

DOI:10.19322/j.cnki.issn.1006-4710.2023.02.004

<https://xuebao.xaut.edu.cn>

引文格式:霍霄,王茂华,张钦伟,魏崇,黄永健,顾倩荣.基于 GEOS-Chem V12.6.3 的全球 CO<sub>2</sub> 浓度同化系统的构建[J].西安理工大学学报,2023,39(2):184-197.

HUO Xiao, WANG Maohua, ZHANG Qinwei, WEI Chong, HUANG Yongjian, GU Qianrong. Construction of a global CO<sub>2</sub> concentration assimilation system based on GEOS-Chem V12.6.3[J]. Journal of Xi'an University of Technology, 2023, 39(2): 184-197.

# 基于 GEOS-Chem V12.6.3 的全球 CO<sub>2</sub> 浓度同化系统的构建

霍霄<sup>1,2,3</sup>, 王茂华<sup>4</sup>, 张钦伟<sup>1,2,3</sup>, 魏崇<sup>1,3</sup>, 黄永健<sup>1,3</sup>, 顾倩荣<sup>1,3</sup>

(1. 中国科学院上海高等研究院 碳数据与碳评估研究中心, 上海 201210; 2. 中国科学院大学, 北京 100049;  
3. 中国科学院上海高等研究院 低碳转化科学与工程重点实验室, 上海 201210;  
4. 中国科学院脑科学与智能技术卓越创新中心, 上海 200031)

**摘要:** 为了研究同化 OCO-2 卫星柱浓度(XCO<sub>2</sub>)数据对于全球 CO<sub>2</sub> 浓度模拟的影响,本文基于 GEOS-Chem V12.6.3,采用四维变分(four dimensional variational, 4D-Var)的方法,构建了一个同化 OCO-2 卫星 XCO<sub>2</sub> 数据的全球大气 CO<sub>2</sub> 浓度同化系统。首先,采用有限差分法验证了观测算子、积云对流、行星边界层和平流 4 个伴随模块计算结果的正确性。然后,以 2018 年为例,设计了模拟和同化两个实验,并利用 TCCON、地面和航飞 3 种独立的观测数据进行对比验证。结果显示,同化实验结果与 TCCON、地面和航飞观测数据之间的平均误差分别为 0.37 mL/m<sup>3</sup>、0.41 mL/m<sup>3</sup> 和 0.51 mL/m<sup>3</sup>,相比于模拟实验,分别改善了 40.32%、42.25% 和 45.15%,表明了同化 OCO-2 卫星的 XCO<sub>2</sub> 数据能显著提高对全球大气 CO<sub>2</sub> 浓度模拟的准确性。

**关键词:** CO<sub>2</sub> 浓度; 同化系统; 4D-Var; OCO-2; GEOS-Chem

**中图分类号:** P402      **文献标志码:** A      **文章编号:** 1006-4710(2023)02-0184-14

## Construction of a global CO<sub>2</sub> concentration assimilation system based on GEOS-Chem V12.6.3

HUO Xiao<sup>1,2,3</sup>, WANG Maohua<sup>4</sup>, ZHANG Qinwei<sup>1,2,3</sup>, WEI Chong<sup>1,3</sup>,  
HUANG Yongjian<sup>1,3</sup>, GU Qianrong<sup>1,3</sup>

(1. Shanghai Carbon Data Research Center, Shanghai Advanced Research Institute, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201210, China; 2. University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China;  
3. Key Laboratory of Low-Carbon Conversion Science & Engineering, Shanghai Advanced Research Institute, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201210, China; 4. Center for Excellence in Brain Science and Intelligence Technology, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200031, China)

**Abstract:** In order to study the influence of the assimilation of OCO-2 satellite column-averaged dry air mole fractions of CO<sub>2</sub> (XCO<sub>2</sub>) data on global CO<sub>2</sub> simulation, the study, based on GEOS-Chem V12.6.3, adopts the four dimensional variational (4D-Var) method to develop a global atmospheric CO<sub>2</sub> concentration assimilation system that assimilates OCO-2 satellite XCO<sub>2</sub> data. First, the finite difference method is used to validate the correctness of the calculation results of

**收稿日期:** 2021-03-16; **网络首发日期:** 2021-06-25

**网络首发地址:** <https://kns.cnki.net/kcms/detail/61.1294.N.20210625.0931.002.html>

**基金项目:** 中国科学院重点部署资助项目(ZDRW-ZS-2019-1); 国际碳卫星观测数据分析合作计划资助(131211KYSB20180002)

**第一作者:** 霍霄,男,硕士生,研究方向为数据同化。E-mail: huoxiao2018@sari.ac.cn

**通信作者:** 顾倩荣,男,博士,高级工程师,研究方向为机器学习和数据同化。E-mail: guqr@sari.ac.cn

the observation operator, the cloud convection, the planetary boundary layer, and the advection modules. Then, two experiments on simulation and assimilation are designed taking the year 2018 as an example, with three observation data of TCCON, ground and aircraft used for comparison and validation. The results show that the mean errors between the assimilation experiment results and independent TCCON, ground and aircraft observations are 0.37 mL/m<sup>3</sup>, 0.41 mL/m<sup>3</sup>, and 0.51 mL/m<sup>3</sup>, respectively, which are improved by 40.32%, 42.25%, and 45.15% compared with the simulation experiment results. It shows that the assimilation system could significantly improve the accuracy of the global atmospheric CO<sub>2</sub> concentration estimation.

**Key words:** CO<sub>2</sub> concentration; assimilation system; 4D-Var; OCO-2; GEOS-Chem

自 1750 年工业革命开始,大量的 CO<sub>2</sub> 因人类对化石能源的大规模使用而被排入大气,使得大气中 CO<sub>2</sub> 浓度从工业革命前的约 278 mL/m<sup>3</sup> 上升到 2019 年的约 410.5 mL/m<sup>3</sup><sup>[1]</sup>。大气中 CO<sub>2</sub> 浓度的上升导致辐射强迫的变化,是引起全球变暖的主要原因<sup>[2]</sup>。因此,估算出大气中 CO<sub>2</sub> 浓度及其变化情况,对更好地理解全球碳循环机理,研究碳源、碳汇的分布,从而为减缓全球变暖提供科学支持具有重要的意义。

国际社会目前已发射了多颗卫星监测大气 CO<sub>2</sub> 浓度变化,包括 SCIAMACHY<sup>[3]</sup>、GOSAT<sup>[4]</sup>、GOSAT-2<sup>[5]</sup>、OCO-2<sup>[6]</sup>、OCO-3<sup>[7]</sup> 和 TanSat<sup>[8]</sup>。除此之外,如 MicroCarb<sup>[9]</sup>、GeoCARB<sup>[10]</sup> 等其他卫星也将于 2022 年左右进行发射。卫星观测覆盖范围广、分布均匀,为大气中 CO<sub>2</sub> 浓度和 CO<sub>2</sub> 通量估算研究的开展,提供了扎实的数据基础。

基于不同的大气化学传输模型和数据同化算法,已开发出多个全球碳同化系统,包括 Carbon-Tracke<sup>[11]</sup>、PCTM-Adjoint<sup>[12]</sup>、LMDZ-4DVar<sup>[13]</sup>、TM5-4DVar<sup>[14]</sup> 和 GEOS-Chem Adjoint<sup>[15]</sup>。同化卫星观测能较好地提升 CO<sub>2</sub> 模拟浓度的准确性和反演通量的不确定度<sup>[14,16-21]</sup>。Liu 等<sup>[22]</sup> 通过对 Aqua 卫星搭载的 AIRS(atmospheric infrared sounder) 载荷的 XCO<sub>2</sub> 数据进行同化,生成全球 6 小时间隔的三维大气 CO<sub>2</sub> 浓度场。Basu 等<sup>[14]</sup> 采用 TM5 传输模型和 4D-Var 相结合的方法,在 4°×6° 的模式分辨率下,通过同化 GOSAT 观测对海洋和生态系统碳通量进行估计。Wang 等<sup>[23]</sup> 采用 PCTM 传输模型和 Bayes 综合反演相结合的方法,在 2°×2.5° 的模式分辨率下,分别对原位观测、GOSAT 观测以及融合的原位观测和 GOSAT 观测数据进行了同化,并分析了对应的浓度模拟结果和通量反演结果。模型误差能显著影响同化效果,全球碳通量的估算需综合考虑不同模型的实验结果<sup>[24-26]</sup>。Crowell 等<sup>[27]</sup> 采

用不同的大气化学模型和同化算法,分别同化了 OCO-2 卫星观测和原位观测,同化结果显示由这两种观测估计的全球总碳汇相近。Basu 等<sup>[26]</sup> 采用观测系统模拟实验的方法,评估了 ACTM、LMDZ 等五种全球大气化学模型对于同化 OCO-2 伪观测的影响。

目前更多的研究集中于同化 GOSAT 卫星数据,并且多同化系统结果相互比较对于合理估算碳通量具有重要的作用。因此本研究以 GEOS-Chem V12.6.3 版本为前向模式,开发了一个能同化 OCO-2 卫星 XCO<sub>2</sub> 数据的全球大气 CO<sub>2</sub> 浓度四维变分同化系统。首先,借鉴在大气化学传输模式 GEOS-Chem<sup>[28]</sup> V9.0.2 基础上开发的伴随模型 GEOS-Chem Adjoint V35<sup>[15]</sup> 版本的思路和方法开发了观测算子伴随模块、积云对流伴随模块、行星边界层伴随模块和平流伴随模块,并利用有限差分的方法对这 4 个伴随模块进行了验证,然后分别进行了针对 2018 年的模拟实验和同化 OCO-2 卫星 XCO<sub>2</sub> 数据的实验,实验结果与独立的观测比较显示,同化卫星 XCO<sub>2</sub> 数据,能显著提高对全球大气 CO<sub>2</sub> 浓度估计的准确性。

