

# 第七届中国研究生人工智能创新大赛

[基于深度学习的二氧化碳全球浓度重建]

项目文档

[V1.2]

[2025.07.31]

[灵犀智碳小队]

[技术创新类]

# 目录

<b>1 项目概况</b>	<b>1</b>
1.1 背景 and 基础	1
1.1.1 背景 and 意义	1
1.1.2 国内外研究基础	2
1.1.3 团队构成	3
1.2 场景 and 价值	4
1.2.1 应用场景 and 潜在价值	4
1.2.2 现有研究方法概述 and 不足	6
1.2.3 性能对比分析	10
1.3 所需支持	13
1.3.1 二氧化碳数据集	13
1.3.2 硬件支持	14
<b>2 项目规划</b>	<b>16</b>
2.1 整体目标	16
2.1.1 目标分析	16
2.1.2 模型效果可视化-二氧化碳重建结果	16
2.2 技术创新点	20
2.2.1 现有方法关键挑战	20
2.2.2 本项目工作和创新点	20
<b>3 实施方案</b>	<b>22</b>
3.1 技术可行性分析	22
3.1.1 二氧化碳数据集	22
3.1.2 算力与硬件支持可行性	25
3.2 技术细节	26
3.2.1 模型总体结构	26
3.2.2 时空模型分解	27
3.2.3 逐层时空连接模块	29
3.2.4 基于风场的时空周期性嵌入	32
3.3 实验结果与分析	34
3.3.1 实验设计	34
3.3.2 全球二氧化碳重建结果	36
3.3.3 长短期二氧化碳重建结果	37
3.3.4 消融实验	40
3.3.5 超参数配置	43
3.4 计划和分工	45
3.4.1 项目计划	45
3.4.2 团队分工	46
<b>4 参考资料</b>	<b>47</b>

记录更改历史

序号	更改原因	版本	作者	更改日期	备 注
1	完善项目背景和基础知识	V0.1	孙伟	2025 年 7 月 6 日	
2	完善场景、使用价值和实验结果	V0.2	孙伟	2025 年 7 月 7 日	
3	编写所需支持	V0.3	孙伟	2025 年 7 月 8 日	
4	编写整体目标	V0.4	袁俊炫	2025 年 7 月 14 日	
5	编写实际运行效果部分	V0.5	岳旻迪	2025 年 7 月 14 日	
6	编写算法运行效果部分	V0.6	傅庆桢	2025 年 7 月 15 日	
7	编写技术创新点、技术路线和可行性分析	V1.0	孙伟	2025 年 7 月 21 日	
8	完善参考文献	V1.1	孙伟	2025 年 7 月 23 日	
9	完善文档	V1.2	孙伟	2025 年 7 月 25 日	
10	完善成员信息	V1.3	孙伟	2025 年 7 月 30 日	

# 1 项目概况

## 1.1 背景和基础

### 1.1.1 背景和意义

二氧化碳（Carbon Dioxide, CO<sub>2</sub>）是对人类生活影响最大的温室气体之一，其浓度逐年增加是全球气候变化的重要原因，它在生态、社会和经济等领域都产生了全球范围的影响，包括极端天气事件的增加、海平面上升、生物多样性减少和粮食安全问题<sup>[1]-[3]</sup>，如何抑制全球变暖是地球未来的重要挑战之一。当前，地球每年的碳排放量已经超过其自然吸收能力，大气CO<sub>2</sub>浓度持续增加，并且将带动全球温度升高<sup>[4]-[5]</sup>。在过去的数十年中，随着全球经济发展以及人口数量增加，人类活动的碳排放逐年增加，加剧了全球气候变化。

为应对全球CO<sub>2</sub>浓度逐年增加带来的环境危害，各国政府和国际组织制定了一系列温室气体减排政策和目标，目的是将CO<sub>2</sub>浓度控制在特定的水平，例如中国提出的“碳达峰”及“碳中和”目标<sup>[6]</sup>、联合国气候变化纲要公约制定和实施的《巴黎协定》<sup>[7]</sup>等。温室气体减排相关政策的制定强调了对充分了解全球CO<sub>2</sub>时空分布的需求，为了有效地控制和减少CO<sub>2</sub>排放，监测CO<sub>2</sub>浓度的时空分布特征和趋势是首要问题。然而，大气CO<sub>2</sub>的浓度一方面受到大气扩散影响<sup>[8]</sup>，另一方面受到人类的工业活动影响<sup>[9]</sup>，时空分布不均匀，难以对其进行监测。CO<sub>2</sub>重建旨在结合有限的CO<sub>2</sub>观测数据和充足的相关气候变量（如温度、风速场和压强等）重建全球CO<sub>2</sub>浓度的时空分布，从而辅助碳循环研究、气候分析以及碳排放气候政策的制定与实施。

传统的CO<sub>2</sub>重建方法一般基于反演模型<sup>[10][15][19]</sup>，利用CO<sub>2</sub>观测数据和数值模型模拟产生的气候变量数据，对CO<sub>2</sub>的时空分布进行重建。这类模型在重建过程中，需要使用碳通量和碳排放等先验数据，然而这些数据有着获取成本高、覆盖范围小和数据质量低等问题。除此之外，随着数据规模的提升，数值模拟过程的计算量将急剧增大，反演模型的计算效率问题将愈发明显，导致其无法应对大规模数据重建的情况。

近年来，人工智能技术快速发展，常被应用于解决常见的自然科学问题，推动人工智能驱动的科学（AI for Science, AI4S）发展，例如气候预测、蛋白质分子结构预测等<sup>[11]-[14]</sup>。受此启发，本项目聚焦于提出一种基于深度学习的CO<sub>2</sub>重建算法，提高CO<sub>2</sub>浓度重建的准确性和效率，克服反演模型方法在处理大规模、复杂时空数据时的局限性。本项目的研究意义主要体现在以下三点：

- （1）利用有限的观测数据结合气候变量，实现高质量的全球CO<sub>2</sub>浓度重建，填补CO<sub>2</sub>

在海洋等区域上观测数据的空缺，为研究碳循环过程提供数据支撑；

(2) 深度学习方法具备高计算效率，可以减少对数值模拟的需求，从而显著降低CO<sub>2</sub>重建的计算成本，可以应对大规模、高分辨率数据分析情况，为CO<sub>2</sub>实时监测提供精准支持；

(3) 通过深度学习方法重建CO<sub>2</sub>时空分布，为各国政府和国际组织制定和调整温室气体减排政策，评估碳达峰和碳中和目标的实现进度，以及深入理解人类活动对全球碳循环和气候变化的影响提供科学保障。

### 1.1.2 国内外研究基础

在全球二氧化碳浓度重建领域，经过多年探索，学术界已形成以传统反演模型为基础、深度学习方法为补充的技术体系，为后续研究提供了理论与实践支撑。

传统反演模型是二氧化碳浓度重建的经典方法，核心是通过数值模拟融合观测数据与大气传输规律。贝叶斯反演框架是早期代表性成果，Rödenbeck 等（2003）结合 1982-2001 年 NOAA 地基观测数据与 TM3 传输模型，构建误差协方差矩阵反演全球二氧化碳通量，揭示了陆地生态系统对碳循环年际变化的主导作用，但依赖高精度先验数据，在发展中国家及海洋区域存在误差。卡尔曼滤波同化技术进一步优化了动态调整能力，Peters 等（2007）开发的 CarbonTracker 系统，将全球划分为生态区域并通过集合卡尔曼滤波优化参数，提升了北美地区重建精度，不过计算复杂度随分辨率提升呈指数增长，难以扩展至全球高分辨率场景。高分辨率变分反演系统如 NTFVAR（Shamil Maksyutov 等，2020），基于 NIES-TM 和 FLEXPART 模型，在 0.1° 分辨率下实现了二氧化碳通量优化，可捕捉短期高排放事件，但对计算资源需求极高，且在气象数据稀缺的海洋、极地区域精度受限。整体而言，传统方法存在先验数据依赖强、计算效率低、物理参数经验性偏差等局限。

近年来，深度学习方法为解决传统模型局限提供了新思路。在时空建模方面，双流架构（如 CAS<sub>t</sub> 模型）通过“空间专家”与“时间专家”分支分别处理空间分布与时序变化，结合交叉注意力机制实现信息交互，在视频识别中表现优异，但其未融入二氧化碳传输的物理规律，适用性有限；时空表征融合方法（如高阶卷积 - LSTM）通过张量分解降低复杂度，高效学习时空关联，可借鉴于建模二氧化碳区域传输滞后效应，但在数据稀疏区域效果欠佳。周期性嵌入技术方面，Verma 等（2024）提出的时空联合嵌入，通过三角函数编码时间戳与经纬度，为天气预测提供周期信号，提升了气候周期性捕捉能力，然而未考虑风场等动态因素对二氧化碳周期的影响，直接应用存在偏差。针对数据稀疏问题，图像修复技术（如 MAT 模型）通过 Transformer 聚焦有效观测区域，保持全局一致性，可用于填补海洋数据空缺，但缺乏对时空动态的适配；隐式神经表示（如 Senseiver 框架）通过 MLP 将离散观测映射

为连续函数，在大气场重建中表现高效，却难以满足全球二氧化碳时空四维重建的实时性需求。深度学习方法的主要不足在于物理可解释性弱、数据依赖性强、长时序建模能力不足。

数据集建设为模型研发提供了基础支撑。再分析数据集如 CarbonTracker(2000-2020 年, 3 小时分辨率,  $2^{\circ} \times 3^{\circ}$  空间分辨率), 整合多源观测与模拟, 包含二氧化碳浓度及气压、风速等辅助变量, 适合短期动态建模, 但在观测稀疏区依赖模拟存在偏差; CMIP6 数据集(1850-2014 年, 月均数据)时间跨度长, 可用于长期趋势训练, 却因分辨率粗难以反映短期变化。观测数据集如 GLOBALVIEWplus v10.0(1957-2024 年, 96 个站点)精度高, 是模型验证的“黄金标准”, 但空间分布不均, 海洋站点不足 10%。数据集存在的“偏差传递”、辅助变量不一致、海洋数据稀缺等问题, 也为模型训练带来挑战。

因此, 现有研究仍面临核心挑战: 时空关联性建模需融合物理规律与数据驱动方法, 周期性表征需适应动态气候影响, 稀疏数据利用需探索自监督学习策略。这些挑战为新一代模型研发指明了方向。总结来说现有二氧化碳浓度重建方法可归纳为两类: 传统反演模型基于物理方程融合观测与模拟, 能保证物理一致性, 但依赖先验数据且计算低效; 深度学习方法通过数据驱动学习时空特征, 效率更高, 却缺乏物理约束, 在稀疏区域表现有限。数据集方面, 再分析数据覆盖完整但存在模拟偏差, 观测数据精度高但分布不均。

考虑到上述因素, 我们的研究结合两类方法优势, 在深度学习框架中嵌入物理规律(如对流-扩散方程), 设计动态周期建模机制, 并利用自监督学习提升稀疏数据利用能力, 以实现高精度、高效率的全球二氧化碳浓度重建, 为海洋监测提供有效的解决方案。

### 1.1.3 团队构成

本团队由 1 位指导老师和 4 名专业队员组成。

组长(队员 1), 计算机研究生在读, 本科获得软件工程学位, 研究方向包括深度学习、AI4S 和无线网络安全, 曾获“互联网+”、挑战杯和计算机设计大赛奖项等 30 余项, 已发表多篇会议, 目前有多篇 CCF-A/B 论文在投。

队员 2, 计算机研究生在读, 本科获得计算机科学与技术学位, 研究方向包括深度学习和大模型 Agent 对话, 曾获“高教杯”数学建模全国二等奖项 20 余项。

队员 3, 计算机研究生在读, 本科获得智能科学与技术学位, 研究方向为人工智能与数字人, 曾获中国数学奥林匹克金牌等 10 余项。

队员 4, 计算机研究生在读, 本科获得智能科学与技术学位, 研究方向为大模型高效微调和部署, 曾获中国软件杯省奖等 10 余项。

## 1.2 场景和价值

### 1.2.1 应用场景和潜在价值

二氧化碳是对人类生活影响最大的温室气体之一，其浓度逐年增加是全球气候变化的重要原因，它在生态、社会和经济等领域都产生了全球范围的影响，包括极端天气事件的增加、海平面上升、生物多样性减少和粮食安全问题<sup>[1]-[3]</sup>，如何抑制全球变暖是地球未来的重要挑战之一。当前，地球每年的碳排放量已经超过其自然吸收能力，大气CO<sub>2</sub>浓度持续增加，并且将带动全球温度升高<sup>[4]-[5]</sup>。在过去的数十年中，随着全球经济发展以及人口数量增加，人类活动的碳排放逐年增加，加剧了全球气候变化。

#### (1) 应用场景

本项目基于深度学习的二氧化碳（二氧化碳）全球浓度重建技术（CO<sub>2</sub>-Net 模型），在海洋动态监测与保护领域的核心应用场景如下。

##### (a) 海洋区域二氧化碳浓度精细化重建

海洋作为全球碳循环的关键环节，承担了约 30% 的人为碳排放吸收，但目前海洋二氧化碳观测数据严重稀疏——近 90% 的海域缺乏持续监测站点，仅依赖少数浮标、船舶或卫星遥感数据，难以反映洋流运动、海水层化等导致的二氧化碳浓度时空差异。CO<sub>2</sub>-Net 模型可利用有限的海洋观测数据（如表层海水二氧化碳分压、盐度、温度等），结合风场、洋流等气候变量，重建高分辨率的海洋二氧化碳浓度分布。例如，在赤道东太平洋上升流区域，模型能捕捉因深海富碳海水上涌导致的二氧化碳浓度骤升；在北大西洋环流区，可还原洋流运输带来的二氧化碳浓度季节性波动，填补传统观测在远洋、深海区域的空白。

##### (b) 海洋酸化风险评估与预警

海水吸收过量二氧化碳会导致酸化（pH 值下降），威胁珊瑚礁、贝类等钙化生物生存，进而破坏海洋食物链。传统酸化评估依赖离散的 pH 值观测，难以与二氧化碳浓度变化直接关联。基于 CO<sub>2</sub>-Net 重建的海洋二氧化碳浓度数据，可结合海水化学模型反推 pH 值变化趋势，精准定位酸化高风险区域。例如，在澳大利亚大堡礁周边海域，模型可通过重建的二氧化碳浓度时空分布，预测未来 5 年珊瑚礁栖息地的酸化速率，为保护区划定、人工珊瑚修复等措施提供数据支撑。

##### (c) 全球碳循环中海洋碳汇能力量化

海洋碳汇是实现“碳达峰、碳中和”目标的重要路径，但传统方法对海洋碳吸收量的估算误差较大（约±10%），主要因二氧化碳浓度数据不完整。CO<sub>2</sub>-Net 模型可整合海洋

表层与大气边界层的二氧化碳浓度重建结果，计算海-气二氧化碳通量（即海洋吸收/释放的碳量）。例如，在南大洋等强碳汇区域，模型能更精准地量化不同季节的碳吸收强度，揭示洋流、温度变化对碳汇能力的影响，为全球碳预算核算提供关键参数。

#### （d）极端气候事件与海洋二氧化碳交互监测

厄尔尼诺、台风等极端事件会显著影响海洋二氧化碳的释放与吸收。例如，厄尔尼诺期间赤道太平洋升温会减少海洋碳吸收，导致大气二氧化碳浓度异常上升，但传统观测难以捕捉这种动态关联。CO<sub>2</sub>-Net 模型可通过高时间分辨率的重建结果，追踪极端事件期间海洋二氧化碳浓度的快速变化。例如，在厄尔尼诺事件中，模型还原赤道海域二氧化碳浓度从“吸收”转为“释放”的过程，帮助理解气候事件与碳循环的相互作用。

## （2）潜在价值

基于深度学习的二氧化碳浓度重建技术在海洋监测与保护中的潜在价值主要体现在以下方面。

#### （a）提升海洋二氧化碳监测数据的完整性与时效性

传统反演模型依赖碳通量等先验数据，计算效率低（处理全球数据需数天），且难以覆盖数据稀疏的海洋区域。CO<sub>2</sub>-Net 模型通过时空分解、风场嵌入等设计，可在普通服务器上实现小时级全球二氧化碳浓度重建，尤其能填补海洋观测空白区的数据缺口。例如，对南印度洋等缺乏站点的海域，模型重建数据的误差（RMSE）可控制在 1.09  $\mu\text{mol/mol}$  以内（基于 CarbonTracker 数据集验证），为海洋碳循环研究提供可靠的基础数据。

#### （b）为海洋生态保护提供精准决策依据

准确的海洋二氧化碳浓度数据可直接支撑生态保护策略制定。例如，在红树林、盐沼等“蓝碳”生态系统中，模型重建的二氧化碳浓度分布能量化生态系统的固碳效率，帮助评估退耕还湿、红树林修复等工程的碳汇效益；在珊瑚礁保护区，结合二氧化碳浓度与酸化风险的关联分析，可划定“生态敏感区”，限制近海工业排放或旅游活动，降低人为干扰对海洋生物的影响。

#### （c）支撑全球气候变化政策的科学制定

海洋碳汇能力的精准量化是各国制定减排目标的重要依据。CO<sub>2</sub>-Net 模型提供的高分辨率海洋二氧化碳数据，可提升《巴黎协定》等国际气候公约下的碳核算精度。例如，我国在评估“双碳”目标进展时，可利用模型数据更准确地计算近海碳汇量，为调整减排配额、优化能源结构提供参考；在国际谈判中，也能基于客观的海洋碳汇数据，增强气候治理话语权。推动深度学习在地球科学领域的应用创新 CO<sub>2</sub>-Net 模型针对海洋二氧化碳数据的时空关联



性强、周期性显著等特点，设计了时空模型分解、风场重建损失函数等组件，其技术思路可复用于其他海洋环境要素（如甲烷浓度、海水温度）的重建，为构建“多要素协同监测”的海洋 AI 系统提供借鉴。同时，模型在处理稀疏数据、融合多源气候变量等方面的经验，也可为大气、陆地等领域的碳循环研究提供技术参考。

综上，基于深度学习的二氧化碳浓度重建技术通过解决海洋二氧化碳监测的数据稀疏性、计算低效性等问题，既能支撑基础科学研究，又能直接服务于海洋生态保护与气候政策制定，为推动海洋可持续发展提供了高效的技术工具。

### 1.2.2 现有研究方法概述和不足

#### （1）基于反演模型的二氧化碳重建

传统的重建方法主要通过反演模型，结合 $\text{CO}_2$ 观测数据和由传输模型（Transport Models, TM）模拟产生的气候变量数据，反推 $\text{CO}_2$ 的分布，传统反演模型包括：贝叶斯反演<sup>[15]</sup>，卡尔曼滤波<sup>[16]</sup>，变分法<sup>[17][18]</sup>以及 NISMOM- $\text{CO}_2$ 反演系统<sup>[19]</sup>等。

Rödenbeck et al.<sup>[15]</sup>提出使用贝叶斯反演方法，结合 1982-2001 年 NOAA/CMDL 采样网络<sup>[20]</sup>收集到的 $\text{CO}_2$ 观测数据（地基观测，分布如图 1-1）和大气传输模型 TM3<sup>[21]</sup>，反演 1982-2001 年之间 $\text{CO}_2$ 通量的全球分布。贝叶斯反演的核心是，通过调整参数（即 $\text{CO}_2$ 通量），使得观测数据和先验知识（传输模型模拟值）之间的误差（即目标函数）最小。该方法主要分为三步：（1）构建观测数据和先验知识之间的误差协方差矩阵；（2）通过优化算法求解 $\text{CO}_2$ 通量参数，最小化观测值和先验之间的误差；（3）计算考虑观测数据之后，最佳的后验 $\text{CO}_2$ 通量估计。通过对反演得到的 $\text{CO}_2$ 通量估计进行分析，研究发现 1982-2001 年中，陆地通量是全球碳通量的年际变化的主要驱动因素，并且受到厄尔尼诺事件、火山喷发等气候因素驱动。

