

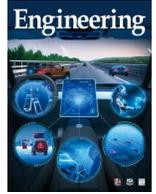


ELSEVIER

Contents lists available at ScienceDirect

Engineering

journal homepage: [www.elsevier.com/locate/eng](http://www.elsevier.com/locate/eng)



Research  
Climate Change—Article

## 区域公里尺度碳源汇同化反演系统的构建与应用

郭立峰<sup>a</sup>, 张小曳<sup>b,a,\*</sup>, 仲峻霆<sup>a,\*</sup>, 王德英<sup>a</sup>, 苗长虹<sup>b</sup>, 赵立城<sup>c</sup>, 周子江<sup>c</sup>, 廖捷<sup>c</sup>, 胡博<sup>d</sup>, 朱凌云<sup>e</sup>, 陈燕<sup>f</sup>

<sup>a</sup> Monitoring and Assessment Center for GHGs and Carbon Neutrality & Key Laboratory of Atmospheric Chemistry of CMA, Chinese Academy of Meteorological Sciences, Beijing 100081, China

<sup>b</sup> Laboratory of Climate Change Mitigation and Carbon Neutrality, Henan University, Zhengzhou 450001, China

<sup>c</sup> National Meteorological Information Center, Beijing 100081, China

<sup>d</sup> Shanxi Meteorological Administration, Taiyuan 030002, China

<sup>e</sup> Shanxi Provincial Institute of Meteorological Sciences, Taiyuan 030002, China

<sup>f</sup> Jiangsu Provincial Climate Center, Nanjing 210000, China

### ARTICLE INFO

#### Article history:

Received 31 August 2022

Revised 1 February 2023

Accepted 27 February 2023

Available online 14 June 2023

#### 关键词

CCMVS-R

区域碳同化系统

人为碳排放

CO<sub>2</sub>

POD 4DVar

#### 摘要

CO<sub>2</sub>是地球大气中最重要的温室气体之一。自工业革命以来,人类活动排放了大量温室气体进入大气,导致自1950年以来的气候变暖,并导致极端天气和气候事件频率增加。2020年,我国承诺在2060年前努力实现碳中和,这一承诺以及我国随后的行动将导致全球和区域人为碳排放发生重大变化,因此需要及时、全面且客观的监测和验证支持(monitoring, verification and supporting, MVS)系统。MVS方法是2019年联合国政府间气候变化专门委员会(IPCC)清单改进指南中增加的内容,其基于大气CO<sub>2</sub>浓度观测数据“自上而下”同化反演碳源汇。然而,区域高分辨率的同化和反演方法仍处于初步发展阶段。本研究中,我们运用本征正交分解(POD)与四维变分(4DVar)相结合的数据同化方法,基于WRF-GHG模型构建了一个在公里尺度上进行碳源汇反演的系统——中国区域碳源汇监测核校支持系统(CCMVS-R)。CCMVS-R可以持续同化大气CO<sub>2</sub>和其他相关信息,并实现区域和局地人为碳排放和自然陆地生态系统碳交换的反演。本研究基于山西省6个地面监测站收集的大气CO<sub>2</sub>浓度观测数据,采用两层嵌套(27 km和9 km)设置理想和真实实验来验证区域人为碳排放的同化反演效果。同化后大气CO<sub>2</sub>浓度模拟值不确定性显著降低,CO<sub>2</sub>浓度模拟值与理想值之间的均方根误差接近于零。同化反演获得的2019年山西省人为碳排放总量,较采用“自下而上”方法的5套排放清单的平均值高出约28.6%(17%~38%),表明“自上而下”的CCMVS-R系统能够获取更全面的人为碳排放信息。

© 2023 THE AUTHORS. Published by Elsevier LTD on behalf of Chinese Academy of Engineering and Higher Education Press Limited Company. This is an open access article under the CC BY-NC-ND license (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>).

## 1. 引言

目前国际上所讨论的气候变化问题主要是指由于温室气体(GHG)的增加导致的全球变暖问题。气候变化、全球变暖和人为温室效应备受国内外的关注。联合国政府

间气候变化专门委员会(IPCC)第五次评估报告第一工作组的报告明确指出:温室气体(CO<sub>2</sub>、CH<sub>4</sub>、N<sub>2</sub>O等)的增加和土地利用的改变将会引起一系列的影响,包括平均温度的增加、极端温度的改变、灾害性天气的频发以及自70年代以来在北纬30°N降水的增加而在热带地区降水

\* Corresponding authors.