## 1 同化系统的构建

### 1.1 GEOS-Chem 前向模式

GEOS-Chem<sup>[28]</sup> 是一个全球三维大气化学传输模式。本研究以内部模块结构如图 1 所示的 GEOS-Chem V12.6.3 版本作为同化系统的前向模式。在同化过程中,系统 CO<sub>2</sub> 浓度状态量的初始值和先验 CO<sub>2</sub> 通量由 HEMCO 模块<sup>[29]</sup> 读入,在由 FlexGrid 模块读入的气象场的驱动下,先经过平流模块,然后经过通量添加模块叠加上由先验 CO<sub>2</sub> 通量引起的 CO<sub>2</sub> 浓度变化量之后,再经过行星边界层和积云对流模块的向前积分,得到前向模式对全球大气 CO<sub>2</sub> 浓度分布的模拟结果。

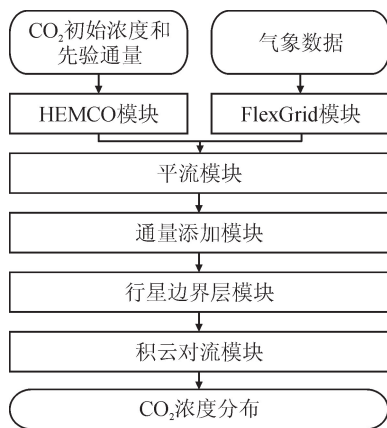


图 1 GEOS-Chem V12.6.3 版本的内部模块结构图  
Fig. 1 Internal module structure of GEOS-Chem V12.6.3

1.2 同化计算过程

在 GEOS-Chem 前向模式的基础上,构建了一个全球大气 CO<sub>2</sub> 浓度同化系统,见图 2,采用四维变分的方法对 OCO-2 卫星的 XCO<sub>2</sub> 数据进行同化,图 2 的虚线框内是同化系统的伴随计算过程。同化系统中各模块的说明见表 1。

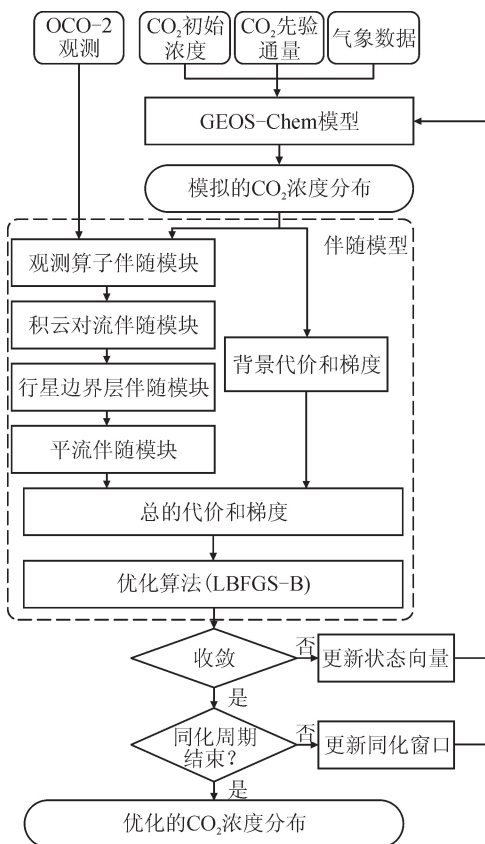


图 2 基于 GEOS-Chem 的全球大气 CO<sub>2</sub> 浓度同化系统  
Fig. 2 Global atmospheric CO<sub>2</sub> concentration assimilation system based on GEOS-Chem

表 1 全球大气 CO<sub>2</sub> 浓度同化系统中主要模块说明  
Tab. 1 Descriptions of modules from global atmospheric CO<sub>2</sub> concentration assimilation system

模块名称	说明
观测算子伴随	独立开发的 OCO-2 卫星 XCO <sub>2</sub> 数据的观测算子
积云对流伴随	独立开发的积云对流的伴随模块
行星边界层伴随	在 GEOS-Chem Adjoint V35 <sup>[15]</sup> 的行星边界层模块的基础上修改实现
平流伴随	借鉴 Henze 等在 GEOS-Chem Adjoint V35 <sup>[15]</sup> 中对平流伴随模块的构造方法,在 GEOS-Chem V12.6.3 前向模式中的平流模块基础上修改实现
优化算法	拟 Newton 优化算法 <sup>[30]</sup> ,调用美国西北大学发布的 Lbfgsb. 3.0 版本实现

四维变分的同化过程,是通过求解式(1)表示的代价函数的代价及其梯度,然后将求得的代价函数的代价和梯度输入进梯度优化算法中去调整对前向模式的系统初始状态的估计,再通过迭代计算的过程,得到使代价函数取得最小值时的系统初始状态值,即为同化优化后的结果<sup>[31]</sup>。四维变分的详细计算过程说明如下。

$$J(\mathbf{x}_0) = J_o(\mathbf{x}_0) + J_b(\mathbf{x}_0) \quad (1)$$

式中:  $J(\mathbf{x}_0)$  表示系统 CO<sub>2</sub> 浓度状态量的初始值为  $\mathbf{x}_0$  时代价函数的代价,可以分解为由观测代价  $J_o(\mathbf{x}_0)$  和背景代价  $J_b(\mathbf{x}_0)$  构成。 $J_o(\mathbf{x}_0)$  表示由观测值  $\mathbf{y}_i$  和系统状态  $\mathbf{x}_i$  之间的偏差引起的代价,  $J_b(\mathbf{x}_0)$  表示由系统初始状态  $\mathbf{x}_0$  和背景值  $\mathbf{x}_b$  之间的偏差引起的代价。 $J_o(\mathbf{x}_0)$  和  $J_b(\mathbf{x}_0)$  的表达式为:

$$J_o(\mathbf{x}_0) = \frac{1}{2} \sum_{i=0}^N (\mathbf{H}(\mathbf{x}_i) - \mathbf{y}_i)^T \mathbf{R}^{-1} (\mathbf{H}(\mathbf{x}_i) - \mathbf{y}_i) \quad (2)$$

$$J_b(\mathbf{x}_0) = \frac{1}{2} (\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_b)^T \mathbf{B}^{-1} (\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_b) \quad (3)$$

式中:  $N$  为当前同化窗口中同化时刻的总数;  $\mathbf{H}$  为观测算子;  $\mathbf{R}$  为观测误差协方差;  $\mathbf{B}$  为背景误差协方差。

为提高计算代价函数梯度的效率,采用了伴随的方法<sup>[32]</sup>,先求出式(2)观测代价函数的梯度  $\nabla J_o(\mathbf{x}_0)$ ,然后求出式(3)中背景代价函数的梯度  $\nabla J_b(\mathbf{x}_0)$ ,最后加和后得到总的代价函数的梯度  $\nabla J(\mathbf{x}_0)$ 。

1.2.1 观测代价函数的梯度  $\nabla J_o(\mathbf{x}_0)$

同化系统中的 CO<sub>2</sub> 浓度状态量  $\mathbf{x}_i$  表示的是大气层中每个三维格点处的 CO<sub>2</sub> 点浓度。OCO-2 卫

星的 XCO<sub>2</sub> 数据,表示的是从地表到大气层顶端各大气分层中处的 CO<sub>2</sub> 浓度,经加权平均后得到的柱浓度<sup>[33]</sup>。两者的物理意义不同,因此在计算式(2)表示的观测代价函数的梯度  $\nabla J_o(\mathbf{x}_0)$  时,首先要构建一个观测算子  $\mathbf{H}$ ,用于将系统 CO<sub>2</sub> 浓度状态量  $\mathbf{x}_i$ ,转换成与卫星观测  $\mathbf{y}_i$  有相同物理意义的大气 CO<sub>2</sub> 柱浓度。观测算子  $\mathbf{H}$  的表达式<sup>[19,34]</sup>为:

$$XCO_2^m = XCO_2^a + \sum_j h_j a_j (CO_2^m - CO_2^a) \quad (4)$$

式中:  $XCO_2^a$ 、 $h_j$ 、 $a_j$  和  $CO_2^a$  分别是 OCO-2 卫星观测数据反演出 XCO<sub>2</sub> 数据时的 XCO<sub>2</sub> 的先验值、气压权重函数、柱平均核函数和先验 CO<sub>2</sub> 浓度廓线,这些参数都可以从 OCO-2 卫星的 XCO<sub>2</sub> 数据产品中直接获得<sup>[35]</sup>;  $CO_2^m$  为 GEOS-Chem 前向模式模拟输出的 CO<sub>2</sub> 浓度廓线经插值到 OCO-2 卫星先验 CO<sub>2</sub> 浓度廓线对应的气压层上的廓线数据;  $XCO_2^m$  为前向模式输出的 CO<sub>2</sub> 浓度廓线经观测算子  $\mathbf{H}$  转换后得到的 CO<sub>2</sub> 柱浓度值。

式(2)中的  $\mathbf{R}$  是 OCO-2 卫星的观测误差协方差矩阵。为了减少 OCO-2 观测数据之间的相关性,将  $\mathbf{R}$  简化为对角阵,我们参照 Crowell 等<sup>[36]</sup>的方法,先用式(5)~(6)将 OCO-2 卫星在时间间隔 1 s 内的 XCO<sub>2</sub> 数据和相应的不确定度  $\sigma$  进行平均,得到 1 s 均值,然后再用式(5)~(6)将时间间隔 10 s 内的 1 s 均值再进行平均,得到 10 s 均值。

$$\widetilde{XCO_2} = \sum_{i=1}^N XCO_{2i} \sigma_i^{-2} / \sum_{i=1}^N \sigma_i^{-2} \quad (5)$$

$$\tilde{\sigma} = 1 / \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sigma_i^{-2}} \quad (6)$$

式中:  $XCO_{2i}$  为时间段内 OCO-2 卫星的第  $i$  个柱浓度值;  $\sigma_i$  为与第  $i$  个柱浓度值对应的不确定度;  $N$  为时间段内 XCO<sub>2</sub> 数据的总数;  $\widetilde{XCO_2}$  和  $\tilde{\sigma}$  分别为柱浓度和不确定度的均值。