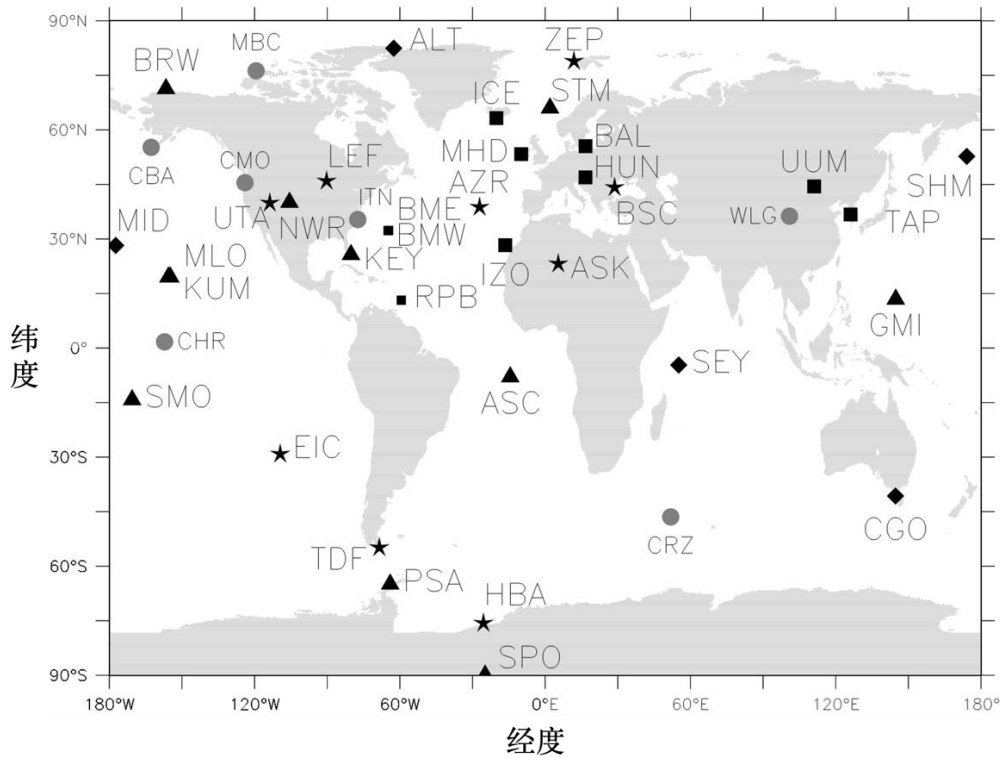


图 1-1 Rödenbeck et al.<sup>[15]</sup>研究中采用的站点位置分布图。站点主要分布于北美或西欧等陆地区域，海洋上有少数站点分布。

Peters et al.<sup>[16]</sup>提出一种基于集合卡尔曼滤波的大气数据同化系统，整合地基、空基观测的CO<sub>2</sub>数据，结合大气传输模型 TM5<sup>[22]</sup>重建 2000-2005 年北美地区的CO<sub>2</sub>通量。其方法的核心是，将全球陆地生态系统划分为若干生态区域（如森林、农田等），并为每个区域定义一个系数（Scaling Factor），然后通过集合卡尔曼滤波方法对系数进行调整，最小化观测值和先验之间的误差。主要步骤是：（1）定义CO<sub>2</sub>通量模型，即变量定义和参数（即区域系数）初始化；（2）计算出观测数据和传输模型模拟值之间的误差；（3）通过集合卡尔曼滤波方法对参数进行优化，最小化误差；（4）得到最优的参数组合，重建CO<sub>2</sub>通量。该研究提出的集合卡尔曼滤波方法提高了CO<sub>2</sub>通量的估算精度，并成功应用于北美地区的碳循环监测。

Shamil Maksyutov et al.<sup>[18]</sup>提出一种名为 NTFVAR 的全球高分辨率反演系统，它基于欧拉-拉格朗日传输模型 NIES-TM 和分散模型 FLEXPART，采用了变分优化算法来重建地表CO<sub>2</sub>通量。该研究使用了 GLOBLAVIEWplus v2.1<sup>[23]</sup>提供的全球观测网络的CO<sub>2</sub>观测数据（图 1-2），通过构建高分辨率的先验通量场以及不确定性结构，通过迭代优化估计通量的修正项。研究表明，NTFVAR 在0.1°空间分辨率上优化了CO<sub>2</sub>通量重建结果，提高了对于观测值的拟合程度，能够重建出季节性和短期浓度变化，包括与人为排放相关的高CO<sub>2</sub>浓度事件。

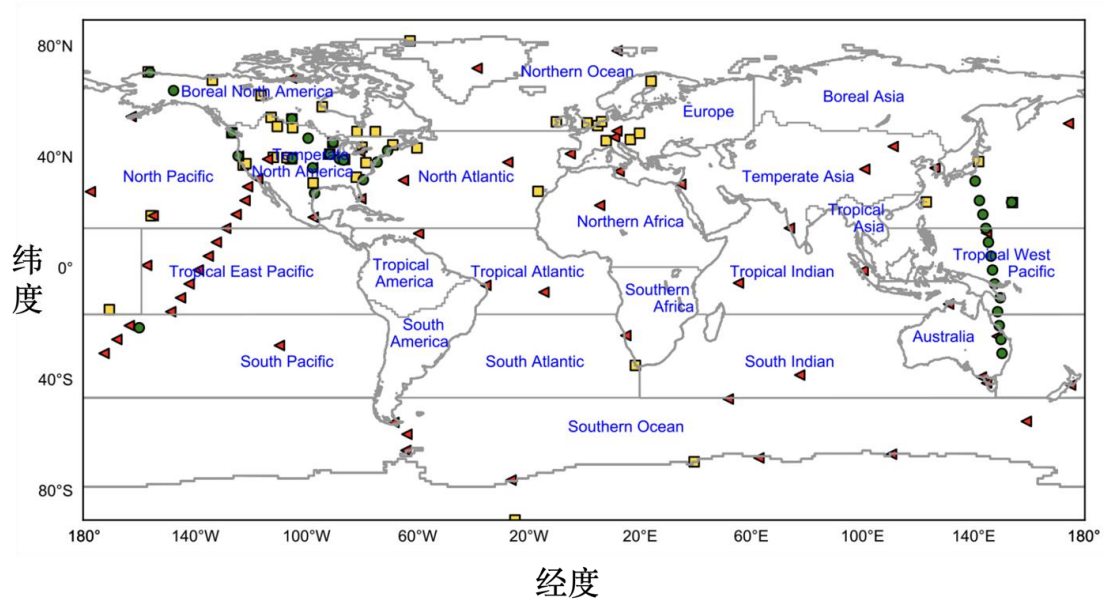


图 1-2 Shamil Maksyutov et al.<sup>[18]</sup>研究中采用的观测数据位置分布，区域划分依照 Transcom 标准<sup>[24]</sup>。三角形表示地表烧瓶观测点；正方形表示地基连续观测站点；圆形表示飞行器观测点。

该研究结合三种观测数据来源，扩大了CO<sub>2</sub>观测数据覆盖范围。

基于反演模型的重建方法虽然能够取得不错的效果，但仍然存在以下局限性：（1）十分依赖碳通量和碳排放等先验数据，而这些数据有着获取成本高、覆盖范围有限和数据质量参差不齐的问题；（2）随着数据规模增大，反演模型的计算效率问题将愈发明显。

## （2）基于深度学习的二氧化碳重建

在CO<sub>2</sub>重建领域，有三个主要的挑战：（1）CO<sub>2</sub>数据本身具有很强的时空变化特征，这来源于大气中的对流扩散作用；（2）气象模式数据具有明显的时空周期性，这来源于时间上的季节性变换（春夏交替）和昼夜变换（日夜更替），以及空间上信风、季风和环流等周期性气候现象；（3）CO<sub>2</sub>观测数据稀疏，这来源于稀疏分布的地基观测站点。本项目汇总了在深度学习领域解决类似问题的方法，并对这些方法与CO<sub>2</sub>重建的联系进行了讨论。

### （a）时空模型

时空模型可以有效捕捉数据在时间和空间上的联系，常用于动态系统分析任务中，例如视频动作识别、行人再识别等。时空模型主要可分为双流架构以及时空表征整合。

**双流架构**将模型分为时间和空间两部分，分别处理时间和空间信息，最后再将两部分的特征融合，实现时空分析。代表模型 CAST<sup>[25]</sup>，将模型分成时间专家和空间专家两部分，并提出瓶颈时空交叉注意力模块，实现两个专家之间的信息交换，增强时空分析能力；Spatiotemporal Side Tuning<sup>[26]</sup>，引入时空侧网络（Spatio-temporal Side Networks），分别聚合

时间信息和空间信息，最后通过相加融合时空特征，增强模型视频理解能力。

**时空表征融合**通过时空表征学习，将时间和空间特征融合在一起训练模型。时空表征学习方法如 Su J. et al.<sup>[27]</sup>提出一种高阶的卷积-长短期记忆网络（Long Short-Term Memory, LSTM）网络对时空信息进行高效学习，并通过 Tensor-Train 分解降低模型复杂度；Yao Y. et al.<sup>[28]</sup>提出一种名为视频播放率感知的自监督训练方法，通过对快进速率进行分类，使模型学习复杂的时空信息。

尽管这些方法在计算机视觉任务（如视频动作识别、视频检索）中都能达到不错的效果，但要将这些方法应用于CO<sub>2</sub>重建，还缺乏了物理上的可解释性以及与相关的科学规律的联系。

### （b）周期性嵌入

在现有的基于深度学习的天气预测模型中，模型难以直接建模气象模式的时空周期性，一般通过在输入中显式引入额外的周期性时空嵌入作为辅助信号，给模型提供周期性信息，从而提高模型处理气候数据的能力。

Verma Y. et al.<sup>[29]</sup>提出了一种时空联合嵌入，其中时间嵌入通过三角函数编码了昼夜变换的周期性和季节性变换的周期性，空间嵌入利用三角函数和球形位置编码，编码经度（ $w$ ）和纬度（ $h$ ）信息，表示空间上的气候特征。时空联合嵌入的具体形式见公式(1-1)及公式(1-2)。

$$\psi(t) = \left\{ \sin 2\pi t, \cos 2\pi t, \sin \frac{2\pi t}{365}, \cos \frac{2\pi t}{365} \right\}, \quad (1-1)$$

$$\psi(x) = \{ \{ \sin, \cos \} \times h, w, \sin(h) \cos(w), \sin(h) \sin(w) \}. \quad (1-2)$$

最后通过笛卡尔积结合时间嵌入 $\psi(t)$ 和空间嵌入 $\psi(x)$ ，得到最终的联合时空嵌入 $\psi(x, t) = \psi(t) \times \psi(x)$ 。联合时空嵌入表示了地球上气候模式数据在时间和空间上的周期性变化模式。在 Liu P et al.<sup>[30]</sup>提出的 WeatherODE 方法中，也使用了这种时空嵌入来处理数据的时空周期性信息。

这种时空嵌入的方法常用于气候建模相关的任务中（如天气预测），用来表示气候数据中的时空周期性特征，并且都在一定程度上提高了模型性能。在CO<sub>2</sub>重建任务中，CO<sub>2</sub>和气象变量数据的时空周期性特征也能通过类似的方法进行应对。

### （c）数据重建方法

主流的基于深度学习的数据重建方法包括：图像超分辨率（Image Super Resolution），图像修复（Image Inpainting）和隐式神经表示（Implicit Neural Representation）。

**图像超分辨率**的目的是通过算法将低分辨率的图像重建成高分辨率的图像，加强图像的视觉效果。典型方法包括 SinSR<sup>[31]</sup>，该研究提出一种新颖的模型蒸馏算法，即单步双向蒸馏方法，让模型学习输入噪声和输出图像之间的确定性映射，并且在训练过程中引入了一致性保持损失函数，确保学生模型能够同时对齐老师模型和真实值的特征信息；MeshfreeFlowNet<sup>[32]</sup>，该研究提出一种计算高效的图像超分辨率框架，可以重建任意时空分辨率的物理量，为了保证物理一致性，还引入了一系列基于偏微分方程的物理约束。

**图像修复**旨在修复损坏或部分缺失的图像，恢复图像的完整性。根据模型结构，可分为基于生成对抗网络（Generative Adversarial Network, GAN），基于 Transformer 和基于扩散模型（Diffusion Model, DM）的修复方法。CoModGAN<sup>[33]</sup>是一种基于 GAN 的图像修复算法，其通过混合调制有条件和随机的风格表示，结合有条件和无条件的生成结构，提高了大尺度自由格式图像修复的效果；MAT<sup>[34]</sup>是一种基于 Transformer 的图像修复算法，提出部分注意力机制，根据 Mask，让模型关注有效的 Token，提高修复效果，还引入了风格控制模块，增强了修复的多样性；LatentPaint<sup>[35]</sup>是新兴的基于扩散模型的图像修复方法，提出了一个即插即用的传播模块，将扩散模型中的前向和反向步骤从图像空间转移到了潜空间，加快了扩散模型的推理速度。

**隐式神经表示**利用神经网络，将复杂信号（如图像、三维形状等）表示成空间坐标的连续函数，实现对离散、缺失数据的连续重建。利用隐式神经表示方法进行重建的方法包括 Senseiver<sup>[36]</sup>，这是一种基于注意力的场重建框架，可以从极少数的观测点重建  $n$  维的复杂空间场；CoNFILD<sup>[37]</sup>，它结合条件神经场编码和潜在扩散过程，实现在不同条件下进行高效且鲁棒的湍流生成。

在这三种方法中，图像超分辨率的输入是完整的低分辨率图像，不存在数据稀疏性问题，并不适用于  $\text{CO}_2$  重建；而从稀疏数据进行重建的图像修复和隐式神经表示方法只关注了静态重建，忽视了时序动态信息，难以直接应用到  $\text{CO}_2$  重建上。

### 1.2.3 性能对比分析

本项目主要将  $\text{CO}_2$ -Net 与以下基于深度学习的重建方法进行了对比，包括：基于 Transformer 结构的 Vision Transformer (ViT) 模型<sup>[57]</sup>，SwinLSTM 模型<sup>[58]</sup>；基于生成对抗网络结构的 CycleGAN 模型<sup>[59]</sup>；基于隐式神经表示的 Senseiver 模型<sup>[36]</sup>。

本项目主要在 CarbonTracker 和 CMIP6 两个再分析数据集上对模型进行实验。本项目将两个数据集划分为训练集、验证集和测试集三部分，具体划分情况见表 1-1。本项目使用训练集对模型进行训练，同时在训练过程中使用验证集检验模型性能，避免发生模型过拟合

或者欠拟合的情况，最后在测试集上对训练好的模型进行测试，计算评价指标。

表 1-1 CarbonTracker 和 CMIP6 数据集划分情况，单位为年。

数据集	训练集划分	验证集划分	测试集划分
CarbonTracker	[2002,2018]	{2001, 2019}	{2000,2020}
CMIP6	[1865,1999]	[1860,1864] ∪ [2000,2004]	[1850,1859] ∪ [2005,2014]

对于 CarbonTracker 数据集，本项目选用 2002-2018 年共 17 年的数据作为训练集，选择 2001 和 2019 年两年的数据作为验证集，选择 2000 和 2020 年两年的数据作为测试集；对于 CMIP6 数据集，本项目选用 1865-1999 年共 135 年的数据作为训练集，选择 1860-1864 年和 2000-2004 年共 10 年的数据作为验证集，选择 1850-1859 年和 2005-2014 年共 20 年的数据作为测试集。本项目没有按年份顺序对数据集进行验证集和测试集的划分，而是选择了一头一尾的数据进行组合，目的是验证模型能否捕捉CO<sub>2</sub>浓度的长期变化趋势。

在评价指标方便，本项目主要通过纬度加权均方根误差（Latitude-weighted Rooted Mean Square Error, RMSE）和异常相关系数（AnomalyCorrelationCoefficient, ACC）来量化模型性能。

**RMSE** 量化了CO<sub>2</sub>重建结果与CO<sub>2</sub>真实值之间的平均误差，并且通过纬度加权的方式考虑了地球球面曲度的问题。其计算公式见公式(1-3)：

$$\text{RMSE} = \frac{1}{N} \sum_{t=1}^N \sqrt{\frac{1}{HW} \sum_{h=1}^H \sum_{w=1}^W \alpha(h)(y_{thw} - u_{thw})^2}, \quad (1-3)$$

其中 $N$ ， $H$ ， $W$ 分别表示时间点数量，纬度网格个数和经度网格个数。 $y_{thw}$ 和 $u_{thw}$ 分别表示在时间点 $t$ ，坐标为 $(h, w)$ 的网格上的真实值和重建值。 $\alpha(h) = \cos(h) / (\frac{1}{H} \sum_h \cos(h))$ 表示纬度权重系数。**RMSE** 的单位为 $\mu\text{mol/mol}$ ，**RMSE** 越低模型性能越好。

**ACC** 量化了CO<sub>2</sub>重建结果与CO<sub>2</sub>真实值在异常模式上的一致性。其计算公式见公式(1-4)：

$$\text{ACC} = \frac{\sum_{t,h,w} \alpha(h) \tilde{y}_{thw} \tilde{u}_{thw}}{\sqrt{\sum_{t,h,w} \alpha(h) \tilde{y}_{thw}^2 \sum_{t,h,w} \alpha(h) \tilde{u}_{thw}^2}}, \quad (1-4)$$

其中 $\tilde{y}_{thw}$ 和 $\tilde{u}_{thw}$ 分别表示在时间点 $t$ ，坐标为 $(h, w)$ 的网格上的真实数据和重建结果的异常模式，异常模式是通过用真实值和重建值减去真实值的经验均值 $C$ 得到的，即 $\tilde{y}_{thw} = y_{thw} -$

$C$ ,  $\tilde{u}_{thw} = u_{thw} - C$ 。  $\alpha(h)$ 是与 RMSE 公式中相同的纬度权重系数。ACC 是无量纲量, ACC 越高模型性能越好。

在算法性能方面,本项目在 CarbonTracker 和 CMIP6 两个再分析数据集上对CO<sub>2</sub>-Net 和其他重建方法进行实验,并计算了全球范围、海洋区域以及亚欧大陆区域上不同模型重建结果的 RMSE 和 ACC 值,所有结果见表 1-2。

表 1-2 CO<sub>2</sub>-Net 和其他基准模型的在全球范围、海洋区域和亚欧大陆上的CO<sub>2</sub>重建结果对比,评价指标为 RMSE 和 ACC。↓表示越低越好,↑表示越高越好, RMSE 的单位是μmol/mol。最好的结果进行了加粗处理。

数据集	模型	全球		海洋		亚欧大陆	
		RMSE(↓)	ACC(↑)	RMSE(↓)	ACC(↑)	RMSE(↓)	ACC(↑)
CarbonTracker	Senseiver	6.39	0.43	4.74	0.28	9.70	0.50
	SwinLSTM	5.31	0.61	2.90	0.45	6.33	0.65
	CycleGAN	4.70	0.71	1.57	0.88	8.39	0.73
	ViT	5.42	0.50	2.27	0.72	9.43	0.63
	CO <sub>2</sub> -Net	<b>3.36</b>	<b>0.85</b>	<b>1.09</b>	<b>0.94</b>	<b>5.39</b>	<b>0.85</b>
CMIP6	Senseiver	36.47	0.59	31.94	0.79	40.52	0.43
	SwinLSTM	27.42	0.52	28.41	0.52	27.70	0.51
	CycleGAN	28.36	0.74	29.38	0.74	28.67	0.74
	ViT	18.18	0.49	18.86	0.49	18.38	0.49
	CO <sub>2</sub> -Net	<b>5.31</b>	<b>0.99</b>	<b>5.49</b>	<b>0.99</b>	<b>5.36</b>	<b>0.97</b>

首先,根据表 1-2,在全球范围内,CO<sub>2</sub>-Net 都取得了优于其他基准模型的CO<sub>2</sub>重建效果。在 CarbonTracker 数据集上,重建效果最好的基准模型是 CycleGAN,取得了 4.70μmol/mol 的 RMSE 值和 0.71 的 ACC 值,而CO<sub>2</sub>-Net 取得了 3.36μmol/mol 的 RMSE 值,相较于 CycleGAN 减少了约 28.5%,以及 0.85 的 ACC 值,相较于 CycleGAN 增加了约 10.4%;在 CMIP6 数据集上,重建效果最好的基准模型是 ViT,取得了 18.18μmol/mol 的 RMSE 值和 0.49 的 ACC 值,而CO<sub>2</sub>-Net 取得了 5.31μmol/mol 的 RMSE 值,相较于 ViT 减少了约 70.8%,以及 0.99 的 ACC 值,相较于 ViT 增加了 102%,大幅提高了CO<sub>2</sub>的重建精度。这一结果表明CO<sub>2</sub>-Net 的重建效果优于其他基准模型,验证了CO<sub>2</sub>-Net 的带来的CO<sub>2</sub>重建精度提升。

其次,本项目发现,不光在全球范围内,在海洋和亚欧大陆等局部区域上,CO<sub>2</sub>-Net

也取得了最好的CO<sub>2</sub>重建效果，例如在 CarbonTracker 数据集上，在海洋区域上，CO<sub>2</sub>-Net 取得了 1.09μmol/mol 的 RMSE 值和 0.94 的 ACC 值，而在亚欧大陆区域上，CO<sub>2</sub>-Net 取得了 5.39μmol/mol 的 RMSE 值和 0.85 的 ACC 值，都远远超过了其他基准模型。在 CMIP6 数据集上，本项目也观察到了类似的现象，在海洋区域和亚欧大陆区域，CO<sub>2</sub>-Net 的 RMSE 和 ACC 值分别是 5.49μmol/mol, 0.99 和 5.36μmol/mol, 0.97。这一结果表明CO<sub>2</sub>-Net 既能很好的重建全球范围内的CO<sub>2</sub>浓度，在局部地区上也能展现出优异的重建精度。

