb{R}^{F \times d_v}$ 为可学习的投影矩阵。通过三组独立的线性变换，模型能够从同一输入中分别提取用于“提问”、“被检索”和“提供信息”三种不同角色的表征，从而实现输入元素间灵活的全局信息交互。

2.3.2 多头注意力

单一注意力函数仅能在固定的投影空间中计算相似度，特征表示能力有限，往往难以同时捕捉输入序列中多种类型的依赖关系。为此，多头注意力（Multi-

Head Attention) 通过将输入投影到 h 个相互独立的表示子空间, 分别并行计算注意力, 再将各子空间的输出结果拼接融合:

$$\text{MultiHead}(\mathbf{Q}, \mathbf{K}, \mathbf{V}) = \text{Concat}(\text{head}_1, \dots, \text{head}_h) \mathbf{W}^O \quad (2.14)$$

其中, 第 i 个注意力头的计算为 $\text{head}_i = \text{Attention}(\mathbf{Q}\mathbf{W}_i^Q, \mathbf{K}\mathbf{W}_i^K, \mathbf{V}\mathbf{W}_i^V)$, $\mathbf{W}^O \in \mathbb{R}^{hd_v \times F}$ 为用于融合多头结果的输出投影矩阵。

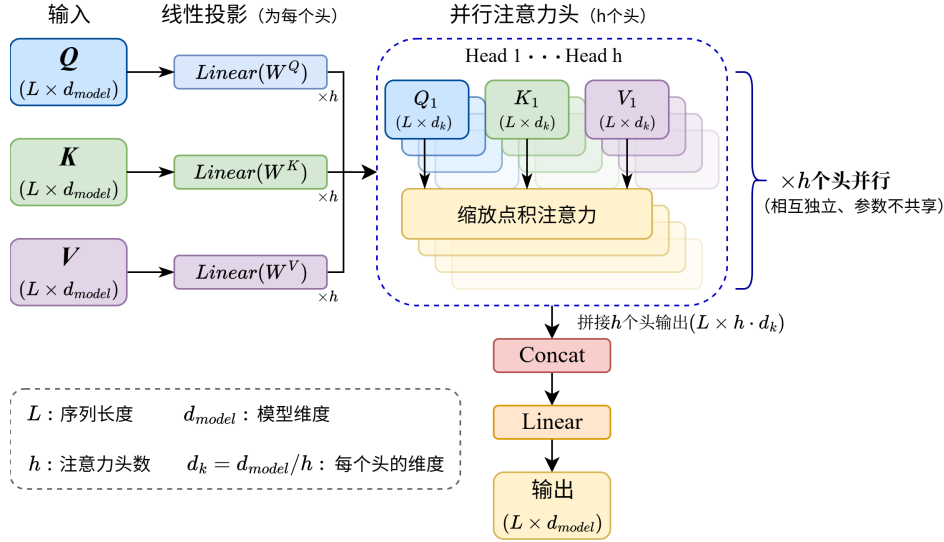


图 2.7 多头注意力结构

整体结构如图2.7所示, h 个注意力头采用各自独立的线性投影参数并行计算、互不依赖, 每个头在专属的表示子空间中捕捉一种类型的依赖模式, 最终通过拼接与线性投影融合各头输出。这种并行化的多视角建模能力, 使多头注意力在处理复杂多维依赖关系时具备显著优势。

2.4 排放核算框架与交通流理论

机动车排放量的核算方法可分为自上而下和自下而上两类。前者以宏观统计数据为基础估算区域排放总量, 计算简单但时空分辨率较低; 后者则基于微观交通活动数据逐路段核算排放量, 能够精准刻画排放的时空分布特征。为满足高分辨率排放清单的编制需求, 本文采用自下而上的核算框架。本节依次介绍该框架的总体流程、基于 VSP 的微观排放因子计算方法, 以及用于从路段速度推算交通流量的 Van Aerde 宏观交通流模型。

2.4.1 自下而上的排放核算框架

自下而上方法的核心思想是将路网拆解为离散的路段单元, 基于各路段的交通活动水平分别计算排放量, 再进行累加得到区域总排放。路段 i 在时段 t 的

污染物 p 排放量计算公式为:

$$E_{i,t,p} = Q_{i,t} \times L_i \times EF_p(v_{i,t}, \phi) \quad (2.15)$$

其中 $Q_{i,t}$ 为路段 i 在时段 t 的交通流量 (辆/h), 由交通流模型或传感器数据提供; L_i 为路段 i 的长度 (km); EF_p 为污染物 p 的排放因子 (g/km·辆); $v_{i,t}$ 为路段 i 在时段 t 的平均行驶速度 (km/h); ϕ 为其他影响因素, 包括车型构成、环境温度、燃油特性等。

研究区域在统计周期内的总排放量, 通过对所有路段和时段的排放量进行求和得到:

$$E_{total,p} = \sum_{i=1}^N \sum_{t=1}^T E_{i,t,p} \quad (2.16)$$

其中 N 为路段总数, T 为时段总数。该方法的优势在于能够输出任意时空粒度的排放结果, 便于准确识别高排放路段和时段, 为交通精准管控提供科学依据。

2.4.2 基于 VSP 的微观排放因子计算方法

排放因子的准确估算是编制排放清单的核心环节。传统方法仅依据平均速度通过查表确定排放因子, 难以充分反映车辆加减速等瞬态工况对排放的显著影响。研究表明, 车辆在急加速和怠速工况下的排放速率可达匀速巡航的数倍至数十倍^[56]。

机动车比功率 (VSP) 是表征车辆瞬时运行状态的综合性指标, 其定义为单位质量车辆的瞬时功率输出^[7]:

$$VSP = v \times (1.1a + 9.81 \sin \theta + 0.132) + 0.000302v^3 \quad (2.17)$$

其中 v 为车辆瞬时速度 (m/s); a 为车辆瞬时加速度 (m/s²); θ 为道路坡度 (rad), 城市道路通常近似为 0; 常数 1.1 为旋转质量修正系数, 0.132 对应滚动阻力, $0.000302v^3$ 项反映空气阻力。

基于 VSP 值, 可将车辆运行状态划分为若干操作模式区间, 每个区间对应特定的排放速率。表2.1给出了典型的 VSP 区间划分方案。

与仅依赖平均速度的单一修正方法相比, 基于 VSP 的排放因子计算方法能够有效区分怠速、巡航、加速等不同运行工况的排放差异, 尤其能够精准捕捉交通拥堵场景下车辆频繁启停所导致的高排放特征。本文第3章进一步将 VSP 作为预测方法的输入特征之一, 参与 CO₂ 排放因子的端到端预测。

表 2.1 VSP 区间与操作模式划分

操作模式	VSP 范围 (kW/t)	典型工况
0	怠速 ($v < 1 \text{ m/s}$)	停车等待、红灯排队
1	$\text{VSP} < 0$	减速滑行、下坡
11	$0 \leq \text{VSP} < 3$	低速平稳行驶
12	$3 \leq \text{VSP} < 6$	中速巡航
13	$6 \leq \text{VSP} < 9$	轻度加速
14	$9 \leq \text{VSP} < 12$	中度加速
15	$\text{VSP} \geq 12$	急加速、爬坡

注：操作模式编号参考美国 EPA MOVES 排放模型^[40]，本表为省略速度分组、仅按 VSP 范围划分的简化方案。

2.4.3 Van Aerde 宏观交通流模型

在编制高分辨率排放清单时，除排放因子外，交通流量是决定路段排放总量的另一核心数据。然而在实际工程应用中，全路网逐路段的精确流量数据往往难以直接获取。Van Aerde 交通流模型^[57]为解决这一问题提供了有效途径，它通过路段平均速度推算交通流量的宏观建模方法，为速度—流量的映射转换提供了坚实的理论依据。

Van Aerde 模型属于单体制交通流模型，能够统一描述从自由流到拥堵状态的完整速度—密度—流量关系。模型的速度—密度关系通过以下隐式方程定义：

$$k = \frac{1}{c_1 + \frac{c_2}{v_f - v} + c_3 v} \quad (2.18)$$

其中 k 为交通密度 (辆/km)， v 为路段平均速度 (km/h)， v_f 为自由流速度 (km/h)， c_1 、 c_2 、 c_3 为模型标定参数。结合交通流基本方程 $q = k \cdot v$ ，即可得到速度与流量的映射关系：

$$q = \frac{v}{c_1 + \frac{c_2}{v_f - v} + c_3 v} \quad (2.19)$$

其中 q 为交通流量 (辆/h)。模型参数 c_1 、 c_2 、 c_3 可通过自由流速度 v_f 、通行能力 q_c (最大流量值) 和临界速度 v_c (最大流量对应的速度) 进行标定。

在实际工程应用中，Van Aerde 模型可进一步简化为仅依赖自由流速度 v_f 和目标通行能力 q_{target} 两个参数的形式：

$$q = \frac{v}{c} \cdot \ln \frac{v_f}{v} \quad (2.20)$$

其中 $c = v_f / (q_{target} \cdot e)$ 为标定参数， e 为自然常数。该简化形式在保持模型核心特性的同时降低了参数标定的复杂度，适用于大规模路网中不同等级道路的流

量估算。本文第5章即采用该简化模型，将预测得到的路段速度转换为交通流量，进而与排放因子结合编制 CO₂ 排放清单。

2.5 数据集介绍

随着智能交通系统（ITS）的广泛应用，海量道路交通信息的准确获取成为可能，为编制城市高时空分辨率排放清单提供了坚实的数据支撑。为验证后续提出方法的有效性，本研究选取济南市作为典型案例城市，所采用的多源数据集介绍如下。

2.5.1 济南市路网监控卡口数据

城市道路监控卡口（俗称“电子眼”）是固定式交通检测设施的典型代表，也是目前获取路面断面交通流参数的主要手段。图2.8展示了城市路口监控摄像系统的部署示例。



图 2.8 路网监控卡口

本研究利用路口监控终端采集的过车记录，经数据清洗与处理，解析得到特定路段的交通流量和车型构成数据。数据覆盖济南市主要路网，时间跨度为 2023 年 11 月及 2024 年 1 月。本研究从中选取了 282 个高覆盖率监控卡口点位，各点位分别记录了通过的机动车类型、流量、通行时间等信息，其数据样本如表2.2所示。

表 2.2 济南市路网监控卡口数据样本

卡口编号	卡口名称	流量	品牌种类	开始时间	结束时间
37010200051210196092	文化东路盐务局门口东向西 (黄网格)	28	4	2023-11-20 00:00:00	2023-11-20 01:00:00
37010200051210247541	坤顺路与奥体中路路口西向东	42	4	2023-11-20 00:00:00	2023-11-20 01:00:00

2.5.2 济南市路网浮动车数据

浮动车技术作为移动式交通检测技术的代表，具有覆盖范围广、采样密度高、时空分布均匀等优势，能够有效反映全路网的宏观交通运行状态。目前，互联网导航平台、网约车平台等数据源通过整合海量移动终端及车载北斗/GPS 定位信息，可提供高精度路况数据。

本研究使用的浮动车数据，源于四维图新提供的济南市 2023 年 11 月至 2024 年 1 月路段通行记录。该数据源日均产生约 2.5 亿条记录，覆盖济南市全域约 27 万条路段。与传统监控卡口定点观测不同，该数据集提供基于路段（Link）粒度的通行状态信息，且未经过度时间聚合，保留了较高时空分辨率。路段 ID 是关联浮动车数据与路网地图的唯一标识，主要数据字段包括：路段长度（米）、平均通行时长（秒）、拥堵状态及时间戳。数据样本如表 2.3 所示。

表 2.3 济南市路网浮动车数据样本

Link ID	长度 (m)	时间戳 (Unix)	通行时长 (s)	拥堵状态
611573361	25	1702539744	1.800	1
511414388	23	1702539802	1.700	1

2.5.3 济南市路网地图数据

为实现多源数据的空间融合与可视化，本研究采用四维图新提供的济南市路网矢量数据，格式为 Shapefile，共包含 268907 条路段（Link）记录。

数据的空间几何信息采用 WKT 标准的 LINESTRING 格式存储，其由一系列经纬度折点坐标组成，用于精确描述路段的地理位置及几何形状，是路网排放强度空间可视化的基础。除几何信息外，路网属性表还包含路段唯一 ID、道路等级、通行方向、分方向车道数、路段长度等关键拓扑信息（见表 2.4）。

表 2.4 济南市路网地图属性数据样本

Link ID	道路等级	方向	顺向车道	逆向车道	长度 (m)	几何信息 (WKT)
100583492	06	3	0	2	74	LINESTRING (117.01524 36.65739, 117.01524 36.65717, 117.01523 36.65672)
100583493	06	1	1	1	6	LINESTRING (116.98743 36.65741, 116.98744 36.65736)

2.6 本章小结

本章系统梳理了支撑本文研究的相关理论与方法基础。首先介绍了梯度提升框架及 XGBoost、CatBoost 两种代表性算法，为第 3 章排放因子预测框架的异

构集成模块提供方法基础；其次阐述了图卷积神经网络的空间特征提取原理、时域卷积网络的时序建模方法，以及注意力机制的全局信息聚合原理，为第3章和第4章的深度学习模型设计奠定算法基础；随后介绍了自下而上的排放核算框架、基于 VSP 的微观排放因子计算方法及 Van Aerde 宏观交通流模型，为第5章排放清单的编制奠定理论基础。此外，详细说明了本文使用的多源数据集，为后续章节的实验验证提供了数据支撑。

第3章 基于深度特征交互与集成学习的 CO₂ 排放因子预测与分析

本章针对轻型汽油车的瞬时 CO₂ 排放因子预测展开研究。首先阐述实际驾驶排放数据的获取与处理过程，并确定预测模型的输入特征。然后，详细介绍本章提出的基于深度特征交互与集成学习的排放预测方法总体框架，并分别阐述注意力增强特征交互模块、异构梯度提升预测模块、工况感知自适应融合模块的设计原理与训练策略。接着，通过模型对比实验、消融实验和预测值与真实值对比实验，验证所提方法的有效性。最后，结合特征归因方法与融合权重分布特性，探讨模型的物理可解释性与工况自适应能力。

3.1 数据采集与处理

3.1.1 数据采集

本研究的瞬时排放数据来源于实际驾驶排放（RDE）测试，实验装置搭建如图 3.1 所示。本研究共选取 5 辆符合国六排放标准的轻型汽油车开展测试，车辆具体参数信息如表 3.1 所示。所选车辆均搭载缸内直喷内燃机，且均配置三元催化器（Three-Way Catalyst, TWC）后处理装置，以保证测试样本在动力型式与排放控制技术上的基础一致性。测试车辆包括轿车、SUV 等常见乘用车型，发动机排量为 1.5L 或 2.0L，测试质量介于 1437 kg 至 1820 kg 之间。此外，所选车辆车龄均在两年以内（8 ~ 21 个月），累计行驶里程处于较低水平（373 ~ 11651 km），整体车况良好，可排除车辆严重老化导致排放异常的干扰因素。

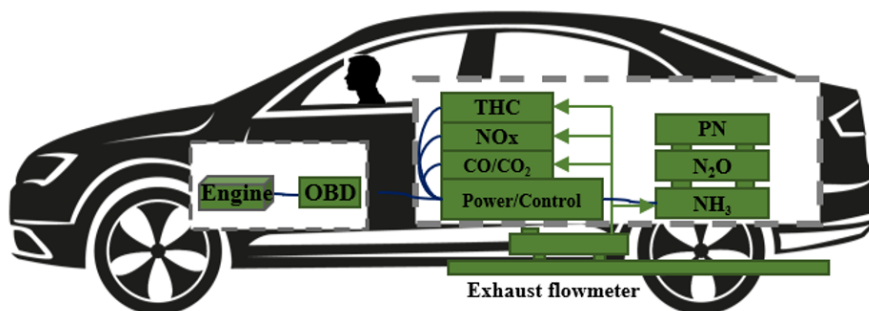


图 3.1 RDE 测试实验装置图

本研究的 RDE 测试采用 HORIBA 公司生产的车载便携式排放测量系统（PEMS，型号为 OBS-ONE）开展。实车测试过程中，PEMS 主机及供电单元刚性固定于测试车辆的后备箱内，排气流量计通过专用连接管路与车辆尾管末端密封对接，微型气象站与 GPS 天线安装于车顶，数据采集终端经车载诊断系统

表 3.1 测试车辆参数信息

车辆编号	1	2	3	4	5
排放标准	国六	国六	国六	国六	国六
燃油喷射类型	缸内直喷	缸内直喷	缸内直喷	缸内直喷	缸内直喷
测试质量/(kg)	1820	1761	1437	1709	1600
排量/(L)	1.496	1.476	1.598	1.497	1.997
车龄/(month)	9	21	11	12	8
里程/(km)	11651	5362	373	7620	4101
后处理装置	TWC	TWC	TWC	TWC	TWC

(OBD) 诊断接口与车辆电控系统相连，整套设备与车辆同步运行。该系统核心组成单元包括排气流量计、气体分析模块、微型气象站、GPS 定位模块以及 OBD 数据采集接口。在 RDE 测试期间，气体分析模块可实时监测排气中的 CO₂ 浓度；同时通过车辆 OBD 接口实时读取发动机转速、冷却液温度、发动机实际扭矩百分比等车辆内部运行参数；环境参数（环境温度、环境压力、相对湿度）、排气参数（排气温度、排气压力）以及地理位置与工况信息（GPS 车速、海拔高度）均由对应功能模块同步采集。所有测试数据的采样频率均统一设定为 1 Hz。

本次实车测试全过程严格遵循国六排放法规规定的 RDE 测试规范与流程。所有测试均在福建省厦门市开展，测试时段集中于 2023 年 3 ~ 5 月。RDE 测试路线覆盖城市道路（车速 ≤ 60 km/h）、郊区道路（60 km/h < 车速 ≤ 90 km/h）和高速公路（车速 > 90 km/h）三种典型道路工况类型，路线走向如图 3.2 所示。所有测试车辆均沿统一预设标准路线行驶，路线总里程约 73 km，其中城市路段约 23 km（占总里程 31.5%），郊区路段约 25 km（占总里程 34.2%），高速路段约 25 km（占总里程 34.2%），各路段里程占比均满足国六 RDE 法规的硬性要求。具体路线走向如下：城市路段自金龙路出发，经航天路、灌口中路、灌口南路返回金龙路，再经灌新路、灌口大道至安仁大道；郊区路段沿安仁大道经海翔大道至孚莲路；高速路段由孚莲路经海沧货运通道返回灌新路。实际测试过程中，受道路实时交通工况影响，不同测试车次的实际行驶里程存在小幅偏差。

为保障测试数据的准确性与可靠性，本研究在每次实车测试前，均对 PEMS 设备执行严格的预热流程，预热完成后依次开展气路泄漏检查、气体分析仪零点校准与量程校准。此外，受不同气体分析模块与各类传感器固有响应时间差异的影响，测试完成后统一采用 PEMS 设备配套的后处理软件执行时间序列同步校正，消除排气浓度数据与发动机转速、车速等工况参数在时间轴上的物理传输延迟，确保各数据通道在时序上严格对齐。

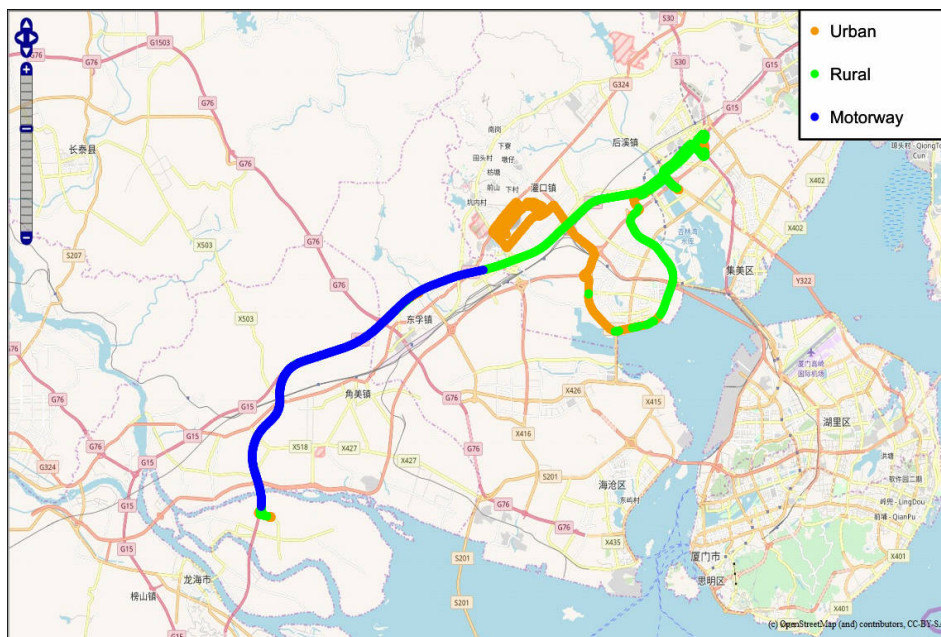


图 3.2 RDE 测试路线图

3.1.2 数据处理

原始 RDE 测试数据为多传感器通道高频采集的时间序列，存在测试噪声、设备系统误差、异常工况样本等问题，这些问题将对模型的正常训练产生干扰。因此本研究构建了五步标准化数据清洗流程，为模型构建提供高质量数据集：

(1) 冷启动数据剔除。机动车冷启动阶段的排放特性与热机稳态下差异显著，不属于本章的研究范畴。依据国六 RDE 法规规定，剔除冷却液温度首次升至 70°C 前的数据段；若测试全程冷却液温度均高于 70°C（车辆测试前已充分暖机），则剔除测试起始前 300 s 数据，以消除初始阶段设备响应滞后与工况波动的影响。

(2) 怠速与停机工况过滤。实际道路行驶包含大量怠速和启停系统介入的停机工况，本研究剔除发动机转速低于 50 rpm 的数据段。该阶段车辆动力输出与 CO₂ 排放趋近于零，无动态预测建模价值。

(3) 无效排放数据剔除。针对 PEMS 设备极限工况下测量延迟或量程波动导致的 CO₂ 排放因子为负或为零的异常样本，因其不符合排放物理机理，直接予以剔除。

(4) 离群异常值过滤。为避免极端离群点干扰深度学习模型的梯度更新过程，采用 3σ 准则对所有输入特征与 CO₂ 排放因子标签进行异常值检测，剔除超过均值 ± 3 倍标准差区间的样本。

(5) 缺失值处理。剔除任一特征通道含缺失值 (NaN) 的样本记录，保障模型输入数据的完整性与一致性。

经过上述预处理流程，5 辆测试车的 7 次有效 RDE 测试共得到 36594 条有

效数据样本。为保障模型评估的客观性与泛化能力验证的有效性，本研究将数据集按 8:1:1 的比例随机划分为训练集（29275 条）、验证集（3659 条）与测试集（3660 条）。由于本章建模目标为 CO₂ 排放因子与行驶特征的映射关系，而非时序序列预测任务，因此随机划分方式不会破坏建模所需的特征-标签关联关系，具备充分的合理性。