经式(5)~(6)处理之后,相邻 2 个 OCO-2 卫星 XCO<sub>2</sub> 的 10 s 均值数据之间,在空间上相距约为 80 km,可以认为它们之间没有相关性<sup>[36]</sup>。因此对于 XCO<sub>2</sub> 的 10 s 均值数据,观测误差协方差矩阵  $\mathbf{R}$  可以简化成对角阵,按照式(7)~(8)表示的残差计算方法<sup>[37]</sup>即可得到  $\mathbf{R}$ 。

$$b = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N (H(x_j) - y_j) \quad (7)$$

$$\epsilon_j = H(x_j) - y_j - b \quad (8)$$

式中:  $y_j$  为 OCO-2 的一个观测值;  $x_j$  为该观测值对应的模式 CO<sub>2</sub> 浓度;  $b$  为一段时间内 GEOS-Chem 前向模式的模拟值和 OCO-2 卫星的 XCO<sub>2</sub> 数据之

间差异的均值。通过将式(8)中  $\epsilon_j$  的标准差  $\sigma_j$  带入到  $(\frac{\sigma_j}{y_j})^2$  中即可得到  $\mathbf{R}$  中对角线上 OCO-2 卫星 XCO<sub>2</sub> 数据  $y_j$  所对应的值,其中  $\bar{y}$  为观测的均值。

使用伴随方法求观测代价函数的梯度  $\nabla J_o(\mathbf{x}_0)$  的过程,可以分解为先求出同化窗口中当前同化时刻  $t_n$  对应的伴随项  $\lambda(t_n)$ ,然后求出时刻  $t_n$  的前一时刻  $t_{n-1}$  对应的伴随项  $\lambda(t_{n-1})$ ,再用相同的方法向后递归,直到求出初始时刻  $t_0$  对应的伴随项  $\lambda(t_0)$ , $\lambda(t_0)$  即为所求的梯度  $\nabla J_o(\mathbf{x}_0)$ <sup>[38-39]</sup>。观测代价函数在当前同化时刻  $t_n$  的伴随项  $\lambda(t_n)$  的计算公式为

$$\lambda(t_n) = \mathbf{H}^T \mathbf{R}^{-1} (\mathbf{H}(\mathbf{x}_n) - \mathbf{y}_n) \quad (9)$$

在 GEOS-Chem 前向模式中,系统状态量  $\mathbf{x}_i$  从时刻  $t_i$  迁移到时刻  $t_{i+1}$  的过程,可以表示成式(10)<sup>[40-41]</sup>,因此当  $0 \leq i < n$  时,时刻  $t_i$  的伴随项  $\lambda(t_i)$  的计算过程可以表示为式(11)<sup>[39]</sup>。

$$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{M}_{\text{conv}} (\mathbf{M}_{\text{pbl}} (\mathbf{M}_{\text{adv}} (\mathbf{x}_i) + \mathbf{E} dt)) \quad (10)$$

$$\lambda(t_i) = \mathbf{H}^T \mathbf{R}^{-1} (\mathbf{H}(\mathbf{x}_i) - \mathbf{y}_i) + \mathbf{M}_{\text{adv}}^T \mathbf{M}_{\text{pbl}}^T \mathbf{M}_{\text{conv}}^T \lambda(t_{i+1}) \quad (11)$$

式中:  $\mathbf{M}_{\text{conv}}$ 、 $\mathbf{M}_{\text{pbl}}$ 、 $\mathbf{M}_{\text{adv}}$  分别为 GEOS-Chem 前向模式中的积云对流、行星边界层和平流模块;  $dt$  为时刻  $t_i$  和时刻  $t_{i+1}$  之间的时间间隔,即前向模式的积分时间步长;  $\mathbf{E} dt$  为在一个积分时间步长内,输入模式的先验 CO<sub>2</sub> 通量。 $\mathbf{M}_{\text{conv}}^T$ 、 $\mathbf{M}_{\text{pbl}}^T$ 、 $\mathbf{M}_{\text{adv}}^T$  分别为同化系统中,与前向模式中的  $\mathbf{M}_{\text{conv}}$ 、 $\mathbf{M}_{\text{pbl}}$ 、 $\mathbf{M}_{\text{adv}}$  模块相对应的伴随模块。

式(11)等号右边的第 2 项,表示通过前向模式的伴随过程,将时刻  $t_{i+1}$  的伴随项  $\lambda(t_{i+1})$  向后积分到时刻  $t_i$ 。利用式(11),一直到向后递归到同化周期初始时刻  $t_0$  时得到的  $\lambda(t_0)$ ,即为观测代价函数的梯度  $\nabla J_o(\mathbf{x}_0)$ <sup>[38]</sup>。

### 1.2.2 背景代价函数的梯度 $\nabla J_b(\mathbf{x}_0)$

式(3)中的  $\mathbf{B}$  是 CO<sub>2</sub> 背景浓度的误差协方差矩阵,因前向模式采用  $2^\circ \times 2.5^\circ$  较大尺度的网格空间,为简化背景误差协方差矩阵  $\mathbf{B}$  的计算,参照 Park 等<sup>[42]</sup>的方法,采用对角阵来近似  $\mathbf{B}$ ,并参照 Bannister 等<sup>[43]</sup>的方法,将 CO<sub>2</sub> 浓度的方差作为  $\mathbf{B}$  中对角线处的值,具体的方差值采用 Villalobos 等<sup>[20]</sup>的研究结果为 4 mL/m<sup>3</sup>。在得到  $\mathbf{B}$  之后,将背景代价函数  $J_b(\mathbf{x}_0)$  对初始状态  $\mathbf{x}_0$  求导,即可得到背景代价函数的梯度  $\nabla J_b(\mathbf{x}_0)$ ,具体公式为:

$$\nabla J_b(\mathbf{x}_0) = \mathbf{B}^{-1} (\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_b) \quad (12)$$

### 1.2.3 CO<sub>2</sub> 浓度状态更新

在根据式(1)求得代价函数  $J(\mathbf{x}_0)$  的值,和将式(11)~(12)的结果加和得到代价函数的梯度  $\nabla J(\mathbf{x}_0)$  之后,调用拟 Newton 优化算法 LBFGS-B<sup>[44-46]</sup>程序,对当前同化过程的 CO<sub>2</sub> 浓度状态的初

始值进行更新。LBFGS-B 算法对初始值进行更新的具体过程为<sup>[44]</sup>：

$$\mathbf{x}_{0,new} = \mathbf{x}_0 - \eta \mathbf{H}^{-1} \nabla J(\mathbf{x}_0) \quad (13)$$

式中： $\mathbf{x}_{0,new}$  为更新后的 CO<sub>2</sub> 浓度状态初始值； $\mathbf{H}$  为代价函数  $J(\mathbf{x}_0)$  对于 CO<sub>2</sub> 浓度状态初始值  $\mathbf{x}_0$  的 Hesse 矩阵； $\eta$  为 LBFGS-B 算法内部的计算步长。

## 2 实验与数据

### 2.1 实验设计

为检验同化系统中伴随计算过程的准确性,及同化 OCO-2 卫星数据对提高大气 CO<sub>2</sub> 浓度估计准确性的作用,分别设计了伴随验证、模拟和同化 3 个实验。

#### 2.1.1 伴随模块验证实验

通过对比有限差分法和伴随这 2 种不同方法计算出的梯度是否相同,对同化系统中的观测算子、积云对流、行星边界层,平流共 4 个伴随模块的计算正确性进行验证,每个伴随模块验证实验的计算方法见表 2。有限差分计算梯度的过程为,在初始状态量  $x$  上分别加上正、负扰动  $\Delta x$ ,然后用表 2 中对应的计算方法模拟出加扰动后的结果  $f(x + \Delta x)$  和  $f(x - \Delta x)$ ,最后根据  $\frac{f(x + \Delta x) - f(x - \Delta x)}{2\Delta x}$  计算出对应模块的梯度。

表 2 伴随验证实验的计算方法

Tab.2 Calculation method for the adjoint validation experiment

方法	计算内容	计算过程
有限差分法	观测算子	在同化过程中,关闭所有的伴随模块,打开观测算子中的前向过程
	积云对流	在前向模式中,关闭平流和行星边界层模块,打开积云对流模块
	行星边界层	在前向模式中,关闭平流和积云对流模块,打开行星边界层模块
	平流	在前向模式中,关闭积云对流和行星边界层模块,打开平流模块
伴随法	观测算子	在同化过程中,关闭其它伴随模块,打开观测算子中的伴随过程
	积云对流	在同化过程中,关闭其它伴随模块,打开积云对流伴随模块
	行星边界层	在同化过程中,关闭其它伴随模块,打开行星边界层伴随模块
	平流	在同化过程中,关闭其它伴随模块,打开平流伴随模块

### 2.1.2 模拟实验

模拟实验仅用来自 MERRA-2<sup>[47]</sup> 的气象数据驱动 GEOS-Chem 前向模式,模拟全球大气 CO<sub>2</sub> 浓度的变化情况,不对 OCO-2 卫星的 XCO<sub>2</sub> 数据进行同化。模拟实验的时间范围是 2017 年 10 月至 2018 年 12 月,水平分辨率为 2°×2.5°,垂直分辨率为 47 层,积分时间步长为 10 min。GEOS-Chem 模拟时的初始 CO<sub>2</sub> 浓度来自 CT2019<sup>[48]</sup> (Carbon-Tracker 2019)数据集,先验 CO<sub>2</sub> 通量中的人为通量部分来自 ODIAC 2019<sup>[49]</sup>,陆地生态通量部分来自 CASA<sup>[50]</sup> 模型的 GFED4.1s,野火通量和海洋通量来自 CT2019 中的野火和海洋后验通量。

### 2.1.3 同化实验

同化实验中 GEOS-Chem 模式的参数设置与模拟实验完全相同。在同化实验中,利用构建的同化系统,同化 OCO-2 卫星天底模式的 XCO<sub>2</sub> 数据,得到优化后的全球大气 CO<sub>2</sub> 浓度。同化周期为 2017 年 10 月至 2018 年 12 月,其中 2017 年 10 月至 2017 年 12 月为模式的启动期,同化窗口为 6 h,同化积分时间步长为 10 min。在将同化结果与地面观测数据对比做误差分析时,不包括启动期时间内的部分。