根据表 1-2 的数据，本项目还发现在 CMIP6 数据集上，CO<sub>2</sub>-Net 相较于其他基准模型的性能提升比在 CarbonTracker 数据集上要更加明显。本项目认为这种差异很可能来源于 CMIP6 和 CarbonTracker 数据集本身的差异，CMIP6 数据集提供了更长时间跨度（165 年）以及更粗糙的时间分辨率（月平均数据）的数据，而 CarbonTracker 数据集提供了更短时间跨度（21 年）以及更精细的时间分辨率（间隔 3 小时采样数据）的数据，所以来自 CMIP6 数据集的数据分布具有更大的方差，增加了模型学习的难度。

## 1.3 所需支持

### 1.3.1 二氧化碳数据集

数据质量和多样性对于重建CO<sub>2</sub>具有基础性和决定性的作用。在进行CO<sub>2</sub>重建时，站点的CO<sub>2</sub>观测数据和辅助气候变量数据的质量、代表性、时空覆盖性以及物理一致性是影响重建效果的关键因素。因此，在进行具体的模型构建以及实验分析前，对所使用的数据集进行系统介绍是必须的。本章将首先介绍CO<sub>2</sub>数据的三种采集方式：地基观测、空基观测和星载观测，对比分析这三种采集方式获得的CO<sub>2</sub>数据在数据完整性和数据质量上的差异，进而说明文本采用的三个代表性CO<sub>2</sub>数据集（CarbonTracker, CMIP6 以及 GLOBALVIEWplus）的来源和数据结构等信息。

CO<sub>2</sub>数据主要有三种获得方式：地基观测（ground-based）、空基观测（airborne）和星载（satellite-based）观测。地基观测主要通过在地面设立观测站点或塔，对CO<sub>2</sub>进行观测，观测精度一般较高，但是地面站点修缮成本高，不容易维护，而且在海洋和森林密布的地区很难布置观测站点，因此地面观测站点数量十分稀疏<sup>[41]</sup>。空基观测主要通过通过在飞机上装载测量仪器，对CO<sub>2</sub>浓度进行探测，尽管空基观测可以将观测范围扩展到高空和海洋，但是测量仪器的精度容易被测量路径中云层的光学散射影响，还可能受到太阳光源限制导致无法在夜间和中高纬度地区进行准确测量<sup>[42][43]</sup>。星载观测则是将CO<sub>2</sub>测量仪器装载到卫星上（如 GOSAT 卫星<sup>[44]</sup>和 OCO 卫星<sup>[45]</sup>），对CO<sub>2</sub>垂直分布信息进行探测，进一步将CO<sub>2</sub>观测范围扩



展到全球，但是星载观测仍然受到一些时空约束，例如可能受到气溶胶和卫星轨道的影响，可能出现数据损失问题，而且卫星观测数据的分辨率一般较低<sup>[41][46]</sup>。

空基观测和星载观测虽然观测范围较广，但是这两种观测方法都容易受到云层和轨道的影响，带来数据缺失的问题，而且空载测量或卫星观测得到的数据质量较低，给CO<sub>2</sub>重建带来困难。地基观测尽管稀疏，但观测时间跨度长，能提供高精度的CO<sub>2</sub>观测信息，而且数据稀疏的问题可以通过深度学习方法进行解决，因此，本项目选取地基观测数据进行全球CO<sub>2</sub>重建的研究。

为了全面评估模型在不同数据来源以及不同时间分辨率条件下的重建性能，本项目选取了三个具有代表性的CO<sub>2</sub>数据集进行实验，对比和验证模型性能，具体包括两个再分析数据集：CarbonTracker（碳追踪器）<sup>[47]</sup>和 CMIP6（耦合模型比较项目阶段 6）<sup>[48]</sup>，以及一个站点观测数据集：GLOBALVIEWplus<sup>[49]</sup>。

再分析数据集指利用数据同化算法，整合多源观测数据与数值模型产生的模拟数据，最终生成的数据集。数据同化算法不但适用了全球不同的数据来源和时空尺度的数据，并且在建立数值模型时引入了相关的物理定律作为约束，因此，数据同化算法具有时空覆盖性广以及物理一致性的特点，是训练和评估模型性能的主要数据源。CarbonTracker 数据集提供了 2000 年至 2020 年，共 21 年内 3 小时间隔采样的CO<sub>2</sub>估算的结果，具有更精细的时间分辨率，适合评估模型捕捉CO<sub>2</sub>短期高频变化的能力；而 CMIP6 数据集提供了 1850 年至 2014 年，共 165 年的月平均数据，相比于 CarbonTracker，CMIP6 数据集的覆盖时间更长，能够检验模型在长期气候变化背景下，重建效果的鲁棒性。

站点观测数据集 GLOBALVIEWplus 收集了来自全球范围内，多个观测站点在一段时间内的观测数据。这些观测数据是通过真实的，经过校准的测量仪器观测而得，具有很高的精度和可信度。虽然其空间覆盖程度有限，数据很稀疏而且不连续，但可以用于从实际观测角度对模型进行独立验证。

通过组合使用以上三个数据集，本项目构建了一个全面评估模型CO<sub>2</sub>重建性能的框架，从多个角度评估提出模型在CO<sub>2</sub>重建任务中的有效性和鲁棒性。接下来，本项目将详细介绍三个数据集的数据来源，数据组成，数据的时空分辨率等信息。

### 1.3.2 硬件支持

本项目基于深度学习的全球二氧化碳浓度重建技术研发及海洋动态监测应用，在算力与硬件方面的需求以满足模型训练、数据处理及实验验证为核心，因此硬件支持主要集中在算力和存储方面。

在算力需求上,项目核心模型 CO<sub>2</sub>-Net 参数量约 3000 万,属于中等规模深度学习模型。训练阶段处理 CarbonTracker (2000-2020 年,3 小时分辨率,2°×3° 空间分辨率)和 CMIP6 (1850-2014 年,月均分辨率,2.8°×2.8° 空间分辨率)两类数据集时,单轮训练需 4 张 NVIDIA RTX 3090 (24GB 显存)显卡协同计算,其中 CarbonTracker 数据集训练周期约 2 天,CMIP6 数据集约 3 天。消融实验(含 10 组模型结构变体及 15 组超参数配置)需额外算力,总算力为基础训练的 2 倍,可通过实验室现有算力集群分时调度实现,无需专用超算资源。推理阶段(1°×1° 空间分辨率,1 小时时间间隔)需 2 张 NVIDIA RTX 3090 显卡,可实现小时级全球数据处理,满足海洋动态监测实时性要求;模型调试及小规模数据预处理在单张 NVIDIA RTX 3090 显卡上即可完成。

硬件设备方面,计算设备包括 2 台工作站(每台搭载 1 张 NVIDIA RTX 3090 显卡、32GB DDR4 内存、1TB NVMe SSD 硬盘),用于模型开发、代码调试及小规模数据处理;1 台 4 卡服务器(搭载 4 张 NVIDIA RTX 3090 显卡、128GB DDR4 内存、2TB NVMe SSD 硬盘),作为核心训练设备支持大规模训练及并行计算。存储设备为 1 台 8TB 容量的存储服务器,采用 RAID 5 冗余备份,用于存储原始数据(CarbonTracker 约 300GB、CMIP6 约 200GB、GLOBALVIEWplus 约 50GB,合计约 550GB)及预处理数据(特征工程后输入数据约 1.2TB、模型输出结果约 300GB,合计约 1.5TB),后续可扩展至 16TB。实验验证设备包括 1 台便携式二氧化碳浓度检测仪(精度  $\pm 0.5 \mu\text{mol/mol}$ )和 1 台消费级无人机(搭载 1200 万像素摄像头),分别用于实地数据采集与近海生态影像拍摄,辅助验证模型精度。

总结来说,算力上 NVIDIA RTX 3090 显卡的显存与性能可支持中等规模模型的训练与推理,无需依赖更高成本的专业卡;硬件上存储容量与设备数量基于实际数据量与并行需求设计,实验验证设备以基础功能为主,可在控制成本的同时保障项目从模型研发到近海验证的有效推进。

## 2 项目规划

### 2.1 整体目标

#### 2.1.1 目标分析

本项目旨在提出并验证一种基于深度学习的全球二氧化碳浓度重建方法（CO<sub>2</sub>-Net），通过整合多源气候数据与物理规律，实现对全球二氧化碳浓度时空分布的高精度重建，重点服务于海洋生态系统的动态监测与保护。具体目标包括：

##### （1）二氧化碳浓度重建模型设计

设计并实现 CO<sub>2</sub>-Net 模型，通过时空模型分解捕捉二氧化碳数据的强时空关联性，基于风场的时空周期性嵌入表征气象数据的周期性特征，结合风场重建损失函数解决观测数据稀疏性问题，最终实现全球二氧化碳浓度的高精度重建（在 CarbonTracker 和 CMIP6 数据集上的 RMSE 分别低于 3.36  $\mu\text{mol/mol}$  和 5.31  $\mu\text{mol/mol}$ ）。

##### （2）二氧化碳浓度重建模型性能验证

在 CarbonTracker（2000-2020 年，3 小时分辨率， $2^\circ \times 3^\circ$  空间分辨率）和 CMIP6（1850-2014 年，月均分辨率， $2.8^\circ \times 2.8^\circ$  空间分辨率）两个再分析数据集上开展对比实验，验证 CO<sub>2</sub>-Net 的有效性：相较于现有基准模型（如 ViT、SwinLSTM），在 CarbonTracker 数据集上使 RMSE 降低至少 28.5%，在 CMIP6 数据集上使 RMSE 降低至少 70.5%；通过 GLOBALVIEWplus 真实站点数据（1957-2024 年）验证模型在近海区域的重建精度（误差  $\leq 0.5 \mu\text{mol/mol}$ ）。

##### （3）二氧化碳重建应用落地探索

基于 CO<sub>2</sub>-Net 的重建结果，分析全球二氧化碳浓度的时空分布规律，重点探究海洋区域（如中国渤海黄海等）的二氧化碳浓度变化与海洋生态系统（如珊瑚礁退化、浮游生物分布）的关联，为海洋保护策略制定（如碳汇评估、酸化风险预警）提供数据支撑和科学依据。

##### （4）海洋系统动态监测

突破传统反演模型对先验数据的强依赖及计算效率低下的局限，通过深度学习技术实现二氧化碳浓度重建的高效性（全球数据推理时间  $\leq 1$  小时）与可扩展性（支持多源数据融合），为海洋系统科学中大气成分监测提供新的技术路径。

#### 2.1.2 模型效果可视化-二氧化碳重建结果

本项目使用 CarbonTracker 数据集进行实验，对一件长期全球 CO<sub>2</sub> 浓度变化事件和三件短期区域性 CO<sub>2</sub> 浓度变化事件进行案例分析，比较 CO<sub>2</sub>-Net 和 ViT 建模 CO<sub>2</sub> 浓度变化过程的

效果，从而验证CO<sub>2</sub>-Net 模型捕捉CO<sub>2</sub>浓度时序变化趋势的能力。

### (1) 长期二氧化碳重建结果

在全球变暖背景下，CO<sub>2</sub>浓度变化呈现逐年上升的趋势，本项目使用 CarbonTracker 测试集上对CO<sub>2</sub>-Net 和 ViT 模型进行测试，并可视化两个模型在 2000 年和 2020 年的重建结果，对比分析CO<sub>2</sub>-Net 和 ViT 捕捉长期CO<sub>2</sub>浓度变化趋势的能力。

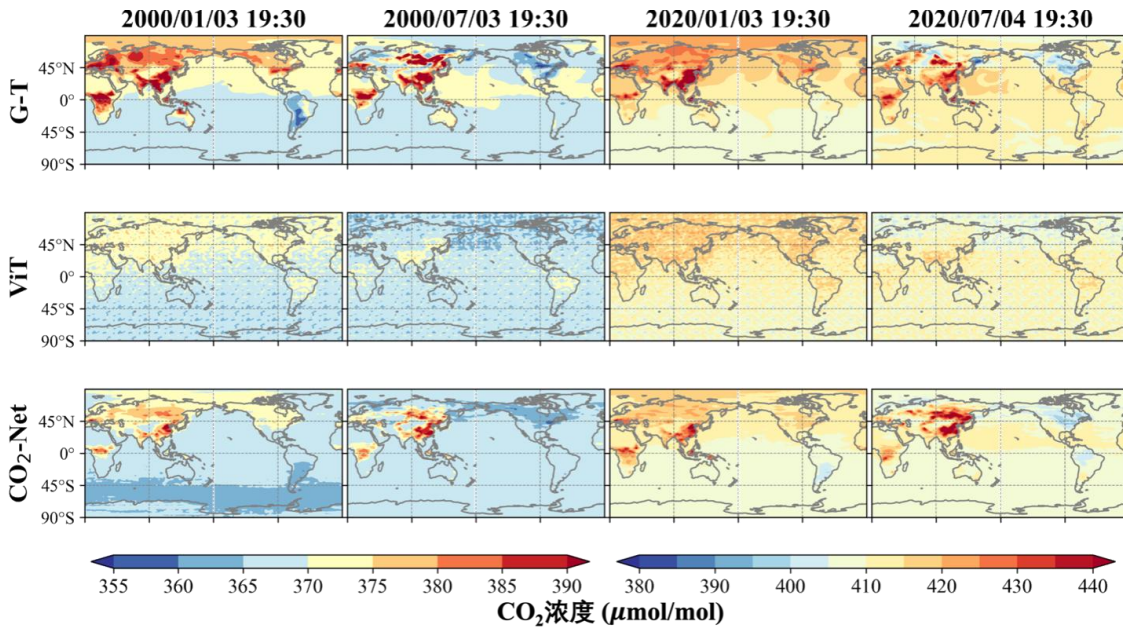


图 2-1 CO<sub>2</sub>-Net 和 ViT 在 CarbonTracker 数据集上重建的 2000 年及 2020 年CO<sub>2</sub>浓度与真实值的对比。

图 2-1 展示了CO<sub>2</sub>-Net 和 ViT 重建的CO<sub>2</sub>浓度与CO<sub>2</sub>浓度真实值 (G-T) 的可视化结果。在 2000 年 1 月和 2000 年 7 月这段时间里，全球CO<sub>2</sub>浓度范围大约处在 355~390μmol/mol 之间，而到了 2020 年 1 月和 2020 年 7 月，全球CO<sub>2</sub>浓度增长到了约 380~440μmol/mol 的范围内，这一浓度范围的变化体现了这 21 年间在全球变暖影响下，大气中温室气体浓度含量逐年上升的趋势。可以发现，CO<sub>2</sub>-Net 和 ViT 重建的这两个时间段内的CO<sub>2</sub>浓度都落在了上述浓度范围内，说明两个模型都可以重建出气候变暖导致的CO<sub>2</sub>浓度上升的现象。

然而，在局部地区重建细节上，CO<sub>2</sub>-Net 达到了比 ViT 更好的重建效果。具体而言，在东南亚地区，CO<sub>2</sub>浓度常年处于全球最高水平，在 2000 年 7 月，该地区的CO<sub>2</sub>浓度范围为 380~390μmol/mol，在 2020 年 7 月，该地区的CO<sub>2</sub>浓度范围为 420~440μmol/mol，从图中可以看出，CO<sub>2</sub>-Net 重建出的该地区CO<sub>2</sub>浓度更接近真实值，说明重建更准确，然而 ViT 重建结果中，该地区的CO<sub>2</sub>浓度水平明显低于真实值，进一步突出了CO<sub>2</sub>-Net 的效果优异；在中非地区，在 2000 年和 2020 年，该地区的CO<sub>2</sub>浓度都处于全球最高水平，CO<sub>2</sub>-Net 在中非

地区的重建结果虽然与真实值有一定的差异，但仍然可以体现出中非地区CO<sub>2</sub>浓度比其他地区高的相对特征，而 ViT 是没有捕捉到这种特征的；在北美洲地区，2000 年 7 月和 2020 年 7 月，该地区的CO<sub>2</sub>浓度范围分别是 355~370μmol/mol 和 395~410μmol/mol，是比较低的CO<sub>2</sub>浓度水平，从图中可以看出，CO<sub>2</sub>-Net 和 ViT 都能够成功捕捉这种特征，但是 ViT 的重建结果和真实值相比，误差比CO<sub>2</sub>-Net 更大。

通过以上对比，本项目发现CO<sub>2</sub>-Net 能够准确地捕捉长期的CO<sub>2</sub>浓度变化趋势，比如全球变暖，CO<sub>2</sub>浓度逐年上升。除此之外，在局部地区的重建细节上，CO<sub>2</sub>-Net 重建效果也比基准模型 ViT 更好，能够重建出真实CO<sub>2</sub>浓度的空间分布特征。

## (2) 短期二氧化碳重建结果

一些短时间的突发事件，如森林野火、山火以及季节性碳吸收，会引起CO<sub>2</sub>浓度在短时间内的剧烈变化，能否准确重建这种剧烈变化，是CO<sub>2</sub>重建任务中的一大挑战。因此，在这一节，本项目以（1）**2019 年 8 月亚马逊雨林野火**、（2）**2020 年 10 月加利福尼亚州山火**以及（3）**2020 年 6 月西伯利亚森林的季节性碳吸收**为案例，对比分析了CO<sub>2</sub>-Net 和 ViT 重建短期CO<sub>2</sub>浓度剧烈变化趋势的能力。短期重建案例选取的区域范围见图 2-2。

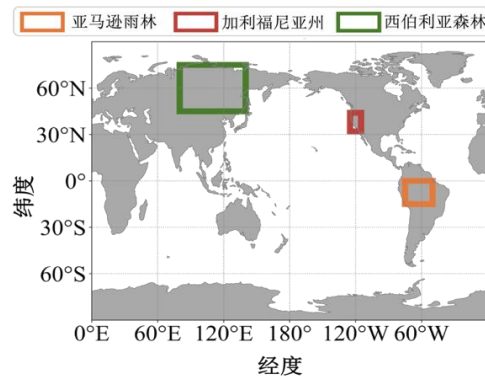


图 2-2 短期重建案例分析所选地区，包括亚马逊雨林、加利福尼亚州以及西伯利亚森林地区。

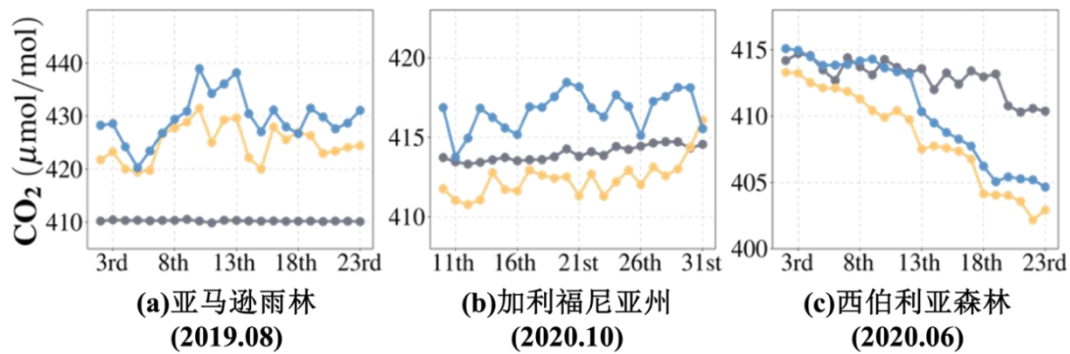


图 2-3 CO<sub>2</sub>-Net 重建在亚马逊雨林、加利福尼亚州和西伯利亚森林地区内短期CO<sub>2</sub>浓度变化

## 趋势的结果。

(1) **2019 年 8 月亚马逊雨林野火。**2019 年旱季，地处热带的亚马逊雨林发生了数千起独立野火，波及了周边国家如玻利维亚、巴拉圭等。本项目以 2019 年 8 月在亚马逊雨林发生的野火为例，可视化展示了 CO<sub>2</sub>-Net 和 ViT 的 CO<sub>2</sub> 浓度重建结果（图 2-3 (a)）。从图中可以看出，在 8 月 5 日至 8 月 10 日这五天时间里，由于野火燃烧产生了大量的 CO<sub>2</sub>，亚马逊雨林地带的 CO<sub>2</sub> 浓度迅速从 420 μmol/mol 上升到 440 μmol/mol。从模型重建结果来看，CO<sub>2</sub>-Net 重建的 CO<sub>2</sub> 浓度曲线非常贴近 CO<sub>2</sub> 浓度真实值的变化曲线，从 420 μmol/mol 上升到 431 μmol/mol，说明 CO<sub>2</sub>-Net 精确地捕捉了这段时间内 CO<sub>2</sub> 浓度迅速上升的趋势，只是在绝对数值上有微小的差异；而 ViT 在这段时间重建的 CO<sub>2</sub> 浓度基本稳定在 410 μmol/mol，不仅和真实值的绝对数值差异很大，而且也没有捕捉到 CO<sub>2</sub> 浓度的变化趋势。