为消除各输入特征的物理量纲、数值取值范围差异对模型收敛性的影响，本研究对所有输入特征采用 Z-Score 方法进行标准化处理，标准化公式如下：

$$x^* = \frac{x - \mu}{\sigma} \tag{3.1}$$

式中： x 为特征的原始观测值， μ 、 σ 分别为该特征在训练集上的均值与标准差， x^* 为标准化后的无量纲特征值。为严格规避数据信息泄露问题，验证集与测试集的标准化变换，均统一采用训练集计算得到的统计参数执行。

3.1.3 特征确定

为构建具有物理意义的排放因子预测模型，本研究基于排放生成机理与现有研究基础，从发动机工况、驾驶工况、气象特性、排气特性、地理特性五个维度，筛选得到模型输入特征集，具体信息如表3.2所示。

表 3.2 排放因子预测模型输入特征集

特征类别	特征名称	符号	数据来源	单位
发动机工况	发动机转速	ES	OBD 接口	rpm
	冷却液温度	CLT	OBD 接口	°C
	实际扭矩百分比	TQ	OBD 接口	%
驾驶工况	车速	V	GPS 模块	km/h
	加速度	A	差分计算	m/s ²
	车辆比功率	VSP	公式计算	kW/t
气象特性	环境温度	AT	微型气象站	°C
	环境压强	AP	微型气象站	kPa
	相对湿度	ARH	微型气象站	%
排气特性	排气温度	ET	PEMS 分析仪	°C
	排气压力	EP	PEMS 分析仪	kPa
地理特性	海拔高度	Alt	GPS 模块	m

发动机工况是决定 CO₂ 生成的核心内因。其中，发动机转速与实际扭矩直接决定发动机瞬时功率输出，二者乘积与瞬时燃油消耗率近似呈正比，与 CO₂

排放存在直接物理关联；冷却液温度可表征发动机热平衡状态，是反映燃烧效率的重要辅助特征。

驾驶工况是影响 CO₂ 排放的主要外因。车速与加速度直接决定车辆行驶阻力与动力需求，是高排放工况的核心表征参数，其中车速由 GPS 模块实测，加速度由相邻采样时刻车速差分计算得到；车辆比功率（VSP）综合覆盖了滚动阻力、空气阻力、坡道阻力等行驶阻力的影响，可全面表征车辆动力需求与排放的关联关系，其计算公式如式（3.2）所示：

$$VSP = v(1.1 \times a + 9.81 \times s + 0.132) + 0.302 \times 10^{-3} \times v^3 \quad (3.2)$$

式中， VSP 为车辆比功率（kW/t）， v 为车辆行驶速度（m/s）， a 为行驶加速度（m/s²）， s 为道路坡度。

气象特性与地理特性通过改变发动机进气状态影响燃烧过程。环境温度直接决定进气温度，对缸内燃烧过程影响显著；环境压强、相对湿度与海拔高度会改变进气充量密度与氧含量，进而影响燃油燃烧效率与 CO₂ 排放水平。

排气特性可表征尾气后处理过程对排放的影响。排气温度反映燃烧热力学状态，排气压力与排气系统背压直接相关，二者共同表征发动机燃烧效率与后处理系统工作状态。本研究前期台架试验结果表明，排气背压升高会显著增加发动机泵气损失与燃油消耗率，直接影响 CO₂ 排放，因此将排气压力作为关键特征纳入模型。

3.2 基于深度特征交互与集成学习的 CO₂ 排放因子预测方法

为准确预测机动车真实行驶时的 CO₂ 排放因子，本章提出一种注意力增强特征交互深度集成学习（Attention-enhanced Feature Interaction Deep Ensemble, AFIDE）方法。该方法的总体框架如图3.3所示，数据流向从左至右依次为特征输入、多模型并行预测与自适应融合，核心由以下三个模块构成：

（1）注意力增强特征交互模块（Attention-enhanced Feature Interaction Module, AFIM）：作为框架的深度学习分支，该模块接收预处理后的 12 维特征输入，通过注意力机制自动挖掘特征间的高阶交互关系，同时提取表征当前驾驶工况的语义向量，最终经多层感知机输出深度模型的预测值 $\hat{y}_{deep}$ 。

（2）梯度提升预测模块：作为传统树模型分支，该模块并行引入 XGBoost 和 CatBoost 两种主流梯度提升算法，利用集成树模型处理结构化表格数据的鲁棒性优势，分别独立建模并输出预测值 $\hat{y}_{xgb}$ 与 $\hat{y}_{cat}$ 。

（3）工况感知自适应融合模块：为改善传统集成策略固定权重分配的不足，该模块设计动态加权机制，结合原始输入特征、各分支预测值与 AFIM 提取的工况语义向量，计算各模型输出的动态权重，并通过加权求和得到 CO₂ 排放因子

的最终预测值 $\hat{y}$ 。

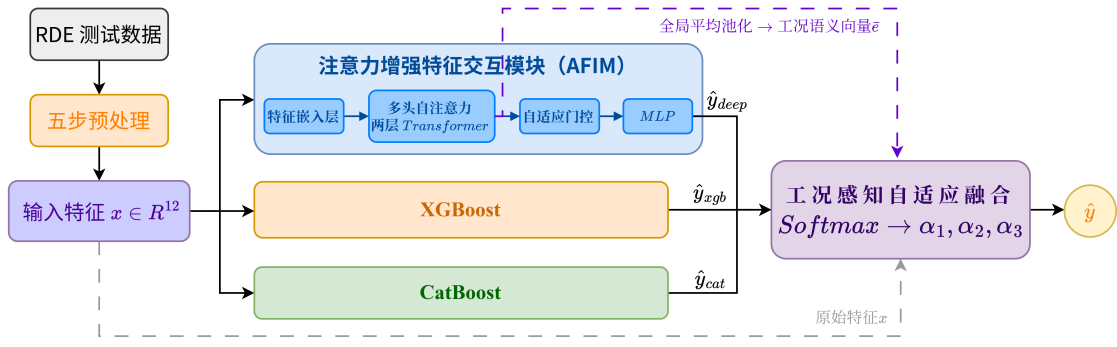


图 3.3 注意力增强特征交互深度集成学习方法框架图

3.2.1 注意力增强特征交互模块

注意力增强特征交互模块 (AFIM) 是 AFIDE 方法的深度学习分支, 核心功能为挖掘并建模多维输入特征间的高阶非线性交互关系, 同时提取可表征瞬态驾驶工况的语义特征。模块整体分为四个环节, 具体实现如下:

(1) 特征嵌入与语义编码

针对不同输入特征分布特性的差异化问题, 模块对维度为 M (本章 $M = 12$) 的输入特征向量 $\mathbf{x} = [x_1, x_2, \dots, x_M] \in \mathbb{R}^M$, 采用独立参数的嵌入层, 将每个标量特征 x_i 映射至 d 维高维表征空间:

$$\mathbf{e}_i = \text{Dropout}(\text{ReLU}(\mathbf{W}_i^{\text{emb}} x_i + \mathbf{b}_i^{\text{emb}})) \quad (3.3)$$

式中, $\mathbf{W}_i^{\text{emb}}$ 、 $\mathbf{b}_i^{\text{emb}}$ 为第 i 个特征的嵌入权重与偏置。为保留特征的语义属性, 引入可学习的特征类型编码 $\mathbf{p}_i \in \mathbb{R}^d$, 得到初始特征矩阵:

$$\mathbf{E}^{(0)} = [\mathbf{e}_1 + \mathbf{p}_1, \mathbf{e}_2 + \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{e}_M + \mathbf{p}_M]^T \in \mathbb{R}^{M \times d} \quad (3.4)$$

(2) 多头自注意力高阶特征交互

为建模特征间的复杂耦合关系, 模块采用 $L = 2$ 层 Transformer 块堆叠的多头自注意力机制, 通过缩放点积计算特征间的动态相关性, 注意力权重直接表征模型预测 CO₂ 排放时对不同特征交互的关注程度。两层堆叠结构可将特征交互从一阶直接交互拓展至高阶组合交互, 显著提升模型对复杂排放规律的拟合能力。

(3) 工况自适应门控加权

针对不同工况下主导排放的关键特征存在动态差异的问题, 模块设计自适应门控机制实现特征的动态筛选。首先通过全局平均池化, 从最后一层 Transformer 的输出 $\mathbf{E}^{(L)}$ 中提取工况语义向量 $\bar{\mathbf{e}} \in \mathbb{R}^d$, 表征当前综合驾驶状态:

$$\bar{\mathbf{e}} = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \mathbf{e}_i^{(L)} \quad (3.5)$$

以 $\mathbf{x}$ 与 $\bar{\mathbf{e}}$ 的拼接结果为条件输入，经两层前馈网络生成各特征的门控权重，对交互特征进行动态缩放：

$$\mathbf{g} = \sigma(\mathbf{W}_{g2} \cdot \text{ReLU}(\mathbf{W}_{g1}[\mathbf{x}; \bar{\mathbf{e}}] + \mathbf{b}_{g1}) + \mathbf{b}_{g2}) \quad (3.6)$$

$$\mathbf{e}'_i = g_i \cdot \mathbf{e}_i^{(L)} \quad (3.7)$$

式中， $\mathbf{W}_{g1}$ 、 $\mathbf{W}_{g2}$ 为门控网络权重， $\mathbf{g} \in [0, 1]^M$ 为门控权重向量， σ 为 Sigmoid 激活函数。该机制可根据瞬态工况自动强化关键特征和抑制冗余信息，同时提取的 $\bar{\mathbf{e}}$ 将同步输入至后续融合模块。

(4) 模块预测输出

将门控处理后的特征展平拼接，输入至多层感知机（MLP）得到深度学习模块的最终预测值：

$$\hat{y}_{deep} = \text{MLP}([\mathbf{e}'_1; \mathbf{e}'_2; \dots; \mathbf{e}'_M]) \quad (3.8)$$

本章实验中，MLP 采用 $Md \rightarrow 512 \rightarrow 128 \rightarrow 1$ 的神经元逐层递减结构（嵌入维度 $d = 128$ ），隐藏层配置 ReLU 激活函数与 Dropout 操作，以缓解模型过拟合风险。

3.2.2 异构预测与工况感知自适应融合模块

在 AFIM 深度学习分支之外，AFIDE 方法的异构集成结构还并行引入了 XGBoost 和 CatBoost 两种主流梯度提升树算法。这两种算法在处理结构化表格数据时，具备较强的非线性拟合能力与抗过拟合鲁棒性，可与基于自注意力的深度学习模块形成优势互补。梯度提升预测模块分别独立建模，生成两个标量预测值 $\hat{y}_{xgb}$ 和 $\hat{y}_{cat}$ ，与 AFIM 模块输出的预测值 $\hat{y}_{deep}$ 共同作为后续融合模块的输入。

传统集成学习多采用简单平均或固定权重投票策略整合多个基学习器，但实际道路行驶中，车辆会经历起步、急加速、匀速巡航等多种复杂动态的瞬态工况，不同工况下各单一预测模型的拟合可靠性存在明显差异。为此，本模块设计了一种工况感知的自适应融合策略，旨在根据当前输入特征的分布状态，动态调整对各候选模型的信任权重。

该自适应融合模块的核心是一个基于多层感知机的元网络。对于每个输入样本，融合网络的输入由三部分物理信息拼接而成：原始特征向量 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^M$ （提供基础状态信息），三个候选模型的预测值 $\hat{\mathbf{y}} = [\hat{y}_{deep}, \hat{y}_{xgb}, \hat{y}_{cat}] \in \mathbb{R}^3$ （提供各模型的独立决策信息），以及由 AFIM 模块池化提取的工况语义向量 $\bar{\mathbf{e}} \in \mathbb{R}^d$ （提供深层抽象的工况上下文感知）。动态融合权重向量的计算过程可表示为：

$$[\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3] = \text{softmax}(\text{MLP}_{fusion}([\mathbf{x}; \hat{\mathbf{y}}; \bar{\mathbf{e}}])) \quad (3.9)$$

式中，拼接后的输入张量维度为 $M + 3 + d$ （本章中为 $12 + 3 + 128 = 143$ 维）。 MLP_{fusion} 的网络结构配置为 $143 \rightarrow 128 \rightarrow 64 \rightarrow 3$ ，隐藏层采用 ReLU 激活函数，

并辅以 Dropout 正则化缓解过拟合。网络最终通过 Softmax 激活函数输出 AFIM、XGBoost 和 CatBoost 各自对应的融合权重 $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ ，确保 $\sum_i \alpha_i = 1$ 且 $\alpha_i > 0$ 。

获取动态权重后，最终的 CO₂ 排放因子预测值 $\hat{y}$ 由各候选模型预测值的线性加权求和得到：

$$\hat{y} = \alpha_1 \hat{y}_{deep} + \alpha_2 \hat{y}_{xgb} + \alpha_3 \hat{y}_{cat} \quad (3.10)$$

该融合机制的合理性在于赋予模型在特征空间中自适应“软选择”的能力：在特征交互关系高度复杂的急加速工况下，融合网络倾向于分配更高权重给具备深度特征挖掘能力的 AFIM 模块；而在特征映射关系相对平稳的匀速巡航路段，表现稳定的梯度提升树模型将会获得更高权重。通过这种数据驱动的动态调度，进一步提升了整体预测方法的工况适应性与预测精度。

3.2.3 模型训练策略

为保障异构模块间训练的独立性并严格规避数据泄漏风险，本章为 AFIDE 方法设计了三阶段级联训练策略，各阶段具体流程如下：

第一阶段：多分支预测组件独立训练。该阶段中，AFIM、XGBoost 与 CatBoost 三个预测组件在训练集上完全独立训练。其中，树模型通过监控验证集的均方误差（MSE）执行早停迭代；AFIM 模块则采用 Huber 损失函数^[58]进行参数优化。具体而言，Huber 损失函数的定义如下：

$$\mathcal{L}_{\text{Huber}} = \begin{cases} \frac{1}{2}(y - \hat{y})^2, & |y - \hat{y}| \leq \delta \\ \delta \left(|y - \hat{y}| - \frac{1}{2}\delta \right), & |y - \hat{y}| > \delta \end{cases} \quad (3.11)$$

式中，阈值参数设定为 $\delta = 1.0$ 。与 MSE 相比，Huber 损失在预测误差较小时保持二次函数的精细拟合特性，在误差较大时则转换为线性惩罚。该设计可有效抑制极端异常样本引发的梯度爆炸问题，更适配具有长尾分布特征的真实行驶排放数据。

第二阶段：基于交叉验证的融合特征构建。为给后续融合网络提供无偏训练数据，本研究采用五折交叉验证（5-Fold Out-of-Fold, OOF）策略。具体操作为：将原始训练集随机划分为 5 个互斥子集，每次选取其中 4 折训练上述三个预测组件，并对剩余 1 折进行预测。经 5 次循环迭代，训练集中的每个样本均可获得一个未参与该样本建模的无偏预测值；同时，同步提取 AFIM 模块在对应前向传播中生成的工况语义向量 $\bar{\mathbf{e}}$ 。此过程生成的 OOF 预测值与全局验证集预测值合并，构成融合网络的训练数据集。

第三阶段：工况感知融合网络训练。该阶段中，冻结前置 AFIM、XGBoost 和 CatBoost 的所有网络权重，仅对融合网络进行参数更新。为确保两个阶段的优化过程严格解耦，传入融合网络的工况语义向量 $\bar{\mathbf{e}}$ 在 PyTorch 计算图中执行梯

度截断操作，阻止融合网络的误差反向传播至 AFIM 模块。在损失计算方面，融合网络的训练损失同样采用 Huber 损失函数进行优化。为实施早停策略，融合网络的整体训练数据在内部按 8:2 的比例随机划分为训练子集与验证子集，并以验证子集上的 MSE 指标作为训练终止的监控依据。

实验中涉及各预测组件及融合网络的超参数配置，均通过初步网格搜索与验证集早停策略确定，具体设定如表3.3所示。

表 3.3 AFIDE 方法各模块超参数配置

模块名称	超参数名称	设定值/配置
AFIM	核心架构维度	嵌入维度 $d = 128$, 头数 $H = 4$, 层数 $L = 2$
	优化器与正则化	AdamW, 权重衰减 10^{-4} , Dropout 0.1
	学习率策略	初始 5×10^{-4} , 线性预热 (10 epochs) + 余弦退火
	训练控制	批量大小 256, 最大范数裁剪 1.0, 早停 Patience 30
XGBoost	树结构	树数量 (n_estimators) 1500, 最大深度 6
	学习率与采样	学习率 0.1, 样本/特征采样率 0.8
CatBoost	树结构与正则化	迭代次数 1700, 最大深度 8, L_2 正则化 3
	学习率	学习率 0.1
融合网络	网络架构	MLP 层级维度 $[143 \rightarrow 128 \rightarrow 64 \rightarrow 3]$
	优化器与训练	Adam, 学习率 5×10^{-4} , 早停 Patience 15

3.3 实验结果与分析

为系统验证本章所提 AFIDE 方法的预测性能与设计合理性，本节围绕机动车 CO₂ 排放因子预测任务，开展多维度实验验证与分析；通过依次完成数据集统计特性分析、实验环境与评价指标设定、主流方法横向性能对比、核心组件消融验证，以及模型拟合能力可视化分析，论证所提方法的先进性与有效性。

3.3.1 数据集描述

本研究依托课题组织的 RDE 实车测试数据开展实验，经过前文的预处理流程，最终选取了 36594 条有效数据构成本文实验的数据集，每条数据包含 12 个特征和 1 个预测目标，具体的描述性统计信息如表3.4所示。

发动机工况参数中，发动机转速分布范围覆盖 437.5 rpm 至 2981.0 rpm，标准差达 406.58 rpm，充分体现了实际道路行驶中频繁启停、加减速带来的剧烈工况波动；冷却液温度均值稳定在 90°C 附近且方差较小，验证了前文冷启动数据

表 3.4 数据集特征变量描述性统计

特征	单位	均值	标准差	最小值	最大值
ES	rpm	1505.83	406.58	437.50	2981.00
CLT	°C	90.10	5.96	74.00	106.00
TQ	%	2.54	8.42	0.00	62.00
V	km/h	51.81	32.85	0.00	119.90
A	m/s ²	-0.00	0.42	-1.79	1.78
VSP	kW/t	3.92	6.38	-21.75	30.22
AT	°C	26.47	3.98	20.39	33.58
ARH	%	42.25	15.12	18.10	72.03
AP	kPa	101.41	0.49	100.17	102.20
ET	°C	119.79	40.69	44.64	257.89
EP	kPa	101.26	0.64	98.67	103.61
Alt	m	20.17	9.70	-14.00	59.00
CO ₂	g/s	2.33	2.08	0.00	11.38

剔除流程的有效性，确保建模数据均处于发动机热稳定工作区间。针对实际扭矩百分比特征整体均值仅 2.54% 且存在大量零值的问题，考虑到实际应用中传感器数据缺失或协议未开放是常见情形，本研究仍保留该特征，以验证所提方法对高稀疏特征的建模鲁棒性与自适应筛选能力。

驾驶工况参数基本涵盖了车辆真实行驶的全状态。车速最高 120km/h，平均车速为 51.81km/h，包含了市区低速、郊区中速与高速公路高速三类典型工况；加速度均值趋近于零，符合长距离行驶过程中加减速行为整体平衡的物理规律；车辆比功率呈现显著的右偏分布特性，标准差达 6.38 kW/t，反映了车辆克服瞬态道路阻力时做功需求的大幅波动，与 CO₂ 排放的瞬态变化特性高度匹配。

环境与地理参数的波动范围相对有限，这是由于所有测试均在同一城市区域内开展，海拔与气象条件的整体跨度较小。排气特性参数中的排气温度跨度从 44.64°C 至 257.89°C，直观反映了发动机从怠速到全功率输出的区间内燃烧过程热力学状态的显著差异，为排放预测提供了关键的燃烧状态表征信息。

作为预测目标的 CO₂ 排放因子，呈现出排放预测领域典型的长尾分布特征：其整体均值为 2.33 g/s，但在急加速或高负荷爬坡等极端瞬态工况下，排放峰值可达 11.38 g/s，约为均值的 5 倍。这种正常工况数据紧密、极端高排放数据稀疏的不平衡分布特性，对预测模型的非线性拟合能力、极端工况泛化能力与损失函数的鲁棒性均提出了较高要求，也印证了前文引入 Huber 损失函数与深度特征交互机制的必要性与合理性。

3.3.2 实验设置与评价指标

为严格保障实验的可靠性与结果的可复现性，本章所有模型训练、验证与测试均在统一的软硬件环境中完成。计算平台采用 Windows 11 操作系统，硬件配置为 Intel Core i5-13600KF 处理器、32 GB 系统内存、NVIDIA GeForce RTX 4070 独立显卡；软件环境以 Python 3.11 为核心编程语言，PyCharm 为集成开发环境（IDE），深度学习模块基于 PyTorch 2.7.1 框架构建并通过 CUDA 11.8 实现 GPU 并行加速，传统梯度提升树基线模型及后续特征重要性解释依托 XGBoost、CatBoost、SHAP 等主流开源算法库实现。

为全面客观地评估模型预测性能，本实验选取四个主流评价指标：决定系数（ R^2 ）、均方误差（MSE）、均方根误差（RMSE）和平均绝对误差（MAE）。其中， R^2 用于衡量模型对目标变量数据方差的解释能力，取值范围通常在 0 到 1 之间，数值越接近 1 则拟合优度越高；MSE、RMSE 与 MAE 用于量化预测值与真实值的绝对偏差，数值越小代表预测精度越高，三者结合可同时评估模型的整体偏差、极端偏差与平均偏差。各指标的具体计算公式如下：

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2} \quad (3.12)$$

$$MSE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (3.13)$$

$$RMSE = \sqrt{MSE} \quad (3.14)$$

$$MAE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |y_i - \hat{y}_i| \quad (3.15)$$

式中， y_i 为第 i 个样本的 CO₂ 排放实际观测值， $\hat{y}_i$ 为模型输出的对应预测值， $\bar{y}$ 为测试集中实际观测值的算术平均值， N 为参与评估的样本总数。

3.3.3 整体预测性能评价

为验证所提方法的预测性能与先进性，本章选取 5 类主流算法作为基线模型，在完全一致的数据集、训练验证规则与软硬件环境下开展公平对比实验。基线模型涵盖经典 Bagging 集成、Boosting 集成、基础神经网络与当前梯度提升树代表算法，具体包括：随机森林（RF）^[59]、AdaBoost^[60]、多层感知机（MLP）^[61]、XGBoost^[49] 与 CatBoost^[50]，各模型的核心超参数均通过网格搜索与验证集早停确定，保证所有基线模型处于最优性能状态。

AFIDE 方法与上述方法在测试集上的性能表现如表 3.5 所示。

从实验结果来看，基于梯度提升的 XGBoost 与 CatBoost 在结构化排放数据的拟合上表现更优，其中 CatBoost 以 $R^2 = 0.8150$ 取得基线模型最优性能，这与