## 2.2 实验数据

### 2.2.1 用于同化的 OCO-2 卫星的 XCO<sub>2</sub> 数据

OCO-2 卫星是 NASA 在 2014 年发射的一颗大气 CO<sub>2</sub> 浓度观测卫星,运行在约 705 km 高度的太阳同步轨道上,观测的空间分辨率为 1.29 km×2.25 km<sup>[51-52]</sup>。在同化实验中使用的是 OCO-2 第 9 版的 XCO<sub>2</sub> Lite 数据产品,先从 Lite 数据产品中筛选出质量标记为“好”(xco<sub>2</sub>\_quality\_flag=0)的天底观测模式(operation\_mode=0)的 XCO<sub>2</sub> 数据<sup>[35]</sup>,然后再按照式(5)~(6)进行 10 s 均值处理,2018 年全年数据的处理结果见图 3。

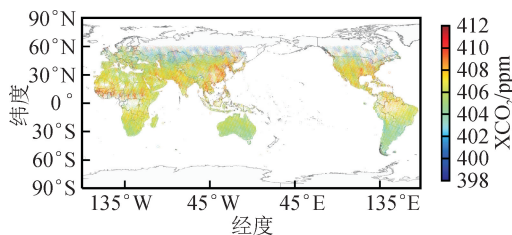


图 3 经质量筛选和 10 s 均值处理后的 2018 年 OCO-2 卫星天底模式的 XCO<sub>2</sub> 数据

Fig.3 XCO<sub>2</sub> data of OCO-2 nadir mode in 2018 after quality filter and 10 s averaging

注:此图基于国家自然资源部标准地图服务网站审图号为 GS(2016)1666 号的标准地图制作,底图无修改。

### 2.2.2 用于验证的地面观测数据

用于验证实验结果的大气 CO<sub>2</sub> 柱浓度观测数据来自 TCCON 的 GGG2014<sup>[53]</sup> 数据集。研究中使用了 27 个在 2018 年内有观测数据的 TCCON 站点的

数据。为了分析实验结果在内陆、海洋和海岸 3 种不同下垫面下的误差,将 27 个 TCCON 站点分为内陆、海洋和海岸 3 种类型。这 3 种类型的分类规则为:1)在大陆上,并且离最近海岸线距离大于 100 km 为内陆型;2)在岛上,并且离最近海岸线距离小于 100 km 为海洋型;3)在大陆上,并且离最近海岸线距离小于 100 km 为海岸型。用于验证实验结果的地面和航飞观测数据来自 obspack\_co2\_1\_CARBON-TRACKER\_CT2019\_2020-01-16<sup>[54]</sup>。研究中使用了来自 Obspack 的 77 个地面站点和 12 个航飞站点的观测数据。77 个地面站点中有 53 个气瓶采样(flask)方式的站点,16 个可编程气瓶采样(programmable flask packages, PFP)方式的站点和 8 个原位观测(in situ)方式的站点。12 个航飞站点都是 PFP 观测方式。

### 2.2.3 用于参照对比的 CT2019B 数据

CT2019B<sup>[48]</sup> 是 CarbonTracker 同化系统<sup>[11,55]</sup> 发布的 2019 版本全球大气 CO<sub>2</sub> 同化相关的数据集,研究中使用 CT2019B 数据集中全球 3°×2°垂直层数为 25 层的大气 CO<sub>2</sub> 浓度数据产品,与实验结果进行参照和对比。

### 2.3 实验结果评价指标

采用平均误差 ME(mean error)、平均绝对误差 MAE(mean absolute error)、均方根误差 RMSE(root mean square error)和相关系数 CORR(correlation)指标来评价模拟、同化实验结果和用于验证的地面观测数

据之间的偏差。这 4 个评价指标的表达式分别为:

$$ME = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_i - y_i) \quad (14)$$

$$MAE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (|x_i - y_i|) \quad (15)$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_i - y_i)^2} \quad (16)$$

$$CORR = \frac{\sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})(x_i - \bar{x})}{\sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2} \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2}} \quad (17)$$

式中:  $y_i$  是用于验证的第  $i$  个地面观测数据;  $x_i$  是与  $y_i$  对应的模拟或同化实验的输出结果;  $N$  是地面观测数据的总数;  $\bar{y}$  和  $\bar{x}$  分别为地面观测数据和实验输出结果的均值。

## 3 实验结果分析与讨论

### 3.1 伴随模块验证实验

图 4 是用有限差分法,验证同化系统中观测算子、积云对流、行星边界层和平流伴随模块计算正确性的实验结果。图 4(a)~(d)分别对应 4 个伴随模块的验证结果,横轴表示用伴随模块计算出的梯度,竖轴表示用对应的有限差分法计算出的梯度。图 4 中,除观测算子伴随模块验证结果拟合直线的斜率为 0.97,平流伴随模块验证结果拟合直线的  $R^2$  为 0.98 之外,其它伴随模块验证结果拟合直线的斜率和  $R^2$  都为 1.00,证明了 4 个伴随模块计算过程的正确性。

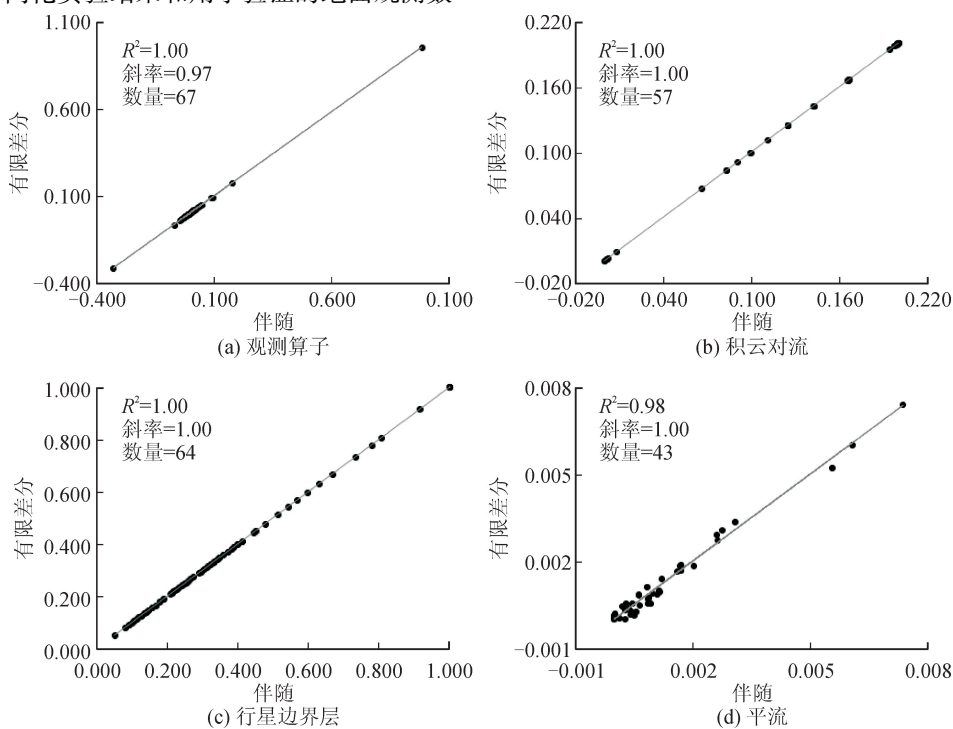


图 4 同化系统伴随模块验证实验结果

Fig. 4 Validation of adjoint modules

### 3.2 模拟和同化实验

#### 3.2.1 与 TCCON 的对比

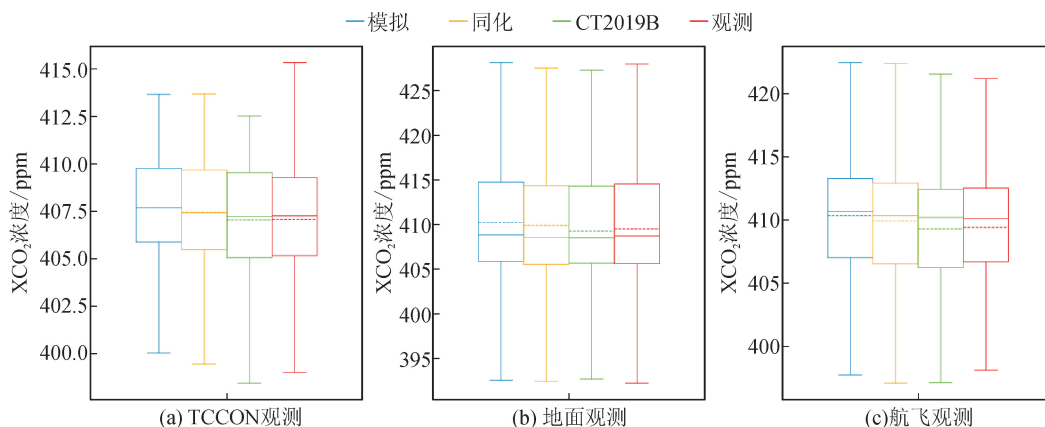
采用 Wunch 等<sup>[52]</sup>的方法,将实验结果、CT2019B 与全球 27 个 TCCON 站点的观测数据进行对比。先以 TCCON 站点为中心,对位于南纬 25°以北的 TCCON 站点,划出一个经度×纬度为 10°×5°的区域,对位于南纬 25°以南的 TCCON 站点,划出一个经度×纬度为 120°×20°的区域,对落在该区域中的

模拟、同化实验的结果和 CT2019B 的数据分别进行平均,然后再将模拟、同化实验的平均结果和 CT2019B 的均值数据转换成柱浓度数据,与 TCCON 观测数据进行对比。表 3 中列出了模拟、同化实验的结果与 TCCON 观测数据进行对比分析的结果,同时作为参照,也列出了 CT2019B 的对比结果,图 5(a)和图 6(a)分别展示了全球对比结果和三种 TCCON 类型对比结果的箱形图。

表 3 模拟、同化实验、CT2019B 与 TCCON 观测之间误差分析结果

Tab. 3 Evaluation results between TCCON observations and the corresponding results from simulation experiment, assimilation experiment and CT2019B