(2) **2020 年 10 月加利福尼亚州山火。**在加利福尼亚州，8 月到 11 月，炎热、干燥的风最为频繁，是山火、野火的高发时间段。本项目以 2020 年 10 月在加利福尼亚州发生的山火为例，可视化展示了 CO<sub>2</sub>-Net 和 ViT 的 CO<sub>2</sub> 浓度重建结果（图 2-3 (b)）。根据折线图展示的结果，在 10 月 11 日到 10 月 30 日这段时间内，加利福尼亚州的 CO<sub>2</sub> 浓度波动频繁，但整体呈现上升趋势，CO<sub>2</sub> 浓度峰值达到了约 418 μmol/mol。CO<sub>2</sub>-Net 和 ViT 模型的重建结果都能体现出 CO<sub>2</sub> 浓度上升的趋势，但是 ViT 重建的 CO<sub>2</sub> 浓度变化过于平缓，没有体现出这段时间内加利福尼亚州地区 CO<sub>2</sub> 浓度频繁波动的特征，而 CO<sub>2</sub>-Net 能够捕捉到这种频繁波动的细节特征。

(3) **2020 年 6 月西伯利亚森林的季节性碳吸收。**西伯利亚地区森林覆盖面广，由于植物在生长季（6-8 月）会通过光合作用吸收大量的 CO<sub>2</sub>，导致这段时间内该地区 CO<sub>2</sub> 浓度会呈现明显的下降趋势。本项目以 2020 年 6 月西伯利亚森林的季节性碳吸收为例，可视化展示了 CO<sub>2</sub>-Net 和 ViT 的 CO<sub>2</sub> 浓度重建结果（图 4-3 (c)）。在 6 月 3 日至 6 月 23 日这段时间内，由于季节性碳吸收现象，西伯利亚地区的 CO<sub>2</sub> 浓度从 415 μmol/mol 下降到了 405 μmol/mol。从图中可以看出，CO<sub>2</sub>-Net 重建的 CO<sub>2</sub> 浓度呈现出和真实值类似的下降趋势，从 413 μmol/mol 下降到了 403 μmol/mol，而 ViT 重建的 CO<sub>2</sub> 浓度虽然整体上也呈现了下降趋势，但是下降过程缓慢，只从 414 μmol/mol 下降到了 410 μmol/mol，没有重建出真实值迅速下降的变化过程。

本项目通过对三个 CO<sub>2</sub> 浓度剧烈变化的具体案例（亚马逊雨林野火、加利福尼亚州山火和西伯利亚森林的季节性碳吸收）进行分析，并且与 ViT 模型进行对比，验证了 CO<sub>2</sub>-Net 捕捉 CO<sub>2</sub> 浓度短期迅速变化趋势的能力。

## 2.2 技术创新点

### 2.2.1 现有方法关键挑战

本项目的研究难点在于如何解决CO<sub>2</sub>重建任务中的主要挑战，即：（1）CO<sub>2</sub>数据时空关联性强；（2）气候模式数据周期性变化剧烈；（3）CO<sub>2</sub>观测数据分布十分稀疏。

因此，针对每个问题，本项目提出以下解决思路：

（1）**采用时空模型分解的方法**，解耦数据时空特征的处理过程，使用时间模型和空间模型分别处理数据的时序特征和空间特征，加强模型捕捉CO<sub>2</sub>数据的时空分布特征的能力。时空模型分解的方式在视频理解相关任务中已经得到了广泛的应用，并凭借强大的时空理解能力，取得了显著的性能提升<sup>[25][26]</sup>。时空模型分解通过将模型划分成时间模型和空间模型两部分，分别建模CO<sub>2</sub>数据的时空特征，最后将时空特征进行融合，实现CO<sub>2</sub>重建。

（2）**设计时空周期性嵌入**，引入时空周期性信号，建模CO<sub>2</sub>和其他气候变量的周期性特征。在一些气候建模相关的深度学习模型中，时空嵌入一般被用于表征数据的周期性特征，作为额外的辅助信息输入到模型中，并且展现出了不错的效果<sup>[29][30]</sup>。时空周期性嵌入包含时间嵌入和空间嵌入两部分，分别编码时序信息和经纬度信息，表示在地球上时间和空间的周期性变化特征。

（3）**设计自监督学习训练方法**，应对CO<sub>2</sub>观测数据的稀疏性问题。当前，自监督学习的方法已广泛应用于自然语言处理和计算机视觉领域，用于解决数据稀疏的问题，如掩码语言建模（Masked Language Modeling）<sup>[38]</sup>和掩码自编码器（Masked Autoencoders）<sup>[39][40]</sup>。进行自监督学习的关键问题是确定何种特征对于模型学习是有效的，以及如何设计合理的自监督学习任务，让模型从有限的数据中学习丰富的特征。

### 2.2.2 本项目工作和创新点

因此，本项目的主要工作包括：

（1）提出一种基于深度学习的CO<sub>2</sub>重建方法，称为CO<sub>2</sub>-Net，它主要由三个关键组件组成，包括建模CO<sub>2</sub>数据时空关联性的时空模型分解，引入时空周期性特征作为辅助信息的基于风场的时空周期性嵌入，解决CO<sub>2</sub>观测数据稀疏性问题的自监督学习损失函数——风场重建损失。

（2）通过在 CarbonTracker 和 CMIP6 两个再分析数据集上与其他深度学习基准模型进行大量的对比实验，本项目发现，相较于基准模型，CO<sub>2</sub>-Net 在 CarbonTracker 数据集上将 RMSE 降低了约 28.5%，在 CMIP6 数据集上将 RMSE 降低了约 70.5%，验证了CO<sub>2</sub>-Net 模

型在CO<sub>2</sub>重建任务中的有效性。

(3) 通过结构消融实验，分析了CO<sub>2</sub>-Net 中每个关键组件对于提升CO<sub>2</sub>-Net 重建效果的作用，验证模型设计的合理性。通过超参数配置消融实验，分析了输入历史数据长度、数据集采样频率以及损失函数的权重系数对于CO<sub>2</sub>-Net 重建效果的影响，以及CO<sub>2</sub>-Net 对于这些超参数的敏感性。

本项目的技术创新点主要体现在以下三个方面，通过理论建模与实验验证的结合，形成了兼具科学性与实用性的技术方案：

(1) 提出融合物理机制的深度学习模型架构（CO<sub>2</sub>-Net），实现了数据驱动与物理规律的协同建模。该模型通过三级组件解决二氧化碳浓度重建的核心挑战：其一，时空模型分解模块基于对流-扩散方程的物理逻辑，将二氧化碳浓度场解耦为空间分布特征（时不变特解）与时间演化特征（时变通解），分别采用视觉 Transformer（ViT）和时序 Transformer 建模，有效捕捉大气对流扩散导致的强时空关联性；其二，基于风场的时空周期性嵌入模块，通过经纬向风速调制三角函数编码，量化季风、信风等周期性气象现象对二氧化碳传输的影响，克服了传统周期性嵌入忽略物理驱动因素的局限；其三，风场重建损失函数通过自监督学习机制，利用时间模型输出的时序特征反推风场数据（U、V），在观测稀疏的海洋区域，通过物理变量关联性提升模型泛化能力，降低对密集标签数据的依赖。

(2) 实现了高精度与高效能的平衡设计，满足实际应用场景的需求。模型参数量控制在 3000 万级，通过 Tensor-Train 分解压缩特征维度，在单张 NVIDIA RTX 3090 显卡上即可完成模型调试与小规模数据处理；大规模训练阶段采用 4 张同型号显卡协同计算，单轮训练周期控制在 2-3 天（CarbonTracker 数据集约 2 天，CMIP6 数据集约 3 天），全球范围（1° × 1 分辨率）的推理时间≤1 小时，满足海洋动态监测的实时性要求。存储系统采用 8TB 容量服务器（RAID 5 冗余备份），可容纳原始数据（约 550GB）及预处理特征数据（约 1.5TB），支持多源数据的高效管理与调用，为模型训练验证提供稳定的数据支撑。

(3) 构建了“全球重建-区域验证-生态关联”的全链条技术路径，实现理论与应用的闭环。在全球尺度上，基于 CarbonTracker 和 CMIP6 数据集的实验表明，CO<sub>2</sub>-Net 的 RMSE 较基准模型分别降低 28.5%（CarbonTracker）和 70.5%（CMIP6），验证了模型的全局有效性；在区域尺度上，方法后续可以通过便携式二氧化碳检测仪（精度 ±0.5 μmol/mol）与近海无人机观测，完成模型在关键海洋区域的实地验证，确保局部重建精度；在生态尺度上，将重建结果与海洋生物分布数据（如珊瑚覆盖率、浮游植物浓度）关联分析，量化二氧化碳浓度变化对海洋生态系统的影响，为保护策略制定提供量化依据。



## 3 实施方案

### 3.1 技术可行性分析

#### 3.1.1 二氧化碳数据集

数据质量和多样性对于重建 $\text{CO}_2$ 具有基础性和决定性的作用。在进行 $\text{CO}_2$ 重建时，站点的 $\text{CO}_2$ 观测数据和辅助气候变量数据的质量、代表性、时空覆盖性以及物理一致性是影响重建效果的关键因素。因此，在进行具体的模型构建以及实验分析前，对所使用的数据集进行系统介绍是必须的。本章将首先介绍 $\text{CO}_2$ 数据的三种采集方式：地基观测、空基观测和星载观测，对比分析这三种采集方式获得的 $\text{CO}_2$ 数据在数据完整性和数据质量上的差异，进而说明文本采用的三个代表性 $\text{CO}_2$ 数据集（CarbonTracker, CMIP6 以及 GLOBALVIEWplus）的来源和数据结构等信息。

##### （1）二氧化碳数据采集

$\text{CO}_2$ 数据主要有三种获得方式：地基观测（ground-based）、空基观测（airborne）和星载（satellite-based）观测。地基观测主要通过在地面设立观测站点或塔，对 $\text{CO}_2$ 进行观测，观测精度一般较高，但是地面站点修缮成本高，不容易维护，而且在海洋和森林密布的地区很难布置观测站点，因此地面观测站点数量十分稀疏<sup>[41]</sup>。空基观测主要通过通过在飞机上装载测量仪器，对 $\text{CO}_2$ 浓度进行探测，尽管空基观测可以将观测范围扩展到高空和海洋，但是测量仪器的精度容易被测量路径中云层的光学散射影响，还可能受到太阳光源限制导致无法在夜间和中高纬度地区进行准确测量<sup>[42][43]</sup>。星载观测则是将 $\text{CO}_2$ 测量仪器装载到卫星上（如 GOSAT 卫星<sup>[44]</sup>和 OCO 卫星<sup>[45]</sup>），对 $\text{CO}_2$ 垂直分布信息进行探测，进一步将 $\text{CO}_2$ 观测范围扩展到全球，但是星载观测仍然受到一些时空约束，例如可能受到气溶胶和卫星轨道的影响，可能出现数据损失问题，而且卫星观测数据的分辨率一般较低<sup>[41][46]</sup>。

空基观测和星载观测虽然观测范围较广，但是这两种观测方法都容易受到云层和轨道的影响，带来数据缺失的问题，而且空载测量或卫星观测得到的数据质量较低，给 $\text{CO}_2$ 重建带来困难。地基观测尽管稀疏，但观测时间跨度长，能提供高精度的 $\text{CO}_2$ 观测信息，而且数据稀疏的问题可以通过深度学习方法进行解决，因此，本项目选取地基观测数据进行全球 $\text{CO}_2$ 重建的研究。

##### （2）典型的二氧化碳数据集

为了全面评估模型在不同数据来源以及不同时间分辨率条件下的重建性能，本项目选取了三个具有代表性的 $\text{CO}_2$ 数据集进行实验，对比和验证模型性能，具体包括两个再分析数

数据集：CarbonTracker（碳追踪器）<sup>[47]</sup>和 CMIP6（耦合模型比较项目阶段 6）<sup>[48]</sup>，以及一个站点观测数据集：GLOBALVIEWplus<sup>[49]</sup>。

再分析数据集指利用数据同化算法，整合多源观测数据与数值模型产生的模拟数据，最终生成的数据集。数据同化算法不但适用了全球不同的数据来源和时空尺度的数据，并且在建立数值模型时引入了相关的物理定律作为约束，因此，数据同化算法具有时空覆盖性广以及物理一致性的特点，是训练和评估模型性能的主要数据源。CarbonTracker 数据集提供了 2000 年至 2020 年，共 21 年内 3 小时间隔采样的 CO<sub>2</sub> 估算的结果，具有更精细的时间分辨率，适合评估模型捕捉 CO<sub>2</sub> 短期高频变化的能力；而 CMIP6 数据集提供了 1850 年至 2014 年，共 165 年的月平均数据，相比于 CarbonTracker，CMIP6 数据集的覆盖时间更长，能够检验模型在长期气候变化背景下，重建效果的鲁棒性。

站点观测数据集 GLOBALVIEWplus 收集了来自全球范围内，多个观测站点在一段时间内的观测数据。这些观测数据是通过真实的，经过校准的测量仪器观测而得，具有很高的精度和可信度。虽然其空间覆盖程度有限，数据很稀疏而且不连续，但可以用于从实际观测角度对模型进行独立验证。

通过组合使用以上三个数据集，本项目构建了一个全面评估模型 CO<sub>2</sub> 重建性能的框架，从多个角度评估提出模型在 CO<sub>2</sub> 重建任务中的有效性和鲁棒性。接下来，本项目将详细介绍三个数据集的数据来源，数据组成，数据的时空分辨率等信息。

#### （a）CarbonTracker 数据集

CarbonTracker<sup>[47]</sup>是由美国国家海洋和大气管理局（NOAA）开发的全球 CO<sub>2</sub> 测量和模拟系统，主要用于追踪全球范围内 CO<sub>2</sub> 的排放源（向大气中排放）和吸收汇（从大气中清除）。CarbonTracker 整合了不同来源的大气 CO<sub>2</sub> 观测数据，然后通过模拟大气传输过程，对全球 CO<sub>2</sub> 分布进行估算。

本项目使用的 CarbonTracker 数据集版本是 2022 年公布的 CT2022，它提供了 2000 年 1 月到 2020 年 12 月这 21 年间，间隔 3 小时采样的全球 CO<sub>2</sub> 分布。CarbonTracker 提供的数据的空间分辨率是  $2^{\circ} \times 3^{\circ}$ 。

除了 CO<sub>2</sub> 数据，本项目还使用了来自 CarbonTracker 的其他气候变量数据作为辅助，进行 CO<sub>2</sub> 重建。具体的变量使用情况见表 3-1。

表 3- 1CarbonTracker 和 CMIP6 数据集种变量的使用情况。

数据集	压强 (Pa)	湿度 (%)	气温 (K)	纬向风速 (m/s)	经向风速 (m/s)	地势高度 (gpm)	地形 (m)
CarbonTracker	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓
CMIP6	✓	✓	✓	✓	✓	×	×

(b) CMIP6 数据集

CMIP6<sup>[48]</sup>是由世界气候研究计划（WRCP）组织的国际合作气候模型模拟项目，该项目收集了来自全球各地的气候研究组织的不同气候模型的模拟实验生成的气候变量数据，是地球科学领域研究的重要数据来源。CMIP6 提供了包括气温、湿度、风速和CO<sub>2</sub>浓度在内的大量气候变量数据，为气候变化中的物理化学过程研究奠定了坚实的基础。

本项目使用了 CanESM5 模型的 Historical 实验产出的 1850 年 1 月到 2014 年 12 月共 165 年内，各种气候变量的月平均数据。CMIP6 数据集提供的数据分辨率2.8° × 2.8°，为了与 CarbonTracker 数据集保持一致，本项目通过 PyTorch 提供的双线性插值方法将 CMIP6 的数据从2.8° × 2.8°的空间分辨率插值到2° × 3°。

与 CarbonTracker 相同的是，本项目也使用来自 CMIP6 的，除CO<sub>2</sub>之外的气候变量数据作为辅助变量，进行CO<sub>2</sub>重建，具体的变量使用情况见表 3-1。由于 CMIP6 没有提供地势高度和地形数据，本项目并未使用这两种变量。

(c) GLOBALVIEWplus 数据集

GLOBALVIEWplus（GV+）<sup>[49]</sup>是由美国国家海洋和大气管理局（NOAA）的全球监测实验室(GML)维护的一个数据产品，GV+提供了全球范围内主要温室气体(如二氧化碳CO<sub>2</sub>、甲烷CH<sub>4</sub>等)的高质量观测数据。GV+的数据被广泛应用于气候研究、碳循环分析和大气模型验证，是地球科学领域研究的重要工具。

本项目使用的 GV+版本是 GV+ version 10.0 (September 26<sup>th</sup>, 2024)，涵盖了从 1957 年 3 月 21 日到 2024 年 1 月 1 日中，来自全球范围内共 96 个观测站点的CO<sub>2</sub>观测数据。本项目使用的 GV+站点分布情况见图 3-1。

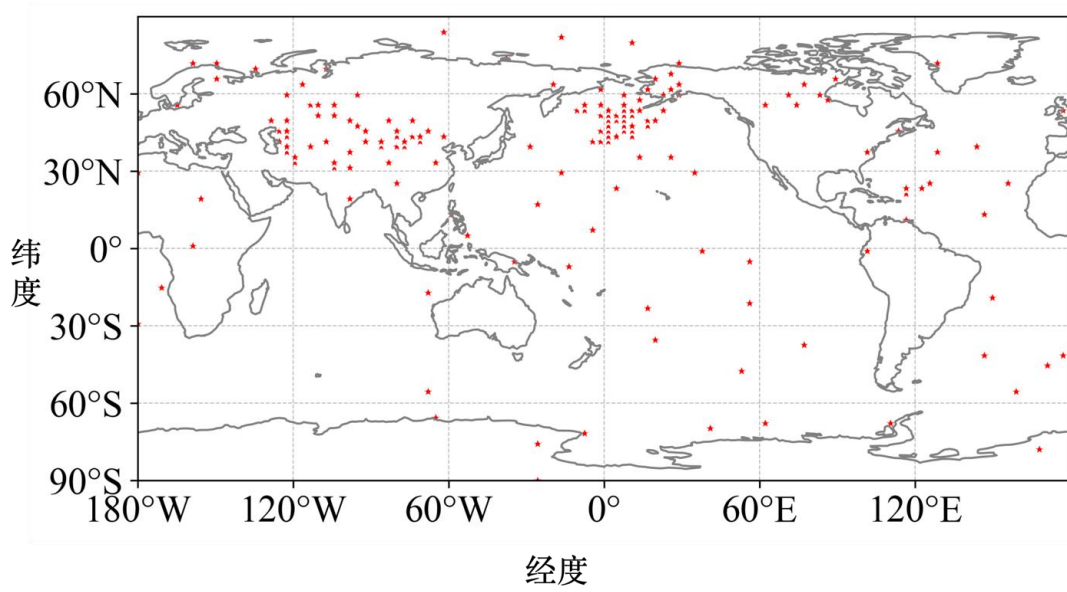


图 3-1 GV+ version 10.0 (September 26<sup>th</sup>, 2024)中的站点分布图，红色星形表示有站点观测数据。

### 3.1.2 算力与硬件支持可行性

算力可行性方面，模型训练与推理依赖的算力配置具有明确技术支撑：基础训练采用 4 张 NVIDIA RTX 3090 显卡（单卡 24GB 显存）组成的服务器，可支持 CO<sub>2</sub>-Net 模型（参数量约 3000 万）在 CarbonTracker 和 CMIP6 数据集上的训练需求，单轮训练周期控制在 5-6 天，与模型复杂度及数据规模相匹配。实验验证阶段，实验室现有 8 张 RTX 3090 显卡的算力集群可支持 10 组模型变体及 15 组超参数配置的并行消融实验，无需依赖超算资源。推理部署时，2 张 RTX 3090 显卡可实现 1°×1° 分辨率全球数据的小时级处理，满足海洋动态监测的实时性要求。日常模型调试与小规模数据处理仅需单卡工作站，硬件资源利用效率可控。