表 3.5 各方法的预测性能对比

方法	R^2	MSE	RMSE	MAE
RF	0.7997	0.2033	0.4508	0.3164
AdaBoost	0.8000	0.2029	0.4505	0.3287
MLP	0.7976	0.2054	0.4532	0.3229
XGBoost	0.8109	0.1919	0.4380	0.3069
CatBoost	0.8150	0.1877	0.4332	0.3044
AFIDE	0.8246	0.1780	0.4219	0.2926

其有序提升机制对梯度偏差的缓解能力直接相关；而无专门特征交互设计的基础 MLP 网络性能最差，验证了显式特征交互建模对排放预测任务的必要性。

本文提出的 AFIDE 方法在 R^2 、MSE、RMSE、MAE 四项指标中均超越所有基线模型，相较于最优基线 CatBoost，MSE 相对下降 5.2%，RMSE 与 MAE 分别下降 2.6% 与 3.9%，预测精度实现稳定提升。这一结果充分验证了方法设计的合理性：AFIM 模块的注意力机制可有效挖掘特征间的高阶非线性交互关系，工况感知自适应融合策略则可根据瞬态工况动态优化各基模型的权重分配，二者结合实现了对复杂瞬态排放规律的精准拟合，有效提升了模型的整体预测性能。

3.3.4 模型消融实验

为系统验证 AFIDE 方法中各核心组件的独立贡献与协同增益，本节设计了多组单因素消融实验，各方法变体在测试集上的性能表现如表3.6所示。

表 3.6 AFIDE 消融实验结果

方法变体	R^2	MSE	RMSE	MAE
仅 AFIM（深度模块）	0.8061	0.1968	0.4436	0.3042
XGBoost+CatBoost（加权融合）	0.8192	0.1835	0.4283	0.2993
AFIDE（固定等权融合）	0.8236	0.1790	0.4231	0.2932
AFIDE（单头注意力）	0.8225	0.1801	0.4244	0.2949
AFIDE（无门控机制）	0.8240	0.1785	0.4226	0.2935
AFIDE（完整模型）	0.8246	0.1780	0.4219	0.2926

从实验结果来看，首先验证了异构融合的必要性：仅采用 AFIM 深度学习模块时， R^2 为 0.8061，低于 XGBoost、CatBoost 的单模型最优性能，反映出当前结构化排放表格数据上纯深度模型的独立拟合存在一定局限；但在树模型组合（XGBoost+CatBoost， $R^2 = 0.8192$ ）基础上引入 AFIM 并固定等权融合后， R^2 提

升至 0.8236，说明 AFIM 虽单体性能受限，却成功学习到与树模型互补的深层特征交互信息，异构融合的互补增益有效提升了整体预测上限。

其次验证了深度学习组件中多头自注意力机制的关键作用：将完整模型的 4 头多头自注意力退化为单头后， R^2 降至 0.8225，为所有单因素消融变体中性能损失最大的一项，这主要是因为多头机制允许模型从不同特征表示子空间中并行捕捉多样化的特征组合与交互模式，这对解析 CO₂ 排放的复杂物理依赖起到了重要作用。

最后验证了动态机制的微观价值：移除自适应门控机制或将工况感知自适应融合退化为固定等权融合后， R^2 分别微降至 0.8240 和 0.8236；尽管两个动态组件在全局评价指标上的绝对性能提升有限，但正如后文第3.4.2节的融合权重分析所示，它们赋予了模型在微观单样本层面的瞬态工况感知能力，可根据当前输入特征动态调整各子模型的融合权重，提供了固定集成策略所缺乏的灵活性与物理可解释性。

3.3.5 预测值与真实值对比

综合前文对比实验与消融实验的结果，AFIDE 方法在各项评价指标上均展现出了优异的性能。为进一步从微观样本层面直观验证模型的瞬态拟合能力与全局泛化性，本节分别通过时序曲线与散点图开展可视化分析。

图3.4选取测试集中前 500 个连续瞬态样本，展示了预测值与实际观测值的详细对比。可以看出，模型预测曲线与实际 CO₂ 排放的变化趋势高度一致：在匀速行驶等排放平稳段，预测精度较高；在频繁加减速导致的排放波动区间，也能较好地捕捉瞬态变化。仅在部分标准化值超过 3 的剧烈排放尖峰处，模型呈现轻微低估倾向——这一现象在排放预测研究中较为常见，主要源于本研究采用的 Huber 损失函数对极大误差采用线性惩罚，通过牺牲极值点的绝对拟合精度，换取了整体模型抗异常值干扰的鲁棒性。

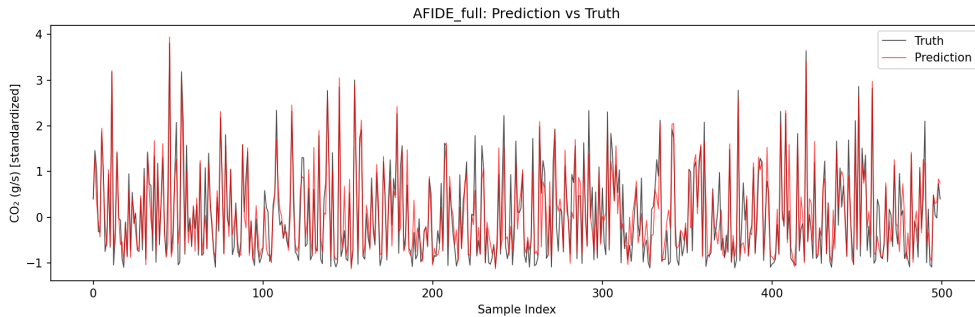


图 3.4 预测值与真实值曲线对比图

图3.5展示了测试集全体样本的散点分布，说明了模型的预测精度（ $R^2 = 0.8246$ ）与区间误差特性：数据点整体紧密分布在 $y = x$ 的理想预测对角线附近，

低、中排放区间（标准化值 $[-1, 1]$ ）收敛性好、偏差小；高排放区域（标准化值 > 2 ）则呈现轻微离散趋势，且多数预测点位于对角线下方，表明模型对极端高排放样本的预测存在一定保守性。结合 RDE 测试数据的物理特性可以得出，此类极端高排放对应急加速、高负荷爬坡等发生频率低的瞬态工况，导致训练时高负荷样本相对稀疏；同时，高负荷下缸内燃烧与排放的高度非线性变化，也客观增加了精准预测的难度。

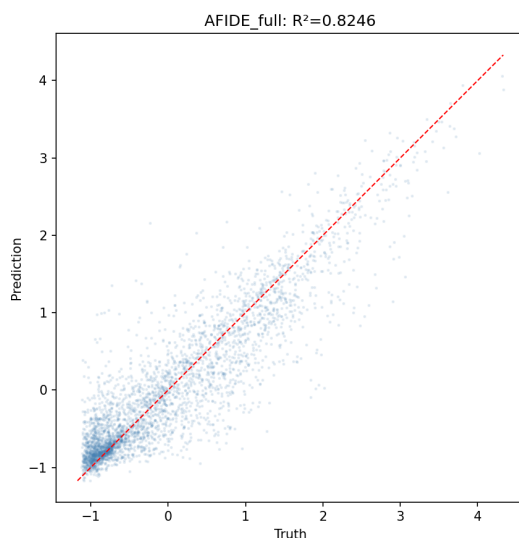


图 3.5 预测值与真实值散点对比图

3.4 模型可解释性与机制分析

深度集成学习模型由于内部结构复杂，通常面临可解释性较弱的问题。为了验证 AFIDE 方法不仅实现了较好的数据拟合，而且能够有效捕捉机动车 CO₂ 排放的物理规律，本节从输入特征的影响机制和融合网络的动态调度策略两方面，对模型进行事后可解释性分析。

3.4.1 基于 SHAP 的特征物理驱动机制分析

为挖掘模型预测的内在物理驱动机制，本节采用基于合作博弈论的 SHAP (SHapley Additive exPlanations) 算法^[62]开展特征归因分析。选取基线模型中性能最优的 CatBoost 单模型，计算全部 12 个输入特征的 SHAP 值，量化各特征对 CO₂ 排放预测的贡献程度与作用方向，特征全局重要性排序与边际影响分布分别如图3.6、图3.7所示。

从归因结果来看，发动机工况参数是 CO₂ 排放的主导驱动因素。其中，发动机转速 (EngineSpeed) 以平均 $|\text{SHAP}| = 0.395$ 位列所有特征首位，与排放水平呈明显的单调正相关，完全符合内燃机燃烧基本原理——转速直接决定单位时间内的

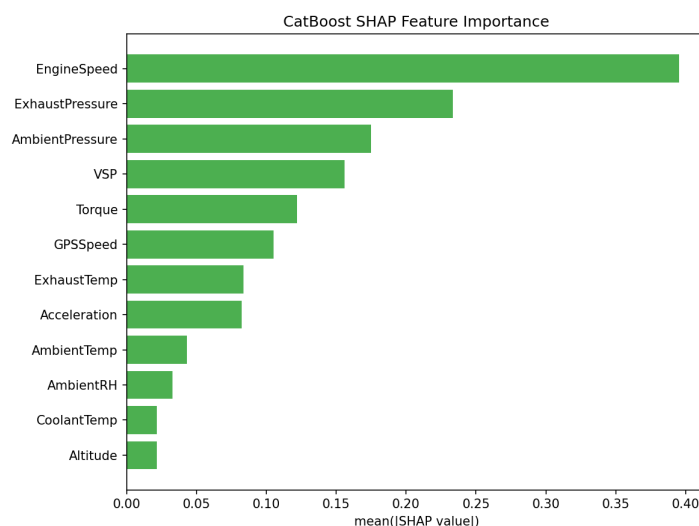
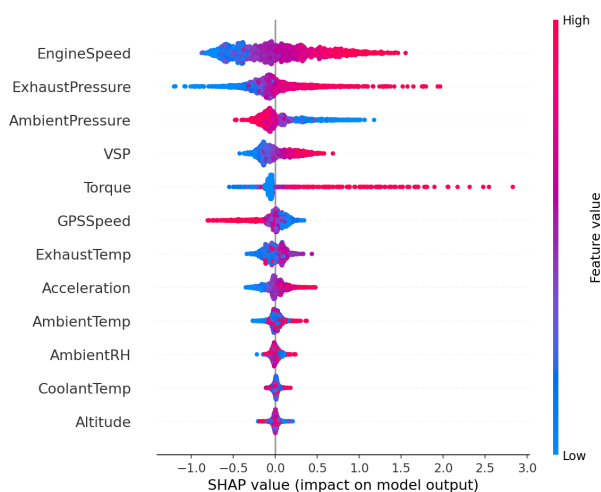


图 3.6 基于 CatBoost 的 SHAP 特征重要性排序

图 3.7 各特征对 CO₂ 排放预测影响的 SHAP 蜂群图

燃烧循环次数,是影响燃油消耗与碳排放的核心变量。排气压力 (ExhaustPressure, 平均 $|SHAP| = 0.233$) 为第二关键特征,其瞬态变化可直接反映进排气系统的背压特性,与发动机负荷高度相关;SHAP 算法从数据层面独立识别出该特征的核心作用,与本研究前期台架试验“背压增大会通过泵气损失提升碳排放”的结论完全吻合,既印证了试验结论的可靠性,也验证了 AFIDE 方法特征工程设计的物理合理性。

针对高度稀疏的实际扭矩百分比 (Torque) 特征,尽管其全局重要性排名第五 (平均 $|SHAP| = 0.122$),但蜂群图显示,其非零大扭矩区间对应极高的正向 SHAP 贡献。这表明,即使输入特征存在严重稀疏性,模型仍能在特征有效激活时,准确捕捉其与高排放工况的物理关联,充分验证了模型的抗干扰能力与鲁棒性。

环境参数与行驶工况构成了排放预测的第二梯队影响因素,其中环境压力

(AmbientPressure, 平均 $|\text{SHAP}| = 0.175$) 与车辆比功率 (VSP, 平均 $|\text{SHAP}| = 0.156$) 贡献显著, 二者分别通过改变发动机充气效率和表征车辆瞬时功率需求影响排放水平。而海拔、冷却液温度、相对湿度的全局贡献率较低, 主要源于本次测试的海拔起伏小、建模数据均处于发动机热机稳态, 且湿度对汽油车 CO₂ 排放的直接物理影响较小。

3.4.2 自适应融合网络的动态调度分析

为验证工况感知自适应融合网络的设计合理性, 并揭示其性能提升的内在机制, 本节统计分析了该模块在测试集所有样本上的融合权重分配规律, 结果如图3.8所示。

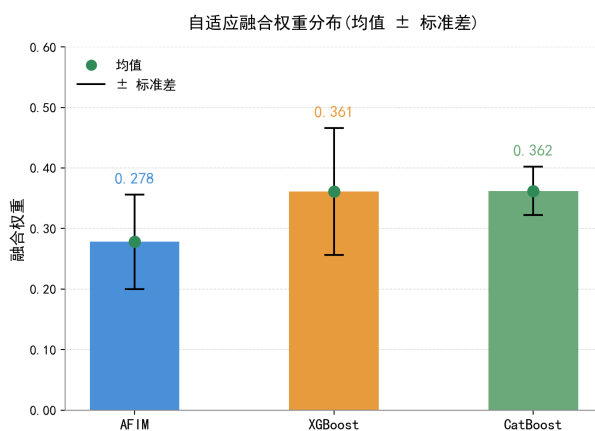


图 3.8 自适应融合权重分布 (均值 $\pm$ 标准差)

从全样本统计结果来看, 融合网络的权重分配呈现出清晰的“基础兜底 + 动态增强”双模式特征。全局平均权重中, CatBoost (0.362) 与 XGBoost (0.361) 显著高于 AFIM 模块 (0.278), 说明梯度提升树算法在结构化排放数据中的整体稳定性更优, 被融合网络赋予了更高的基础信任度, 承担绝大多数工况下的基础预测任务。

而权重标准差的差异, 直观体现了融合网络的动态调度能力: CatBoost 的权重标准差仅为 0.033, 波动极小; AFIM 与 XGBoost 的权重标准差则分别达 0.118 和 0.120, 呈现出明显的样本间波动性。这一差异表明, 融合网络在不同瞬态工况下对 AFIM 与 XGBoost 的信任程度存在较大的动态调整空间——在特征映射关系相对简单的稳态工况下, 这两个模块的权重可能被适当压低; 而在特征交互较为复杂的工况中, 其权重被相应提升以承担更多预测任务。

这种逐样本的自适应权重分配机制, 证明融合网络并未退化为静态加权平均, 而是可根据不同工况动态优化各子模型的贡献占比。这一结论不仅从机制层面解释了前文消融实验中自适应融合优于固定权重融合的核心原因, 也充分论证了本章所提异构集成框架设计的合理性与先进性。

3.5 本章小结

针对机动车实际行驶中瞬时 CO₂ 排放预测难度大的问题，本章提出了一种融合物理先验的注意力增强特征交互深度集成学习方法（AFIDE），实现了更精确的 CO₂ 排放因子预测，核心工作如下：

第一，通过发动机台架试验揭示了排气背压对 CO₂ 排放的影响机制，为模型特征工程提供了物理先验支撑，解决了数据驱动建模特征选择缺乏物理依据的问题；第二，基于 RDE 测试数据构建了标准化数据集与多维特征体系，搭建了融合深度学习与梯度提升树的异构集成框架，并设计工况感知自适应融合策略，突破了固定权重泛化性不足的局限；第三，通过对比实验与消融实验，验证了本文提出的方法在预测性能上的优势性，且具备明确的物理可解释性。

本章解决了排放清单核算逻辑“排放量 = 排放因子 × 交通活动水平”中排放因子获取的问题，为后续清单编制提供了底层方法支撑。然而，要完成全路网逐路段、逐时段的排放量核算，还需获取覆盖全路网的交通活动水平数据——其中路段平均行驶速度起着双重核心作用：一方面，它是排放因子查找表的关键检索参数，另一方面，它是后续通过宏观交通流模型反推路段交通流量的核心输入。因此，下一章将围绕大规模异质路网的交通速度预测问题展开研究。

第4章 面向大规模异质路网的层级感知交通速度预测方法

本章旨在解决城市全域异质路网场景下的交通速度预测问题。首先给出交通状态预测问题的形式化定义，并介绍路网拓扑构建与时空张量生成等数据预处理流程。然后，提出一种融合层级感知与节点自适应的时空图卷积网络，详细介绍了道路层级嵌入、部分层级全局上下文、动态跨等级注意力、时间上下文门控与节点感知归一化模块的设计原理。最后，在济南市全路网数据集上开展模型对比实验与消融实验，验证了本章所提方法在大规模异质路网速度预测任务中的有效性与稳健性。

4.1 交通状态预测问题定义与数据预处理

4.1.1 交通状态预测问题的形式化定义

城市路网的拓扑结构与交通状态的时空演化规律，可建模为时空属性增强的有向图 $\mathcal{G} = (\mathcal{V}, \mathcal{E}, \mathbf{A})$ 。其中， $\mathcal{V}$ 为路段节点集合，集合规模 $|\mathcal{V}| = N$ 代表路网中的节点总数； $\mathcal{E} \subseteq \mathcal{V} \times \mathcal{V}$ 为节点间物理连通关系构成的边集合，对应路网中路段的通行连接关系； $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ 为刻画路网节点间空间依赖关系的邻接矩阵。

定义 4.1 (时空观测张量) 设历史观测窗口长度为 T_{in} ，输入特征维度为 C ，则定义路网 $\mathcal{G}$ 上的时空输入数据为三阶张量 $\mathcal{X} \in \mathbb{R}^{N \times T_{in} \times C}$ ，其中张量元素 $x_{i,t,c}$ 代表节点 v_i 在时刻 t 的第 c 维特征观测值。

定义 4.2 (交通状态预测问题) 给定历史观测窗口 T_{in} 内的时空观测张量序列 $\mathcal{X}^{(t-T_{in}+1:t)}$ 与路网拓扑结构 $\mathcal{G}$ ，交通状态预测任务的目标是预测未来 T_{out} 个时间步内的交通状态矩阵序列。该过程可形式化表述为学习一个非线性映射函数 $f(\cdot)$ ，使得预测值与真实值之间的误差最小化：

$$[\mathcal{X}^{(t-T_{in}+1)}, \dots, \mathcal{X}^{(t)}; \mathcal{G}] \xrightarrow{f(\cdot)} [\hat{\mathcal{Y}}^{(t+1)}, \dots, \hat{\mathcal{Y}}^{(t+T_{out})}] \quad (4.1)$$

其中， $\hat{\mathcal{Y}}^{(\tau)} \in \mathbb{R}^{N \times C'}$ 为时刻 τ 的预测输出张量。本研究中，设置预测目标维度 $C' = 1$ ，对应路段的平均行驶速度，历史观测窗口与预测窗口长度 $T_{in} = T_{out} = 3$ ，时间步粒度为 1 小时，二者均对应 3 小时的时间跨度。

4.1.2 城市路网拓扑构建与简化

在明确交通状态预测的形式化定义后，本节详细阐述核心图结构 $\mathcal{G}$ 的完整构建与拓扑简化流程。

本研究所采用的城市原始路网数据为 GIS 矢量格式 (.shp)，原始数据包含

大量细碎的道路 Link 单元。若直接以原始 Link 单元作为图节点建模，将导致节点规模过度膨胀、拓扑关系高度冗余，大幅提升时空图卷积神经网络的计算开销。为此，本研究设计了一套系统化的图拓扑构建与简化流程，在完整保留路网核心语义与拓扑连通性的前提下，有效降低图运算的计算复杂度。

首先，基于道路功能等级对原始路网开展类型筛选，仅保留高速公路（等级编码 00）、城市快速路（01）、国道（02）、省道（03）、县道（04）与市镇村道（06）六类主要道路。鉴于本研究的下游任务为城市机动车排放清单编制，匝道、人行道及园区内部路等道路主要承载非机动车与低速微循环车流，对机动车尾气排放核算的直接贡献极低，因此在筛选阶段予以剔除。

然后，针对原始路网中同一条连续道路被拆分为多个短 Link 单元的问题，本研究基于几何连续性与语义一致性准则完成链路合并处理。设原始 Link 单元集合为 $\mathcal{L} = \{l_1, l_2, \dots, l_M\}$ ，当相邻 Link 单元同时满足道路等级一致且方向连续（即 l_i 的终点与 l_j 的起点空间坐标重合，且路段走向夹角小于预设角度阈值）时，将其合并为一个独立的路段节点（Segment）。合并后路段的物理属性（如车道数）采用长度加权平均的方式重构：

$$\bar{n}_{seg} = \frac{\sum_{l \in seg} n_l \cdot d_l}{\sum_{l \in seg} d_l} \quad (4.2)$$

式中， n_l 与 d_l 分别为原始 Link 单元的车道数与长度， $\bar{n}_{seg}$ 为合并后路段节点 Segment 的等效车道数。经筛选与合并处理，济南市全域路网的原始近 27 万个 Link 单元被压缩至 41099 个候选路段节点，压缩比约为 7:1，有效剔除了路网中的冗余拓扑结构。

在图拓扑构建阶段，本研究基于路段间的有向连通关系生成邻接矩阵 $\mathbf{A}$ 。采用路段端点坐标精确匹配策略，根据路段的方向属性（单向/双向）确定其驶入与驶出端点；若路段 v_i 的驶出端点与路段 v_j 的驶入端点坐标完全匹配，则在图中建立有向边 $(v_i, v_j) \in \mathcal{E}$ 。

针对原始路网可能存在的拓扑孤岛问题，本研究提取图结构中的最大弱连通分量（Largest Weakly Connected Component, LWCC）作为最终预测任务的拓扑基底，保障时空特征在全局图网络中的连通性与传递效率：

$$g^* = \arg \max_{g_k \in WCC(g)} |\mathcal{V}_k| \quad (4.3)$$

式中， $WCC(g)$ 为图 g 中所有弱连通分量的集合。

最后，为满足图卷积神经网络的数值稳定性要求，本研究引入自环连接机制，对邻接矩阵进行对称归一化处理，以缓解多层图卷积信息聚合过程中可能出现的梯度消失与爆炸问题：

$$\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{D}^{-\frac{1}{2}}(\mathbf{A} + \mathbf{I}_N)\mathbf{D}^{-\frac{1}{2}} \quad (4.4)$$

式中, $\mathbf{I}_N$ 为 N 阶单位矩阵, $\mathbf{D}$ 为对应度矩阵, 其对角元素满足 $D_{ii} = \sum_j (A_{ij} + I_{ij})$ 。经过上述数据处理流程, 最终构建的城市异质路网图不仅具备清晰的层级语义特征, 也为后续层级感知模块的设计提供了高质量的拓扑输入。

4.1.3 跨模态特征融合与时空张量生成

浮动车轨迹数据与路网静态属性属于两类典型的异构数据源, 其来源与属性已在第2.5节详细阐述, 因此本章不再赘述。本节通过时空索引匹配与特征对齐实现二者的深度融合, 旨在构建适用于深度学习模型输入的统一时空张量表示。