类型	站点名	ME/(mL·m <sup>-3</sup> )			MAE/(mL·m <sup>-3</sup> )			RMSE/(mL·m <sup>-3</sup> )			CORR		
		模拟	同化	CT	模拟	同化	CT	模拟	同化	CT	模拟	同化	CT
海洋站点	Ascension	0.01	0.52	0.82	0.67	0.82	1.01	1.03	1.18	1.36	0.61	0.58	0.58
	Burgos	0.48	0.47	0.58	0.83	0.70	0.74	1.08	0.91	0.94	0.82	0.88	0.89
	Izana	0.61	0.42	0.27	0.68	0.56	0.53	0.87	0.70	0.66	0.93	0.94	0.94
	Saga	0.54	0.38	0.06	0.85	0.86	0.67	1.12	1.11	0.90	0.89	0.87	0.90
	Reunion	-1.14	-0.59	-0.69	1.32	0.99	1.03	1.58	1.23	1.28	0.04	0.00	-0.03
	Rikubetsu	1.65	1.19	0.73	1.67	1.29	0.88	1.99	1.62	1.14	0.93	0.93	0.96
	Ny Alesund	1.75	1.33	0.44	1.80	1.46	0.80	1.97	1.60	0.95	0.98	0.98	0.98
	Tsukuba	0.47	0.18	-0.13	0.84	0.82	0.68	1.11	1.08	0.90	0.89	0.88	0.92
海岸站点	Anmyeondo	1.22	1.10	0.83	1.22	1.11	0.92	1.47	1.36	1.19	-0.51	0.15	-0.42
	Caltech	-1.05	-1.30	-1.43	1.19	1.35	1.47	1.51	1.65	1.74	0.79	0.82	0.83
	Darwin	-0.16	-0.34	-0.39	0.46	0.52	0.60	0.67	0.70	0.79	0.68	0.65	0.55
	Pasadena	-1.24	-1.10	-1.00	1.33	1.21	1.10	1.65	1.52	1.40	0.73	0.75	0.79
	Wollongong	-0.39	-0.44	-0.59	0.59	0.62	0.73	0.80	0.82	0.98	0.76	0.81	0.77
内陆站点	Bialystok	1.14	0.80	0.05	1.20	0.96	0.69	1.47	1.27	0.93	0.97	0.96	0.97
	Bremen	1.52	0.93	0.62	1.55	1.14	0.86	1.85	1.43	1.14	0.91	0.90	0.93
	Dryden	0.75	0.39	0.07	0.83	0.54	0.47	0.95	0.66	0.60	0.91	0.92	0.91
	East Trout Lake	1.76	1.37	0.56	1.80	1.47	0.89	2.01	1.68	1.11	0.95	0.96	0.97
	Eureka	0.09	-0.27	-1.36	0.73	0.70	1.36	0.87	0.94	1.60	-0.10	-0.13	-0.27
	Garmisch	1.30	0.94	0.47	1.33	1.04	0.81	1.51	1.25	1.00	0.95	0.94	0.95
	Karlsruhe	1.00	0.61	0.07	1.19	1.03	0.87	1.47	1.26	1.11	0.90	0.90	0.92
	Lauder	0.29	0.48	0.25	0.69	0.63	0.54	0.87	0.83	0.72	0.75	0.75	0.74
	Lamont	0.37	0.09	-0.29	0.89	0.72	0.68	1.20	1.02	0.97	0.88	0.91	0.92
	Orleans	1.51	1.05	0.45	1.53	1.11	0.69	1.71	1.34	0.94	0.94	0.94	0.95
	Paris	1.38	0.98	0.34	1.51	1.17	0.77	1.78	1.47	1.08	0.88	0.88	0.90
	Park Falls	1.08	0.75	0.02	1.18	0.95	0.70	1.45	1.18	0.89	0.96	0.96	0.97
	Sodankyla	1.29	0.93	0.25	1.32	1.04	0.69	1.52	1.25	0.86	0.98	0.97	0.98
	Zugspitze	1.00	0.60	0.28	1.63	1.50	1.52	2.12	1.95	1.93	0.63	0.65	0.66
海洋站点平均	0.67	0.51	0.26	1.03	0.91	0.74	1.33	1.17	0.96	0.89	0.91	0.93	
海岸站点平均	-0.74	-0.86	-0.94	0.92	0.98	1.05	1.27	1.31	1.36	0.89	0.90	0.89	
内陆站点平均	1.06	0.74	0.20	1.22	0.97	0.73	1.50	1.25	0.98	0.93	0.94	0.95	
全部站点平均	0.62	0.37	-0.02	1.12	0.96	0.80	1.42	1.25	1.06	0.89	0.90	0.93	



箱型内的实线和虚线分别表示中位数和均值,箱型的上下两条横边分别表示上四分位数(Q3)和下四分位数(Q1),箱型上下两条横边之间的距离表示四分位间距(IQR),箱型外的上下两条短横线分别表示  $Q3+1.5 \times IQR$  和  $Q1-1.5 \times IQR$  值的位置。

图 5 时间范围为 2018 年全年的模拟、同化实验结果和 CT2019B 与观测对比结果的箱形图

Fig. 5 Boxplots of the different types of observations and the corresponding results from simulation experiment, assimilation experiment and CT2019B in 2018

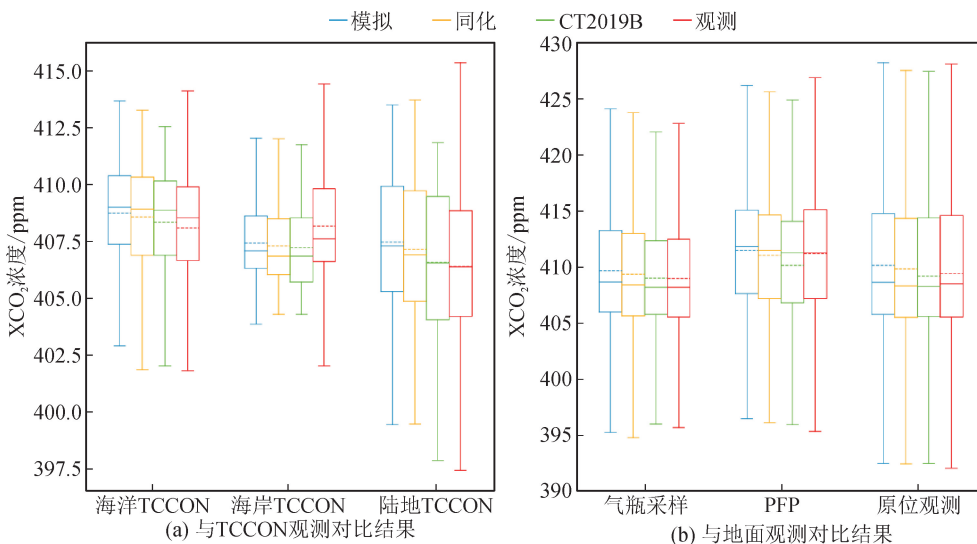


图 6 模拟、同化实验结果和 CT2019B 与 TCCON 和地面观测对比结果的箱形图

Fig. 6 Boxplots of the TCCON and surface observations and the corresponding results from simulation experiment, assimilation experiment and CT2019B in 2018

从表 3 和图 5(a)可以看出,同化实验结果和模拟实验相比,与 TCCON 观测的 ME 和 RMSE,分别从  $0.62 \text{ mL/m}^3$  和  $1.42 \text{ mL/m}^3$ ,下降到  $0.37 \text{ mL/m}^3$  和  $1.25 \text{ mL/m}^3$ ,改善了  $40.32\%$  和  $11.97\%$ ,这与 Wang 等<sup>[56]</sup>同化 OCO-2 卫星数据得到的与 TCCON 观测  $0.80 \text{ mL/m}^3$  的 ME 大致相符,也与 O'Dell 等<sup>[48]</sup>得出的 OCO-2 卫星 XCO<sub>2</sub> 数据与 TCCON 之间的 ME 和 RMSE 分别为  $0.30 \text{ mL/m}^3$  和  $1.08 \text{ mL/m}^3$  的结论基本相符,说明同化结果与 TCCON 之间的偏差,基本达到了 OCO-2 卫星 XCO<sub>2</sub> 数据的程度。

从表 3 和图 6(a)可以看出,对于海洋和内陆这 2 种类型的 TCCON 站点,同化实验结果比模拟实

验结果都有明显的改善,ME 分别从  $0.67 \text{ mL/m}^3$  和  $1.06 \text{ mL/m}^3$  降到了  $0.51 \text{ mL/m}^3$  和  $0.74 \text{ mL/m}^3$ ,改善了  $23.88\%$  和  $30.19\%$ ,RMSE 分别从  $1.33 \text{ mL/m}^3$  和  $1.50 \text{ mL/m}^3$  降到了  $1.17 \text{ mL/m}^3$  和  $1.25 \text{ mL/m}^3$ ,改善了  $12.03\%$  和  $16.67\%$ 。但是对于海岸类型的 TCCON 站点,模拟实验的 ME 和 RMSE 分别为  $-0.74 \text{ mL/m}^3$  和  $1.27 \text{ mL/m}^3$ ,同化实验的 ME 和 RMSE 分别为  $-0.86 \text{ mL/m}^3$  和  $1.31 \text{ mL/m}^3$ ,同化实验的结果并没有改善。作为参照的 CT2019B 与同化结果的情况相同,与海岸 TCCON 站点之间的 ME 和 RMSE 分别为  $-0.94 \text{ mL/m}^3$  和  $1.36 \text{ mL/m}^3$ ,明显大于与海洋和内陆 TCCON 站点之间的 ME 和 RMSE。



这种现象的原因在于,虽然 OCO-2 卫星天底模式的 XCO<sub>2</sub> 数据,并不包括对海洋上空的观测,但因为海洋上空的大气状态较为一致,所以同化系统利用 OCO-2 卫星的数据,在对陆地上同化结果进行约束的同时,通过前向模式仍能较好地约束海洋上空的结果<sup>[57]</sup>,然而对于海陆交界的海岸区域,在受复杂多变海陆风影响的同时,OCO-2 卫星天底模式的 XCO<sub>2</sub> 数据在海岸区域又非常稀疏,因此难以通过同化对海岸区域的结果进行有效的约束。对于这 3 种类型的 TCCON 站点,模拟实验结果和同化实验结果与 TCCON 观测都有一个高的相关性,然而在 Reunion、Anmyeondo 和 Eureka 站点相关性是较差的,与之对应的是 CT2019B 和这 3 个 TCCON 站点