在硬件可行性方面，计算设备配置聚焦实用化需求：2 台工作站（单卡 RTX 3090、32GB 内存、1TB SSD）分别用于模型开发与备份，保障日常代码调试与数据预处理；1 台 4 卡服务器（128GB 内存、2TB SSD）作为核心训练设备，支持并行计算。存储系统采用 8TB 容量服务器（RAID 5 冗余），可容纳原始数据（约 550GB）及预处理特征（约 1.5TB），后续可通过外接硬盘扩展至 16TB，满足 3-5 年数据增长需求。实验验证设备通过标准化采购渠道配置，包括便携式 CO<sub>2</sub>检测仪（精度 ±0.5 μmol/mol）与消费级无人机，成本可控且满足基础验证需求。

综上，现有算力与硬件配置可充分支撑模型训练、数据存储及实验验证全流程，资源投入与技术需求匹配，确保项目稳步推进。

## 3.2 技术细节

CO<sub>2</sub>重建面对的主要问题是，CO<sub>2</sub>的分布具有很强的时空关联性，周期变化剧烈并且CO<sub>2</sub>观测数据十分稀疏。传统基于数值模型的方法，虽然具有较强的物理解释性，但是对碳源碳汇等难以获得的先验数据依赖性强，而且计算较为复杂，难以应对大规模数据。相对而言，深度学习凭借着强大的非线性表征能力，在天气预测领域应用广泛，提高了预测的准确度，然而在大气成分重建任务，如CO<sub>2</sub>重建任务中，相关研究很少。针对上述挑战，本章提出了一种基于对流-扩散方程建立的全球CO<sub>2</sub>重建模型：CO<sub>2</sub>-Net。本章将首先给出CO<sub>2</sub>重建任务的数学形式定义，然后对CO<sub>2</sub>-Net的结构进行详细的介绍，包括时空模型分解、时空连接模块、基于风场的周期性嵌入以及风场重建损失函数。

### 3.2.1 模型总体结构

#### (1) 符号表示

假设 $S^2$ 是三维几何空间 $\mathbb{R}^3$ 中的一个单位球面，其通过纬度-经度网格 $(x, y) \in \Omega = [-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}] \times [-\pi, \pi]$ 进行参数化。对于一个随时间变化的函数 $\varphi(x, y, t)$ ，本项目使用 $\dot{\varphi} = \frac{\partial \varphi}{\partial t}$ 表示它的时间导数。本项目中， $(x, y)$ 坐标系下球面 $S^2$ 上的梯度算子 $\nabla$ 的计算方法见公式(3-1)。

$$\nabla \varphi = \frac{\partial \varphi}{\partial x} \hat{e}_x + \frac{1}{\cos \theta} \frac{\partial \varphi}{\partial y} \hat{e}_y, \quad (3-1)$$

其中， $\hat{e}_x$ 和 $\hat{e}_y$ 分别表示 $x$ 和 $y$ 方向上的单位切向量。本项目将球面 $S^2$ 上的散度算子表示为 $\nabla \cdot$ ，拉普拉斯算子表示为 $\nabla^2$ 。

CO<sub>2</sub>重建旨在利用稀疏的CO<sub>2</sub>观测数据和完整的气候变量数据（如温度、湿度和风场等），重建出CO<sub>2</sub>的时空分布信息。本项目用 $\varphi$ 表示CO<sub>2</sub>浓度， $f$ 表示CO<sub>2</sub>观测数据， $w$ 表示风场数据， $\Phi_1, \dots, \Phi_K$ 表示其余气候变量数据，其中 $w$ 和 $\Phi_1, \dots, \Phi_K$ 在整个时空网格 $\Omega \times [0, T]$ 上都有数据，而CO<sub>2</sub>的观测数据 $f$ 只在有限集合 $Z \times [0, T]$ 上有数据，其中 $Z \subset \Omega$ 。

#### (2) 对流-扩散方程

对流-扩散方程（Advection-Diffusion Equation）<sup>[50]</sup>描述了在风场 $w(x, y, t)$ 的驱动下，CO<sub>2</sub>浓度 $\varphi(x, y, t)$ 和辅助变量 $\Phi_1, \dots, \Phi_K$ 在大气中的对流和扩散过程，捕捉了气候变量在大气中的对流、扩散和外部源之间的相互作用。对流-扩散方程的具体形式如公式(3-2)所示。

$$\dot{\varphi} + w \cdot \nabla \varphi = C \nabla^2 \varphi + s, \quad (3-2)$$

其中， $C$ 是扩散系数， $w \cdot \nabla \varphi$ 称作对流项， $C \nabla^2 \varphi$ 称作扩散项， $s$ 表示外部源（即辐射、排放或化学变化引起的浓度增加或者减少）。

本项目使用一个线性微分算子 $L_C[\varphi]$ 表示对流-扩散方程中的对流和扩散动力，其具体形

式见公式(3-3)。

$$L_C[\varphi] = \dot{\varphi} + w \cdot \nabla \varphi - C \nabla^2 \varphi. \quad (3-3)$$

那么 $\text{CO}_2$ 浓度 $\varphi$ 和辅助变量 $\Phi_k$ 对应的对流-扩散方程可以表示为： $L_D[\varphi] = s(x, y, t)$ 和 $L_{D_k}[\Phi_k] = s_k(x, y, t)$ ，其中 $D$ 和 $D_k$ 分别表示 $\varphi$ 和 $\Phi_k$ 的扩散系数， $s(x, y, t)$ 和 $s_k(x, y, t)$ 分别表示 $\varphi$ 和 $\Phi_k$ 的外部源。

### (3) 问题定义

基于以上的符号表示，本项目将从稀疏的 $\text{CO}_2$ 观测数据重建全球 $\text{CO}_2$ 的任务定义为求解公式(3-4)中受约束的偏微分方程。

$$L_D[\varphi] = s, \quad s.t. \quad \varphi|_{Z \times [0, T]} = f|_{Z \times [0, T]} \quad (3-4)$$

其中， $\varphi|_{Z \times [0, T]} = f|_{Z \times [0, T]}$ 的约束保证了在观测站点位置重建结果与观测数据的一致性。

由于直接求解公式(3-4)的难度较大，本项目将其转换成一个优化问题，即最小化重建 $\text{CO}_2$ 浓度与观测 $\text{CO}_2$ 浓度之间的误差，具体形式见公式(3-5)。

$$\min_F \mathcal{L}_{\text{supv.}}(F) \triangleq \|\varphi - F[w, \Phi, f]\|_2^2 \quad (3-5)$$

其中， $F[w, \Phi, f]$ 是本项目提出的重建模型 $\text{CO}_2\text{-Net}$ （具体结构如图 3-1），它以风场 $w$ ，辅助变量 $\Phi$ 和观测数据 $f$ 为输入，输出 $\text{CO}_2$ 重建结果， $\|\cdot\|_2^2$ 表示在时空网格 $\Omega \times [0, T]$ 上的 $L^2$ 范数。

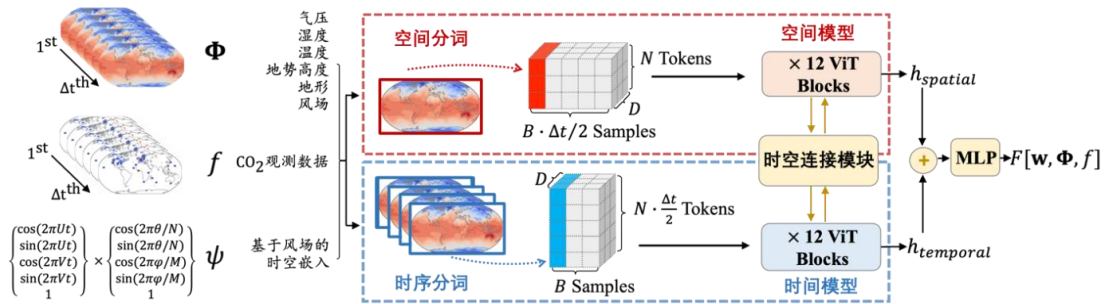


图 3-2  $\text{CO}_2\text{-Net}$  模型结构图。模型输入数据包括气压、温度等辅助变量， $\text{CO}_2$ 观测数据以及时空嵌入，模型分为空间模型和时间模型两部分，并通过时空连接模块进行信息交互，最终分别输出空间特征 $h_{\text{spatial}}$ 与时间特征 $h_{\text{temporal}}$ ，通过特征融合得到最终输出结果。

### 3.3.2 时空模型分解

通过对公式(3-4)的解 $\varphi$ 进行分析，本项目发现，这个受约束的偏微分方程的解 $\varphi$ ，可以被分解成一个时不变的特解 $\varphi_{\text{part}}$ 和一个时变的通解 $\varphi_{\text{homo}}$ 。具体而言，本项目假设在一个极端的时间间隔 $[\tau, \tau + \Delta t]$ 内，存在一个特解 $\varphi_{\text{part}}$ 满足 $L_D[\varphi_{\text{part}}] = s$ ，而通解 $\varphi_{\text{homo}} = f - \varphi_{\text{part}}$

满足  $L_D[\varphi_{\text{homo}}] = 0$ ，而且当外部源  $s$  和扩散系数  $D$  在  $[\tau, \tau + \Delta t]$  内是常量时，特解  $\varphi_{\text{part}}$  是时不变的，并且仅依赖于初始时间  $\tau$ 。

根据这一结论，本项目采用时空模型分解的方法，构建了一个包含空间模型和时间模型的重建模型（见图 3-2），并且空间模型用于建模时不变的特解  $\varphi_{\text{part}}$ ，时间模型用于建模时变的通解  $\varphi_{\text{homo}}$ ，最终引入一个多层感知机（Multi-Layer Perceptron, MLP）用于融合来自时空模型的特征，进行最终的重建。接下来，本项目详细讲解空间模型和时间模型的具体结构。

### （1）空间模型

空间模型主要负责建模时不变的特解  $\varphi_{\text{part}}$ ，即从输入序列的单帧  $\text{CO}_2$  浓度观测值和辅助变量数据中学习关键的空间信息，从而增强模型对  $\text{CO}_2$  空间分布的学习能力。

空间模型的输入数据  $X_s \in \mathbb{R}^{B \times (K+1+E) \times T \times H \times W}$  是一个五维的张量，其中  $B$  表示批大小， $K+1+E$  表示通道数（包括了 1 个  $\text{CO}_2$  通道， $K$  个辅助变量通道以及  $E$  个额外的时空嵌入通道）， $T$  表示输入序列的长度， $H \times W$  表示空间维度。空间模型仅处理输入序列中的偶数帧，并且将输入序列中的所有帧进行混合，减少时间维度上的冗余信息，专注于对单帧内的空间信息的学习。

空间模型主要包括两部分：空间分词器和  $L$  层视觉 Transformer (Vision Transformer, ViT)。其中，为了有效捕捉数据分布的空间信息，空间分词器将输入序列中的每一帧划分成不重叠的补丁（Patch），每个补丁的大小为  $p \times q$ ，因此每一帧都被划分成了  $N = HW/pq$  个补丁，并将这些补丁分别映射成高维向量（维度为  $D$ ），输出一个三维张量  $X'_s \in \mathbb{R}^{(B \cdot \frac{T}{2}) \times N \times D}$ 。接下来， $X'_s$  被输入到  $L$  层 ViT 中进行处理，来学习帧内的空间信息。ViT 主要通过自注意力机制计算各个区域之间的相关性，捕捉  $\text{CO}_2$  和辅助变量的全局模式。经过以上操作，空间模型输出一个四维的空间特征向量  $h_{\text{spatial}} \in \mathbb{R}^{B \times \frac{T}{2} \times N \times D}$ ，这个特征向量编码了  $\text{CO}_2$  的空间分布特征，为后续的时空融合的操作提供空间信息。

空间模型通过将输入序列的所有帧混合在一起的方式，减少了数据在时序上的信息，因此空间模型可以专注于对空间信息的学习，通过 ViT 的自注意力机制，建模  $\text{CO}_2$  和辅助变量的全局空间相关性。除此之外，空间分词器对每一帧划分补丁的操作，使空间模型可以适应不同的空间分辨率，提高了模型的灵活性。

### （2）时间模型

时间模型主要负责建模时变的通解  $\varphi_{\text{homo}}$ ，即从输入序列内各帧之间  $\text{CO}_2$  浓度观测值和

辅助变量数据中学习关键的时序信息，从而增强模型对CO<sub>2</sub>时间分布的学习能力。

时间模型的输入数据  $X_t \in \mathbb{R}^{B \times (K+1+E) \times T \times H \times W}$  是一个五维的张量，与空间模型的输入  $X_t$  相同。与空间模型不同的是，时间模型不会对输入序列进行混合的操作，保持了数据的时序特征，专注于对帧之间的时序信息的学习。

时间模型也包括两部分：时间分词器和  $L$  层 ViT。其中，时间分词器将输入序列划分成不重叠的管道（Tubelet），保留了相邻帧之间的局部相关性，每个管道的大小为  $2 \times p \times q$ ，一共构成了  $T/2 \cdot N$  个管道，并将这些管道分别映射成高维向量（维度为  $D$ ），输出一个三维张量  $X'_t \in \mathbb{R}^{B \times (\frac{T}{2}N) \times D}$ 。接下来， $X'_t$  被输入到  $L$  层 ViT 中进行处理，来学习帧之间的时序信息。ViT 主要通过自注意力机制计算不同帧之间的时序相关性，捕捉CO<sub>2</sub>和辅助变量帧与帧之间的长程依赖信息。经过以上操作，时间模型输出一个四维的时序特征向量  $h_{\text{temporal}} \in \mathbb{R}^{B \times \frac{T}{2} \times N \times D}$ ，这个特征向量编码了CO<sub>2</sub>的时序特征，为后续的时空融合的操作提供时序信息。

时间模型通过 ViT 的自注意力机制，学习CO<sub>2</sub>和辅助变量的长程时序相关性。时间分词器划分管道的操作，一方面，保留了相邻帧之间的局部相关性，使得模型能够兼顾长程时序相关性和短程时序相关性，另一方面，使模型能够适应不同序列长度的数据，提高了模型的灵活性。

### （3）时空特征融合

空间模型和时间模型分别提取了输入数据的空间信息和时序信息，最终生成了各自的特征向量  $h_{\text{spatial}}$  和  $h_{\text{temporal}}$ 。为了充分整合CO<sub>2</sub>的时空特征，本项目对  $h_{\text{spatial}}$  和  $h_{\text{temporal}}$  进行融合，得到一个统一的时空特征向量。

具体而言，本项目将空间特征向量  $h_{\text{spatial}}$  和时序特征向量  $h_{\text{temporal}}$  进行逐元素相加，得到融合的时空特征向量  $h_{\text{fusion}} = h_{\text{spatial}} + h_{\text{temporal}}$ 。逐元素相加的方式可以直接整合空间信息和时间信息，保持了数据的结构完整性，同时确保模型有效地捕捉CO<sub>2</sub>浓度的时空特征。

在模型的最后，本项目采用了一个三层的 MLP，对融合后的时空特征向量  $h_{\text{fusion}}$  进一步变换，将特征向量从  $D$  维映射回  $H \times W$  的空间维度，从而得到最后的CO<sub>2</sub>重建结果  $\hat{\phi}$ 。

### 3.2.3 逐层时空连接模块

时空模型分解通过将模型划分成空间模型和时间模型两部分，分别学习CO<sub>2</sub>浓度的空间分布特征和时序变换特征，在模型的最后再将时空特征进行融合，重建CO<sub>2</sub>浓度。这一模型结构虽然解耦了空间特征和时间特征的学习过程，并通过时空特征融合来增强模型对输入数据的理解能力，但是有一个明显的局限性，即空间模型与时间模型进行的信息交换不足，只



在模型的最后一层进行融合。这一局限性可能导致，空间模型能够理解静态的空间分布特征，却因为缺少时序变换特征，而不能正确重建CO<sub>2</sub>浓度的变化趋势；时间模型能够理解动态的时序变换特征，却因为缺少空间分布特征，而不能正确重建CO<sub>2</sub>浓度在全球的分布情况。

为了解决这一问题，本项目引入了基于时空交叉注意力机制的逐层时空连接模块，加强空间模型和时间模型之间的信息交换频率，使模型能够兼顾数据的空间分布特征和时序变换特征，从而进一步加强模型对于CO<sub>2</sub>浓度分布的时空理解能力。接下来，本项目将详细解释逐层时空连接模块中的关键部分——时空交叉注意力机制。

注意力机制<sup>[51]</sup>是深度学习模型中，模拟人类认知聚焦能力的方式，它通过动态计算权重分配，使得模型在处理序列数据时，能够自动关注序列中的关键数据。注意力机制主要通过处理查询（Query, Q），键（Key, K）和值（Value, V）三元组，计算序列的注意力分数，分数越高说明在序列中的受关注程度应该越高。具体而言，注意力机制首先计算 Q 和 K 的相似度作为注意力权重，再加权聚合 V，输出注意力分数。Transformer<sup>[52]</sup>提出完全基于注意力机制的模型架构，在机器翻译等序列转录任务上都取得了很好的效果提升，并将注意力机制扩展到了多头自注意力和多头交叉注意力，成为了现代自然语言处理的基石。

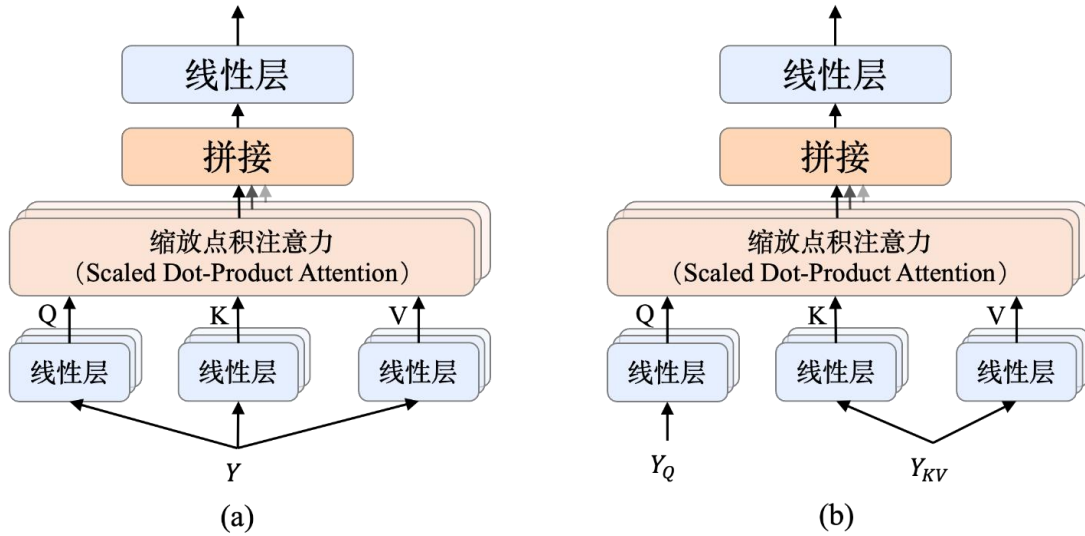


图 3-3 多头自注意力机制和多头交叉注意力机制的结构图。(a) 多头自注意力机制，Q, K, V 都是来自输入 Y；(b) 多头交叉注意力机制，Q 来自输入 Y<sub>Q</sub>，KV 来自输入 Y<sub>KV</sub>。

**多头自注意力机制 (Multi-Head Self-Attention Mechanism, MHSA, 见图 3-3(a))** 中的 Q, K 和 V 都来自相同的输入，具体而言，对于一个输入  $Y \in \mathbb{R}^d$ ，多头自注意力机制的计算方法如公式(3-6)：

$$\text{MHSA}(Y) = \text{Softmax} \left( \frac{(YW_Q)(YW_K)^T}{\sqrt{d}} \right) (YW_V), \quad (3-6)$$

其中,  $W_Q$ ,  $W_K$ 和 $W_V$ 是 Q, K 和 V 对应的线性变换矩阵, 通过除以 $\sqrt{d}$ 进行缩放可以减缓因维度 $d$ 增加导致的权重分布不均匀问题和梯度消失问题。

**多头交叉注意力机制 (Multi-Head Cross-Attention Mechanism, MHCA, 见图 3-3(b))** 中 Q 和 KV 分别来自不同的输入, 具体而言, 对于输入 $Y_Q \in \mathbb{R}^d$ ,  $Y_{KV} \in \mathbb{R}^d$ , 多头交叉注意力机制的计算方法如公式(3-7):

$$\text{MHCA}(Y_Q, Y_{KV}) = \text{Softmax}\left(\frac{(Y_Q W_Q)(Y_{KV} W_K)^T}{\sqrt{d}}\right) (Y_{KV} W_V), \quad (3-7)$$