浮动车轨迹数据映射至路网重构图拓扑的过程, 可分为空间索引匹配与时间维度聚合两个阶段。空间索引方面, 利用上节生成的“Link-Segment”映射表, 将原始 Link 记录准确匹配至简化后的路段节点索引; 因路网简化存在多 Link 合并为单 Segment 的情况, 所以该映射为典型的多对一关系; 未能匹配至路网拓扑的孤立游离记录, 直接作为噪声剔除。时间聚合方面, 将浮动车数据从原来的秒级粒度聚合至小时粒度, 针对同一小时粒度内的所有有效观测值, 通过以下算子计算路段平均行驶速度:

$$\bar{v}_{i,t} = \frac{\sum_{r \in \mathcal{R}_{i,t}} v_r}{|\mathcal{R}_{i,t}|}, \quad v_r = \frac{\text{roadLen}_r}{\text{travelTime}_r} \times 3.6 \quad (4.5)$$

式中, $\mathcal{R}_{i,t}$ 为时段 t 内匹配至路段节点 v_i 的有效轨迹记录集合; v_r 为单条轨迹记录的瞬时速度 (km/h); $\bar{v}_{i,t}$ 为聚合后的宏观交通状态特征。数据质量控制环节, 本研究设置物理阈值, 剔除路段长度异常、通行时长为零及速度超出合理物理范围的离群记录。

为全面刻画路网的时空演化特性, 本研究融合动态特征、时间编码特征与静态属性特征, 构建 16 维统一特征向量。动态特征 (2 维) 反映路段的实时交通状态, 包含平均速度与路况拥堵状态, 并采用 Min-Max 归一化将其映射至 $[0, 1]$ 区间。时间编码特征 (4 维) 利用正弦-余弦编码捕捉交通流的强周期性模式, 分别对日内周期 (Time-of-Day, TOD) 与周内周期 (Day-of-Week, DOW) 进行参数化表征:

$$\mathbf{x}_{tod}^{(t)} = \left[\sin\left(\frac{2\pi \cdot t_{day}}{24}\right), \cos\left(\frac{2\pi \cdot t_{day}}{24}\right) \right] \quad (4.6)$$

$$\mathbf{x}_{dow}^{(t)} = \left[\sin\left(\frac{2\pi \cdot d_{week}}{7}\right), \cos\left(\frac{2\pi \cdot d_{week}}{7}\right) \right] \quad (4.7)$$

式中, t_{day} 为当日时间步索引 (1 小时粒度下每天 24 步), d_{week} 为星期索引。静态属性特征 (10 维) 刻画路段固有的物理几何特性, 包括道路等级 (6 维 One-Hot 编码)、车道数分档 (3 维 One-Hot 编码) 和经对数变换与归一化处理的道路长

度（1 维）。上述异构特征沿通道维度拼接，形成节点 v_i 在时刻 t 的最终特征向量 $\mathbf{x}_{i,t} \in \mathbb{R}^{16}$ ：

$$\mathbf{x}_{i,t} = [\mathbf{x}_{dyn}^{(i,t)}, \mathbf{x}_{tod}^{(t)}, \mathbf{x}_{dow}^{(t)}, \mathbf{x}_{static}^{(i)}] \quad (4.8)$$

表4.1汇总了输入特征的维度组成与预处理方式。

表 4.1 输入特征维度汇总

特征类别	特征名称	维度	处理方式
动态特征	速度、路况状态	2	Min-Max 归一化
时间编码	日内周期 (TOD)、周内周期 (DOW)	4	正弦-余弦周期编码
静态属性	道路等级、车道数分档、路段长度	10	One-Hot 编码 / Log 变换
合计	—	16	—

数据集构建与划分方面，本研究选取济南市路网数据和连续 12 周（共 84 天，2016 个时间步）的浮动车轨迹数据构建数据集。为避免时间序列数据泄露，数据集按时间顺序严格划分为训练集（第 1–9 周）、验证集（第 10–11 周）与测试集（第 12 周），分别用于模型参数训练、超参数优化与泛化性能评估。训练样本采用时间滑动窗口机制生成，设定输入历史窗口 $T_{in} = 3$ 、预测窗口 $T_{out} = 3$ ，预测目标为未来时间步的路段平均速度。单个时空样本对定义为：

$$(\mathcal{X}^{(t:t+T_{in}-1)}, \mathcal{Y}^{(t+T_{in}:t+T_{in}+T_{out}-1)}), \quad t = 1, 2, \dots, T_{set} - T_{in} - T_{out} + 1 \quad (4.9)$$

式中， T_{set} 为对应数据集的总时间步长。经序列滑动窗口处理，最终构建 1507 个训练样本对、331 个验证样本对与 163 个测试样本对，为后续模型的训练与评估提供可靠数据。

4.2 融合层级感知与节点自适应的时空图预测方法

尽管时空图神经网络已成为交通速度预测的主流技术范式，但现有方法应用于城市异质路网时，仍存在三方面核心局限（详见第 1.2.2 节）：一是忽略不同等级道路的节点异质性，将所有路段节点同质化建模；二是全局信息聚合机制在大规模节点下易受低等级道路噪声干扰，引发“噪声淹没”效应；三是缺乏对跨等级道路交通流耦合效应的显式建模，难以捕捉路网中的全局演化规律。针对上述问题，本节提出一种融合层级感知与节点自适应的时空图卷积网络，整体遵循“微观时空提取 + 宏观层级增强 + 节点自适应校正”的多尺度解耦与协同设计思路。

模型整体结构如图 4.1 所示，由输入映射层、 L 个堆叠的时空特征提取块（ST-Block）与输出预测层三部分构成。设输入时空张量为 $\mathcal{X} \in \mathbb{R}^{N \times T_{in} \times 16}$ ，道路

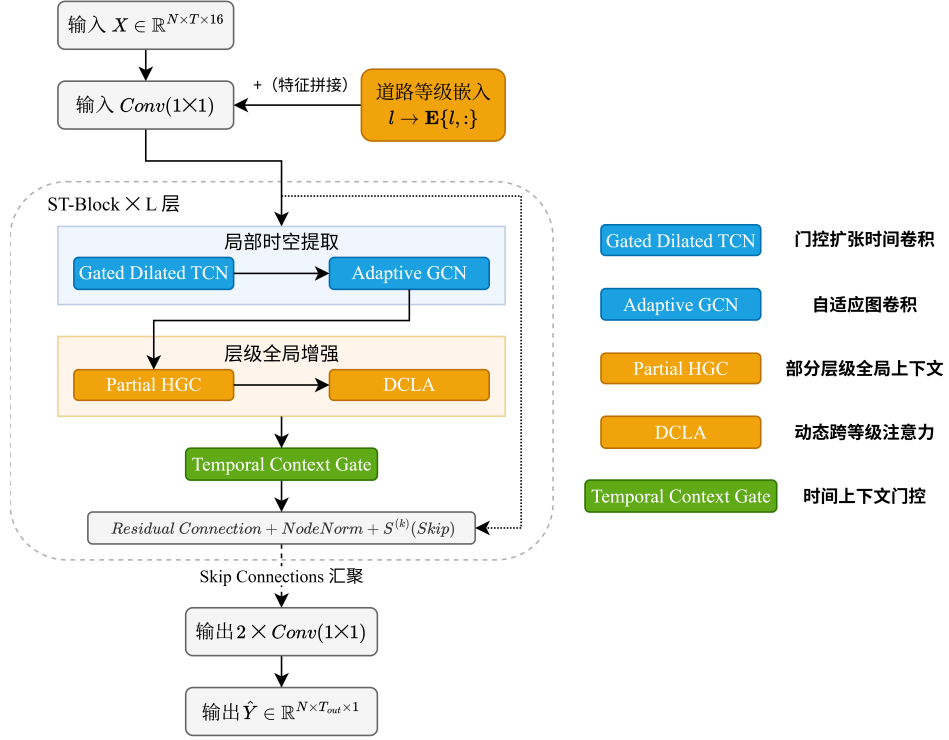


图 4.1 层级感知与节点自适应的时空图卷积网络结构图

等级标签向量为 $\mathbf{l} \in \{0, 1, \dots, 5\}^N$ ，模型前向计算流程可形式化表述为：

$$\mathbf{H}^{(0)} = \text{Conv}_{1 \times 1}([\mathcal{X} \parallel \text{RE}(\mathbf{l})]) \quad (4.10)$$

$$\mathbf{H}^{(k)} = \text{STBlock}^{(k)}(\mathbf{H}^{(k-1)}), \quad k = 1, \dots, L \quad (4.11)$$

$$\hat{\mathbf{y}} = \text{OutputConv} \left(\sum_{k=1}^L \mathbf{S}^{(k)} \right) \quad (4.12)$$

式中， $\text{RE}(\cdot)$ 为道路层级嵌入模块， $\mathbf{S}^{(k)}$ 为第 k 个时空块的跳跃连接输出；最终通过两层 1×1 卷积汇聚多尺度特征，输出预测序列 $\hat{\mathbf{y}} \in \mathbb{R}^{N \times T_{\text{out}} \times 1}$ 。每个 ST-Block 内部模块按如下顺序级联：

$$\mathbf{H}_{\text{tcn}} = \text{GatedDilatedTCN}(\mathbf{H}^{(k-1)}) \quad (4.13)$$

$$\mathbf{H}_{\text{gcn}} = \text{AdaptiveGCN}(\mathbf{H}_{\text{tcn}}) \quad (4.14)$$

$$\mathbf{H}_{\text{hgc}} = \text{PartialHGC}(\mathbf{H}_{\text{gcn}}) \quad (4.15)$$

$$\mathbf{H}_{\text{dcla}} = \text{DCLA}(\mathbf{H}_{\text{hgc}}) \quad (4.16)$$

$$\mathbf{H}_{\text{gate}} = \text{TemporalContextGate}(\mathbf{H}_{\text{dcla}}) \quad (4.17)$$

$$\mathbf{H}^{(k)} = \text{NodeNorm}(\mathbf{H}_{\text{gate}} + \mathbf{H}^{(k-1)}) \quad (4.18)$$

局部时空特征提取与层级全局语义增强以串行方式级联，网络末端通过残差连接与节点感知归一化保证深层梯度的稳定传播。后续小节将依次阐述各核心模块的设计原理与计算流程。

4.2.1 局部时空特征提取层

局部时空特征提取层旨在保持计算效率的同时，充分捕捉节点邻域内的时间演化规律与空间拓扑依赖。本研究采用门控扩张时间卷积（Gated Dilated TCN）处理时间维度，结合自适应扩散图卷积（Adaptive Diffusion GCN）处理空间维度，二者交替级联形成深层特征提取架构，具体结构如图 4.2 所示。

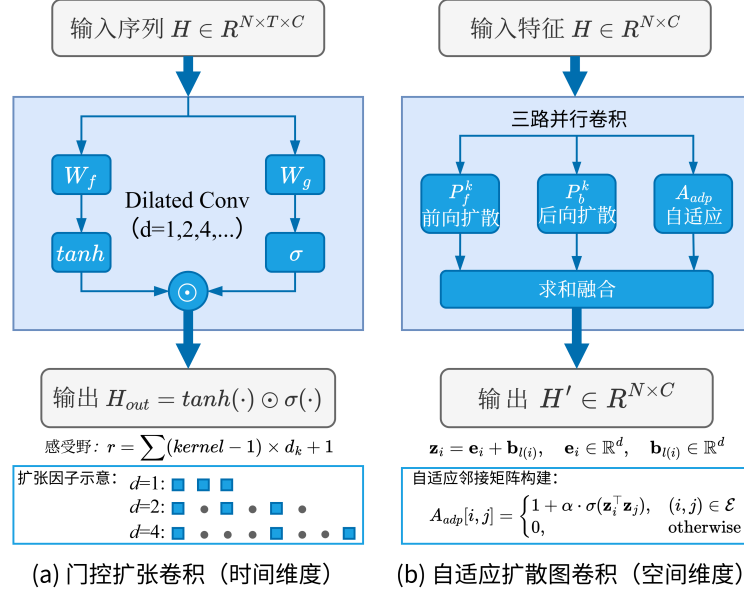


图 4.2 门控扩张卷积与自适应扩散图卷积模块

在时间维度上，门控扩张卷积通过指数增长的扩张因子扩大时间感受野。如图 4.2(a) 所示，扩张因子以 $d_k = 2^{k-1}$ 规律递增，使模型以较浅网络深度覆盖较长历史时间跨度。设输入时空序列特征为 $\mathbf{H} \in \mathbb{R}^{N \times T \times C}$ ，模块计算过程如下：

$$\mathbf{H}_{tcn} = \tanh(\mathbf{W}_f *_{d} \mathbf{H}) \odot \sigma(\mathbf{W}_g *_{d} \mathbf{H}) \quad (4.19)$$

式中， $*_{d}$ 为扩张因子 d 的一维因果卷积， $\mathbf{W}_f$ 和 $\mathbf{W}_g$ 分别为滤波器与门控分支的卷积核参数。门控机制通过 Sigmoid 激活函数 $\sigma(\cdot)$ 控制特征信息流的保留比例，以缓解深层网络中的梯度消失问题；同时，严格的因果卷积设计确保时序预测过程仅依赖历史真实观测，避免未来数据泄露。

在空间维度上，考虑到真实交通流具有极强的方向性（如上下游的非对称传播），传统的无向图卷积难以有效建模。因此，本研究采用多阶双向扩散图卷积，并在物理拓扑邻接矩阵的基础上，引入融合道路层级先验的自适应隐式图结构。如图 4.2(b) 所示，该模块通过三路并行卷积（前向扩散、后向扩散与自适应聚合）实现特征的空间信息交互：

$$\mathbf{H}_{gcn} = \sum_{k=0}^K \left(\mathbf{P}_f^k \mathbf{H}_{tcn} \mathbf{W}_{f,k} + \mathbf{P}_b^k \mathbf{H}_{tcn} \mathbf{W}_{b,k} \right) + \mathbf{A}_{adp} \mathbf{H}_{tcn} \mathbf{W}_{adp} \quad (4.20)$$

式中， $\mathbf{P}_f = \mathbf{A} / \text{rowsum}(\mathbf{A})$ 和 $\mathbf{P}_b = \mathbf{A}^T / \text{rowsum}(\mathbf{A}^T)$ 分别代表交通流的前向（基

于驶出边)与后向(基于驶入边)状态转移矩阵, K 为扩散步数, $\mathbf{W}_{f,k}$ 、 $\mathbf{W}_{b,k}$ 、 $\mathbf{W}_{adp}$ 为各路分支的可学习权重矩阵。双向扩散机制可精准捕捉路段的上游拥堵蔓延与下游抽吸效应。

为弥补静态物理拓扑无法表征动态交通语义相关性的不足, 本研究设计了层级感知的自适应邻接矩阵 $\mathbf{A}_{adp}$ 。其计算逻辑不仅依赖节点的隐式嵌入特征 $\mathbf{e}_i \in \mathbb{R}^d$, 还显式引入该节点所属道路等级 $l(i)$ 的特征偏置 $\mathbf{b}_{l(i)} \in \mathbb{R}^d$:

$$\mathbf{z}_i = \mathbf{e}_i + \mathbf{b}_{l(i)} \quad (4.21)$$

$$\mathbf{A}_{adp}[i, j] = \begin{cases} 1 + \alpha \cdot \sigma(\mathbf{z}_i^\top \mathbf{z}_j), & (i, j) \in \mathcal{E} \\ 0, & (i, j) \notin \mathcal{E} \end{cases} \quad (4.22)$$

式中, α 为预设的缩放系数, $\mathcal{E}$ 为物理连通边集。该设计利用节点嵌入的内积相似度对物理连通边上的权重进行自适应校准, 且通过 $\mathbf{b}_{l(i)}$ 融入道路层级异质性, 可有效捕捉异质路网上复杂的非欧几里得空间关联。

尽管局部时空特征提取层充分利用了交通流的微观局部特性, 但其感知范围仍受限於卷积核尺寸与固定扩散步数。针对城市大规模路网中跨区域、跨等级的宏观长尾交通模式, 仍需通过后续道路层级感知增强模块补充建模。

4.2.2 道路层级嵌入模块

道路层级嵌入模块(Road-level Embedding, RE)旨在将离散的道路等级属性映射为高维连续空间的语义向量表示, 为模型显式注入道路结构先验信息。

尽管输入特征中已包含道路等级的独热编码(One-Hot Encoding), 但这种稀疏表征方式存在两方面局限: 一是独热向量各维度相互正交, 无法刻画不同等级间的物理与语义关联(如国道与省道在交通功能、通行特性上的相似性); 二是静态固定编码缺乏学习能力, 难以根据动态预测任务自适应演化等级表征。为解决上述问题, 本研究设计道路层级嵌入模块, 结构如图 4.3 所示。

具体而言, RE 模块通过可学习的嵌入矩阵 $\mathbf{E} \in \mathbb{R}^{6 \times d_e}$ 实现等级语义的参数化建模:

$$\mathbf{e}_i = \mathbf{E}[l_i, :] \in \mathbb{R}^{d_e} \quad (4.23)$$

式中, $l_i \in \{0, 1, \dots, 5\}$ 为节点 v_i 的道路等级标签, d_e 为嵌入维度。

为实现异质先验与输入特征的深度融合, 层级嵌入向量 $\mathbf{e}_i$ 首先通过广播机制扩展至与输入特征一致的时间维度 T_{in} , 随后沿特征通道维度与原始输入特征 $\mathcal{X}_i \in \mathbb{R}^{T_{in} \times 16}$ 拼接, 最后经 1×1 卷积完成维度对齐与特征压缩:

$$\mathbf{H}_i^{(0)} = \text{Conv}_{1 \times 1}([\mathcal{X}_i \parallel (\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{1}_{T_{in}})]) \quad (4.24)$$

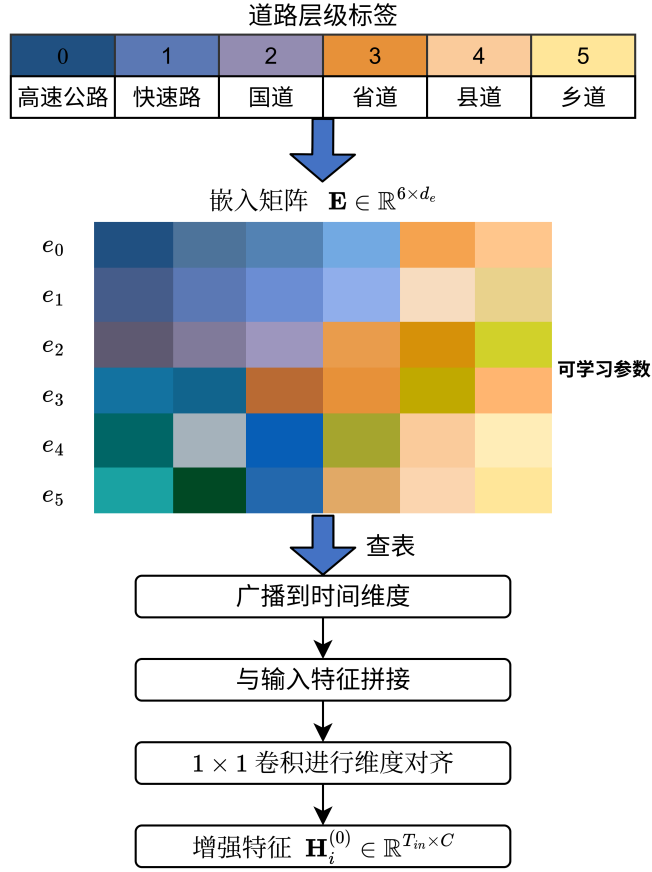


图 4.3 道路层级嵌入模块

式中, $\parallel$ 表示通道维度的拼接操作, $\otimes$ 表示外积广播, $\mathbf{1}_{T_{in}}$ 为长度 T_{in} 的全 1 向量, $\mathbf{H}_i^{(0)} \in \mathbb{R}^{T_{in} \times C}$ 为融合层级语义后的增强节点特征, 直接作为后续 ST-Block 骨干网络的输入。

4.2.3 部分层级全局上下文模块

部分层级全局上下文模块 (Partial Hierarchical Global Context, Partial HGC) 针对大规模异质路网中全局建模机制面临的“噪声淹没”问题, 设计了基于道路等级的差异化特征增强策略。

图4.4对比了常规全局建模与本研究提出的 Partial HGC 的结构差异。如图4.4(a)所示, 常规方法对全网节点执行无差别的池化与激活; 但在大规模异质路网中, 占比较高的低等级道路 (如县道、市镇村道) 交通模式随机性强, 数据信噪比显著低于主干路网。若采用常规全局建模, 局部噪声会经聚合过程污染全局特征空间, 并通过梯度反向传播干扰高等级道路稳定交通模式的学习。无差别全等级激活不仅无法提升性能, 反而会造成模型退化 (详见第4.3.3节消融实验)。

针对上述问题, Partial HGC 采用分级差异化阻断策略, 如图4.4(b)所示。该机制通过引入层级掩码, 对高等级道路实施选择性全局上下文增强, 同时对低等

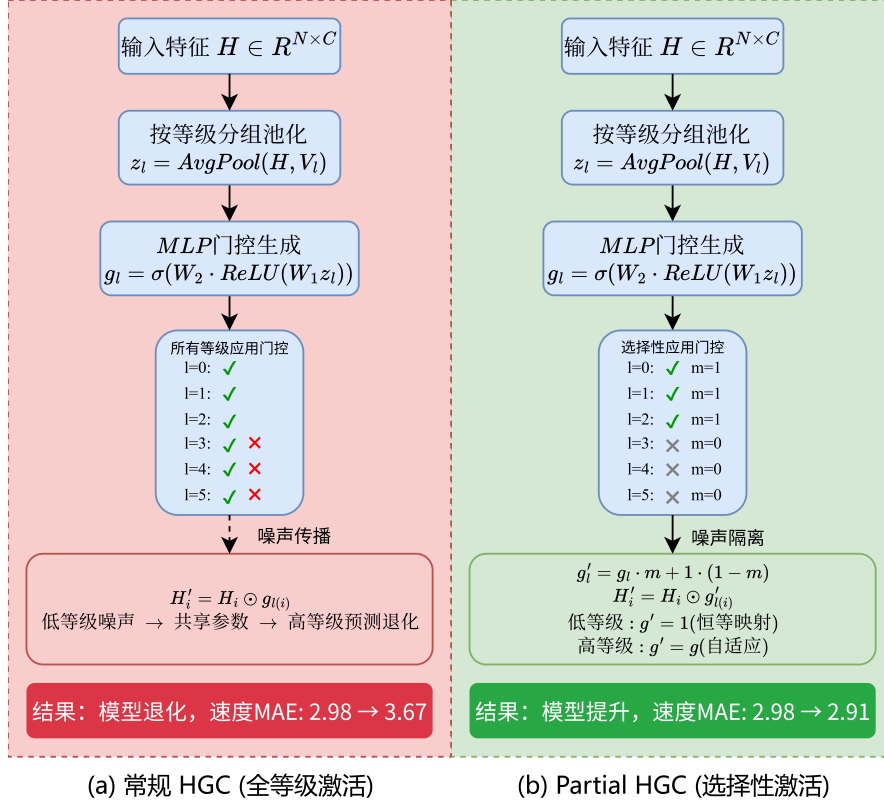


图 4.4 常规全局建模与部分层级全局上下文机制对比

级道路采用恒等映射，物理隔离噪声传播。设输入特征为 $\mathbf{H} \in \mathbb{R}^{N \times C}$ ，模块计算过程如下：

首先，按道路等级对输入特征进行分组平均池化，提取各等级全局特征：

$$\mathbf{z}_l = \frac{1}{|V_l|} \sum_{i \in V_l} \mathbf{H}_i, \quad l = 0, 1, \dots, 5 \quad (4.25)$$