的观测也有一个较差的相关性。

### 3.2.2 与地面站和航飞观测的对比

在与 Obspack<sup>[54]</sup> 中的 77 个地面站和 12 个航飞观测数据进行对比时,在时间上选取与观测数据的观测时间最接近的实验结果和 CT2019B 数据,在空间上将观测数据插值到最近邻的 GEOS-Chem 模式和 CT2019B 的格点上,然后将该格点处的实验结果和 CT2019B 的数据,线性插值到观测数据对应的气压分层后,再进行对比分析。实验结果、CT2019B 数据与地面站观测数据对比分析的结果见表 4,对应的箱形图见图 5(b)和图 6(b),与航飞观测数据对比分析的结果见表 5,对应的垂直廓线的对比结果见图 5(c)和图 7。

表 4 模拟、同化实验、CT2019B 与地面观测之间的误差分析结果

Tab. 4 Evaluation results between surface observations and the corresponding results from simulation experiment, assimilation experiment and CT2019B

观测方式	ME/(mL · m <sup>-3</sup> )			MAE/(mL · m <sup>-3</sup> )			RMSE/(mL · m <sup>-3</sup> )			CORR		
	模拟	同化	CT2019B	模拟	同化	CT2019B	模拟	同化	CT2019B	模拟	同化	CT2019B
气瓶采样	0.70	0.40	0.06	1.75	1.60	1.43	2.63	2.52	2.82	0.89	0.89	0.85
PFP 采样	0.27	-0.17	-1.06	3.56	3.45	3.29	6.03	6.00	5.75	0.72	0.72	0.76
原位观测	0.74	0.44	-0.18	2.74	2.60	1.92	4.56	4.44	3.65	0.79	0.80	0.87
全部平均	0.71	0.41	-0.21	2.74	2.60	1.97	4.58	4.47	3.74	0.79	0.80	0.86

表 5 模拟、同化实验、CT2019B 与航飞观测之间的误差分析结果

Tab. 5 Evaluation results between aircraft observations and the corresponding results from simulation experiment, assimilation experiment and CT2019B

航飞站点	ME/(mL · m <sup>-3</sup> )			MAE/(mL · m <sup>-3</sup> )			RMSE/(mL · m <sup>-3</sup> )			CORR		
	模拟	同化	CT2019B	模拟	同化	CT2019B	模拟	同化	CT2019B	模拟	同化	CT2019B
Brig	-0.05	-0.36	-0.58	1.63	1.51	1.45	3.16	3.27	3.00	0.64	0.62	0.69
OCM	0.75	0.44	0.08	1.94	1.90	1.30	2.70	2.61	1.73	0.84	0.85	0.93
EP	0.68	0.25	-0.44	1.47	1.31	1.15	2.15	2.01	1.82	0.89	0.89	0.91
ETL	1.82	1.25	0.19	2.19	1.88	1.18	2.99	2.62	1.62	0.92	0.92	0.96
Homer	1.03	0.47	-0.52	1.64	1.53	1.45	2.55	2.39	2.32	0.89	0.89	0.91
PaF	1.48	1.04	-0.86	2.13	1.92	1.88	3.10	2.93	3.24	0.93	0.93	0.91
OP	0.92	0.32	-0.29	1.36	1.27	1.16	2.14	1.78	1.89	0.93	0.94	0.94
PoF	1.55	1.09	-0.56	1.95	1.69	1.12	2.62	2.37	1.52	0.93	0.93	0.97
Raro	-0.41	-0.30	-0.27	0.55	0.52	0.52	0.70	0.67	0.66	0.82	0.79	0.80
OC	0.84	0.43	0.09	1.17	1.00	0.85	1.85	1.62	1.29	0.90	0.91	0.94
SGP	1.14	0.74	-0.29	1.81	1.76	1.37	2.53	2.41	1.94	0.85	0.85	0.91
WB	0.58	0.27	-0.67	1.40	1.34	1.16	2.12	2.05	2.01	0.90	0.90	0.92
全部平均	0.93	0.51	-0.38	1.64	1.49	1.25	2.50	2.34	2.10	0.89	0.89	0.92

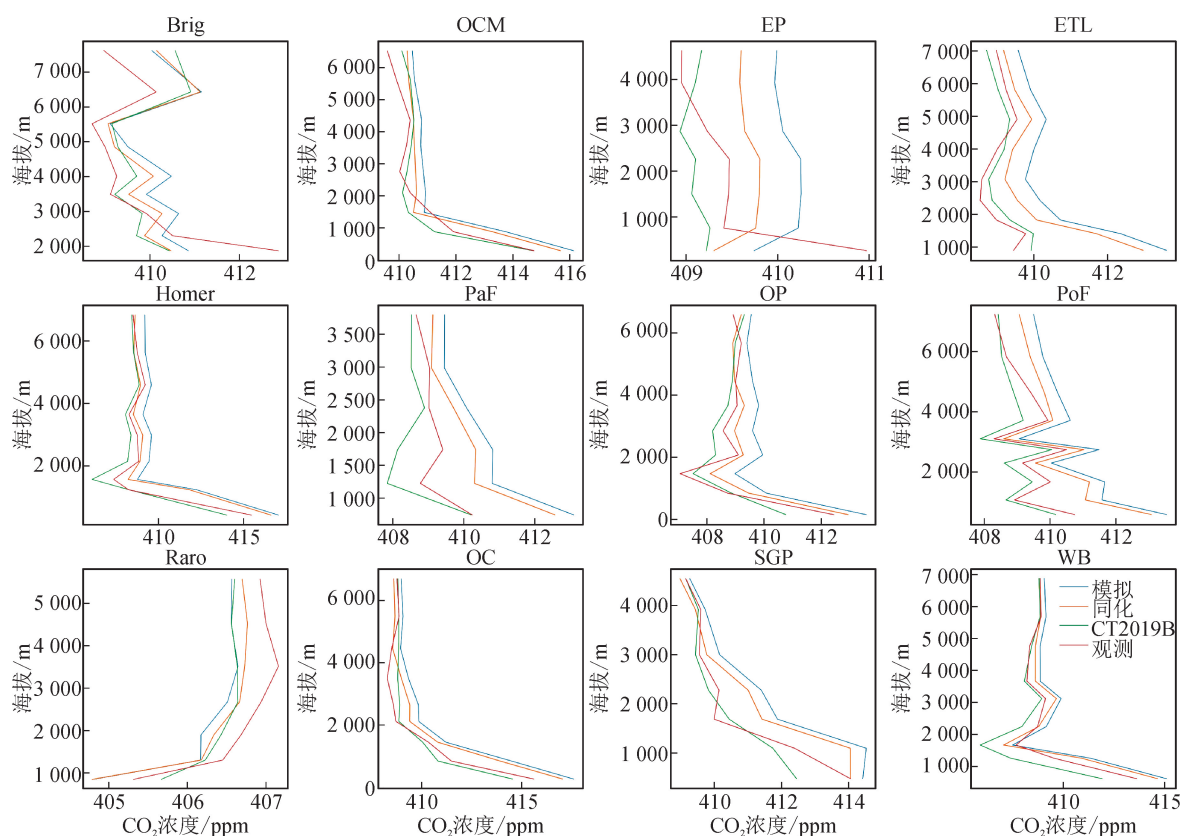


图7 模拟、同化实验、CT2019B与12个航飞观测站点之间垂直廓线的对比

Fig. 7 Comparison of observations from 12 aircrafts with the CO<sub>2</sub> vertical profile of simulation experiment, assimilation experiment and CT2019B

同化实验结果和模拟实验相比,总体上有较明显的改善,其中与地面站和航飞观测之间的平均误差ME,分别从0.71 mL/m<sup>3</sup>和0.93 mL/m<sup>3</sup>,下降到0.41 mL/m<sup>3</sup>和0.51 mL/m<sup>3</sup>,改善了42.25%和45.15%。

从表4和图6(b)可以看出,对于气瓶采样和原位观测的地面观测数据,同化实验结果与模拟实验相比都有改善,ME分别从0.70 mL/m<sup>3</sup>和0.74 mL/m<sup>3</sup>下降到0.40 mL/m<sup>3</sup>和0.44 mL/m<sup>3</sup>,改善幅度为42.86%和40.54%,RMSE分别从2.63 mL/m<sup>3</sup>和4.56 mL/m<sup>3</sup>下降到2.52 mL/m<sup>3</sup>和4.44 mL/m<sup>3</sup>,改善幅度为4.18%和2.63%。对于PFP采样的观测数据,与模型实验相比,同化的效果不明显,与此相对应的是,CT2019B的数据与PFP采样的观测数据之间的ME、MAE和RMSE,也明显高于与气瓶采样和原位观测之间的对应值。

从表5可以看出,除Brig站点之外,同化实验结果与其它11个航飞观测站点观测数据之间的ME,都要比模拟实验有明显的改善,整体上与航飞数据对比的ME从0.93 mL/m<sup>3</sup>下降到0.51 mL/m<sup>3</sup>,改善幅度为45.16%,RMSE从2.50 mL/m<sup>3</sup>下降到

2.34 mL/m<sup>3</sup>,改善幅度为6.40%。从图7可以看出,与模拟实验相比,同化实验的垂直廓线更接近航飞观测的数据,模拟实验结果、同化实验结果和CT2019B在2 km以下的垂直廓线与航飞观测的偏差,明显比2 km以上的偏差要大。

### 3.2.3 与CT2019B的对比

当用CT2019B与模拟、同化实验结果进行对比时,先将CT2019B的廓线浓度转换成柱浓度,然后插值到GEOS-Chem设置的格点上,插值结果见图8(a),具有明显的季节变化。2018年4个季节和全年平均的模拟、同化实验结果的XCO<sub>2</sub>与CT2019B XCO<sub>2</sub>的差异见图8(b)和(c)。模拟、同化实验结果的XCO<sub>2</sub>浓度显著高于CT2019B的XCO<sub>2</sub>浓度,经过同化后,同化实验结果的XCO<sub>2</sub>在北半球的中高纬度地区与CT2019B的XCO<sub>2</sub>分布是更接近的。模拟、同化实验结果与CT2019B的统计指标见表6,其中与模拟实验相比,同化的结果与CT2019B之间的ME从0.77 mL/m<sup>3</sup>下降到0.68 mL/m<sup>3</sup>,改善幅度为11.69%,而RMSE从0.93 mL/m<sup>3</sup>下降到0.75 mL/m<sup>3</sup>,改善幅度为19.35%。