其中,  $W_Q$ ,  $W_K$ 和 $W_V$ 是 Q, K 和 V 对应的线性变换矩阵。

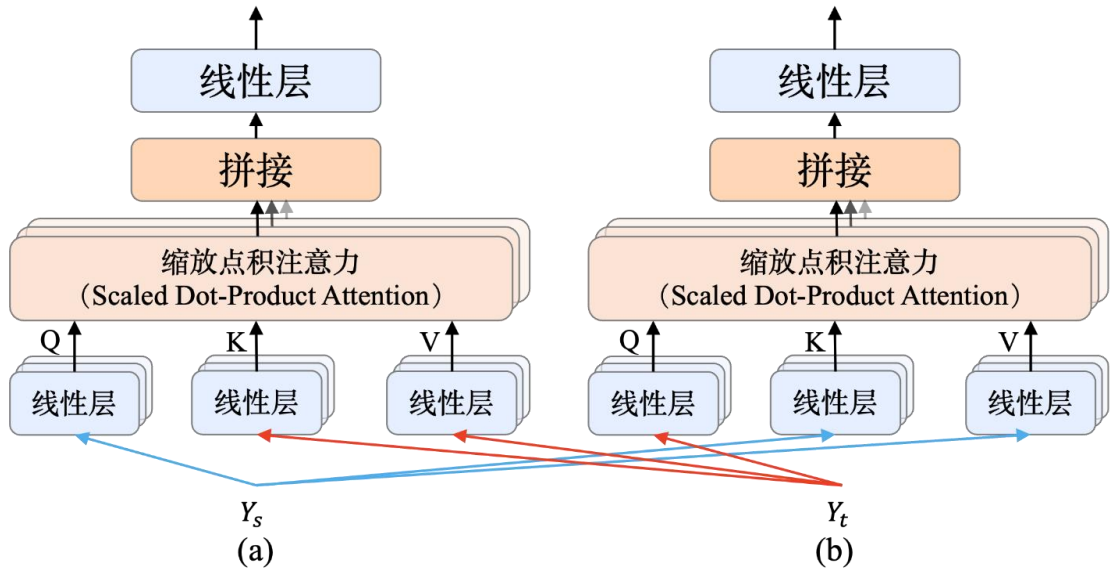


图 3-4 多头时空交叉注意力机制的结构图。(a) 时间到空间交叉注意力机制, Q 来自空间模型的输出 $Y_s$ , K, V 来自时间模型的输出 $Y_t$ ; (b) 空间到时间交叉注意力机制, Q 来自时间模型的输出 $Y_t$ , K, V 来自空间模型的输出 $Y_s$ 。

**多头时空交叉注意力机制<sup>[25]</sup> (Multi-Head Cross-Attention in Space and Time Mechanism, CAST, 见图 3-4)** 基于多头交叉注意力机制, 包括时间到空间交叉注意力机制 (Temporal to Spatial Cross-Attention, T2S) 和空间到时间交叉注意力机制 (Spatial to Temporal Cross-Attention, S2T) 两部分。

假设来自空间模型和时间模型的特征向量分别为 $Y_s \in \mathbb{R}^d$ 和 $Y_t \in \mathbb{R}^d$ , 那么时间到空间交叉注意力机制的计算方法如公式(3-8):

$$\text{T2S}(Y_s, Y_t) = \text{MHCA}(Y_s, Y_t), \quad (3-8)$$

其中, 查询 Q 来自空间模型的特征, 键值对 K 和 V 来自时间模型的特征。

空间到时间交叉注意力机制的计算方法如公式(3-9):

$$S2T(Y_t, Y_s) = MHCA(Y_t, Y_s), \quad (3-9)$$

其中，查询  $Q$  来自时间模型的特征，键值对  $K$  和  $V$  来自空间模型的特征。

通过 T2S 和 S2T 注意力，空间模型可以学习到数据的时序变化特征，时间模型也可以学习到数据的空间分布特征，从而增强了模型对于  $CO_2$  分布时空特征的理解能力，实现更准确的重建。

### 3.2.4 基于风场的时空周期性嵌入

先前的研究<sup>[29][30]</sup>表明在处理气象数据时，通过引入时空嵌入作为额外的输入通道，可以很好地捕捉数据中空间上和时间上的周期性，提升天气预测的准确性。然而，在这些研究提出的时空嵌入方法里，时间嵌入的形式如公式(3-10)。

$$\psi'(t) = \left\{ \sin 2\pi t, \cos 2\pi t, \sin \frac{2\pi t}{365}, \cos \frac{2\pi t}{365} \right\}, \quad (3-10)$$

这只考虑了时间戳信息  $t$ ，但实际上，根据对流-扩散方程， $CO_2$  在全球的时空分布是受到经向和纬向风速影响的，因此本项目认为，单独考虑时间戳忽略了风速对于  $CO_2$  浓度分布的影响，不能正确表示  $CO_2$  数据在时间上的周期性变化特征。因此，本项目参考引入时空嵌入的思路，提出一种基于风场的时空周期性嵌入，改善其他方法中没有考虑风速影响的问题。

具体而言，在本项目提出的基于风场的时空周期性嵌入中，时间嵌入的形式如公式(3-11)。

$$\psi(t) = \{\cos(2\pi Ut), \sin(2\pi Ut), \cos(2\pi Vt), \sin(2\pi Vt), 1\}, \quad (3-11)$$

其中， $U(x, y, t)$  表示沿纬度的风的速度， $V(x, y, t)$  表示沿经度的风的速度。 $\psi(t)$  在表示时间周期性特征时，通过引入经纬向的风速，能够更好地表示  $CO_2$  浓度分布的变化过程。

对于空间嵌入，我们使用公式(3-12)进行表示。

$$\psi(x, y) = \left\{ \cos \frac{2\pi x}{N}, \sin \frac{2\pi x}{N}, 1 \right\} \times \left\{ \cos \frac{2\pi y}{M}, \sin \frac{2\pi y}{M}, 1 \right\}, \quad (3-12)$$

对  $CO_2$  数据的空间周期性特征进行表示，其中  $N$  和  $M$  分别表示经纬度网格中，纬度和经度的网格个数。

最后，本项目通过笛卡尔积的方法结合时间嵌入  $\psi(t)$  和空间嵌入  $\psi(x, y)$ ，得到联合时空嵌入，其具体形式如公式(3-13)

$$\Psi(x, y, t) = \psi(x, y) \times \psi(t). \quad (3-13)$$

与先前通过时空嵌入来表示数据周期性特征的方法不同的是，本项目提出的基于风场的时空嵌入中，考虑了风场对于  $CO_2$  浓度分布的影响，引入了经纬向的风速，能够更加准确地表示  $CO_2$  数据中的周期性变化特征。

传统的有监督学习的任务是通过最小化监督损失函数 $\mathcal{L}_{\text{supv.}}$ ，使得模型输出尽可能拟合真实标签。在有完整输入数据的任务上，有监督学习可以表现出很好的效果，比如图像分类<sup>[53]</sup>和动作识别等任务<sup>[54]</sup>，但这不能直接适用于 $\text{CO}_2$ 重建任务中，原因是 $\text{CO}_2$ 的站点观测数据十分稀疏，导致有监督学习的效果有限。

在自然语言处理和计算机视觉领域，数据的稀疏性一般通过自监督学习的方法进行解决，代表性工作包括 BERT<sup>[38]</sup>，MAE<sup>[39]</sup>和 VideoMAE<sup>[40]</sup>。这些方法通过让模型从模型中间层的特征向量中重建出被遮掩的数据，不需要额外的数据标注工作。受到这些自监督学习方法的启发，本项目设计和实现了一个自监督学习任务，利用模型输出的特征向量，重建输入数据中的风场。

在设计自监督学习任务时，关键的挑战是：如何选择合适的特征向量，以及如何设计合理的自监督学习损失函数<sup>[55][56]</sup>。由于自监督学习不直接依赖于明确的真实标签进行学习，模型需要依赖自身结构以及从数据中学习到的特征进行学习，因此，需要选择有足够强表征能力的特征向量，才能有效提升 $\text{CO}_2$ 重建效果。在本项目应对的场景和提出的模型结构下，这一挑战更加突出：一方面， $\text{CO}_2$ 重建的输入数据多，包括 $\text{CO}_2$ 观测数据以及各种辅助变量；另一方面，模型包括空间模型和时间模型两部分，二者提取的特征信息有所不同。

本项目发现，当公式(1)的解中时变的通解 $\varphi_{\text{homo}}$ 成立时，风场 $w$ 可以从时间模型输出的特征向量重建出来，这一发现为自监督学习损失函数设计提供了思路。具体而言，假设 $\varphi_{\text{homo}}: S^2 \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}$ 是一个具有非零梯度的光滑函数，并且满足 $L_D[\varphi_{\text{homo}}] = 0$ ，其中风场 $w$ 是 $S^2$ 上的非零的依赖于时间的光滑函数，则 $w$ 可以由 $\varphi_{\text{homo}}$ 唯一确定。

基于上述理论，本项目引入风场重建任务作为自监督目标，并设计了对应的风场重建损失函数 $\mathcal{L}_{\text{wind}}$ ，具体而言，本项目将来自时间模型的特征向量 $h_{\text{temporal}}$ 映射回风场 $w$ ，风场重建损失函数的具体形式如公式(3-14)所示：

$$\mathcal{L}_{\text{wind}} = \min_{\theta} \|w - g(h_{\text{temporal}}; \theta)\|_2^2, \quad (3-14)$$

其中， $w$ 为输入的经纬向风速组成的风场， $g(\cdot)$ 是一个风场重建模型， $\theta$ 是其参数， $\|\cdot\|_2^2$ 表示在 $\Omega \times [0, T]$ 上的 $L^2$ 范数。

最终，本项目将模型的半监督损失函数定义为风场重建损失函数 $\mathcal{L}_{\text{wind}}$ 和公式(2)中的有监督损失函数 $\mathcal{L}_{\text{supv.}}$ 的加权和，具体形式见公式(3-15)：

$$\mathcal{L}_{\text{semi-supv.}} = \mathcal{L}_{\text{supv.}} + \lambda \cdot \mathcal{L}_{\text{wind}}, \quad (3-15)$$

其中， $\lambda$ 是权重系数，用于平衡 $\mathcal{L}_{\text{wind}}$ 和 $\mathcal{L}_{\text{supv.}}$ 。

### 3.3 实验结果与分析

为了系统地评估CO<sub>2</sub>-Net 模型在全球CO<sub>2</sub>重建任务中的有效性，本章从多个维度对CO<sub>2</sub>-Net 的模型性能进行了全面评估。首先，本章将详细介绍实验设计内容，包括CO<sub>2</sub>-Net 进行对比的基准模型的选择，CarbonTracker 和 CMIP6 数据集的训练-验证-测试集划分方式，实验采用的评估指标，以及具体的实验内容。实验内容包括：（1）全球CO<sub>2</sub>重建，验证模型在大范围稀疏观测数据下的重建能力；（2）长期CO<sub>2</sub>重建，探讨模型重建的结果能否准确表示CO<sub>2</sub>的长期变化趋势（气候变暖背景下，CO<sub>2</sub>浓度逐年增加），验证重建结果的物理合理性；（3）局部地区短期CO<sub>2</sub>重建，分析模型捕捉局部和短期数据高频变化的能力；（4）针对CO<sub>2</sub>-Net 的结构消融实验和超参数配置消融实验，探究CO<sub>2</sub>-Net 中的主要组成部分的作用，并探讨CO<sub>2</sub>-Net 对于超参数配置的敏感性。

#### 3.3.1 实验设计

本项目主要将CO<sub>2</sub>-Net 与以下基于深度学习的重建方法进行了对比，包括：基于Transformer 结构的 Vision Transformer（ViT）模型<sup>[57]</sup>，SwinLSTM 模型<sup>[58]</sup>；基于生成对抗网络结构的 CycleGAN 模型<sup>[59]</sup>；基于隐式神经表示的 Senseiver 模型<sup>[36]</sup>。

本项目主要在 CarbonTracker 和 CMIP6 两个再分析数据集上对模型进行实验。本项目将两个数据集划分为训练集、验证集和测试集三部分，具体划分情况见表 3-2。本项目使用训练集对模型进行训练，同时在训练过程中使用验证集检验模型性能，避免发生模型过拟合或者欠拟合的情况，最后在测试集上对训练好的模型进行测试，计算评价指标。

表 3-2 CarbonTracker 和 CMIP6 数据集划分情况，单位为年。

数据集	训练集划分	验证集划分	测试集划分
CarbonTracker	[2002,2018]	{2001, 2019}	{2000,2020}
CMIP6	[1865,1999]	[1860,1864] ∪ [2000,2004]	[1850,1859] ∪ [2005,2014]

对于 CarbonTracker 数据集，本项目选用 2002-2018 年共 17 年的数据作为训练集，选择 2001 和 2019 年两年的数据作为验证集，选择 2000 和 2020 年两年的数据作为测试集；对于 CMIP6 数据集，本项目选用 1865-1999 年共 135 年的数据作为训练集，选择 1860-1864 年和 2000-2004 年共 10 年的数据作为验证集，选择 1850-1859 年和 2005-2014 年共 20 年的数据作为测试集。本项目没有按年份顺序对数据集进行验证集和测试集的划分，而是选择了一头一尾的数据进行组合，目的是验证模型能否捕捉CO<sub>2</sub>浓度的长期变化趋势。

本项目主要通过纬度加权均方根误差（Latitude-weighted Rooted Mean Square Error, RMSE）和异常相关系数（AnomalyCorrelationCoefficient, ACC）来量化模型性能。

**RMSE** 量化了CO<sub>2</sub>重建结果与CO<sub>2</sub>真实值之间的平均误差，并且通过纬度加权的方式考虑了地球球面曲度的问题。其计算公式见公式(3-16)：

$$\text{RMSE} = \frac{1}{N} \sum_{t=1}^N \sqrt{\frac{1}{HW} \sum_{h=1}^H \sum_{w=1}^W \alpha(h)(y_{thw} - u_{thw})^2}, \quad (3-16)$$

其中 $N$ ， $H$ ， $W$ 分别表示时间点数量，纬度网格个数和经度网格个数。 $y_{thw}$ 和 $u_{thw}$ 分别表示在时间点 $t$ ，坐标为 $(h, w)$ 的网格上的真实值和重建值。 $\alpha(h) = \cos(h) / (\frac{1}{H} \sum_{h'} \cos(h'))$ 表示纬度权重系数。RMSE 的单位为 $\mu\text{mol/mol}$ ，RMSE 越低模型性能越好。

**ACC** 量化了CO<sub>2</sub>重建结果与CO<sub>2</sub>真实值在异常模式上的一致性。其计算公式见公式(3-17)：

$$\text{ACC} = \frac{\sum_{t,h,w} \alpha(h) \tilde{y}_{thw} \tilde{u}_{thw}}{\sqrt{\sum_{t,h,w} \alpha(h) \tilde{y}_{thw}^2 \sum_{t,h,w} \alpha(h) \tilde{u}_{thw}^2}}, \quad (3-17)$$

其中 $\tilde{y}_{thw}$ 和 $\tilde{u}_{thw}$ 分别表示在时间点 $t$ ，坐标为 $(h, w)$ 的网格上的真实数据和重建结果的异常模式，异常模式是通过用真实值和重建值减去真实值的经验均值 $C$ 得到的，即 $\tilde{y}_{thw} = y_{thw} - C$ ， $\tilde{u}_{thw} = u_{thw} - C$ 。 $\alpha(h)$ 是与 RMSE 公式中相同的纬度权重系数。ACC 是无量纲量，ACC 越高模型性能越好。

本项目主要从四个角度进行实验，分析CO<sub>2</sub>-Net 重建CO<sub>2</sub>的效果，以及模型结构设计的优势。

（1）全球CO<sub>2</sub>重建效果。通过在 CarbonTracker 和 CMIP6 数据集上进行实验，分析 CO<sub>2</sub>-Net 和其他基准模型相比，能否提升CO<sub>2</sub>重建效果。

（2）长期CO<sub>2</sub>变化趋势捕捉能力。在 CarbonTracker 数据集上进行实验，验证CO<sub>2</sub>-Net 能否准确重建全球变暖导致的CO<sub>2</sub>浓度逐年升高的现象，分析其捕捉全球范围内，长期的CO<sub>2</sub>变化趋势的能力。

（3）短期CO<sub>2</sub>变化趋势捕捉能力。在 CarbonTracker 数据集上进行实验，通过三个具体案例分析CO<sub>2</sub>-Net 捕捉局部范围内，短期CO<sub>2</sub>变化趋势的能力。

（4）CO<sub>2</sub>-Net 的关键组件对模型性能提升的贡献以及CO<sub>2</sub>-Net 对于超参数的敏感性。通过在 CarbonTracker 和 CMIP6 再分析数据集上，从结构和超参数设置两个角度进行消融实验，验证各个组件带来的模型性能提升，以及超参数设置对于模型性能的影响。

### 3.3.2 全球二氧化碳重建结果

在这一节，本项目在 CarbonTracker 和 CMIP6 两个再分析数据集上对 CO<sub>2</sub>-Net 和其他重建方法进行实验，并计算了全球范围、海洋区域以及亚欧大陆区域上不同模型重建结果的 RMSE 和 ACC 值，所有结果见表 3-3。

表 3-3 CO<sub>2</sub>-Net 和其他基准模型的在全球范围、海洋区域和亚欧大陆上的 CO<sub>2</sub> 重建结果对比，评价指标为 RMSE 和 ACC。↓表示越低越好，↑表示越高越好，RMSE 的单位是 μmol/mol。最好的结果进行了加粗处理。

数据集	模型	全球		海洋		亚欧大陆	
		RMSE(↓)	ACC(↑)	RMSE(↓)	ACC(↑)	RMSE(↓)	ACC(↑)
CarbonTracker	Senseiver	6.39	0.43	4.74	0.28	9.70	0.50
	SwinLSTM	5.31	0.61	2.90	0.45	6.33	0.65
	CycleGAN	4.70	0.71	1.57	0.88	8.39	0.73
	ViT	5.42	0.50	2.27	0.72	9.43	0.63
	CO <sub>2</sub> -Net	<b>3.36</b>	<b>0.85</b>	<b>1.09</b>	<b>0.94</b>	<b>5.39</b>	<b>0.85</b>
CMIP6	Senseiver	36.47	0.59	31.94	0.79	40.52	0.43
	SwinLSTM	27.42	0.52	28.41	0.52	27.70	0.51
	CycleGAN	28.36	0.74	29.38	0.74	28.67	0.74
	ViT	18.18	0.49	18.86	0.49	18.38	0.49
	CO <sub>2</sub> -Net	<b>5.31</b>	<b>0.99</b>	<b>5.49</b>	<b>0.99</b>	<b>5.36</b>	<b>0.97</b>

首先，根据表 3-3，在全球范围内，CO<sub>2</sub>-Net 都取得了优于其他基准模型的 CO<sub>2</sub> 重建效果。在 CarbonTracker 数据集上，重建效果最好的基准模型是 CycleGAN，取得了 4.70 μmol/mol 的 RMSE 值和 0.71 的 ACC 值，而 CO<sub>2</sub>-Net 取得了 3.36 μmol/mol 的 RMSE 值，相较于 CycleGAN 减少了约 28.5%，以及 0.85 的 ACC 值，相较于 CycleGAN 增加了约 10.4%；在 CMIP6 数据集上，重建效果最好的基准模型是 ViT，取得了 18.18 μmol/mol 的 RMSE 值和 0.49 的 ACC 值，而 CO<sub>2</sub>-Net 取得了 5.31 μmol/mol 的 RMSE 值，相较于 ViT 减少了约 70.8%，以及 0.99 的 ACC 值，相较于 ViT 增加了 102%，大幅提高了 CO<sub>2</sub> 的重建精度。这一结果表明 CO<sub>2</sub>-Net 的重建效果优于其他基准模型，验证了 CO<sub>2</sub>-Net 的带来的 CO<sub>2</sub> 重建精度提升。

其次，本项目发现，不光在全球范围内，在海洋和亚欧大陆等局部区域上，CO<sub>2</sub>-Net 也取得了最好的 CO<sub>2</sub> 重建效果，例如在 CarbonTracker 数据集上，在海洋区域上，CO<sub>2</sub>-Net

取得了  $1.09\mu\text{mol/mol}$  的 RMSE 值和 0.94 的 ACC 值，而在亚欧大陆区域上，CO<sub>2</sub>-Net 取得了  $5.39\mu\text{mol/mol}$  的 RMSE 值和 0.85 的 ACC 值，都远远超过了其他基准模型。在 CMIP6 数据集上，本项目也观察到了类似的现象，在海洋区域和亚欧大陆区域，CO<sub>2</sub>-Net 的 RMSE 和 ACC 值分别是  $5.49\mu\text{mol/mol}$ , 0.99 和  $5.36\mu\text{mol/mol}$ , 0.97。这一结果表明 CO<sub>2</sub>-Net 既能很好的重建全球范围内的 CO<sub>2</sub> 浓度，在局部地区上也能展现出优异的重建精度。