式中， V_l 为等级 l 对应的路段节点集合。

然后，通过两层全连接层（MLP）构建的“降维-升维”瓶颈结构，为各道路等级生成通道门控权重：

$$\mathbf{g}_l = \sigma(\mathbf{W}_2 \text{ReLU}(\mathbf{W}_1 \mathbf{z}_l)) \quad (4.26)$$

式中， $\mathbf{W}_1 \in \mathbb{R}^{\frac{C}{r} \times C}$ 、 $\mathbf{W}_2 \in \mathbb{R}^{C \times \frac{C}{r}}$ 为可学习投影矩阵， r 为降维比例， σ 为 Sigmoid 激活函数。

Partial HGC 的核心创新在于层级掩码控制逻辑，通过引入掩码向量 $\mathbf{m} \in \{0, 1\}^6$ 对各等级门控权重进行选择激活：

$$\mathbf{g}'_l = \mathbf{g}_l \odot m_l + \mathbf{1} \odot (1 - m_l) \quad (4.27)$$

式中，层级掩码基于道路等级先验定义为：

$$m_l = \begin{cases} 1, & l \in \{0, 1, 2\} \text{ (高速公路、城市快速路、国道)} \\ 0, & l \in \{3, 4, 5\} \text{ (省道、县道、市镇村道)} \end{cases} \quad (4.28)$$

结合式 (4.27) 可明确其作用机理：当 $m_l = 1$ 时，高等级道路的门控权重被激活，沿主路径自适应融合全局上下文信息；当 $m_l = 0$ 时，门控权重被强制重置为单位向量 $\mathbf{1}$ ，低等级道路的节点特征在逐元素调制 ($\mathbf{H}'_i = \mathbf{H}_i \odot \mathbf{g}'_{l(i)}$) 中执行恒等映射。

该机制从前向传播与反向梯度传播双重视角，切断了低信噪比路段对全局特征的干扰路径，使模型在充分捕获主干路网宏观交通态势的同时，实现对长尾噪声的免疫。

4.2.4 动态跨等级注意力模块

动态跨等级注意力模块 (Dynamic Cross-Level Attention, DCLA) 旨在建立不同等级道路间的显式交互机制，捕捉交通流在层级路网间的动态传播与反馈溢出效应。

前述 Partial HGC 聚焦同一等级内部的全局聚合与降噪，但缺乏对跨等级交通流关联的建模能力。然而在现实城市交通中，跨等级传播现象对预测精度影响显著，例如城市快速路的拥堵往往会引发周边平行低等级道路流量激增，这种层级间的溢出与转移是现有模型难以准确刻画的重要规律。基于此，DCLA 遵循“聚合—交互—分发”的设计逻辑，通过以下四个步骤实现跨等级特征增强，模块整体结构如图4.5所示。

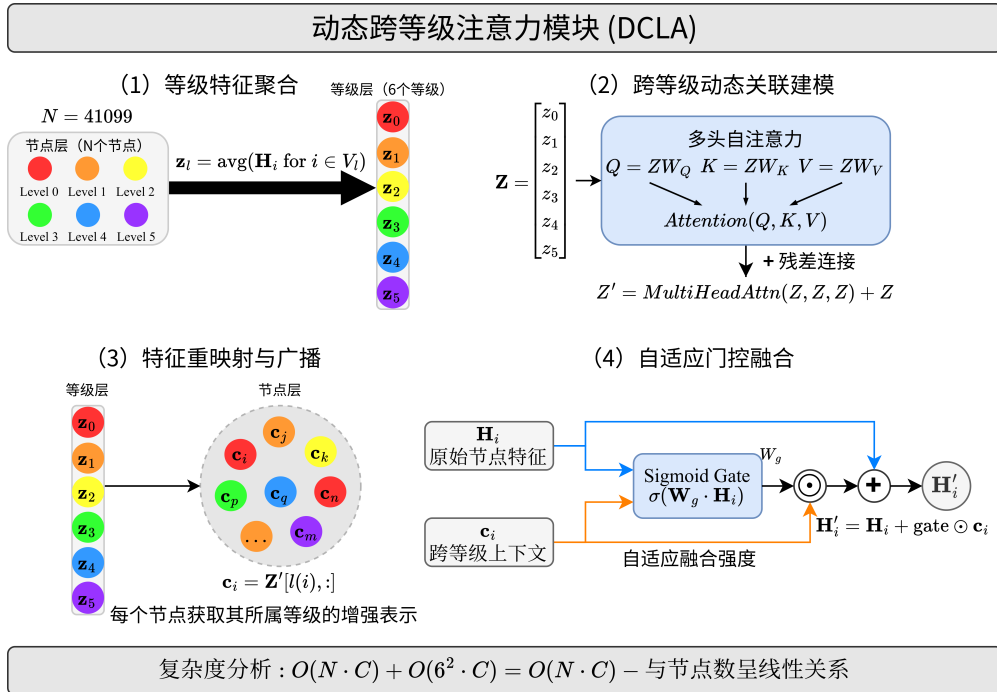


图 4.5 动态跨等级注意力模块图

(1) 等级特征聚合

如图4.5左侧所示，模块首先利用平均聚合算子将节点特征按道路等级汇聚，

生成代表各等级宏观状态的层级表示矩阵 $\mathbf{Z}$:

$$\mathbf{z}_l = \frac{1}{|V_l|} \sum_{i \in V_l} \mathbf{H}_i \in \mathbb{R}^C, \quad l = 0, 1, \dots, 5 \quad (4.29)$$

式中, V_l 表示等级为 l 的节点集合。该步骤将空间维度从 N 压缩至常数 L , 保证大规模计算的可行性。

(2) 跨等级动态关联建模

获取层级表示矩阵 $\mathbf{Z} = [\mathbf{z}_0, \mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_5]^\top \in \mathbb{R}^{6 \times C}$ 后, 模块通过多头自注意力建模等级间的非线性关联:

$$\mathbf{Q} = \mathbf{Z}\mathbf{W}_Q, \quad \mathbf{K} = \mathbf{Z}\mathbf{W}_K, \quad \mathbf{V} = \mathbf{Z}\mathbf{W}_V \quad (4.30)$$

$$\mathbf{Z}' = \text{MultiHeadAttn}(\mathbf{Q}, \mathbf{K}, \mathbf{V}) + \mathbf{Z} \quad (4.31)$$

注意力机制的查询、键与值均由层级表示 $\mathbf{Z}$ 线性映射得到, 使各道路等级能够根据当前宏观交通状态, 动态调整对其他等级的关注与信息吸收程度; 残差连接则保证引入跨等级上下文时, 不丢失原始层级的本征特征。

(3) 特征重映射与广播

如图4.5中的反馈路径所示, 交互增强后的层级特征 $\mathbf{Z}'$ 被广播回对应等级的所有路段节点, 生成节点的跨等级上下文向量 $\mathbf{c}_i$:

$$\mathbf{c}_i = \mathbf{Z}'[l(i), :] \in \mathbb{R}^C \quad (4.32)$$

式中, $l(i)$ 为节点 v_i 的道路等级索引。

(4) 自适应门控融合

最后, 模块利用图4.5右侧的门控结构, 将跨等级信息集成至原始节点特征, 该结构包含残差分支与门控调节分支:

$$\mathbf{H}'_i = \mathbf{H}_i + \sigma(\mathbf{W}_g \mathbf{H}_i) \odot \mathbf{c}_i \quad (4.33)$$

式中, $\mathbf{W}_g$ 为门控学习参数, σ 为 Sigmoid 激活函数。门控值基于原始特征动态决定跨等级信息的注入强度, 实现局部微观观测与全局宏观层级背景的自适应平衡。

在大规模异质路网的预测任务中, DCLA 展现出优秀的算法可扩展性: 等级聚合与特征广播的计算复杂度为 $O(N \cdot C)$; 计算最密集的多头自注意力机制仅在固定层级维度 ($L = 6$) 展开, 复杂度为 $O(L^2 \cdot C)$ 。由于 $L \ll N$ (本研究中 $N = 41099$), 模块整体计算复杂度严格维持在 $O(N \cdot C)$ 的线性量级, 从根本上避免了全节点自注意力机制 $O(N^2)$ 的平方级复杂度膨胀, 是模型能够高效处理全量城市路网数据的重要保障。

此外, DCLA 与前述 Partial HGC 形成了明显的协同增强效应, 二者共同构成了模型层级语义感知的核心架构。Partial HGC 通过分级掩码策略在源头抑制

了长尾低等级路段的噪声干扰，为 DCLA 的跨等级交互提供了更纯净的输入特征表示；DCLA 则在降噪隔离的基础上，实现了跨等级交通流耦合规律的显式建模。这种“先降噪隔离，后全局交互”的递进式协同设计，为 HiNA-STGCN 在大规模异质路网场景下的精准预测提供了核心算法支持。

4.2.5 时间上下文门控模块

在深层时空图卷积网络中，输入特征经多层图卷积的空间聚合与注意力机制的特征交互后，原始时间编码信号易被逐层稀释，进而引发“时间特征过平滑”的问题，导致模型在深层网络中无法有效感知交通流的时间周期性。为此，本研究设计时间上下文门控（Temporal Context Gate）模块，在每个 ST-Block 的残差连接汇聚前，对时间周期信息进行显式重注入与特征校准。

具体而言，时间编码特征 $\mathbf{t} \in \mathbb{R}^{T_{in} \times d_t}$ （包含日内与周内的正弦-余弦编码， $d_t = 4$ ）在模型输入端完成提取与全局缓存。随后，在第 k 个 ST-Block 中，该特征通过两层全连接层（MLP）映射为时间上下文门控向量 $\mathbf{g}^{(k)} \in \mathbb{R}^{T_{in} \times C}$ ：

$$\mathbf{g}^{(k)} = \sigma(\text{ReLU}(\mathbf{t}\mathbf{W}_1^{(k)})\mathbf{W}_2^{(k)}) \quad (4.34)$$

式中， $\mathbf{W}_1^{(k)} \in \mathbb{R}^{d_t \times C}$ 和 $\mathbf{W}_2^{(k)} \in \mathbb{R}^{C \times C}$ 为第 k 个 ST-Block 独立的可学习参数矩阵， σ 为 Sigmoid 激活函数。生成的门控向量通过逐元素乘积的方式，对深层隐藏特征进行时间维度的动态调制：

$$\mathbf{H}_{gate}^{(k)} = \mathbf{H}^{(k)} \odot \mathbf{g}^{(k)} \quad (4.35)$$

该机制通过层级化的门控设计，确保模型即使在网络深层，仍能保持对早高峰与凌晨、工作日与周末等关键时间模式的敏锐判别力，有效提升了模型对交通流时变特性的建模精度。

4.2.6 节点感知归一化

在城市路网中，不同路段的速度分布呈现出显著的节点异质性。即使属于同一道路等级，不同路段也会因所处地理位置、周边用地性质和交通功能的差异，表现出截然不同的速度统计特性。例如，同属市镇村道的商业街路段与住宅区路段，其平均通行速度、速度波动方差和拥堵发生模式均存在本质差别。传统批量归一化（BatchNorm）仅能提供跨空间共享的通道仿射参数（共 $2C$ 个），无法适配这种显著的节点分布异质性。

为此，本研究提出节点感知归一化（Node-Aware Normalization, NodeNorm），将特征归一化过程解耦为两个职责明确的数学步骤：

$$\hat{\mathbf{H}}_i = \text{BatchNorm}(\mathbf{H}_i) \quad (4.36)$$

$$\mathbf{H}'_i = \gamma_i \odot \hat{\mathbf{H}}_i + \beta_i \quad (4.37)$$

式中，第一步的 BatchNorm 负责实现跨批次与跨节点的通道标准化，保障网络深层梯度传播的稳定性；第二步的 $\gamma_i \in \mathbb{R}^C$ 和 $\beta_i \in \mathbb{R}^C$ 为节点 v_i 独立分配的可学习仿射参数。通过该设计，每个路段节点均拥有专属的特征缩放与偏移向量，使模型能够为每条路段学习专属的速度分布校正参数。

从计算复杂度来看，NodeNorm 每层引入的参数量为 $2 \times N \times C$ 。以本研究中 $N = 41099$ 、 $C = 64$ 的设置为例，6 层网络共计引入约 31.6M 额外参数，这些参数编码了每条路段的固有物理限速与长期交通运行统计特征。需要说明的是，在 1507 个训练时间步中，每个路段节点均提供了充足的观测样本，即每个 γ_i 和 β_i 均在上千个独立时间切片上完成梯度更新，海量时序样本有效缓解了参数量增加带来的过拟合风险，保证了模型在异质路网上的强泛化能力。

4.2.7 计算复杂度分析

在大规模异质路网场景下，计算效率是制约时空图神经网络应用的关键因素。本节从时间复杂度与空间复杂度两方面，分析 HiNA-STGCN 算法在处理大规模节点时的计算特性。

表4.2对比了传统全局建模方法与 HiNA-STGCN 各核心模块，在 $N = 41099$ 节点规模下的理论复杂度与参数量级。

表 4.2 大规模节点场景下的计算复杂度对比

模块/方法	时间复杂度	空间复杂度	$N = 41099$ 时的规模特性
<i>传统全局建模方法</i>			
Self-Attention	$O(N^2 \cdot d)$	$O(N^2)$	1.69×10^9 （平方级爆炸）
Graph Transformer	$O(N^2 \cdot d)$	$O(N^2)$	1.69×10^9 （平方级爆炸）
<i>HiNA-STGCN 核心模块</i>			
Gated Dilated TCN	$O(N \cdot T_{in} \cdot K \cdot d^2)$	$O(N \cdot T_{in} \cdot d)$	严格线性于 N
Adaptive Diffusion GCN	$O(\mathcal{E} \cdot d + N \cdot d^2)$	$O(N \cdot d)$	严格线性于 N
Partial HGC	$O(N \cdot d + L \cdot d^2)$	$O(L \cdot d)$	严格线性于 N
DCLA	$O(N \cdot d + L^2 \cdot d)$	$O(L \cdot d)$	严格线性于 N
HiNA-STGCN (整体)	$O(N \cdot d^2 + L^2 \cdot d)$	$O(N \cdot d)$	严格线性于 N

注： N 为节点数， d 为隐藏层特征维度， $L = 6$ 为道路等级数量， T_{in} 为输入时间步数， K 为时间卷积核大小， $|\mathcal{E}|$ 为有效物理边数。

传统全局时空自注意力机制（如 GMAN^[63]、ASTGCN^[64] 等），因需要显式计算全量节点对的关联权重，其时间与空间复杂度均不可避免地达到 $O(N^2)$ 。在本研究 $N = 41099$ 的实验场景下，单层注意力特征矩阵的元素规模高达 1.69×10^9 ；若采用单精度浮点数存储，仅该矩阵的单次前向传播就需占用约 6.4GB 显存，叠加反向传播梯度图与多头注意力机制后，显存开销将远超当前主流单张 GPU 的

物理显存极限。

针对以上瓶颈，HiNA-STGCN 将 $O(N^2)$ 的全局依赖建模任务，转化为基于道路先验的层级感知分治策略。以 DCLA 模块为例，其通过“先等级聚合、后注意力交互、再节点分发”的路径优化计算流向：

$$\underbrace{O(N \cdot d)}_{\text{等级聚合}} + \underbrace{O(L^2 \cdot d)}_{\text{多头注意力交互}} + \underbrace{O(N \cdot d)}_{\text{特征广播与门控}} = O(N \cdot d + L^2 \cdot d) \quad (4.38)$$

由于道路等级数 $L = 6$ 为极小常数， L^2 项的算力消耗可忽略不计（远小于 N^2 ），因此 DCLA 的整体时间复杂度可严格约束并简化为 $O(N \cdot d)$ 。类似地，Partial HGC 通过按等级分组池化机制，将全路网 N 个高维节点压缩为 L 个低维等级特征后再进行瓶颈映射，有效规避了在节点直接执行全局全连接运算的高额算力成本。

综上所述，HiNA-STGCN 凭借层级拓扑重构与分级增强算法，成功将全局建模的时空复杂度从难以应用的平方级 $O(N^2)$ 降至计算友好的线性级 $O(N)$ 。这一理论特性，使模型在保留全路网宏观感知能力的同时，为高效处理城市交通预测任务提供了坚实的算力可行性保障。

4.3 实验结果与分析

本节基于前文构建的济南市全路网交通数据集，对本章提出的 HiNA-STGCN 模型开展实验验证。首先介绍实验的具体设置与性能评价指标；其次通过与基线模型的对比实验，客观评估模型在交通速度预测任务中的整体性能；最后开展消融实验验证各核心模块的独立贡献，并进一步分析模型在不同等级道路上的具体预测表现。

4.3.1 实验设置与评价指标

为保证实验结果的可靠性与可复现性，具体实验环境、工程优化策略、训练超参数和评价指标详述如下：

- (1) 软硬件环境配置：本研究涉及济南市全域路网 41099 个路段节点，大规模图张量运算对计算设备的显存与算力有较高要求。实验在高性能计算服务器上完成，硬件端搭载单张 NVIDIA RTX PRO 6000（显存容量 96GB）计算卡，CPU 为 22 核心的 Intel(R) Xeon(R) Platinum 8470Q，系统内存容量为 110GB。软件端采用 Ubuntu 22.04 操作系统，CUDA 12.8 驱动，PyTorch 2.7.0 深度学习框架，Python 3.12 编程语言。
- (2) 大规模图训练的工程优化：针对路网中大规模节点的显存压力，本研究在模型训练阶段采取以下优化措施：

- 显存优化：引入梯度检查点技术，反向传播时重新计算部分中间激活值，将网络深层的显存占用从 $O(L_{net})$ 降低至 $O(\sqrt{L_{net}})$ (L_{net} 为网络层数)，确保全量图张量在单卡显存限制内可计算。
 - 计算加速：启用自动混合精度 (Automatic Mixed Precision, AMP) 训练，利用 FP16 半精度浮点数加速前向、反向计算，并配合梯度缩放算法维持训练数值稳定性，避免梯度下溢。
- (3) 训练策略与参数设置：采用 Xavier 均匀分布初始化模型参数，以路段平均速度为单一预测目标，训练总轮次设为 150，批量大小设为 48。选用 Adam 优化器，初始学习率设为 0.001，权重衰减设为 0.0001。学习率调度采用带 Warmup 机制的余弦退火策略，同时设置容忍度为 15 的早停机制防止模型过拟合。
- (4) 性能评价指标：选取平均绝对误差 (MAE)、均方根误差 (RMSE)、平均绝对百分比误差 (MAPE) 三项回归任务主流指标，全面评估模型的预测精度与鲁棒性，各指标定义如下：

$$MAE = \frac{1}{|\Omega|} \sum_{(i,t) \in \Omega} |y_{i,t} - \hat{y}_{i,t}| \quad (4.39)$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{|\Omega|} \sum_{(i,t) \in \Omega} (y_{i,t} - \hat{y}_{i,t})^2} \quad (4.40)$$

$$MAPE = \frac{1}{|\Omega|} \sum_{(i,t) \in \Omega} \left| \frac{y_{i,t} - \hat{y}_{i,t}}{y_{i,t}} \right| \times 100\% \quad (4.41)$$

式中， Ω 为有效预测样本的时空集合， $y_{i,t}$ 与 $\hat{y}_{i,t}$ 分别为路段 i 在 t 时刻的实际速度与模型预测速度，单位均为 km/h。

4.3.2 整体预测性能评价

为全面验证 HiNA-STGCN 在大规模异质路网交通速度预测任务中的有效性，本研究将所提模型与 5 类主流基线模型分别进行 1 小时、2 小时、3 小时步长的预测性能对比。对比使用的基线模型说明如下：

- (1) HA：历史平均模型，以历史同周期时段的观测均值作为预测值。
- (2) SVR^[23]：支持向量回归模型，通过核函数将输入映射至高维空间完成回归预测。
- (3) STGCN^[29]：纯卷积架构时空预测模型，通过堆叠时空卷积块提取交通流时空特征。
- (4) AGCRN^[32]：通过自适应图学习矩阵捕捉空间依赖，结合 GRU 结构建模时间序列。
- (5) GWNet^[31]：融合自适应邻接矩阵与门控扩张因果卷积的经典模型，本

研究将其作为模型底层骨干架构。

各模型在济南市全路网测试集上的分时段预测性能如表4.3所示。

表 4.3 各模型在不同预测步长下的整体预测性能对比

模型	1 小时			2 小时			3 小时		
	MAE	RMSE	MAPE	MAE	RMSE	MAPE	MAE	RMSE	MAPE
HA	4.12	10.09	10.45%	4.14	10.10	10.55%	4.20	10.08	10.61%
SVR	3.98	9.73	10.09%	4.01	9.75	10.15%	4.05	9.76	10.27%
STGCN	2.93	7.08	7.42%	2.99	7.20	7.61%	2.97	7.09	7.54%
AGCRN	3.04	7.45	7.70%	3.07	7.46	7.78%	3.09	7.44	7.86%
GWNet	2.99	7.28	7.53%	3.00	7.28	7.65%	3.02	7.33	7.71%
HiNA-STGCN	2.84	6.94	7.20%	2.86	6.96	7.27%	2.89	6.97	7.34%

从表4.3的实验结果可得到如下结论：

第一，统计类模型（HA）与传统机器学习模型（SVR）整体性能较弱。此类模型仅能建模时间序列的线性或浅层非线性特征，无法捕捉路网复杂的空间拓扑依赖；而基于图卷积的深度学习模型可有效处理非欧几里得结构的交通数据，在所有评价指标上均展现出显著优势。

第二，深度学习基线模型中，STGCN 展现出优异性能，其三时段平均 MAE 为 2.96，优于具备自适应图学习能力的 AGCRN 与 GWNet。深入分析其原因，STGCN 采用的层归一化（Layer Normalization, LayerNorm），在数学上等价于为每个节点引入独立的仿射参数；在处理异质性极强的城市路网时，该机制相当于为每条路段隐式学习了独立的速度分布校正项。这一现象不仅解释了 STGCN 的优异表现，也从实证角度支持了本章节点感知归一化（NodeNorm）模块设计的物理动机与合理性。同时，纯数据驱动的 AGCRN 与 GWNet，在面对大规模节点的异质路网时，其自学习空间矩阵极易受海量低等级道路噪声的干扰，导致模型泛化能力受限。