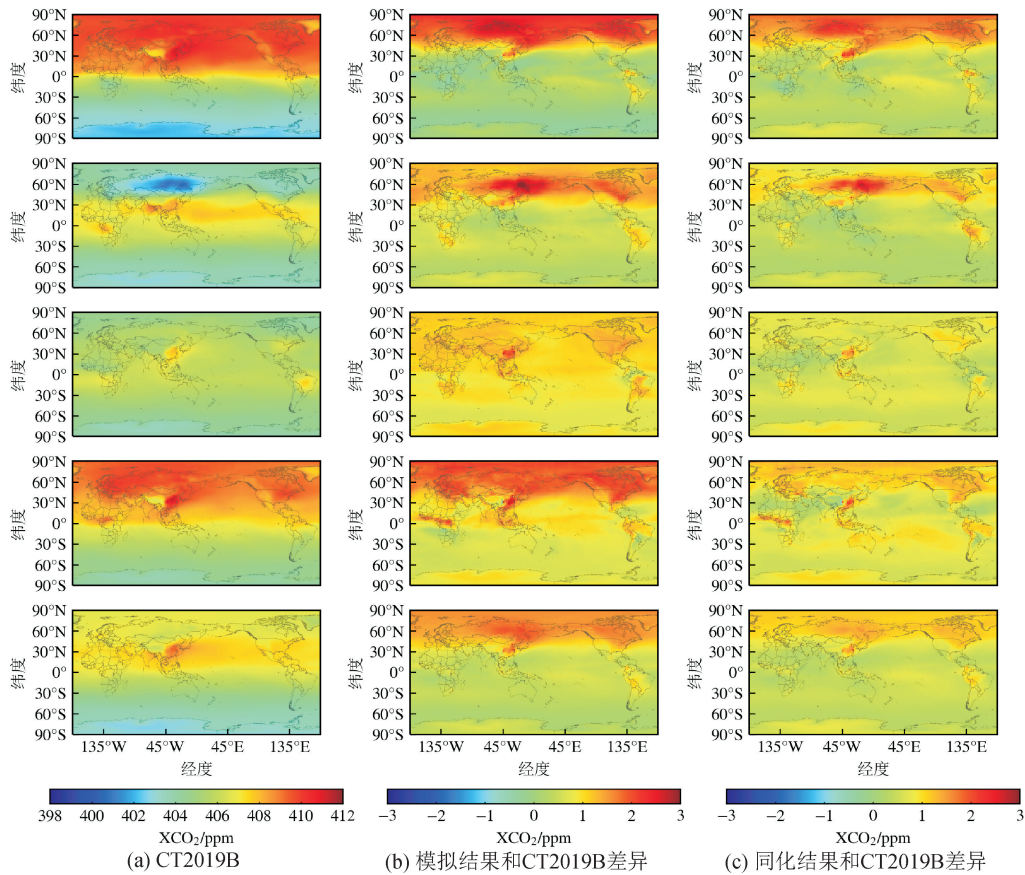


图 8 2018 年 4 个季节和年平均的 CT2019B XCO<sub>2</sub> 以及模拟结果、同化结果和 CT2019B XCO<sub>2</sub> 差异  
 Fig. 8 Seasonal mean and annual mean of CT2019B XCO<sub>2</sub> in 2018, and the difference between the corresponding result from simulation experiment and assimilation experiment with CT2019B XCO<sub>2</sub>

注:此图基于国家自然资源部标准地图服务网站审图号为 GS(2016)1666 号的标准地图制作,底图无修改。

表 6 模拟、同化实验与 CT2019B 之间的误差分析结果  
 Tab. 6 Evaluation results between CT2019B and the corresponding results from simulation experiment and assimilation experiment

类别	ME/(mL · m <sup>-3</sup> )		MAE/(mL · m <sup>-3</sup> )		RMSE/(mL · m <sup>-3</sup> )		CORR	
	模拟	同化	模拟	同化	模拟	同化	模拟	同化
春季均值	0.62	0.75	0.70	0.75	1.08	0.94	0.99	0.99
夏季均值	0.82	0.61	0.82	0.61	0.96	0.72	0.95	0.97
秋季均值	1.01	0.65	1.01	0.65	1.02	0.67	0.98	0.98
冬季均值	1.13	0.84	1.13	0.84	1.24	0.88	0.99	0.99
年均值	0.77	0.68	0.77	0.68	0.93	0.75	0.98	0.99

### 3.2.4 实验小结

与模拟实验结果相比,同化了 OCO-2 卫星 XCO<sub>2</sub> 数据的同化实验结果与 3 种观测数据之间的偏差,都有明显的改善,其中与 TCCON、地面站和航飞观测之间的平均误差 ME,分别改善了 40.32%、42.25% 和 45.15%。将其与同化实验结果相比,CT2019B 与 3 种观测数据之间的偏差更小,这是因为 CT2019B 本身就同化了 Obspack 里的数

据,而同化实验与这些观测数据相互独立,同化结果中不包含这些观测数据的信息。

## 4 结论

本文基于 GEOS-Chem V12.6.3 和 OCO-2 卫星 XCO<sub>2</sub> 数据,采用四维变分的方法构建了全球大气 CO<sub>2</sub> 浓度同化系统。并利用有限差分法和独立的 TCCON、地面、航飞观测对伴随模块和浓度同化系

统进行验证,结果见下。

1) 对于观测算子、积云对流、行星边界层和平流 4 个伴随模块,有限差分法计算出来的梯度与伴随法计算出来的梯度一致,证明了伴随模块构造的正确性。

2) 在 ME 指标上,同化实验结果与 TCCON、地面和航飞观测数据之间的 ME 分别为 0.37 mL/m<sup>3</sup>、0.41 mL/m<sup>3</sup> 和 0.51 mL/m<sup>3</sup>,与对比的模拟实验结果相比,分别改善了 40.32%、42.25% 和 45.15%,在 RMSE 指标上,相比与模拟实验结果分别改善了 11.97%、2.40% 和 6.40%,表明同化 OCO-2 卫星数据能明显提高对大气 CO<sub>2</sub> 浓度估计的准确性。

#### 参考文献:

- [1] World Meteorological Organization. WMO greenhouse gas bulletin (GHG Bulletin) - No. 16: the state of greenhouse gases in the atmosphere based on global observations through 2019[EB/OL]. (2020-11-21)[2021-03-01]. [https://library.wmo.int/index.php?lvl=notice\\_display&id=21795](https://library.wmo.int/index.php?lvl=notice_display&id=21795).
- [2] Core Writing Team, PACHARUI R K, MEYER L. Climate Change 2014 Synthesis Report[R/OL]. [2021-03-01]. [https://www.ipcc.ch/site/assets/uploads/2018/02/SYR\\_AR5\\_FINAL\\_full.pdf](https://www.ipcc.ch/site/assets/uploads/2018/02/SYR_AR5_FINAL_full.pdf).
- [3] BOVENSMANN H, BURROWS J P, BUCHWITZ M, et al. SCIAMACHY: mission objectives and measurement modes[J]. *Journal of Atmospheric Sciences*, 1999, 56(2): 127-150.
- [4] NAKAJIMA M, KUZE A, KAWAKAMI S, et al. Monitoring of the greenhouse gases from space by GOSAT[C]//International Archives of the Photogrammetry, Remote Sensing and Spatial Information Science. 2010.
- [5] GLUMB R, DAVIS G, LIETZKE C. The TANSO-FTS-2 instrument for the GOSAT-2 greenhouse gas monitoring mission[C]//2014 IEEE Geoscience and Remote Sensing Symposium. IEEE, 2014.
- [6] ELDERING A, O'DELL C W, WENNBERG P O, et al. The Orbiting Carbon Observatory-2: first 18 months of science data products [J]. *Atmospheric Measurement Techniques*, 2017, 10(2): 549-563.
- [7] ELDERING A, TAYLOR T E, O'DELL C W, et al. The OCO-3 mission: measurement objectives and expected performance based on 1 year of simulated data [J]. *Atmospheric Measurement Techniques*, 2019, 12(4): 2341-2370.
- [8] LIU Yi, WANG Jing, YAO Lu, et al. The TanSat mission: preliminary global observations [J]. *Science Bulletin*, 2018, 63(18): 1200-1207.
- [9] PASCAL V, BUIL C, LOESEL J, et al. An improved microcarb dispersive instrumental concept for the measurement of greenhouse gases concentration in the atmosphere[C]//International Conference on Space Optics — ICSO 2014. 2017.
- [10] POLONSKY I N, O'BRIEN D M, KUMER J B, et al. Performance of a geostationary mission, geo-CARB, to measure CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub> and CO column-averaged concentrations [J]. *Atmospheric Measurement Techniques*, 2013, 6(5): 9397-9465.
- [11] PETERS W, JACOBSON A R, SWEENEY C, et al. An atmospheric perspective on North American carbon dioxide exchange: CarbonTracker[J]. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 2007, 104(48): 18925-18930.
- [12] BAKER D F, DONEY S C, SCHIMMEL D S. Variational data assimilation for atmospheric CO<sub>2</sub> [J]. *Tellus B: Chemical and Physical Meteorology*, 2006, 58(5): 359-365.
- [13] CHEVALLIER F, FISHER M, PEYLIN P, et al. Inferring CO<sub>2</sub> sources and sinks from satellite observations: method and application to TOVS data[J]. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 2005, 110(D24).
- [14] BASU S, GUERLET S, BUTZ A, et al. Global CO<sub>2</sub> fluxes estimated from GOSAT retrievals of total column CO<sub>2</sub> [J]. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2013, 13(17): 8695-8717.
- [15] HENZE D K, HAKAMI A, SEINFELD J H. Development of the adjoint of GEOS-Chem[J]. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2007, 7(9): 2413-2433.
- [16] LIU Junjie, BOWMAN K W, LEE M, et al. Carbon monitoring system flux estimation and attribution: impact of ACOS-GOSAT XCO<sub>2</sub> sampling on the inference of terrestrial biospheric sources and sinks[J]. *Tellus B: Chemical and Physical Meteorology*, 2014, 66(1): 22486.
- [17] DENG F, JONES D B A, HENZE D K, et al. Inferring regional sources and sinks of atmospheric CO<sub>2</sub> from GOSAT XCO<sub>2</sub> data[J]. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2014, 14(7): 3703-3727.
- [18] JIANG Fei, WANG Hengmao, CHEN Jing, et al. Regional CO<sub>2</sub> fluxes from 2010 to 2015 inferred from GOSAT XCO<sub>2</sub> retrievals using a new version of the Global Carbon Assimilation System[J]. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2021, 21(3): 1963-1985.
- [19] ZHANG Qinwei, LI Mingqi, WEI Chong, et al. Assimilation of OCO-2 retrievals with WRF-Chem/DART: a case study for the Midwestern United States [J]. *Atmospheric Environment*, 2021, 246: 118106.