根据表 4-2 的数据，本项目还发现在 CMIP6 数据集上，CO<sub>2</sub>-Net 相较于其他基准模型的性能提升比在 CarbonTracker 数据集上要更加明显。本项目认为这种差异很可能来源于 CMIP6 和 CarbonTracker 数据集本身的差异，CMIP6 数据集提供了更长时间跨度（165 年）以及更粗糙的时间分辨率（月平均数据）的数据，而 CarbonTracker 数据集提供了更短时间跨度（21 年）以及更精细的时间分辨率（间隔 3 小时采样数据）的数据，所以来自 CMIP6 数据集的数据分布具有更大的方差，增加了模型学习的难度。

### 3.3.3 长短期二氧化碳重建结果

在这一节，本项目使用 CarbonTracker 数据集进行实验，对一件长期全球 CO<sub>2</sub> 浓度变化事件和三件短期区域性 CO<sub>2</sub> 浓度变化事件进行案例分析，比较 CO<sub>2</sub>-Net 和 ViT 建模 CO<sub>2</sub> 浓度变化过程的效果，从而验证 CO<sub>2</sub>-Net 模型捕捉 CO<sub>2</sub> 浓度时序变化趋势的能力。

#### （1）长期二氧化碳重建结果

在全球变暖背景下，CO<sub>2</sub> 浓度变化呈现逐年上升的趋势，本项目使用 CarbonTracker 数据集上对 CO<sub>2</sub>-Net 和 ViT 模型进行测试，并可视化两个模型在 2000 年和 2020 年的重建结果，对比分析 CO<sub>2</sub>-Net 和 ViT 捕捉长期 CO<sub>2</sub> 浓度变化趋势的能力。



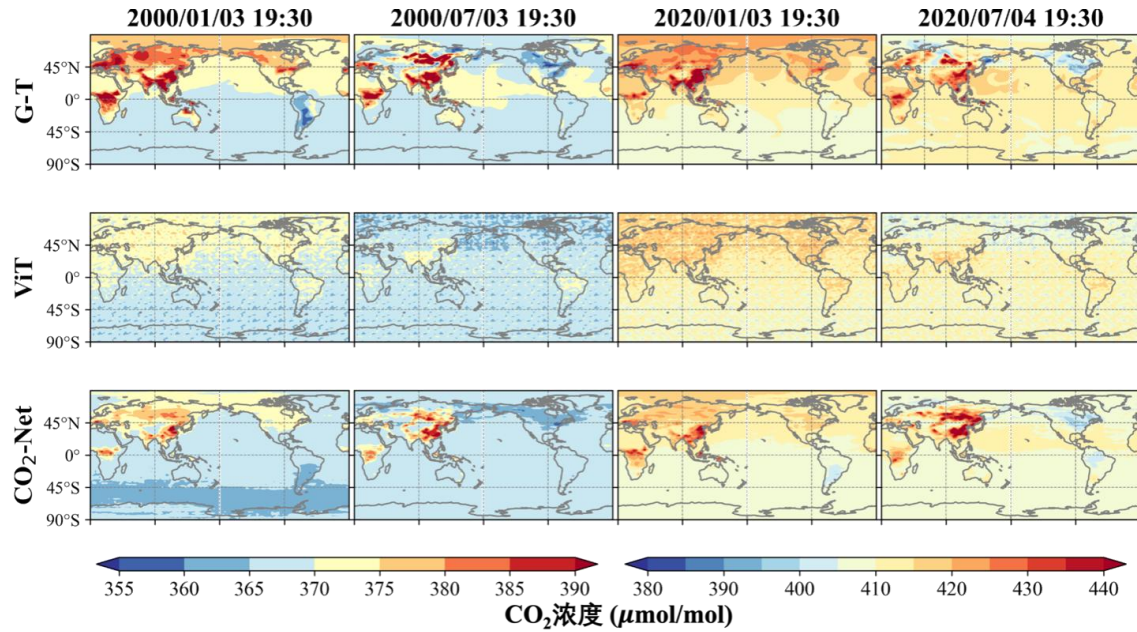


图 3-5 CO<sub>2</sub>-Net 和 ViT 在 CarbonTracker 数据集上重建的 2000 年及 2020 年 CO<sub>2</sub> 浓度与真实值的对比。

图 3-5 展示了 CO<sub>2</sub>-Net 和 ViT 重建的 CO<sub>2</sub> 浓度与 CO<sub>2</sub> 浓度真实值 (G-T) 的可视化结果。在 2000 年 1 月和 2000 年 7 月这段时间里, 全球 CO<sub>2</sub> 浓度范围大约处在 355~390 μmol/mol 之间, 而到了 2020 年 1 月和 2020 年 7 月, 全球 CO<sub>2</sub> 浓度增长到了约 380~440 μmol/mol 的范围内, 这一浓度范围的变化体现了这 21 年间在全球变暖影响下, 大气中温室气体浓度含量逐年上升的趋势。可以发现, CO<sub>2</sub>-Net 和 ViT 重建的这两个时间段内的 CO<sub>2</sub> 浓度都落在了上述浓度范围内, 说明两个模型都可以重建出气候变暖导致的 CO<sub>2</sub> 浓度上升的现象。

然而, 在局部地区重建细节上, CO<sub>2</sub>-Net 达到了比 ViT 更好的重建效果。具体而言, 在东南亚地区, CO<sub>2</sub> 浓度常年处于全球最高水平, 在 2000 年 7 月, 该地区的 CO<sub>2</sub> 浓度范围为 380~390 μmol/mol, 在 2020 年 7 月, 该地区的 CO<sub>2</sub> 浓度范围为 420~440 μmol/mol, 从图中可以看出, CO<sub>2</sub>-Net 重建出的该地区 CO<sub>2</sub> 浓度更接近真实值, 说明重建更准确, 然而 ViT 重建结果中, 该地区的 CO<sub>2</sub> 浓度水平明显低于真实值, 进一步突出了 CO<sub>2</sub>-Net 的效果优异; 在中非地区, 在 2000 年和 2020 年, 该地区的 CO<sub>2</sub> 浓度都处于全球最高水平, CO<sub>2</sub>-Net 在中非地区重建结果虽然与真实值有一定的差异, 但仍然可以体现出中非地区 CO<sub>2</sub> 浓度比其他地区高的相对特征, 而 ViT 是没有捕捉到这种特征的; 在北美洲地区, 2000 年 7 月和 2020 年 7 月, 该地区的 CO<sub>2</sub> 浓度范围分别是 355~370 μmol/mol 和 395~410 μmol/mol, 是比较低的 CO<sub>2</sub> 浓度水平, 从图中可以看出, CO<sub>2</sub>-Net 和 ViT 都能够成功捕捉这种特征, 但是 ViT 的重建结果和真实值相比, 误差比 CO<sub>2</sub>-Net 更大。

通过以上对比，本项目发现CO<sub>2</sub>-Net 能够准确地捕捉长期的CO<sub>2</sub>浓度变化趋势，比如全球变暖，CO<sub>2</sub>浓度逐年上升。除此之外，在局部地区的重建细节上，CO<sub>2</sub>-Net 重建效果也比基准模型 ViT 更好，能够重建出真实CO<sub>2</sub>浓度的空间分布特征。

## (2) 短期二氧化碳重建结果

一些短时间的突发事件，如森林野火、山火以及季节性碳吸收，会引起CO<sub>2</sub>浓度在短时间内的剧烈变化，能否准确重建这种剧烈变化，是CO<sub>2</sub>重建任务中的一大挑战。因此，在这一节，本项目以（1）**2019 年 8 月亚马逊雨林野火**、（2）**2020 年 10 月加利福尼亚州山火**以及（3）**2020 年 6 月西伯利亚森林的季节性碳吸收**为案例，对比分析了CO<sub>2</sub>-Net 和 ViT 重建短期CO<sub>2</sub>浓度剧烈变化趋势的能力。短期重建案例选取的区域范围见图 3-6。

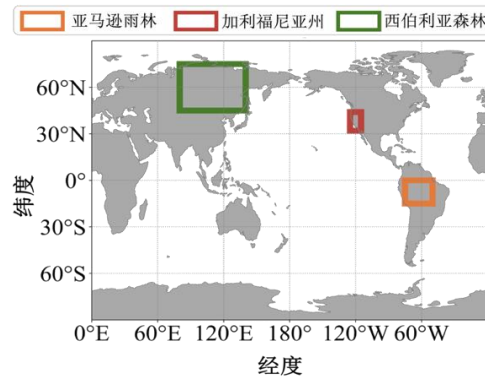


图 3-6 短期重建案例分析所选地区，包括亚马逊雨林、加利福尼亚州以及西伯利亚森林地区。

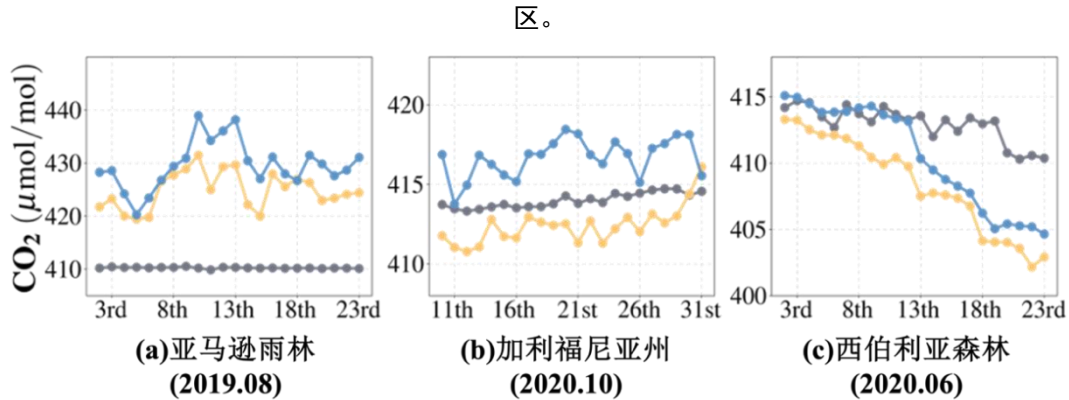


图 3-7 CO<sub>2</sub>-Net 重建在亚马逊雨林、加利福尼亚州和西伯利亚森林地区内短期CO<sub>2</sub>浓度变化趋势的结果。

（a）**2019 年 8 月亚马逊雨林野火**。2019 年旱季，地处热带的亚马逊雨林发生了数千起独立野火，波及了周边国家如玻利维亚、巴拉圭等。本项目以 2019 年 8 月在亚马逊雨林发生的野火为例，可视化展示了CO<sub>2</sub>-Net 和 ViT 的CO<sub>2</sub>浓度重建结果（图 3-7 (a)）。从图中可以看出，在 8 月 5 日至 8 月 10 日这五天时间里，由于野火燃烧产生了大量的CO<sub>2</sub>，亚马

逊雨林地带的CO<sub>2</sub>浓度迅速从 420 $\mu$ mol/mol 上升到 440 $\mu$ mol/mol。从模型重建结果来看，CO<sub>2</sub>-Net 重建的CO<sub>2</sub>浓度曲线非常贴近CO<sub>2</sub>浓度真实值的变化曲线，从 420 $\mu$ mol/mol 上升到 431 $\mu$ mol/mol，说明CO<sub>2</sub>-Net 精确地捕捉了这段时间内CO<sub>2</sub>浓度迅速上升的趋势，只是在绝对数值上有微小的差异；而 ViT 在这段时间重建的CO<sub>2</sub>浓度基本稳定在 410 $\mu$ mol/mol，不仅和真实值的绝对数值差异很大，而且也没有捕捉到CO<sub>2</sub>浓度的变化趋势。

(b) **2020 年 10 月加利福尼亚州山火。**在加利福尼亚州，8 月到 11 月，炎热、干燥的风最为频繁，是山火、野火的高发时间段。本项目以 2020 年 10 月在加利福尼亚州发生的山火为例，可视化展示了CO<sub>2</sub>-Net 和 ViT 的CO<sub>2</sub>浓度重建结果（图 3-7 (b)）。根据折线图展示的结果，在 10 月 11 日到 10 月 30 日这段时间内，加利福尼亚州的CO<sub>2</sub>浓度波动频繁，但整体呈现上升趋势，CO<sub>2</sub>浓度峰值达到了约 418 $\mu$ mol/mol。CO<sub>2</sub>-Net 和 ViT 模型的重建结果都能体现出CO<sub>2</sub>浓度上升的趋势，但是 ViT 重建的CO<sub>2</sub>浓度变化过于平缓，没有体现出这段时间内加利福尼亚州地区CO<sub>2</sub>浓度频繁波动的特征，而CO<sub>2</sub>-Net 能够捕捉到这种频繁波动的细节特征。

(c) **2020 年 6 月西伯利亚森林的季节性碳吸收。**西伯利亚地区森林覆盖面广，由于植物在生长季（6-8 月）会通过光合作用吸收大量的CO<sub>2</sub>，导致这段时间内该地区CO<sub>2</sub>浓度会呈现明显的下降趋势。本项目以 2020 年 6 月西伯利亚森林的季节性碳吸收为例，可视化展示了CO<sub>2</sub>-Net 和 ViT 的CO<sub>2</sub>浓度重建结果（图 3-7 (c)）。在 6 月 3 日至 6 月 23 日这段时间内，由于季节性碳吸收现象，西伯利亚地区的CO<sub>2</sub>浓度从 415 $\mu$ mol/mol 下降到了 405 $\mu$ mol/mol。从图中可以看出，CO<sub>2</sub>-Net 重建的CO<sub>2</sub>浓度呈现出和真实值类似的下降趋势，从 413 $\mu$ mol/mol 下降到了 403 $\mu$ mol/mol，而 ViT 重建的CO<sub>2</sub>浓度虽然整体上也呈现了下降趋势，但是下降过程缓慢，只从 414 $\mu$ mol/mol 下降到了 410 $\mu$ mol/mol，没有重建出真实值迅速下降的变化过程。

本项目通过对三个CO<sub>2</sub>浓度剧烈变化的具体案例（亚马逊雨林野火、加利福尼亚州山火和西伯利亚森林的季节性碳吸收）进行分析，并且与 ViT 模型进行对比，验证了CO<sub>2</sub>-Net 捕捉CO<sub>2</sub>浓度短期迅速变化趋势的能力。

### 3.3.4 消融实验

在这一节，本项目将从模型结构和超参数配置两个角度进行消融实验。一方面，通过结构消融实验分析CO<sub>2</sub>-Net 模型中各个关键部分对于模型效果提升的贡献；另一方面，通过超参数配置的消融实验测试CO<sub>2</sub>-Net 对超参数配置的敏感性。

本项目使用 CarbonTracker 和 CMIP6 数据集，对CO<sub>2</sub>-Net 进行结构消融实验，分别测试时空模型分解、基于风场的时空周期性嵌入（风场嵌入）以及风场重建损失函数给CO<sub>2</sub>-Net

提供的性能提升，验证模型设计的有效性。

本项目从单独的空间模型和时间模型开始测试，逐渐引入时空模型分解和逐层的时空连接模块，分析时空模型分解和时空连接模块的效果。表 3-4 展示了不同模型结构在 CarbonTracker 和 CMIP6 数据集上测试得到的 RMSE 结果。从表中可以看出，在 CarbonTracker 数据集上，只使用空间模型或只使用时间模型都取得了  $3.51\mu\text{mol/mol}$  的 RMSE，在进行时空模型分解之后，即使没有添加逐层的时空连接模块，RMSE 已经被降低到了  $3.45\mu\text{mol/mol}$ ，添加逐层时空连接模块之后，又将 RMSE 降低到了  $3.43\mu\text{mol/mol}$ ；在 CMIP6 数据集上，本项目也观察到了类似的趋势，只使用空间模型和时间模型分别取得了  $14.28\mu\text{mol/mol}$  和  $16.63\mu\text{mol/mol}$  的 RMSE 值，进行时空模型分解之后，RMSE 降低到了  $13.01\mu\text{mol/mol}$ ，随着逐层时空连接模块的引入，RMSE 被进一步降低到了  $10.83\mu\text{mol/mol}$ 。本项目发现，在两个数据集上，进行时空模型分解都能够降低模型重建的误差，证明时空模型分解能够增强模型的时空理解能力。

表 3-4 时空模型分解消融实验结果。表中所有模型都引入了风场嵌入，但是没有引入风场重建损失函数。最好的结果进行了加粗处理。

数据集	模型结构	RMSE( $\downarrow$ , $\mu\text{mol/mol}$ )
Carbon Tracker	空间模型	3.51
	时间模型	3.51
	时空模型分解	3.45
	(无时空连接模块)	
	时空模型分解 (有时空连接模块)	<b>3.43</b>
CMIP6	空间模型	14.28
	时间模型	16.63
	时空模型分解	13.01
	(无时空连接模块)	
	时空模型分解 (有时空连接模块)	<b>10.83</b>

基于进行时空模型分解和添加时空连接模块的模型，本项目对比了引入风场嵌入前后，模型的重建效果，分析风场嵌入对模型性能提升的贡献。表 3-5 展示了引入风场嵌入前后，

模型在 CarbonTracker 和 CMIP6 数据集上测试得到的 RMSE 结果。从表中可以看出，在 CarbonTracker 数据集上，引入风场嵌入之前，模型重建结果的 RMSE 是  $3.55\mu\text{mol/mol}$ ，而引入风场嵌入之后，模型重建结果的 RMSE 下降到了  $3.43\mu\text{mol/mol}$ ；在 CMIP6 数据集上，引入风场嵌入后的 RMSE 下降更加明显，引入风场嵌入前后的 RMSE 值分别是  $23.40\mu\text{mol/mol}$  和  $10.83\mu\text{mol/mol}$ ，将 RMSE 减少了约 51.7%，减小重建误差的效果显著。由此可见，通过使用风场嵌入作为辅助信息，给模型引入时空周期信号，能够增强模型对  $\text{CO}_2$  以及其他辅助变量的周期性特征的学习能力，从而降低模型重建  $\text{CO}_2$  浓度的误差。

为了进一步验证风场嵌入的有效性，本项目还与 ClimODE<sup>[29]</sup>中提出的时空嵌入进行了比较。从实验结果可以发现，在模型中引入 ClimODE's 时空嵌入后，在 CarbonTracker 数据集上，模型重建结果的 RMSE 下降不多，只从  $3.55\mu\text{mol/mol}$  下降到了  $3.53\mu\text{mol/mol}$ ，甚至在 CMIP6 数据集上，RMSE 反而从  $23.40\mu\text{mol/mol}$  增加到了  $27.06\mu\text{mol/mol}$ ，由此可见，相较于 ClimODE's 时空嵌入，本项目提出的风场嵌入对于  $\text{CO}_2$  更加有效。

表 3-5 基于风场的时空周期性嵌入消融实验结果。None 表示不加入时空嵌入，ClimODE's 表示添加 ClimODE 提出的时空嵌入，Wind 表示添加风场嵌入。最好的结果进行了加粗处理。

数据集	时空嵌入种类	RMSE(↓, $\mu\text{mol/mol}$ )
Carbon Tracker	None	3.55
	ClimODE's	3.53
	Wind	<b>3.43</b>
CMIP6	None	23.40
	ClimODE's	27.06
	Wind	<b>10.83</b>

最后，基于以上模型，本项目对比了引入风场损失函数前后的模型重建结果，从而验证风场重建损失函数的有效性。表 3-6 展示了引入风场重建损失函数前后，模型在 CarbonTracker 和 CMIP6 数据集上测试的 RMSE 结果对比。在 CarbonTracker 数据集上，如果不引入风场重建损失函数，通过传统的有监督学习方法训练模型，可以达到  $3.43\mu\text{mol/mol}$  的 RMSE，在进一步引入风场重建损失函数，进行半监督学习后，可以进一步降低模型重建误差，达到  $3.36\mu\text{mol/mol}$  的 RMSE，RMSE 减少了约 2.0%；在 CMIP6 数据集上，引入风场重建损失函数前后，模型测试的 RMSE 分别是  $10.83\mu\text{mol/mol}$  和  $5.31\mu\text{mol/mol}$ ，减少了 51.0%。因此，采用时间模型输出的时序信息特征进行风场重建的自监督学习目标是合理的，并且引

入风场重建损失函数后，让模型进行半监督学习能够进一步提升模型重建CO<sub>2</sub>的效果。

表 3-6 风场重建损失函数消融实验结果。最好的结果进行了加粗处理。

数据集	是否引入风场重建损失函数	RMSE(↓, $\mu\text{mol/mol}$ )
Carbon	否	3.43
Tracker	是	<b>3.36</b>
CMIP6	否	10.83
	是	<b>5.31</b>