第三，本章提出的 HiNA-STGCN，在所有预测步长（1 小时、2 小时、3 小时）的全部评价指标上均取得最优性能。相较于骨干网络 GWNet，HiNA-STGCN 在三时段平均水平上，将 MAE 与 RMSE 分别降低约 4.7% 与 4.6%；相较于性能最优的基线模型 STGCN，HiNA-STGCN 仍实现了性能提升，平均 MAE 降低 3.4%，RMSE 降低 2.2%。这一结果表明，HiNA-STGCN 通过道路层级嵌入（RE）与部分层级全局上下文（Partial HGC）模块有效缓解了大规模异质路网的建模偏置，阻断了低等级道路的噪声干扰。

此外，随着预测步长增加，交通流不确定性提升，所有模型的预测误差均呈现合理的上升趋势。但从各步长的误差分布来看，HiNA-STGCN 在长时预测中

的误差增长幅度最小，展现出了优秀的时域鲁棒性。这进一步证明，所提模型通过深层网络的交互式学习与时间门控机制，可充分捕捉并维持交通流稳定的宏观物理演化规律。

4.3.3 模型消融实验与道路层级性能分析

为系统验证本章所提各层级感知模块的独立贡献与协同作用，本节在济南市全路网数据集上开展消融实验，并分析模型在不同等级道路上的预测表现。

(1) 模块增量贡献分析

在骨干网络（Backbone）基础上逐步叠加道路层级嵌入（RE）、部分层级全局上下文（Partial HGC）、动态跨等级注意力（DCLA）及辅助校正组件，模型的性能演进如表4.4所示。

表 4.4 HiNA-STGCN 消融实验结果

配置	模型组成	MAE	RMSE	MAPE
M1	Backbone (DiffusionGCN + GatedDilatedTCN)	3.00	7.30	7.63%
M2	M1 + RE	2.98	7.23	7.59%
M3	M2 + Partial HGC	2.95	7.18	7.49%
M4	M2 + DCLA	2.94	7.15	7.47%
M5	M2 + Partial HGC + DCLA	2.91	7.06	7.37%
M6	M5 + TemporalGate + NodeNorm (HiNA-STGCN)	2.86	6.96	7.27%

纵向对比实验结果可清晰了解各模块对预测精度的提升作用：

首先，配置 M2 相较于骨干网络 M1，MAE 与 RMSE 均出现下降，预测性能得到初步提升。这表明显式引入道路等级语义先验，能够引导模型区分异质路网的特征分布，为后续时空特征提取提供层级基准。

其次，在 M2 基础上分别加入 Partial HGC（M3）与 DCLA（M4），MAE 进一步降至 2.95 与 2.94。这分别验证了同层级全局背景信息的补充价值，和跨等级动态依赖建模对路网车流溢出效应的捕捉能力。

此外，同时融合两个模块的配置 M5（MAE 2.91，RMSE 7.06），性能优于单独添加任一模块的配置 M3 和 M4。这说明 Partial HGC 提供的降噪全局背景，与 DCLA 提供的跨层级动态关联信息具有良好的互补性，二者的协同作用是模型性能提升的重要来源。

最后，完整模型 M6 引入时间上下文门控（TemporalGate）与节点感知归一化（NodeNorm）作为深层网络的辅助校正组件，将 MAE 降至 2.86、RMSE 降至 6.96，进一步证明，节点自适应缩放与深层时间周期信息保留在大规模路网预测任务中的有效性。

(2) 常规 HGC 与 Partial HGC 噪声隔离分析

表4.5对比了常规 HGC（全等级激活）与 Partial HGC（选择性激活）的性能差异，实验验证第4.2.3节提出的噪声干扰假设。

表 4.5 常规 HGC 与 Partial HGC 性能对比

模型配置	MAE	模型状态评估
M1 (Backbone)	3.00	基线水平
M1 + RE + 常规 HGC	3.23	较基线退化
M1 + RE + 常规 HGC + DCLA	3.67	显著退化
M6 (HiNA-STGCN)	2.86	最优性能

实验结果验证了大规模异质路网中选择性特征聚合的必要性。采用无差别激活的常规 HGC 时，模型 MAE 相较于基线 M1 未出现下降，反而升至 3.23；当常规 HGC 与 DCLA 叠加使用时，MAE 进一步恶化至 3.67，模型训练过程出现明显的不稳定性。分析其原因，济南市路网中低等级道路占比高且数据信噪比低，其产生的噪声梯度通过池化机制被引入全局上下文；当 DCLA 的注意力机制进一步将这些污染后的全局信息通过跨层级传播时，会严重干扰主干道稳定交通模式的学习。相比之下，本研究设计的 Partial HGC 通过层级掩码对低等级道路实施恒等映射，从结构层面有效阻断了噪声传播路径，保证了模型在异质路网场景下的训练稳定性。

(3) 分道路层级的预测表现分析

为探究模型设计对各类异质道路的具体增益，本研究对比了基础模型 M1 与最终模型 M6 在六类主要道路上的预测表现，结果如表4.6所示。

表 4.6 分道路层级的预测 MAE 对比

模型配置	高速公路	城市快速路	国道	省道	县道	市镇村道
M1 (Backbone)	3.50	3.71	2.28	2.23	2.31	3.46
M6 (HiNA-STGCN)	3.17	3.09	2.14	2.02	2.11	3.23
相对误差降低幅度	9.4%	16.7%	6.1%	9.4%	8.7%	6.6%

结合表4.6数据可知，HiNA-STGCN 在不同等级道路上的性能提升存在差异，其中高等级主干道路的改进效果更为显著：城市快速路与高速公路的 MAE 分别降低 16.7% 与 9.4%。这一结果直接反映了 DCLA 模块的核心作用——快速路等主干道受跨区域交通流转移的影响更大，而 DCLA 能够有效捕捉并利用这一宏观维度的动态转移规律。

与此同时，针对占比高、速度方差大的市镇村道，尽管模型在 Partial HGC

中对其采取保守的恒等映射策略，其速度预测误差仍实现了 6.6% 的降低。这表明该隔离策略在保护高等级主干道学习过程的同时，并未损害低等级道路利用局部时空特征的预测能力，且 NodeNorm 提供的节点自适应校准进一步提升了其预测精度。这种全层级的性能提升，有效证明了 HiNA-STGCN 模型设计的合理性，为其处理城市异质路网数据提供了可靠的实验结果支撑。

4.4 本章小结

本章针对大规模异质路网交通速度预测中的节点异质性、长尾噪声干扰与全局建模计算复杂度瓶颈等核心问题，提出了一种融合层级感知与节点自适应的时空图卷积网络（HiNA-STGCN）。模型核心设计围绕五个维度展开：一是通过道路层级嵌入模块（RE）将离散道路等级属性映射为连续语义表征，为模型注入路网结构先验；二是设计部分层级全局上下文模块（Partial HGC），通过层级掩码机制从结构层面阻断低信噪比路段的噪声传播；三是构建动态跨等级注意力模块（DCLA），在维持线性计算复杂度的前提下，捕捉不同等级道路间的交通流动态传播与交互规律；四是引入时间上下文门控机制（Temporal Gate），缓解深层网络对时间周期信息的稀释遗忘；五是提出节点感知归一化策略（NodeNorm），通过为各路段学习独立仿射参数，适配节点的速度分布差异。基于济南市全路网数据集的实验结果表明，HiNA-STGCN 在各预测步长下的速度预测误差均低于主流基线模型；消融实验与道路层级分析进一步证实，模型可有效隔离低等级道路的噪声干扰，在所有等级道路上均实现稳健预测。

至此，排放清单核算逻辑“排放量 = 排放因子 × 交通活动水平”所需的两类核心要素均已齐备：排放因子由上一章 AFIDE 方法生成基于速度区间的查找表；交通活动水平则由本章预测的路段平均速度承担——其既作为排放因子检索的关键输入，又作为后续通过宏观交通流模型反推路段流量的依据。下一章将以这两项预测结果为输入，结合本地车队结构与车型排放因子，采用自下而上的排放核算框架完成全路网高分辨率 CO₂ 排放清单的编制，并开展多尺度时空特征分析。

第5章 排放清单编制与多尺度时空特征分析

本章基于“排放量 = 排放因子 × 交通活动水平”的自下而上核算逻辑，开展机动车高时空分辨率 CO₂ 排放清单的编制方法研究。首先，完成排放清单核心数据的生成：基于宏观交通流模型，将预测得到的路段平均速度转换为交通流量，并结合卡口数据进行校准；同时，采用前文训练得到的排放因子预测方法，生成基于速度区间的 CO₂ 排放因子查找表。然后，结合本地机动车保有量统计数据确定车队结构，采用自下而上的方法计算逐路段、逐时段的 CO₂ 排放量，完成排放清单的编制。接着，以济南市为典型案例，从行政区、路段和网格三个空间尺度对 CO₂ 排放的时空分布特征开展系统性的可视化分析。最后，通过对比分析验证所得清单的结果合理性。

5.1 排放清单核心数据生成

5.1.1 交通流量推演与修正

(1) 基于 Van Aerde 模型的速度-流量转换

第4章所提出的 HiNA-STGCN 模型，已实现城市路网路段小时平均速度的预测。但机动车 CO₂ 排放清单的编制，除路段行驶速度外，还需获取路段交通流量以核算排放总量。由于浮动车数据仅能反映城市路网的通行状态，其采集的车辆样本数无法代表路段的实际交通流量。为此，本节引入 Van Aerde 宏观交通流模型，将预测得到的路段平均速度转换为对应交通流量。Van Aerde 模型的基本原理已在第2章中详细阐述，本节主要讨论其在城市路网中的具体应用。

本研究采用 Van Aerde 模型的简化形式实现速度-流量转换，其表达式为：

$$q = \frac{v_s}{c} \cdot \ln \frac{v_f}{v_s} \quad (5.1)$$

式中： q 为单车道交通流量，单位为辆/h； v_s 为空间平均速度，单位为 km/h； v_f 为自由流速度，单位为 km/h； c 为模型标定参数，其定义式为：

$$c = \frac{v_f}{q_{target} \cdot e} \quad (5.2)$$

式中： q_{target} 为目标通行能力，单位为辆/h； e 为自然常数。

(2) 分等级道路参数标定

不同等级道路的设计速度、通行能力等核心指标存在明显差异，因此本研究针对城市六类主要道路，分别开展 Van Aerde 模型的参数标定工作。自由流速度 v_f 基于济南市 2023 年 11 月—2024 年 1 月共 12 周浮动车数据，按各道路等级速度数据的分位数确定；目标通行能力 q_{target} 参考既有研究中同类型城市各等级

道路的推荐值赋值。结合道路功能属性，将上述六类道路划分为四个等级完成标定，具体为：等级1（高速公路）、等级2（城市快速路）、等级3（国道、省道）、等级4（县道、市镇村道）。各等级道路的 Van Aerde 模型标定参数如表5.1所示。

表 5.1 各等级道路 Van Aerde 模型标定参数

道路等级	道路类型	v_f (km/h)	q_{target} (辆/h)
等级 1	高速公路	114.00	1710
等级 2	城市快速路	82.79	1493
等级 3	国道	57.01	665
	省道	54.76	665
等级 4	县道	51.60	524
	市镇村道	48.35	524

基于上述标定的 Van Aerde 模型参数，本研究将第4章 HiNA-STGCN 模型预测得到的路段平均速度，逐路段转换为对应交通流量。具体流程为：根据路段所属道路等级匹配对应的 Van Aerde 模型标定参数，将预测速度代入式（5.1）计算单车道流量，再乘以路段有效车道数，最终得到路段交通流量，计算公式为：

$$\hat{Q}_{l,t} = \hat{q}_{l,t}^{lane} \times n_l \quad (5.3)$$

式中： $\hat{Q}_{l,t}$ 为路段 l 在时段 t 的估算交通流量，单位为辆/h； $\hat{q}_{l,t}^{lane}$ 为路段 l 在时段 t 的单车道估算流量，单位为辆/h； n_l 为路段 l 的有效车道数。

需特别说明：当预测速度接近或超过自由流速度（ $\hat{v}_{l,t} \geq 0.98 \cdot v_f$ ）时，式（5.1）中的对数项将趋近于 0，因此本研究将该工况下的速度截断为 $0.98 \cdot v_f$ ，以保证计算过程的数值稳定性。此外，Van Aerde 模型输出的流量单位为标准车当量（Passenger Car Unit, PCU）。

（3）基于卡口数据的流量分布修正

Van Aerde 模型通过速度-流量的宏观映射关系实现流量转换，但该映射关系在凌晨低流量时段存在显著系统偏差：凌晨时段道路上车辆稀疏，路段行驶速度接近自由流速度，模型会据此映射出接近道路通行能力的高流量结果，与城市路网凌晨的实际交通运行状态严重不符。为消除该系统偏差，本研究引入卡口数据，对 Van Aerde 模型输出流量的小时时间分布特征进行校准。

本研究采用济南市两周的卡口流量数据（2023 年 11 月 20 日—26 日、2024 年 1 月 8 日—14 日），筛选出数据有效覆盖率不低于 90% 的 216 个卡口，分别统计工作日与周末的 24 小时 PCU 流量占比分布。卡口数据中，大型车的流量按 1.5 PCU 折算，小型车的流量按 1.0 PCU 折算。

修正系数的计算过程如下：针对每个小时 h ，分别统计卡口流量的小时占比

r_h^{obs} 与 Van Aerde 模型输出流量的小时占比 r_h^{VA} ，修正系数定义为二者的比值：

$$\alpha_h = \frac{r_h^{obs}}{r_h^{VA}} \quad (5.4)$$

将修正系数应用于 Van Aerde 模型输出流量，得到修正后的交通流量：

$$Q_{l,t}^{corr} = Q_{l,t}^{VA} \times \alpha_{h(t)} \quad (5.5)$$

式中： $h(t)$ 为时段 t 对应的小时序号。该修正方法完整保留了 Van Aerde 模型输出流量在路段维度的空间分布特征，仅对小时维度的时间分布进行校准，可有效降低凌晨时段的估算流量和抬升通勤高峰时段的流量水平，使最终流量结果更贴合城市交通的实际运行规律。

图5.1为基于卡口数据提取的工作日与周末 24 小时流量占比分布。工作日流量分布呈现显著的双峰特征，早高峰集中在 7:00—8:00，晚高峰集中在 16:00—18:00，且早高峰流量峰值略高于晚高峰。该特征主要源于工作日上班时间相对固定，居民出行需求高度集中，而下班时间弹性更大，出行分布更为分散。与工作日相比，周末流量分布特征存在明显不同：早高峰时段推迟至 9:00—10:00，且 10:00—17:00 时段内流量始终维持在较高水平，整体呈平台型分布。这一差异源于工作日居民出行受固定通勤时间约束，而周末出行行为更具自主性与随机性。

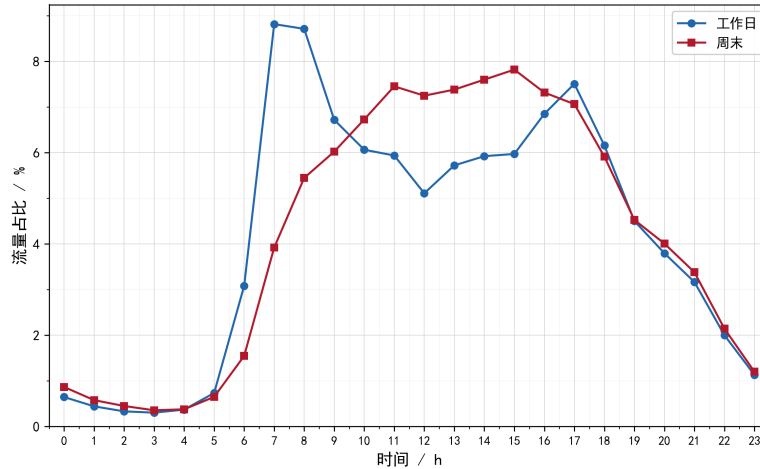


图 5.1 工作日与周末 24 小时车流量占比分布

修正后生成的交通流量矩阵维度为 (163, 41099)，包含 163 个小时时间步与 41099 个路段，时间范围与第4章测试集（2024 年 1 月 22 日—28 日）的预测时段完全对应。

5.1.2 基于速度区间的 CO₂ 排放因子生成

第3章提出的 AFIDE 模型以速度、发动机转速、排气温度等 12 个特征为输入，实现了 CO₂ 排放因子的精准预测。但在排放清单编制的应用场景中，除速度外的其他微观参数难以在全路网范围内逐一获取。为解决该问题，本研究利用

已训练的 AFIDE 模型，采用基于速度区间的逐样本预测聚合策略生成排放因子查找表。

具体方法为：将第3章使用的 RDE 测试数据集按 5 km/h 的间隔划分为连续速度区间，对每个区间内的所有样本保留全部原始特征值，逐条输入已训练的 AFIDE 模型得到 CO₂ 排放因子预测值，取该区间内所有预测值的均值作为对应速度区间的排放因子。第3章 SHAP 归因分析表明，环境参数对 CO₂ 排放的贡献极低（四项合计 |SHAP| 仅为 0.12），保留 RDE 测试的原始环境参数可确保模型工作在训练数据的分布范围内，保证预测结果的可靠性。该方法在保留速度对 CO₂ 排放主导驱动作用的同时，通过逐样本预测有效保留特征分布的方差信息，避免了均值输入方式因非线性映射带来的系统偏差。

基于上述方法生成的 CO₂ 排放因子查找表如表5.2所示。从表中可见，基于距离的 CO₂ 排放因子（g/km）随速度呈先降后升的“U”型变化趋势。在低速区间（0—15 km/h），由于车辆频繁启停和怠速工况，发动机燃烧效率较低，导致单位距离 CO₂ 排放较高；在中速区间（40—70 km/h），发动机工作在经济转速和负荷范围内，CO₂ 排放因子达到最低值；在高速区间（>90 km/h），空气阻力随速度的平方增大，发动机需输出更大功率，排放因子再次上升。从瞬时排放速率（g/s）来看，整体呈递增趋势，这是因为速度越高功率需求越大，瞬时燃油消耗越高。

表 5.2 基于速度区间的轻型汽油车 CO₂ 排放因子

速度区间 (km/h)	0—5	5—10	10—15	15—20	20—25	25—30	30—35	35—40	40—50
g/s	0.79	1.43	1.59	1.69	1.74	1.84	1.89	1.81	1.93
g/km	2362.1	722.2	455.7	346.2	276.8	240.1	209.4	174.0	155.2
速度区间 (km/h)	50—60	60—70	70—80	80—90	90—100	100—105	105—110	110—115	115—120
g/s	2.13	2.52	2.53	3.60	4.52	4.02	4.12	4.47	4.08
g/km	139.3	139.4	121.6	153.0	175.9	141.2	138.3	143.5	126.2

在排放清单编制过程中，根据第4章所提方法预测得到的路段平均速度，通过查表匹配对应速度区间的 CO₂ 排放因子，实现每条路段在每个时间步的排放因子动态赋值。

5.2 排放量核算与清单编制

5.2.1 车队结构与排放因子

机动车 CO₂ 排放清单的编制，需明确路网流量中不同车型的分配比例以及各车型的 CO₂ 排放因子。本研究基于机动车保有量统计数据，将研究范围内的

传统燃油机动车划分为四类车型，济南市各类车型的保有量、车队结构占比和对应排放因子如表5.3所示。

表 5.3 济南市四类机动车保有量及车队结构

车型	保有量 (辆)	占比 (%)	CO ₂ 排放因子
轻型汽油车 (LDGV)	2,723,866	93.60	速度相关 (表5.2)
轻型柴油车 (LDDV)	134,109	4.61	242.4 g/km
重型汽油车 (HDGV)	1,744	0.06	482.0 g/km
重型柴油车 (HDDV)	50,308	1.73	965.6 g/km

其中，轻型汽油车占比达 93.60%，是济南市机动车 CO₂ 排放的核心贡献车型，其排放因子采用依据第3章 AFIDE 模型生成的速度相关排放因子查找表 (表5.2)。后文核算结果显示该车型贡献了 CO₂ 总排放的 89.3% (详见第5.2.3节)，基于 RDE 实测数据对其开展校准是排放清单整体精度提升的关键所在。其余三类车型因缺乏本地化 RDE 测试数据，排放因子采用《大气污染物与温室气体融合排放清单编制技术指南 (试行)》^[5]中的推荐值。此外，Van Aerde 模型输出的流量单位为 PCU，因此分车型流量分配需考虑不同车型的 PCU 折算系数差异。本研究中，轻型车 PCU 折算系数取 1.0，重型车取 1.5，经保有量加权计算得到综合平均 PCU 系数为 1.009。分车型流量分配流程为：先将 PCU 总流量除以综合平均 PCU 系数转换为实际车辆数，再按各类车型的保有量占比完成流量分配。

5.2.2 CO₂ 排放量计算方法

基于已获取的路段交通流量、车队结构占比与 CO₂ 排放因子，本研究采用自下而上的方法编制高时空分辨率排放清单。路段 l 在时段 t 的 CO₂ 排放量计算公式为：

$$E_{l,t} = Q_{l,t}^{corr} \times L_l \times \sum_j \frac{ratio_j}{PCU_{avg}} \times EF_j(v_{l,t}) \quad (5.6)$$

式中： $E_{l,t}$ 为路段 l 在时段 t 的 CO₂ 排放量，单位为 g； $Q_{l,t}^{corr}$ 为经卡口数据修正后的路段交通流量，单位为 PCU/h； L_l 为路段 l 的长度，单位为 km； j 为车型类别，涵盖 LDGV、LDDV、HDGV、HDDV 四类车型； $ratio_j$ 为车型 j 的保有量占比； PCU_{avg} 为加权平均 PCU 系数； $EF_j(v_{l,t})$ 为车型 j 在路段速度 $v_{l,t}$ 下的 CO₂ 排放因子，单位为 g/km。

5.2.3 CO₂ 排放清单编制结果

以济南市 24 年 1 月第四周数据为例，基于上述排放量计算方法可得到全路网机动车 CO₂ 排放量，工作日与周末分车型日均 CO₂ 排放量如表5.4所示。

表 5.4 济南市各车型 CO₂ 日均排放量

时段类型	LDGV (t)	LDDV (t)	HDGV (t)	HDDV (t)	总计 (t)
工作日	44054	2102	54	3143	49354
周末	44775	2070	54	3094	49993

从表5.4可见，轻型汽油车贡献了约 89.3% 的 CO₂ 总排放量，与其 93.60% 的保有量占比基本吻合；重型柴油车虽保有量占比仅 1.73%，但因单车排放因子远高于轻型汽油车平均水平，对总排放量的贡献仍达 6.4%。工作日与周末的总排放水平相近，但小时尺度的排放分布特征存在显著差异。