- [20] VILLALOBOS Y, RAYNER P, THOMAS S, et al. The potential of Orbiting Carbon Observatory-2 data to reduce the uncertainties in CO<sub>2</sub> surface fluxes over Australia using a variational assimilation scheme[J]. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2020, 20(14): 8473-8500.
- [21] PENG Z, ZHANG M, KOU X, et al. A regional carbon data assimilation system and its preliminary evaluation in East Asia[J]. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2015, 15(2): 1087-1104.
- [22] LIU Junjie, FUNG I, KALNAY E, et al. Simultaneous assimilation of AIRS Xco2 and meteorological observations in a carbon climate model with an ensemble Kalman filter[J]. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 2012, 117(D5).
- [23] WANG J S, KAWA S R, COLLATZ G J, et al. A global synthesis inversion analysis of recent variability in CO<sub>2</sub> fluxes using GOSAT and in situ observations[J]. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2018, 18(15): 11097-11124.
- [24] CHEVALLIER F, FENG Liang, BÖSCH H, et al. On the impact of transport model errors for the estimation of CO<sub>2</sub> surface fluxes from GOSAT observations[J]. *Geophysical Research Letters*, 2010, 37(21).
- [25] SCHUH A E, JACOBSON A R, BASU S, et al. Quantifying the impact of atmospheric transport uncertainty on CO<sub>2</sub> surface flux estimates[J]. *Global Biogeochem Cycles*, 2019, 33(4): 484-500.
- [26] BASU S, BAKER D F, CHEVALLIER F, et al. The impact of transport model differences on CO<sub>2</sub> surface flux estimates from OCO-2 retrievals of column average CO<sub>2</sub> [J]. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2018, 18(10): 7189-7215.
- [27] CROWELL S, BAKER D, SCHUH A, et al. The 2015-2016 carbon cycle as seen from OCO-2 and the global in situ network[J]. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2019, 19(15): 9797-9831.
- [28] BEY I, JACOB D J, YANTOSCA R M, et al. Global modeling of tropospheric chemistry with assimilated meteorology: model description and evaluation [J]. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 2001, 106(D19): 23073-23095.
- [29] KELLER C A, LONG M S, YANTOSCA R M, et al. HEMCO v1.0: a versatile, ESMF-compliant component for calculating emissions in atmospheric models [J]. *Geoscientific Model Development*, 2014, 7(4): 1409-1417.
- [30] BYRD R H, LU Peihuang, NOCEDAL J, et al. A limited memory algorithm for bound constrained optimization[J]. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 1995, 16:(5) 1190-1208.
- [31] RABIER F, LIU Zhiqian. Variational data assimilation theory and overview[R/OL]. [2021-03-02]. <https://ecmwf.com/sites/default/files/elibrary/2003/11805-variational-data-assimilation-theory-and-overview.pdf>.
- [32] GIERING R, KAMINSKI T. Recipes for adjoint code construction[J]. *ACM Transactions on Mathematical Software*, 1998, 24(4): 437-474.
- [33] O'DELL C W, CONNOR B, BÖSCH H, et al. The ACOS CO<sub>2</sub> retrieval algorithm-Part 1: description and validation against synthetic observations[J]. *Atmospheric Measurement Techniques*, 2012, 5(1): 99-121.
- [34] CONNOR B J, BOESCH H, TOON G, et al. Orbiting Carbon Observatory: inverse method and prospective error analysis [J]. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 2008, 113(D5).
- [35] OSTERMAN G, ELDERING A, AVIS C, et al. Orbiting Carbon Observatory-2 (OCO-2) data product user's guide, operational L1 and L2 data version 8 and lite file version 9[R]. (2018-10-10)[2021-03-02]. [https://docsserver.gesdisc.eosdis.nasa.gov/public/project/OCO/OCO2\\_DUG.V9.pdf](https://docsserver.gesdisc.eosdis.nasa.gov/public/project/OCO/OCO2_DUG.V9.pdf).
- [36] CROWELL S, BAKER D, SCHUH A, et al. The 2015-2016 carbon cycle as seen from OCO-2 and the global in situ network[J]. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2019, 19(15): 9797-9831.
- [37] HEALD C L, JACOB D J, JONES D B A, et al. Comparative inverse analysis of satellite (MOPITT) and aircraft (TRACE-P) observations to estimate Asian sources of carbon monoxide[J]. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 2004, 109(D23).
- [38] WANG K Y, LARY D J, SHALLCROSS D E, et al. A review on the use of the adjoint method in four-dimensional atmospheric-chemistry data assimilation[J]. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 2001, 127(576): 2181-2204.
- [39] YUMIMOTO K, UNO I. Adjoint inverse modeling of CO emissions over Eastern Asia using four-dimensional variational data assimilation[J]. *Atmospheric Environment*, 2006, 40(35): 6836-6845.
- [40] LONG M S, YANTOSCA R, NIELSEN J E, et al. Development of a grid-independent GEOS-Chem chemical transport model (v9-02) as an atmospheric chemistry module for Earth system models[J]. *Geoscientific Model Development Discussions*, 2015, 8(3): 595-602.
- [41] LIN Haipeng, FENG Xu, FU T M, et al. WRF-GC

- (v1.0): online coupling of WRF (v3.9.1.1) and GEOS-Chem (v12.2.1) for regional atmospheric chemistry modeling-Part 1: description of the one-way model[J]. *Geoscientific Model Development*, 2020, 13(7): 3241-3265.
- [42] PARK S Y, KIM D H, LEE S H, et al. Variational data assimilation for the optimized ozone initial state and the short-time forecasting[J]. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2016, 16(5): 3631-3649.
- [43] BANNISTER R N. A review of forecast error covariance statistics in atmospheric variational data assimilation. I: characteristics and measurements of forecast error covariances[J]. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 2008, 134(637): 1951-1970.
- [44] BYRD R H, NOCEDAL J, SCHNABEL R B. Representations of quasi-Newton matrices and their use in limited memory methods[J]. *Mathematical Programming*, 1994, 63(1/2/3): 129-156.
- [45] ZHU Ciyu, BYRD R H, LU Peihuang, et al. Algorithm 778: L-BFGS-B: Fortran subroutines for large-scale bound-constrained optimization[J]. *ACM Transactions on Mathematical Software*, 1997, 23(4): 550-560.
- [46] MORALES J L, NOCEDAL J. Remark on “algorithm 778: L-BFGS-B: Fortran subroutines for large-scale bound constrained optimization”[J]. *ACM Transactions on Mathematical Software*, 2011, 38(1): 1-7.
- [47] GELARO R, MCCARTY W, SUÁREZ M J, et al. The Modern-Era Retrospective Analysis for Research and Applications, version 2 (MERRA-2)[J]. *Journal of Climate*, 2017, 30(13): 5419-5454.
- [48] JACOBSON A R, SCHULDT K N, MILLER J B, et al. CarbonTracker CT2019[DB]. NOAA Earth System Research Laboratory, Global Monitoring Division, 2020. [2021-03-03].
- [49] ODA T, MAKSYUTOV S. A very high-resolution (1 km×1 km) global fossil fuel CO<sub>2</sub> emission inventory derived using a point source database and satellite observations of nighttime lights[J]. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2011, 11(2): 543-556.
- [50] POTTER C S, RANDERSON J T, FIELD C B, et al. Terrestrial ecosystem production: a process model based on global satellite and surface data[J]. *Global Biogeochemical Cycles*, 1993, 7(4): 811-841.
- [51] O’DELL C W, ELDERING A, WENNERBERG P O, et al. Improved retrievals of carbon dioxide from Orbiting Carbon Observatory-2 with the version 8 ACOS algorithm [J]. *Atmospheric Measurement Techniques*, 2018, 11(12): 6539-6576.
- [52] WUNCH D, WENNERBERG P O, OSTERMAN G, et al. Comparisons of the Orbiting Carbon Observatory-2 (OCO-2) XCO<sub>2</sub> measurements with TCCON[J]. *Atmospheric Measurement Techniques*, 2017, 10(6): 2209-2238.
- [53] TCCON. 2014 TCCON Data Release (Version GGG2014) [DB]. CaltechDATA, 2017. (2017-09-13) [2021-03-04].
- [54] CARBONTRACKER. Simulated observations of atmospheric carbon dioxide from CarbonTracker release CT2019 (obspack\_co2\_1\_CARBONTRACKER\_CT2019\_2020-01-16) [DB]. [2021-03-01].
- [55] PETERS W, MILLER J B, WHITAKER J, et al. An ensemble data assimilation system to estimate CO<sub>2</sub> surface fluxes from atmospheric trace gas observations [J]. *Journal of Geophysical Research*, 2005, 110(D24).
- [56] WANG Hengmao, JIANG Fei, WANG Jun, et al. Terrestrial ecosystem carbon flux estimated using GO-SAT and OCO-2 XCO<sub>2</sub> retrievals [J]. *Atmospheric Chemistry Physics*, 2019, 19(18): 12067-12082.
- [57] DICKINSON R E. How coupling of the atmosphere to ocean and land helps determine the timescales of inter-annual variability of climate[J]. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 2000, 105(D15): 20115-20119.

(责任编辑 王绪迪)