通过逐步引入时空模型分解、基于风场的时空周期性嵌入以及风场重建损失函数，本项目发现CO<sub>2</sub>-Net 重建CO<sub>2</sub>的效果越来越好，验证了不同模块带来的性能提升，并且在所有模块中，基于风场的时空周期性嵌入和风场重建损失函数给模型带来了最大的提升，在CMIP6 数据集上分别将 RMSE 减少了 51.7%和 51.0%。

### 3.3.5 超参数配置

本项目对比了不同历史数据长度、数据集采样频率以及损失函数权重系数 $\lambda$ 对于CO<sub>2</sub>-Net 效果的影响，并且分析了CO<sub>2</sub>-Net 对于超参数设置的敏感性。

CO<sub>2</sub>-Net 根据历史时间点内站点观测数据以及辅助变量数据来重建第 $T$ 帧内CO<sub>2</sub>浓度的分布，为了探究历史数据长度 $T$ 对模型重建效果的影响，本项目在 CarbonTracker 和 CMIP6 数据集上使用不同长度 $T$ 进行了实验，具体结果见图 3-8。从表中数据可以看出，在 CarbonTracker 数据集上，当 $T$ 在 0~48 小时内时，RMSE 随着 $T$ 的增加而减少，在 $T = 48$  小时的时候，RMSE 最低，为  $3.28\mu\text{mol/mol}$ ，当 $T > 48$  小时的时候，RMSE 反而随着 $T$ 的增加而增加；在 CMIP6 数据集上本项目也观察到了类似的情况，当 $T$ 在 0~4 月内时，RMSE 随着 $T$ 的增加而减少，在 $T = 4$  个月的时候，RMSE 最低，为  $5.31\mu\text{mol/mol}$ ，当 $T > 4$  个月时，RMSE 反而随着 $T$ 的增加而增加。由此可见，CO<sub>2</sub>-Net 重建CO<sub>2</sub>的误差并不会一直随着 $T$ 的增加而增加。另外，当 $T$ 增大时，训练模型需要的显存也会随之增大，因此，在选择历史数据长度的时候，需要在计算资源和性能之间做好权衡。为了平衡计算资源和模型性能，本项目在 CarbonTracker 数据集上设置 $T = 24$  小时，在 CMIP6 数据集上设置 $T = 4$  个月。

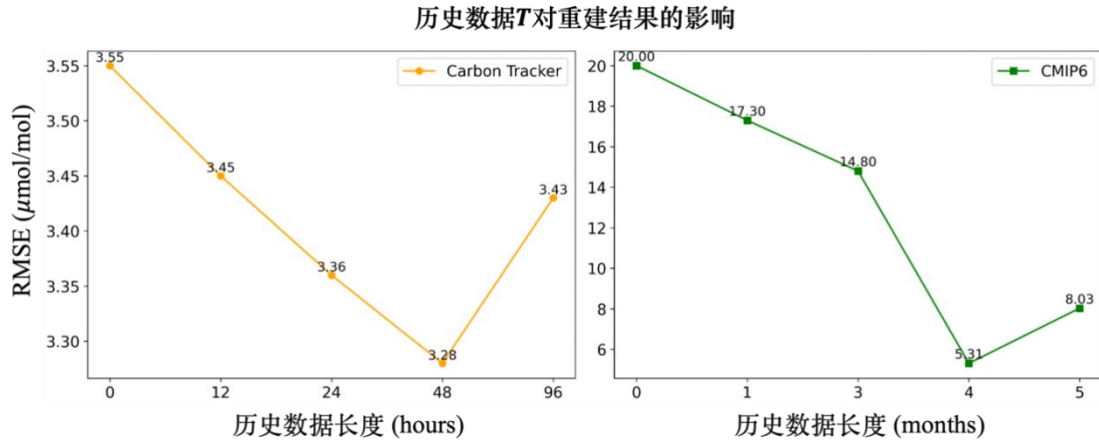


图 3-8 不同历史数据长度 $T$ 对 $\text{CO}_2\text{-Net}$ 在 CarbonTracker 和 CMIP6 数据集上重建效果的影响。

CarbonTracker 数据集提供了 3 小时采样的数据，本项目将这些数据进行重新采样，得到了 6/9/12/18/24/36/48 小时采样的数据，并基于这些数据，分析了数据集采样频率对于  $\text{CO}_2\text{-Net}$  的性能影响，实验结果见表 3-7。从表中数据可以看出，随着采样频率的增加， $\text{CO}_2\text{-Net}$  重建的  $\text{CO}_2$  浓度的 RMSE 逐渐增大，最低是使用 3 小时采样数据，RMSE 为  $3.36\mu\text{mol/mol}$ ，最高时使用 36 小时采样数据，RMSE 为  $5.72\mu\text{mol/mol}$ ，增大了约 41.3%。本项目认为这是由于随着采样频率的增大，数据中细节越来越少，模型很难学习到更加精细的特征，所以模型重建效果变差。

表 3-7 使用不同采样频率的 CarbonTracker 数据集进行重建的结果。最好的结果进行了加粗处理。

采样频率	RMSE(↓, $\mu\text{mol/mol}$ )
3 hour	<b>3.36</b>
6 hour	4.88
9 hour	5.04
12 hour	4.95
18 hour	5.34
24 hour	5.57
36 hour	5.72
48 hour	5.67

本项目还对风场重建损失函数的权重系数 $\lambda$ 的不同取值进行了实验，分析 $\lambda$ 对于 $\text{CO}_2\text{-Net}$ 重建性能的影响。具体而言，本项目在集合 $\{0.1, 0.2, 0.5, 1, 2\}$ 中进行了测试，得到测试结

果如表 3-8。本项目发现，在 CarbonTracker 数据集上， $\lambda$  的最佳取值时 0.2，RMSE 为  $3.36\mu\text{mol/mol}$ ，而在 CMIP6 数据集上， $\lambda$  的最佳取值是 1，RMSE 为  $5.31\mu\text{mol/mol}$ 。根据结果可以看出，在 CMIP6 数据集上，风场重建损失函数的作用比在 CarbonTracker 数据集上更大。本项目认为，CMIP6 数据集中的数据质量更差，因此不能完全依赖于有监督学习，需要通过风场重建的自监督学习目标来改善模型性能。

表 3-8 在 CarbonTracker 数据集和 CMIP6 数据集上使用不同权重系数 $\lambda$ 进行重建的结果。最好的结果进行了加粗处理。

数据集	$\lambda$	RMSE( $\downarrow$ , $\mu\text{mol/mol}$ )
Carbon Tracker	0.1	3.38
	0.2	<b>3.36</b>
	0.5	3.47
	1	3.40
	2	3.45
CMIP6	0.1	36.89
	0.2	19.51
	0.5	13.17

续表 3-8 在 CarbonTracker 数据集和 CMIP6 数据集上使用不同权重系数 $\lambda$ 进行重建的结果。

最好的结果进行了加粗处理。

CMIP6	1	<b>5.31</b>
	2	18.25

在这一节，本项目通过实验系统分析了历史数据长度、数据集采样频率以及损失函数权重系数 $\lambda$ 对于 $\text{CO}_2\text{-Net}$ 重建效果的影响。根据实验结果，本项目发现 $\text{CO}_2\text{-Net}$ 对于历史数据长度以及数据集的采样频率比较敏感，性能变化很大；当数据质量比较差的时候，不能完全依赖于传统的有监督学习，需要通过自监督学习的方式，让模型从自身输出的特征进行学习，提升模型性能。

## 3.4 计划和分工

### 3.4.1 项目计划

2025 年 5 月 8 日至 5 月 21 日：根据选题，学习研究课题第一个阶段（算法研究）的部分算法和模型；



2025 年 5 月 22 日至 5 月 24 日：根据选题，搜索相关参考文献，总结国内外研究现状；

2025 年 5 月 25 日至 5 月 31 日：搭建环境收集实验所需数据并进行预处理；

2025 年 6 月 1 日至 2025 年 6 月 15 日：扩展数据集；进行相关算法的设计和模型的训练，分析实验数据；

2025 年 6 月 16 日至 6 月 31 日：继续学习课题第二阶段（模型推理）的相关知识和开发技术；

2025 年 7 月 1 日至 7 月 15 日：进行模型的部署和测试工作，进行消融实验

2025 年 7 月 16 日至 8 月 6 日：进行算法的测试工作；撰写并完成文档初稿，完成其他要求的相关文档；

### **3.4.2 团队分工**

组长：统筹整体工作，负责算法设计、文档整理和编写，具体包括重建网络算法改进和算法性能实验设计，项目文档编写，实验环境搭建和预处理。

队员 1：负责实验环境搭建，数据采集和算法功能实现，具体包括基于基准的模型训练、国内外研究方法调研和概述、对比方法测试和数据集预处理等。

队员 2：负责 CMIP6 数据集模型验证和消融实验，对比方法测试，项目文档编写和版本迭代等。

队员 3：负责 CarbonTracker 数据模型验证和超参数实验，项目文档编写和版本迭代等。

## 4 参考资料

- [1] Dietz T, Shwom R L, Whitley C T. Climate Change and society. *Annual Review of Sociology*, 2020, 46(1): 135–158.
- [2] Change C. Climate Change [J]. Synthesis report, 2001.
- [3] Change O C. Intergovernmental panel on Climate Change [J]. World Meteorological Organization, 2007, 52(1-43): 1.
- [4] Sawyer J S. Man-made Carbon dioxide and the “greenhouse” effect [J]. *Nature*, 1972, 239(5366): 23-26.
- [5] Manabe S. Carbon dioxide and Climatic Change [J]. *Advances in geophysics*, 1983, 25: 39-82.
- [6] Wang Y, Guo C, Chen X, et al. Carbon peak and Carbon neutrality in China: Goals, implementation path and prospects [J]. *China Geology*, 2021, 4(4): 720-746.
- [7] Kuyper J, Schroeder H, Linnér B O. The Evolution of the UNFCCC [J]. *Annual Review of Environment and Resources*, 2018, 43(1): 343-368.
- [8] Sutton O G. The problem of diffusion in the lower atmosphere [J]. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 1947, 73(317-318): 257-281.
- [9] Salam M A, Noguchi T. Impact of human activities on Carbon dioxide (CO<sub>2</sub>) emissions: A statistical analysis [J]. *Environmentalist*, 2005, 25: 19-30.
- [10] Kimes D S, Knyazikhin Y, Privette J L, et al. Inversion methods for physically-based models [J]. *Remote Sensing Reviews*, 2000, 18(2-4): 381-439.
- [11] Nguyen T, Brandstetter J, Kapoor A, et al. ClimaX: A foundation model for weather and Climate [C]. *International Conference on Machine Learning*. PMLR, 2023: 25904-25938.
- [12] Xu W, Ling F, Han T, et al. Generalizing weather forecast to fine-grained temporal scales via physics-ai hybrid modeling [J]. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 2024, 37: 23325-23351.
- [13] Lin X, Xu C, Xiong Z, et al. PanGu Drug Model: learn a molecule like a human [J]. *Biorxiv*, 2022: 2022.03.31.485886.
- [14] Jumper J, Evans R, Pritzel A, et al. Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold [J]. *Nature*, 2021, 596(7873): 583-589.
- [15] Rödenbeck C, Houweling S, Gloor M, et al. CO<sub>2</sub> flux history 1982–2001 inferred from

- atmospheric data using a global inversion of atmospheric transport[J]. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2003, 3(6): 1919-1964.
- [16] 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.
- [17] Liu J, 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.
- [18] Maksyutov S, Oda T, Saito M, et al. A high-resolution inverse modelling technique for estimating surface CO<sub>2</sub> fluxes based on the NIES-TM-FLEXPART Coupled transport model and its adjoint[J]. *Atmospheric Chemistry and Physics Discussions*, 2020, 2020: 1-33.
- [19] Niwa Y, Ishijima K, Ito A, et al. Toward a long-term atmospheric CO<sub>2</sub> inversion for elucidating natural Carbon fluxes: technical notes of NISMON-CO<sub>2</sub> v2021. 1[J]. *Progress in Earth and Planetary Science*, 2022, 9(1): 42.
- [20] Conway t J, Tans P P, Waterman L S, et al. Evidence for interannual variability of the Carbon Cycle from the National Oceanic and Atmospheric Administration Climate Monitoring and Diagnostics Laboratory global air sampling network[J]. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 1994, 99(D11): 22831-22855.
- [21] Heimann M, Keeling C D. A three-dimensional model of atmospheric CO<sub>2</sub> transport based on observed winds: 2. Model description and simulated tracer experiments[J]. *Aspects of Climate variability in the Pacific and the western Americas*, 1989, 55: 237-275.
- [22] Krol M, Houweling S, Bregman B, et al. The two-way nested global Chemistry-transport zoom model TM5: algorithm and applications[J]. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2005, 5(2): 417-432.
- [23] Cooperative Global Atmospheric Data Integration Project. (2017). Multi-laboratory Compilation of atmospheric Carbon dioxide data for the period 1957–2016: Obspack\_co2\_1\_GLOBALVIEWplus\_v3.1\_2017\_10\_18 [DB/OL]. NOAA Earth System Research Laboratory, Global Monitoring Division. <http://dx.doi.org/10.15138/G3T055>.
- [24] Gurney K R, Law R M, Denning A S, et al. Towards robust regional estimates of CO<sub>2</sub> sources

- and sinks using atmospheric transport models[J]. *Nature*, 2002, 415(6872): 626-630.
- [25] Lee D, Lee J, Choi J. CAST: Cross-attention in space and time for video action recognition[J]. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 2023, 36: 79399-79425.
- [26] Zhang J O, Sax A, Zamir A, et al. Side-tuning: a baseline for network adaptation via additive side networks[C]. *Computer Vision—ECCV 2020: 16th European Conference, Glasgow, UK, August 23–28, 2020, Proceedings, Part III* 16. Springer International Publishing, 2020: 698-714.
- [27] Su J, Byeon W, Kossaiji J, et al. Convolutional tensor-train LSTM for spatio-temporal learning[J]. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 2020, 33: 13714-13726.
- [28] Yao Y, Liu C, Luo D, et al. Video playback rate perception for self-supervised spatio-temporal representation learning[C]. *Proceedings of the IEEE/CVF Conference on Computer vision and pattern recognition*. 2020: 6548-6557.
- [29] Verma Y, Heinonen M, Garg V. ClimODE: Climate and Weather Forecasting with Physics-informed Neural ODEs[C]. *Proceedings of the Twelfth International Conference on Learning Representations*. 2024.
- [30] Liu P, Zhou T, Sun L, et al. Mitigating time discretization Challenges with weatherode: A sandwich physics-driven neural ode for weather forecasting[J]. *arXiv preprint arXiv:2410.06560*, 2024.
- [31] Wang Y, Yang W, Chen X, et al. Sinsr: diffusion-based image super-resolution in a single step[C]. *Proceedings of the IEEE/CVF Conference on Computer vision and pattern recognition*. 2024: 25796-25805.
- [32] Esmailzadeh S, Azizzadenesheli K, Kashinath K, et al. Meshfreeflownet: A physics-constrained deep continuous space-time super-resolution framework[C]. *SC20: International Conference for high performance Computing, networking, storage and analysis*. IEEE, 2020: 1-15.
- [33] Zhao S, Cui J, Sheng Y, et al. Large scale image completion via Co-modulated generative adversarial networks[C]. *International Conference on Learning Representations*, 2021.
- [34] Li W, Lin Z, Zhou K, et al. Mat: Mask-aware transformer for large hole image inpainting[C]. *Proceedings of the IEEE/CVF Conference on Computer vision and pattern recognition*. 2022: 10758-10768.

- [35] Corneanu C, Gadde R, Martinez A M. Latentpaint: Image inpainting in latent space with diffusion models[C]. Proceedings of the IEEE/CVF winter Conference on applications of Computer vision. 2024: 4334-4343.
- [36] Santos J E, Fox Z R, Mohan A, et al. Development of the Senseiver for efficient field reconstruction from sparse observations[J]. Nature Machine Intelligence, 2023, 5(11): 1317-1325.
- [37] Du P, Parikh M H, Fan X, et al. Conditional neural field latent diffusion model for generating spatiotemporal turbulence[J]. Nature Communications, 2024, 15(1): 10416.
- [38] Devlin J, Chang M W, Lee K, et al. Bert: Pre-training of deep bidirectional transformers for language understanding[C]. Proceedings of the 2019 Conference of the North American Chapter of the association for Computational linguistics: human language technologies, volume 1 (long and short papers). 2019: 4171-4186.
- [39] He K, Chen X, Xie S, et al. Masked autoencoders are scalable vision learners[C]. Proceedings of the IEEE/CVF Conference on Computer vision and pattern recognition. 2022: 16000-16009.
- [40] Tong Z, Song Y, Wang J, et al. Videomae: Masked autoencoders are data-efficient learners for self-supervised video pre-training[J]. Advances in neural information processing systems, 2022, 35: 10078-10093.
- [41] Yue t X, Zhang L L, Zhao M W, et al. Space-and ground-based CO<sub>2</sub> measurements: A review[J]. Science China Earth Sciences, 2016, 59: 2089-2097.
- [42] 高雪洁, 刘继桥, 樊纯臻, 等. 1.57  $\mu\text{m}$  IPDA 激光雷达云回波信号 CO<sub>2</sub> 柱浓度测量研究[J]. 中国激光, 2023, 50(23): 2310001.
- [43] Abshire J B, Riris H, Allan G R, et al. Pulsed airborne lidar measurements of atmospheric CO<sub>2</sub> column absorption[J]. Tellus B: Chemical and Physical Meteorology, 2010, 62(5): 770-783.
- [44] Yokota T, Yoshida Y, Eguchi N, et al. Global concentrations of CO<sub>2</sub> and CH<sub>4</sub> retrieved from GOSAT: First preliminary results[J]. Sola, 2009, 5: 160-163.
- [45] Crisp D, Atlas R M, Breon F M, et al. The orbiting Carbon observatory (OCO) mission[J]. Advances in Space Research, 2004, 34(4): 700-709.
- [46] Hu K, Liu Z, Shao P, et al. A review of satellite-based CO<sub>2</sub> data reconstruction studies:

- Methodologies, Challenges, and advances[J]. Remote Sensing, 2024, 16(20).
- [47] Jacobson A R, Schuldt K N, Tans P, et al. CarbonTrackerCT2022[DB/OL]. NOAA Global Monitoring Laboratory, 2023[2024-05-22]. <https://doi.org/10.25925/Z1GJ-3254>.
- [48] Eyring V, Bony S, Meehl G A, et al. Overview of the Coupled Model Intercomparison Project Phase 6 (CMIP6) experimental design and organization[J]. Geoscientific Model Development, 2016, 9(5): 1937-1958.
- [49] Schuldt K N, Mund J, Aalto T, et al. Multi-laboratory Compilation of atmospheric Carbon dioxide data for the period 1957–2023; obspack\_co2\_1\_GLOBALVIEWplus\_v10.0\_2024-09-26. NOAA Global Monitoring Laboratory, 2024. <https://doi.org/10.25925/20240801>.
- [50] Dehghan M. Numerical solution of the three-dimensional advection–diffusion equation[J]. Applied Mathematics and Computation, 2004, 150(1): 5-19.
- [51] Bahdanau D, Cho K, Bengio Y. Neural machine translation by jointly learning to align and translate[C]. Proceedings of the Third International Conference on Learning Representations. 2015.
- [52] Vaswani A, Shazeer N, Parmar N, et al. Attention is all you need[J]. Advances in neural information processing systems, 2017, 30.
- [53] Zhang Z, Xue Z, Chen Y, et al. Boosting verified training for robust image Classifications via abstraction[C]. Proceedings of the IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition. 2023: 16251-16260.
- [54] Wu C Y, Li Y, Mangalam K, et al. Memvit: Memory-augmented multiscale vision transformer for efficient long-term video recognition[C]. Proceedings of the IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition. 2022: 13587-13597.
- [55] Chen T, Kornblith S, Norouzi M, et al. A simple framework for Contrastive learning of visual representations[C]. International Conference on machine learning. PmLR, 2020: 1597-1607.
- [56] Huang L, Liu Y, Wang B, et al. Self-supervised video representation learning by Context and motion decoupling[C]. Proceedings of the IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition. 2021: 13886-13895.
- [57] Dosovitskiy A, Beyer L, Kolesnikov A, et al. An image is worth 16x16 words: Transformers for image recognition at scale[C]. Proceedings of the Ninth International Conference on

Learning Representations. 2021.

- [58] Tang S, Li C, Zhang P, et al. Swinlstm: Improving spatiotemporal prediction accuracy using swin transformer and lstm[C]. Proceedings of the IEEE/CVF internationalConference onComputer vision. 2023: 13470-13479.
- [59] Zhu J Y, Park T, Isola P, et al. Unpaired image-to-image translation usingCycle-consistentadversarial networks[C]. Proceedings of the IEEE internationalConference onComputer vision. 2017: 2223-2232.