图5.2为济南市工作日与周末的小时尺度 CO₂ 排放分布。工作日排放呈现典型的通勤双峰特征，早高峰出现在 7:00—8:00，峰值约为 4300 t/h；晚高峰集中于 16:00—18:00，峰值约为 3500 t/h；凌晨 3:00—5:00 排放降至全天最低值，约为 200 t/h，峰谷比约为 20:1。周末排放分布则呈现单峰特征，排放量自早晨起稳步攀升，于 14:00—15:00 达到峰值，无明显的早晚通勤尖峰。不管是工作日还是周末，日间时段（7:00—19:00）CO₂ 排放量均占全天总量的 75% 以上，这主要是因为日间居民出行需求大、车辆活动水平高。

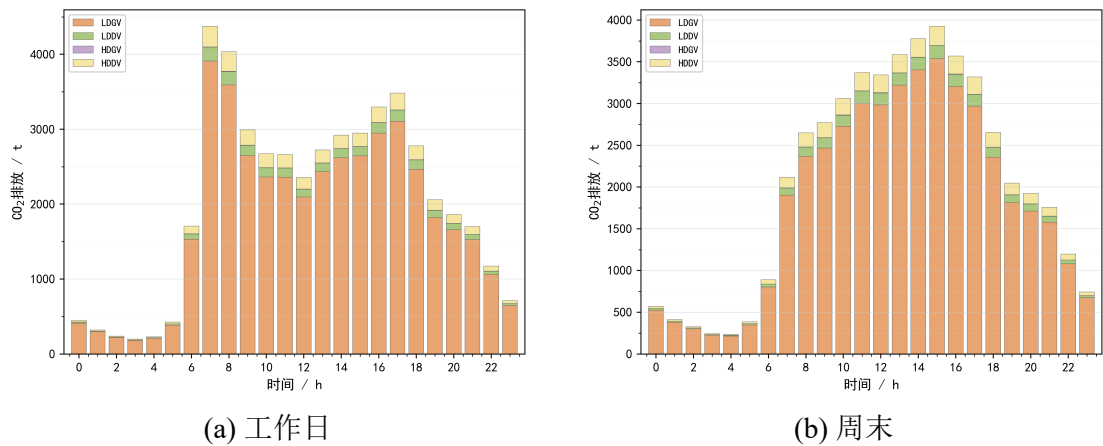


图 5.2 济南市工作日与周末小时尺度 CO₂ 排放分布

5.3 机动车 CO₂ 排放清单可视化

5.3.1 城市行政区排放清单可视化

将路网全路段通过空间关联匹配至济南市 12 个行政区，统计得到各区 CO₂ 排放总量。如图5.3所示，历城区与章丘区的工作日、周末总排放量均位居全市前列，核心原因是两区行政面积大、路网密集，且汇聚了大量干线公路与过境通勤交通；莱芜区因工业重镇的功能定位，排放量同样处于较高水平；历下区、市中区等核心城区则受行政面积与路网规模限制，排放总量相对偏低。受高保有量

与高出行依赖度影响，轻型汽油车在所有行政区的排放构成中均占据绝对主导地位。

图5.4展示了济南市各行政区小时 CO₂ 排放量的变化规律。各区排放曲线的形态高度一致，仅在排放量级上存在差异，表明城市各区域的交通出行模式具有较强的同步性。具体来看，工作日各区排放呈现典型的通勤双峰特征，早高峰于 7:00 左右达峰，其中历城区的峰值最为显著；周末则呈现单峰特征，排放量自早晨起稳步攀升，于 14:00—15:00 达到峰值。

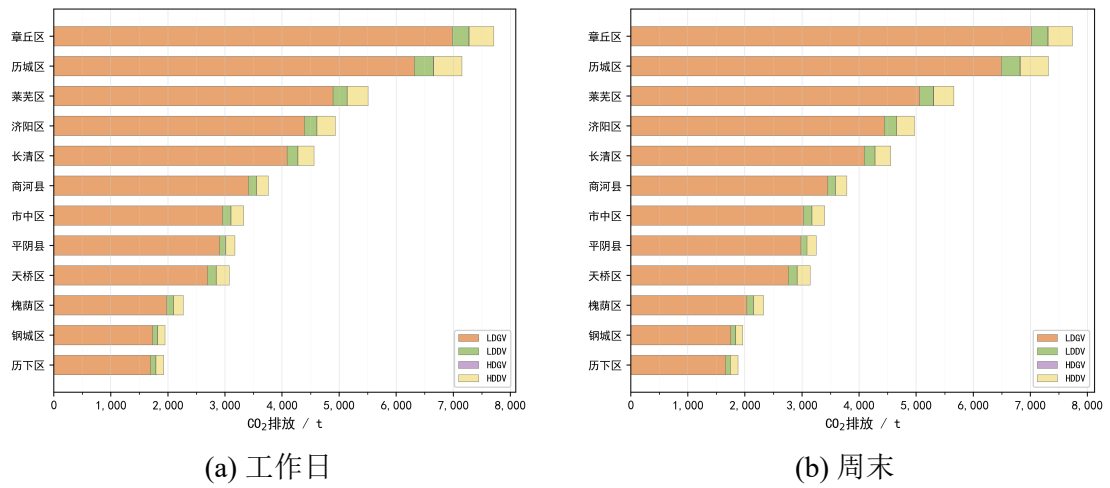


图 5.3 济南市行政区——车型 CO₂ 排放分布图

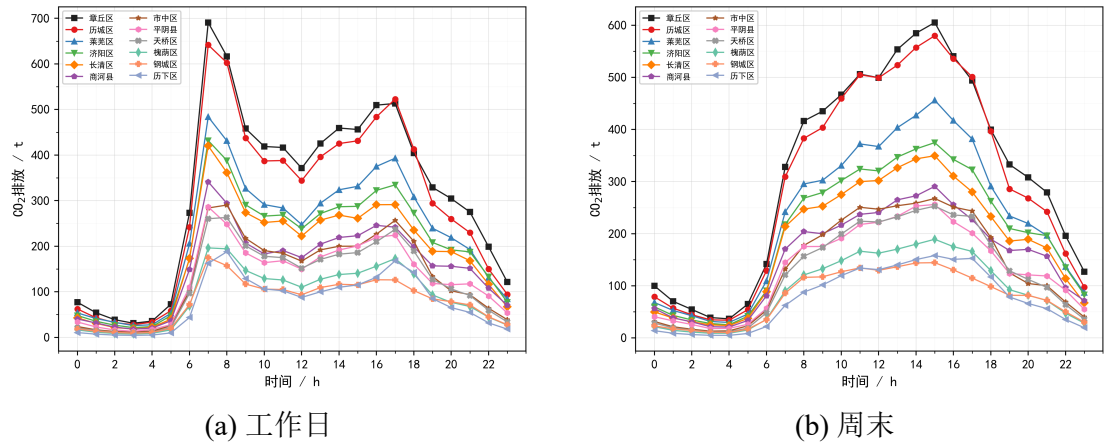


图 5.4 济南市行政区——小时 CO₂ 排放分布图

5.3.2 城市路段排放清单可视化

路段级排放清单以单一路段为基本空间单元，可精细刻画济南市各路段的 CO₂ 排放特征。如图5.5所示，凌晨 0 时，工作日与周末的路网整体排放水平均较日间明显下降，多数路段处于中低排放区间，仅高速公路、城市快速路等主要干线仍维持在较高排放水平，体现了夜间过境货运交通的持续活跃。工作日早高峰 7 时，全路网路段排放量显著上升，高排放路段集中于历下区、市中区、天桥区等中心城区主干道，以及京沪高速、济广高速等南北向过境通道，形成“主干

道 + 高速公路”的清晰高排放走廊。周末高峰时段（15 时）排放分布与工作日早高峰整体相近，但排放水平略低，中心城区高排放路段分布更均匀，无工作日显著的通勤集中排放特征。整体来看，济南市中心城区与主要过境通道始终为全路网排放的核心高值区域。

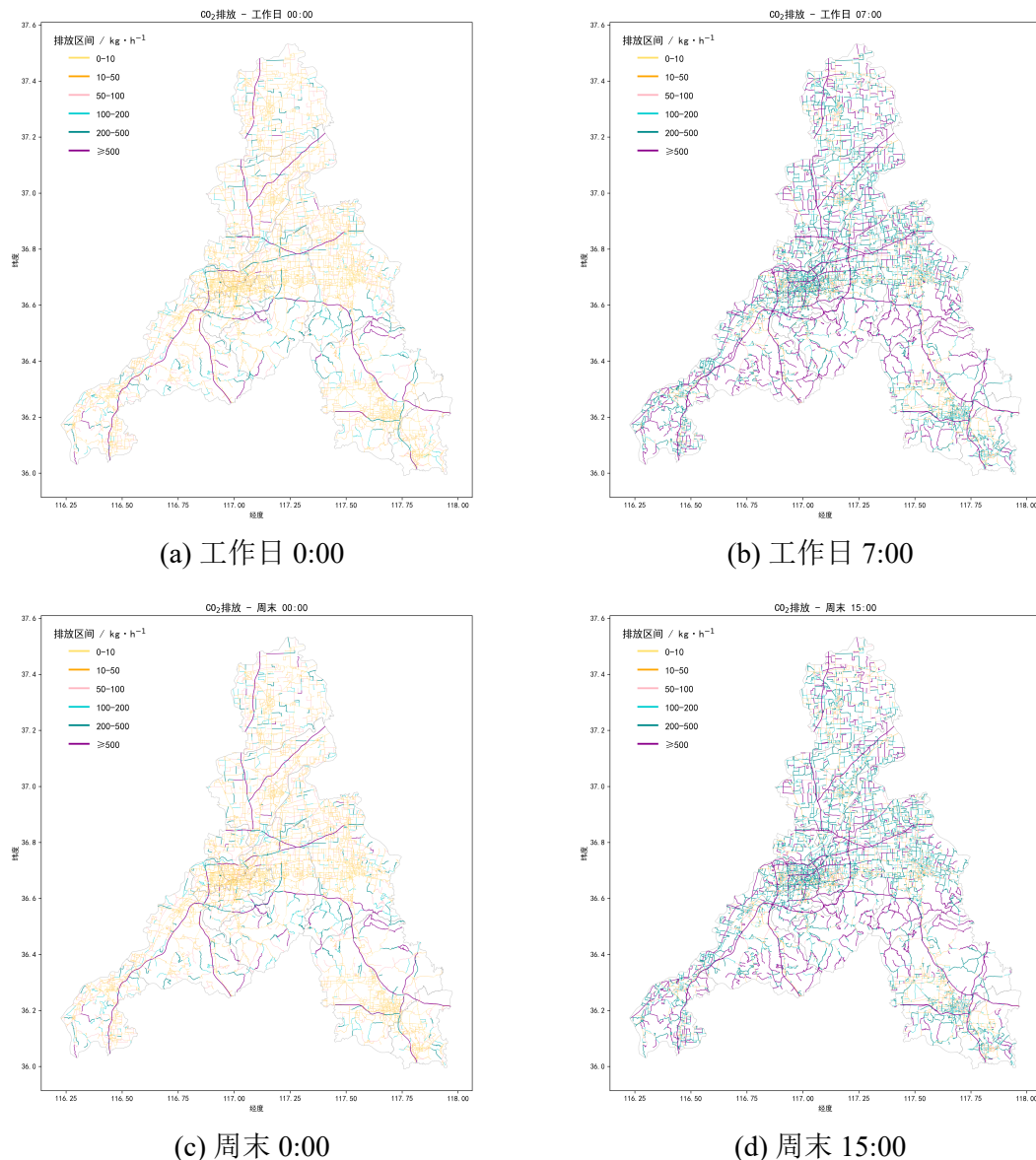


图 5.5 济南市路段 CO₂ 小时排放分布图

5.3.3 城市网格排放清单可视化

相较于路段线源排放清单，网格化排放清单可更直观地量化城市单位面积的排放强度，是机动车排放空间特征分析的主流方法。本研究编制了空间分辨率 1 km×1 km、时间分辨率 1 h 的高分辨率网格化排放清单，共覆盖 170×160 个网格单元，济南市 CO₂ 网格排放分布如图 5.6 所示。

凌晨 0 时，网格排放水平较日间高峰明显回落，整体以中低排放区间为主，

仅中心城区核心区域与高速公路沿线仍维持较高排放水平。工作日早高峰7时，大量网格跃升至高排放区间，排放热点集中于济南市中心城区与章丘城区，整体呈“中心城区为核心、沿高速路网带状延伸”的空间格局。周末高峰时段（15时）的排放空间格局与工作日早高峰基本一致，中心城区的核心区域仍表现出大面积高排放集聚特征，仅外围区域的高排放网格有所减少，整体排放强度略低于工作日。

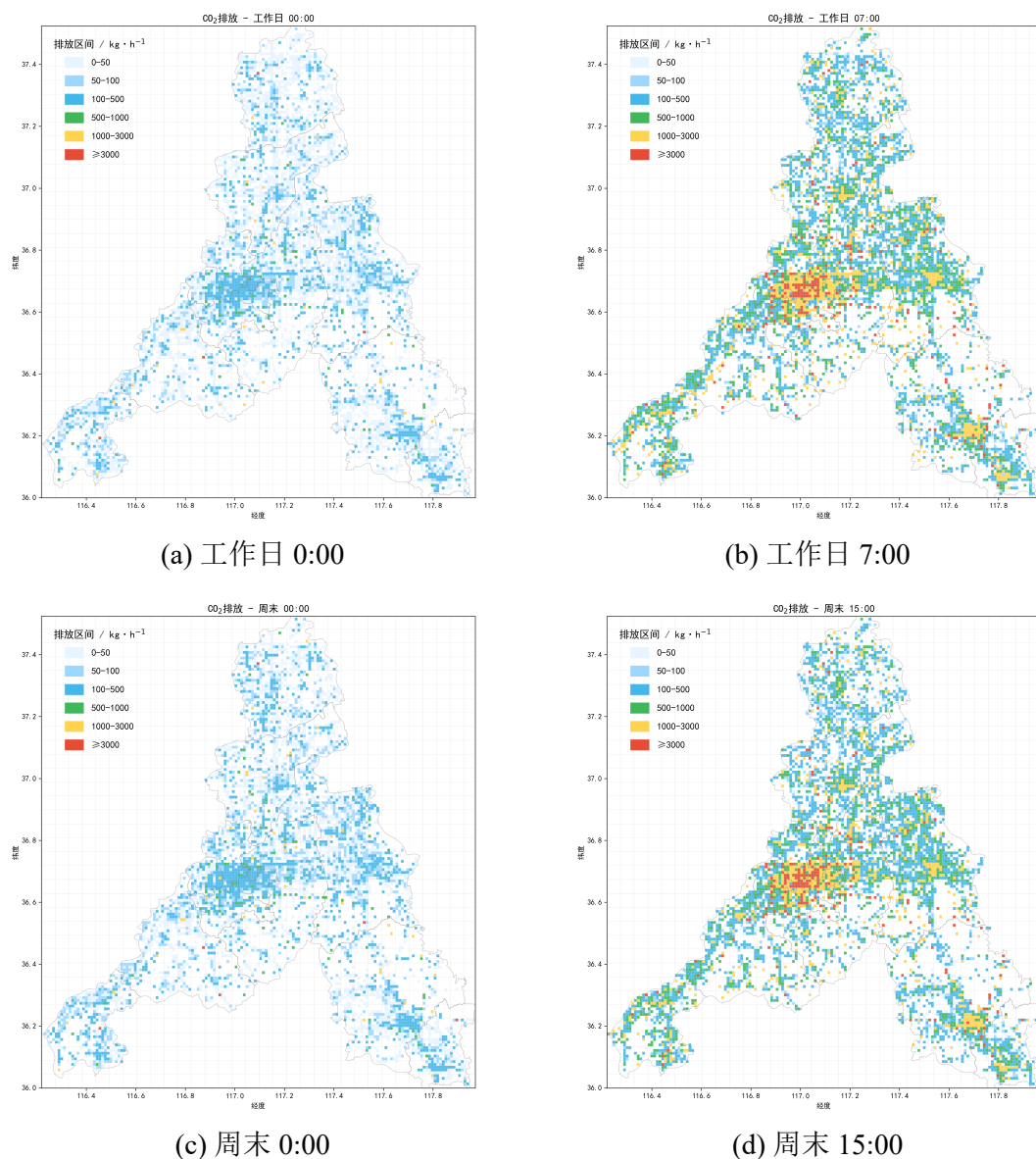


图 5.6 济南市网格 CO₂ 小时排放分布图

5.4 排放清单合理性对比分析

为评估本章所得清单结果的合理性，本节选取近年已发表的城市机动车高时空分辨率排放清单作为比较对象，从方法范式、时空分布特征与车型贡献结构三个维度开展对比分析。考虑到不同研究的目标年份、覆盖污染物与统计口径存

在差异，直接进行排放绝对值的逐点比对缺乏可比性。因此本节从方法范式维度明确所提清单相较于既有清单的差异化定位，并在时空分布特征与车型贡献结构维度通过格局一致性对比验证本章清单结果的可信度。所选对比清单涵盖长三角、京津冀及山东半岛等典型区域，其中两项以济南市为研究区域同类清单可为本章研究结果提供本地化交叉对照，具体属性如表5.5所示。

表 5.5 本章清单与代表性城市机动车排放清单对比

参照研究	城市/区域	目标年	时间分辨率	空间分辨率	核心方法
孙世达等 ^[65]	江苏省	2018	小时	0.05°×0.05°	自上而下，月度气象 + 里程权重 + 客货运量分配
刘庚等 ^[66]	天津市	2017	月	0.01°×0.01°	自上而下，标准道路长度法 + 多代用参数分配
赵子涵等 ^[67]	上海市	2023	小时	1 km×1 km	自上而下，《指南》核算 + 月度车流量与延时指数分配
王天旻等 ^[68]	济南市	2021	年	1 km×1 km	自上而下，主成分综合调解系数空间分配
宁二伟 ^[69]	济南市	2021	小时	1 km×1 km	自上而下，主成分空间分配 + 拥堵延时指数时间分配
本章	济南市	2024	小时	路段级 + 1 km×1 km	自下而上，深度学习驱动的排放因子与交通速度预测

方法范式：本章以交通流和排放因子为核算基础，通过 HiNA-STGCN 模型对济南市全路段实现小时级速度预测，并基于 AFIDE 模型生成速度相关的排放因子，完成自下而上的逐路段、逐时段排放核算，其活动水平直接来源于路网中的路段交通流。这一技术路线与表5.5所列代表性清单普遍采用的“机动车保有量 × 年均行驶里程 × 排放因子”自上而下法存在本质区别：后者虽在空间分配阶段引入主成分多因子加权^[68-69]、标准道路长度法^[66]等差异化代用参数，以及在时间分配阶段引入客货运量^[65,67]与拥堵延时指数^[65,67,69]等多源数据，将时空分辨率提升至小时级与 1 km×1 km 网格，但其活动水平基础仍源自宏观统计的机动车保有量与年均行驶里程，难以满足精确描述特定路段、特定时段排放量的需求。因此，本章排放清单在时空尺度与可解释性上，相较于上述对比清单具备方法学层面的提升价值。

时空分布特征：时间维度上，本章排放清单识别出城市工作日呈“早晚双峰”的小时尺度排放规律（早高峰 7:00–8:00、晚高峰 17:00–18:00），且工作日整体排放水平高于周末。其中，工作日双峰时段位置与上海市排放清单^[67]中报告的早 8 晚 18 时双高峰以及江苏省排放清单^[65]中描述的“两峰一谷”日变化高度一致，也与另一份济南市排放清单^[69]所识别的早 7–8 时、晚 18–19 时双峰格局趋势相符；工作日排放总量高于周末的差异趋势，与上海市排放清单^[67]中“工作日排放强度高于周末”的特征相吻合，反映出我国城市机动车排在通勤规律方面的共性。空间维度上，本章排放清单识别出济南市高排放热点呈现“中心城区主干道 + 过境高速走廊”的双重格局，这一格局与济南市 2021 年另外两份机动车排放清单^[68-69]所识别的“历下区等中心城区为高排放热点、高速公路与一级公路形成线状高排放走廊”分布高度吻合，从同一研究区域的本地化角度为本章清单的空间分布结果形成了直接交叉对照；同时，该“中心城区面源 + 对外

通道线源”格局也和上海市排放清单^[67]的“内环面源 + 外环条带”分布、江苏省排放清单^[65]的“中心城区聚集 + 城际快速路条带”分布一致，反映了我国城市机动车排放空间格局的普遍规律。

车型贡献结构：本章清单核算结果显示轻型汽油车贡献了济南市机动车 CO₂ 总排放的 89.3%，与其 93.60% 的保有量占比基本吻合（详见表5.3），占据 CO₂ 排放的绝对主导地位。这一以汽油小型客车为主导的车型贡献结构，与现有清单揭示的“小型客车主导、汽油动力贡献突出”的车队结构共性一致：上海市机动车排放清单^[67]中显示小型客车贡献 CO 的 71.3%、HC 的 75.4%，江苏省机动车排放清单^[65]中显示汽油小型客车贡献 CO 的 47.5%、VOCs 的 56.1%。考虑到 CO 与 HC 同样以汽油发动机燃烧为主要排放路径，其车型贡献结构与 CO₂ 具有较强的内在相关性，因此上述参照清单从车队结构维度侧面印证了本章机动车 CO₂ 排放清单结果的合理性。

5.5 本章小结

本章基于“排放量 = 排放因子 × 交通活动水平”的自下而上核算逻辑，以济南市为典型案例完成了机动车高时空分辨率 CO₂ 排放清单的编制。本章核心研究工作与成果如下：

一是完成排放清单核心数据生成。基于 Van Aerde 宏观交通流模型，将第4章 HiNA-STGCN 模型预测得到的路段平均速度转换为交通流量，并通过卡口数据校准流量小时分布，修正了凌晨时段流量高估的系统偏差；同时基于第3章 AFIDE 模型，生成轻型汽油车基于速度区间的 CO₂ 排放因子查找表。

二是完成机动车 CO₂ 排放总量核算。结合济南市机动车保有量统计数据，确定四类传统燃油车型的车队结构占比与排放因子取值标准，采用自下而上的方法，经车队结构与 PCU 系数修正，逐路段、逐时段核算 CO₂ 排放量，形成了覆盖济南市 41099 个路段、163 个时间步的动态排放数据库，得到工作日与周末的日均排放总量分别为 49354 吨和 49993 吨。

三是开展多尺度排放时空特征分析。从行政区、路段、1 km×1 km 网格三个空间尺度，细致剖析了 CO₂ 排放的时空分布规律：时间层面上，工作日排放呈与通勤行为高度耦合的双峰特征，周末呈单峰特征；空间层面上，高排放区域集中于中心城区主干道与过境高速公路走廊。

四是开展排放清单合理性对比分析。从方法范式、时空分布特征与车型贡献结构三个维度，与天津、上海、济南等城市已发表的高分辨率排放清单进行对比，论证了本章清单结果的合理性，提升了清单的可信度。

第6章 总结与展望

6.1 本文工作总结

机动车尾气排放是城市移动源 CO_2 排放的重要来源之一。在“双碳”战略目标背景下，精准量化城市机动车 CO_2 排放的时空分布特征，是实现城市交通碳减排精准管控的重要前提。高时空分辨率的机动车 CO_2 排放清单是支持上述精准管控的重要数据基础，然而其编制面临两大技术瓶颈：一是实际行驶工况下 CO_2 排放因子的精准获取，二是城市大规模异质路网全路段交通速度的高精度预测。针对以上瓶颈，本文围绕提升 CO_2 排放因子预测精度与大规模异质路网交通速度预测能力两大核心目标开展系统性方法研究，并以济南市为典型案例完成方法的工程验证与多尺度时空特征分析，主要工作总结如下：

(1) CO_2 排放因子预测。针对机动车实际行驶时， CO_2 排放预测存在多维特征交互复杂、传统集成学习模型在动态工况下泛化能力不足等问题，本文提出了注意力增强特征交互深度集成学习方法（AFIDE）。该方法首先基于堆叠 Transformer 架构设计注意力增强特征交互模块（AFIM），显式挖掘多维特征间的高阶非线性交互关系；进而引入 XGBoost 与 CatBoost 两种异构梯度提升树算法开展并行预测；最后构建工况感知自适应融合网络，依据瞬态工况特征分布动态分配各子模型的融合权重。基于 PEMS 采集的 5 辆国六轻型汽油车的实际行驶排放数据，实验结果表明，AFIDE 方法在各项评价指标上均取得最优性能，相较于主流基线方法实现了预测精度的有效提升。进一步通过 SHAP 可解释性分析与融合权重分布分析，验证了模型的物理可解释性与工况自适应能力。

(2) 大规模路网交通速度预测。针对现有主流时空图神经网络在处理城市大规模异质路网时，普遍存在忽略道路层级结构差异、抗噪声干扰能力弱且计算复杂度高的核心问题，本文提出了融合层级感知与节点自适应的时空图卷积网络（HiNA-STGCN）。该模型以 Graph WaveNet 为基础骨干架构，设计了道路层级嵌入（RE）、部分层级全局上下文（Partial HGC）、动态跨等级注意力机制（DCLA）、时间上下文门控（Temporal Context Gate）与节点感知归一化（NodeNorm）五大核心模块，通过层级分治的建模策略，将全局时空建模的计算复杂度有效控制在线性量级。在济南市全路网交通数据集上，HiNA-STGCN 模型在各预测步长下的速度预测精度优于多种主流基准模型，尤其在城市快速路与高速公路等高等级道路上精度提升最为明显；同时，模型预测误差随预测步长增加的增长幅度最小，展现出了良好的长时预测能力与时域鲁棒性。

(3) 机动车高分辨率 CO_2 排放清单编制。基于上述两项研究成果，本文采

用自下而上的方法构建了高时空分辨率机动车 CO₂ 排放清单编制的完整方法框架。首先利用 Van Aerde 宏观交通流模型将预测得到的路段平均速度转换为交通流量，并引入卡口流量数据对小时流量分布进行校准，有效修正了凌晨时段因车速接近自由流导致的流量高估系统偏差；在此基础上，结合 AFIDE 模型生成的分速度区间 CO₂ 排放因子查找表与本地车型的车队结构，实现了逐路段、逐时段的机动车 CO₂ 排放量精细计算。以济南市为典型案例开展实证分析，最终形成了覆盖 41099 个路段、163 个时间步的高分辨率动态排放数据库，并从行政区、路段与 1 km×1 km 网格三个空间尺度，细致剖析了机动车 CO₂ 排放的时空分布规律。在此基础上，通过与近年已发表的城市高分辨率排放清单的对比分析，从方法范式、时空分布特征与车型贡献结构三个维度论证了本文清单结果的合理性。

6.2 未来工作展望

本文在机动车 CO₂ 排放因子预测、大规模路网交通速度预测与高分辨率排放清单编制三个方面开展了系统性研究，提出了一些有效的解决方案，并取得了不错的成效。然而，本文的研究仍存在一些潜在的改进空间：

(1) 关于排放因子预测，本文方法基于 5 辆国六轻型汽油车的 RDE 测试数据开展实验，车辆样本与车型覆盖范围有限；鉴于轻型汽油车占据济南市机动车保有量主体且本文已对其完成本地化校准，该限制对清单整体精度的影响相对可控。后续研究可分阶段推进数据扩展：第一阶段拓展国五、国四等不同排放标准和车龄段的轻型汽油车样本，从而更全面反映现实车队特征；第二阶段针对柴油车（尤其是对单车排放贡献突出的重型柴油车）开展本地化 PEMS 实测，替换当前指南推荐值；第三阶段研究插电式混合动力与纯电动车型的全生命周期能耗与间接排放核算方法，以适配车队电动化转型背景下的清单编制需求。

(2) 关于交通速度预测，本文提出的模型以浮动车数据作为主要输入，虽已通过周内周期编码隐式区分工作日与周末，但尚未显式融合极端天气、交通事故、临时交通管制等非周期性事件的影响。后续研究可引入实时气象数据、交通管理部门的事故与管制公告以及节假日标签等多源异构数据，从而增强模型在突发事件场景下的预测鲁棒性与泛化能力。

(3) 关于排放清单编制，本文采用 Van Aerde 交通流模型进行速度到流量的转换，其精度受限于模型参数的标定质量，后续可结合更丰富的卡口数据进行精确标定。此外，本文仅以 CO₂ 为单一目标污染物，未来可扩展至 CO、NO_x、PM_{2.5} 等多污染物的协同清单编制，为大气污染物与温室气体的融合管控提供更全面的数据基础。

参考文献

- [1] 中华人民共和国生态环境部. 中国移动源环境管理年报 (2025 年)[EB/OL]. 2025. <https://www.mee.gov.cn/hjzl/sthjzk/ydyhjgl/202512/W020251203577003736659.pdf>.
- [2] 财新智库. 中国交通碳中和：结构优化与技术创新并举[EB/OL]. 2024. <https://index.caixin.com/2024-09-04/102233335.html>.
- [3] 中共中央和国务院. 国家综合立体交通网规划纲要[EB/OL]. 2021. https://www.gov.cn/zhengce/2021-02/24/content_5588654.htm.
- [4] 交通运输部. 绿色交通”十四五”发展规划[EB/OL]. 2021. https://www.gov.cn/zhengce/zhengceku/2022-01/21/content_5669662.htm.
- [5] 生态环境部办公厅. 大气污染物与温室气体融合排放清单编制技术指南（试行）[EB/OL]. 2024. https://www.mee.gov.cn/xxgk/xxgk/xxgk06/202401/t20240130_1065242.html.
- [6] Fontaras G, Ciuffo B, Zacharof N, et al. The difference between reported and real-world CO₂ emissions: how much improvement can be expected by WLTP introduction?[J]. Transportation Research Procedia, 2017, 25: 3933-3943.
- [7] Jiménez-Palacios J L. Understanding and quantifying motor vehicle emissions with vehicle specific power and TILDAS remote sensing[D]. Massachusetts Institute of Technology, 1999.
- [8] Zhai H, Frey H C, Roupail N M. A vehicle-specific power approach to speed- and facility-specific emissions estimates for diesel transit buses[J]. Environmental Science & Technology, 2008, 42(21): 7985-7991.
- [9] Chen J, Wang K, Yu H, et al. A novel VSP-based CO₂ emission model for ICEs and HEVs based on internally observable variables: engine operating speeds[J]. Energy, 2024, 313: 133892.
- [10] 刘慧甜, 胡大伟. 基于机器学习的交通碳排放预测模型构建与分析[J]. 环境科学, 2024, 45(6): 3421-3432.
- [11] Qiao P, Ni J, Huang R, et al. Prediction of instantaneous particle number for light-duty gasoline vehicles under real driving conditions based on ensemble learning[J]. Journal of Cleaner Production, 2024, 434: 139859.
- [12] Jiang Z, Wu L, Niu H, et al. Investigating the impact of high-altitude on vehicle carbon emissions: a comprehensive on-road driving study[J]. Science of The Total Environment, 2024, 918: 170671.
- [13] Xu J, Saleh M, Hatzopoulou M. A machine learning approach capturing the effects of driving

- behaviour and driver characteristics on trip-level emissions[J]. *Atmospheric Environment*, 2020, 224: 117311.
- [14] Liao J, Liu Y, Wang H, et al. AI-assisted transient emission prediction for diesel engines based on a novel hybrid model combined multiple machine learning algorithms and XGBoost [J]. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 2025, 13(6): 119649.
- [15] Seo J, Yun B, Park J, et al. Prediction of instantaneous real-world emissions from diesel light-duty vehicles based on an integrated artificial neural network and vehicle dynamics model[J]. *Science of The Total Environment*, 2021, 786: 147359.
- [16] Zhang R, Wang Y, Pang Y, et al. A deep learning micro-scale model to estimate the CO₂ emissions from light-duty diesel trucks based on real-world driving[J]. *Atmosphere*, 2022, 13(9): 1466.
- [17] Le Cornec C M A, Molden N, van Reeuwijk M, et al. Modelling of instantaneous emissions from diesel vehicles with a special focus on NO_x: insights from machine learning techniques [J]. *Science of The Total Environment*, 2020, 737: 139625.
- [18] Xie H, Zhang Y, He Y, et al. Parallel attention-based LSTM for building a prediction model of vehicle emissions using PEMS and OBD[J]. *Measurement*, 2021, 185: 110074.
- [19] Hu L, Wang C, Ye Z, et al. Estimating gaseous pollutants from bus emissions: a hybrid model based on GRU and XGBoost[J]. *Science of The Total Environment*, 2021, 783: 146870.
- [20] Yu H, Chang H, Wen Z, et al. Prediction of real driving emission of light vehicles in China VI based on GA-BP algorithm[J]. *Atmosphere*, 2022, 13(11): 1800.
- [21] Williams B M, Hoel L A. Modeling and forecasting vehicular traffic flow as a seasonal ARIMA process: theoretical basis and empirical results[J]. *Journal of Transportation Engineering*, 2003, 129(6): 664-672.
- [22] Okutani I, Stephanedes Y J. Dynamic prediction of traffic volume through Kalman filtering theory[J]. *Transportation Research Part B: Methodological*, 1984, 18(1): 1-11.
- [23] Wu C H, Ho J M, Lee D T. Travel-time prediction with support vector regression[J]. *IEEE Transactions on Intelligent Transportation Systems*, 2004, 5(4): 276-281.
- [24] Zhang X, Rice J A. Short-term travel time prediction[J]. *Transportation Research Part C: Emerging Technologies*, 2003, 11(3-4): 187-210.
- [25] Sun S, Zhang C, Yu G. A Bayesian network approach to traffic flow forecasting[J]. *IEEE Transactions on Intelligent Transportation Systems*, 2006, 7(1): 124-132.
- [26] Ma X, Tao Z, Wang Y, et al. Long short-term memory neural network for traffic speed prediction using remote microwave sensor data[J]. *Transportation Research Part C: Emerging Technologies*, 2015, 54: 187-197.
- [27] Fu R, Zhang Z, Li L. Using LSTM and GRU neural network methods for traffic flow predic-

- tion[C]//Proceedings of the 31st Youth Academic Annual Conference of Chinese Association of Automation (YAC). 2016: 324-328.
- [28] Kipf T N, Welling M. Semi-supervised classification with graph convolutional networks[C]//International Conference on Learning Representations (ICLR). 2017.
- [29] Yu B, Yin H, Zhu Z. Spatio-temporal graph convolutional networks: a deep learning framework for traffic forecasting[C]//Proceedings of the 27th International Joint Conference on Artificial Intelligence (IJCAI). 2018: 3634-3640.
- [30] Li Y, Yu R, Shahabi C, et al. Diffusion convolutional recurrent neural network: data-driven traffic forecasting[C]//International Conference on Learning Representations (ICLR). 2018.
- [31] Wu Z, Pan S, Long G, et al. Graph WaveNet for deep spatial-temporal graph modeling [C]//Proceedings of the 28th International Joint Conference on Artificial Intelligence (IJCAI). 2019: 1907-1913.
- [32] Bai L, Yao L, Li C, et al. Adaptive graph convolutional recurrent network for traffic forecasting [C]//Advances in Neural Information Processing Systems (NeurIPS): Vol. 33. 2020: 17804-17815.
- [33] Jiang W, Luo J, He M, et al. Graph neural network for traffic forecasting: the research progress [J]. ISPRS International Journal of Geo-Information, 2023, 12(3): 100.
- [34] Wu Y, Zhang S, Hao J, et al. On-road vehicle emissions and their control in China: a review and outlook[J]. Science of the Total Environment, 2017, 574: 332-349.
- [35] 郝吉明, 吴烨, 傅立新, 等. 中国城市机动车排放污染控制规划体系研究[J]. 应用气象学报, 2002, 13(U01): 195-203.
- [36] 伏晴艳, 魏海萍, 李锦菊, 等. 上海市大气污染物排放清单建立研究[R]. 上海市环境监测中心, 2006.
- [37] Zheng B, Tong D, Li M, et al. Trends in China's anthropogenic emissions since 2010 as the consequence of clean air actions[J]. Atmospheric Chemistry and Physics, 2018, 18(19): 14095-14111.
- [38] U.S. Environmental Protection Agency. User's guide to MOBILE6.1 and MOBILE6.2: mobile source emission factor model: EPA-420-R-03-010[R]. Office of Transportation and Air Quality, U.S. Environmental Protection Agency, 2003.
- [39] Ntziachristos L, Gkatzoflias D, Kouridis C, et al. COPERT: a European road transport emission inventory model[C]//Information Technologies in Environmental Engineering. Springer, 2009: 491-504.
- [40] U.S. Environmental Protection Agency. MOVES2014a user guide: EPA-420-B-15-095[R]. Office of Transportation and Air Quality, U.S. Environmental Protection Agency, 2015.
- [41] Wang H, Fu L, Chen J. Developing a high-resolution vehicular emission inventory by inte-

- grating an emission model and a traffic model: part 2 — A case study in Beijing[J]. Journal of the Air & Waste Management Association, 2010, 60(12): 1471-1484.
- [42] 胥耀方, 于雷, 宋国华, 等. 针对二氧化碳的轻型汽油车 VSP 区间划分[J]. 环境科学学报, 2010, 30(7): 1358-1365.
- [43] Zhang S, Wu Y, Huang R, et al. High-resolution simulation of link-level vehicle emissions and concentrations for air pollutants in a traffic-populated eastern Asian city[J]. Atmospheric Chemistry and Physics, 2016, 16(15): 9965-9981.
- [44] Zhang S, Niu T, Wu Y, et al. Fine-grained vehicle emission management using intelligent transportation system data[J]. Environmental Pollution, 2018, 241: 1027-1037.
- [45] Deng F, Lv Z, Qi L, et al. A big data approach to improving the vehicle emission inventory in China[J]. Nature Communications, 2020, 11(1): 2801.
- [46] Liu J, Han K, Chen X M, et al. Spatial-temporal inference of urban traffic emissions based on taxi trajectories and multi-source urban data[J]. Transportation Research Part C: Emerging Technologies, 2019, 106: 145-165.
- [47] Grinsztajn L, Oyallon E, Varoquaux G. Why do tree-based models still outperform deep learning on typical tabular data?[C]//Advances in Neural Information Processing Systems (NeurIPS): Vol. 35. 2022: 507-520.
- [48] Friedman J H. Greedy function approximation: a gradient boosting machine[J]. Annals of Statistics, 2001, 29(5): 1189-1232.
- [49] Chen T, Guestrin C. XGBoost: a scalable tree boosting system[C]//Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining (KDD). 2016: 785-794.
- [50] Prokhorenkova L, Gusev G, Vorobev A, et al. CatBoost: unbiased boosting with categorical features[C]//Advances in Neural Information Processing Systems (NeurIPS): Vol. 31. 2018: 6638-6648.
- [51] Defferrard M, Bresson X, Vandergheynst P. Convolutional neural networks on graphs with fast localized spectral filtering[C]//Advances in Neural Information Processing Systems (NeurIPS): Vol. 29. 2016: 3844-3852.
- [52] Bai S, Kolter J Z, Koltun V. An empirical evaluation of generic convolutional and recurrent networks for sequence modeling[EB/OL]. 2018. <https://arxiv.org/abs/1803.01271>.
- [53] Van Den Oord A, Dieleman S, Zen H, et al. WaveNet: a generative model for raw audio [EB/OL]. 2016. <https://arxiv.org/abs/1609.03499>.
- [54] Dauphin Y N, Fan A, Auli M, et al. Language modeling with gated convolutional networks [C]//Proceedings of the 34th International Conference on Machine Learning (ICML). 2017: 933-941.

- [55] Vaswani A, Shazeer N, Parmar N, et al. Attention is all you need[C]//Advances in Neural Information Processing Systems (NeurIPS): Vol. 30. 2017: 5998-6008.
- [56] Frey H C, Unal A, Roupail N M, et al. On-road measurement of vehicle tailpipe emissions using a portable instrument[J]. Journal of the Air & Waste Management Association, 2003, 53(8): 992-1002.
- [57] Van Aerde M, Rakha H. Multivariate calibration of single regime speed-flow-density relationships [road traffic management][C]//Proceedings of the 6th Vehicle Navigation and Information Systems Conference (VNIS). 1995: 334-341.
- [58] Huber P J. Robust estimation of a location parameter[J]. Annals of Mathematical Statistics, 1964, 35(1): 73-101.
- [59] Breiman L. Random forests[J]. Machine Learning, 2001, 45(1): 5-32.
- [60] Freund Y, Schapire R E. A decision-theoretic generalization of on-line learning and an application to boosting[J]. Journal of Computer and System Sciences, 1997, 55(1): 119-139.
- [61] Rumelhart D E, Hinton G E, Williams R J. Learning representations by back-propagating errors[J]. Nature, 1986, 323(6088): 533-536.
- [62] Lundberg S M, Lee S I. A unified approach to interpreting model predictions[C]//Advances in Neural Information Processing Systems (NeurIPS): Vol. 30. 2017: 4765-4774.
- [63] Zheng C, Fan X, Wang C, et al. GMAN: a graph multi-attention network for traffic prediction [C]//Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence (AAAI): Vol. 34. 2020: 1234-1241.
- [64] Guo S, Lin Y, Feng N, et al. Attention based spatial-temporal graph convolutional networks for traffic flow forecasting[C]//Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence (AAAI): Vol. 33. 2019: 922-929.
- [65] 孙世达, 王博, 孙露娜, 等. 江苏省高时空分辨率机动车排放清单构建及特征[J]. 中国环境科学, 2023, 43(9): 4490-4502.
- [66] 刘庚, 孙世达, 孙露娜, 等. 天津市 2017 年移动源高时空分辨率排放清单[J]. 环境科学, 2020, 41(10): 4470-4481.
- [67] 赵子涵, 史旭荣, 胡磐遥, 等. 上海市机动车高时空分辨率污染物排放特征[J]. 环境工程, 2025: 1-22.
- [68] 王天旻, 冯海霞, 魏代梅, 等. 济南市高精度机动车碳排放清单研究[J]. 环境污染与防治, 2023, 45(10): 1338-1342.
- [69] 宁二伟. 济南市机动车排放清单的时空特征分析[D]. 山东交通学院, 2023.

致谢

提笔至此，在中国科学技术大学的研究生生涯即将画上句号。回望这三年，有实验屡屡受挫时的迷茫与沮丧，有灵感乍现、取得突破时的欣喜与激动，更有无数被温暖与善意包裹的平凡瞬间。千言万语，汇成一句感谢，献给每一位在这段旅程中给予我帮助与陪伴的人。

首先，我要向我的三位导师致以最崇高的敬意与最衷心的感谢。感谢赵云波教授，从开题、中期到论文评审，每一个关键节点都离不开您的悉心把关与指导。您严谨的治学态度和高屋建瓴的学术眼光，让我在研究方向的把握上受益良多，也让我懂得做学问既要仰望星空，也要脚踏实地。感谢王燕军老师，在北京实践基地学习期间，您深厚的专业积累和认真负责的指导风格，让我在研究中少走了许多弯路，每一次与您的深入交流都让我受益匪浅。另外，我还要特别感谢蒋涵老师，您是我科研路上最亲近的引路人，也是生活中值得信赖的良师益友。从最初面对文献一筹莫展，到逐渐形成自己的研究思路，再到这篇论文的最终完成，每一个环节都离不开您的耐心陪伴与悉心指导。您逐字逐句修改论文时的专注身影，您在我陷入低谷时那些温暖而坚定的鼓励，都将永远铭刻在我心中。

感谢实验室这个温暖的大家庭。特别感谢冯伟杰师兄和王晶师姐，在北京实践期间，你们在科研与生活上给予了我莫大的帮助，面对陌生的环境和全新的课题，正是你们的无私分享与耐心指导，让我得以迅速适应并顺利开展工作。感谢各位师兄师姐在我初入实验室时倾囊相授的宝贵经验，也感谢各位师弟师妹一路相伴的朝气与热忱。我们一起在实验室挑灯夜战，一起分享生活中的点滴喜悦，这些日子是我研究生阶段最珍贵的记忆。

感谢我的舍友们，是你们让我忙碌的求学生活多了许多暖意。感谢在合肥时的舍友毛锐、牟礼、穆锦铭，你们的陪伴让宿舍成为繁重课业之余最放松的港湾；感谢在北京实践期间的舍友罗立卓，异地求学的日子因有你的相伴而不再孤单。感谢研究生阶段所有同行的同学们，你们的友谊让我的校园生活更加丰富而圆满。

最后，我要将最深的感谢留给我的父母。感谢你们含辛茹苦的养育之恩，感谢你们在我漫长求学路上的默默付出与无条件支持。你们的理解与包容，是我面对一切困难时最大的勇气；你们的牵挂与期盼，是我不断前行的力量源泉。

研究生生涯的结束，是人生新征程的开始。我将带着在中科大所学的知识与收获的成长，带着所有师长亲友的祝福与期望，以更加坚定的步伐走向未来。再次向所有帮助过我的人表示衷心的感谢，愿你们一切顺遂，平安喜乐！

在读期间取得的科研成果

已发表期刊论文:

- [1] **Mingshen Ma**, Kai Li, Jia Ke, Sheng Su, Jinsong Mu, Yitu Lai, Yongshuai Qu, Yanjun Wang, and Han Jiang. Impact of Continuous-Regeneration Particulate Filters on Gaseous Pollutant Emissions of Diesel Engines[J]. *Sustainability*, 2026, 18(5): 2250.

发明专利申请:

- [1] 王燕军, **马明坤**, 蒋涵等。一种基于图神经网络的大规模城市路网交通状态预测方法。发明专利（初审合格，目前处于公开准备期）。

参与的科研项目:

- [1] 时空大数据驱动的移动源近实时排放表征技术研发，国家重点研发计划课题（2023YFC3705604），2023–2026。