E-mail addresses: [xiaoye@cma.gov.cn](mailto:xiaoye@cma.gov.cn) (X. Zhang), [zhongjt@cma.gov.cn](mailto:zhongjt@cma.gov.cn) (J. Zhong).

2095-8099/© 2023 THE AUTHORS. Published by Elsevier LTD on behalf of Chinese Academy of Engineering and Higher Education Press Limited Company. This is an open access article under the CC BY-NC-ND license (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>).

英文原文: *Engineering* 2024, 33(2): 263–275

引用本文: Lifeng Guo, Xiaoye Zhang, Juntong Zhong, Deyang Wang, Changhong Miao, Licheng Zhao, Zijiang Zhou, Jie Liao, Bo Hu, Lingyun Zhu, Yan Chen. Construction and Application of a Regional Kilometer-Scale Carbon Source and Sink Assimilation Inversion System (CCMVS-R). *Engineering*, <https://doi.org/10.1016/j.eng.2023.02.017>

的减少等[1]。此外,由于全球变暖引起冰川融化,将导致海平面上升,在1901—2010年期间,全球平均海平面上升了0.19 m,平均增长率为 $1.7 \text{ mm}\cdot\text{a}^{-1}$ 。 $\text{CO}_2$ 是地球大气中最重要的温室气体,由于人类活动的影响(化石燃料消耗和水泥生产),大气中的二氧化碳的浓度从1900年的( $289.9\pm 3.3$ ) ppm增加到2010—2019年的( $398.8\pm 7.3$ ) ppm,增加了38%,过去的50年增长迅速[2–3]。根据《巴黎协定》,到2100年,为了将全球变暖控制在 $1.5^\circ\text{C}$ 以下,IPCC的第6次评估报告(AR6)建议大幅、持续地减少人类活动造成的 $\text{CO}_2$ 排放[4]。IPCC第六次评估小组第一工作组估计,从2020年1月1日起将全球变暖限制在 $1.5^\circ\text{C}$ 、 $1.7^\circ\text{C}$ 和 $2.0^\circ\text{C}$ 的剩余碳预算分别为140 PgC、230 PgC和370 PgC。但是,人类活动造成的 $\text{CO}_2$ 排放量仍在快速增加,2006—2015年由化石燃料使用、水泥生产及土地利用变化等类活动所排放的 $\text{CO}_2$ 已达到 $10.3 \text{ PgC}\cdot\text{a}^{-1}$ [5–6],2010—2019年,人类活动排放的 $\text{CO}_2$ 为( $10.9\pm 0.9$ ) $\text{PgC}\cdot\text{a}^{-1}$ 。按照目前人为排放量约为 $10 \text{ PgC}\cdot\text{a}^{-1}$ 估算,剩余的碳预算将在几十年内消耗[7]。这些人为碳排放分布于地球系统的三个组成部分,其中,46%滞留在大气中[( $5.1\pm 0.02$ ) $\text{PgC}\cdot\text{a}^{-1}$ ],23%被海洋吸收[( $2.5\pm 0.6$ ) $\text{PgC}\cdot\text{a}^{-1}$ ],31%被陆地生态系统植被所吸收[( $3.4\pm 0.9$ ) $\text{PgC}\cdot\text{a}^{-1}$ ][2]。

2020年9月,中国政府宣布“中国将增加自主国家贡献,采取更加积极的政策和措施,努力在2030年实现二氧化碳排放达峰,2060年实现碳中和”[8–10]。这一庄严承诺向世界表明,中国决心走绿色、低碳、高质量的发展道路。中国致力于2060年实现碳中和的承诺与《巴黎协定》对实现零排放的 $2^\circ\text{C}$ 目标一致[11]。IPCC排放清单指南的核心是可监测、可报告和可核查(MRV)的治理机制,这是建立落实政策和方案评估体系的重要组成部分之一,其中一个重要内容是从2023年起每5年核查一次各国的碳排放。人为碳排放的估算方法包括“自下而上”(bottom-up)和“自上而下”(top-down)的方法。例如,美国能源部下属的二氧化碳信息分析中心(CDIAC)估算的全球和国家尺度 $\text{CO}_2$ 排放数据(1751—2006年);国际能源机构(IEA)也收集全球 $\text{CO}_2$ 排放数据,其数据库涵盖全球140多个国家和地区化石燃料排放的 $\text{CO}_2$ (1971—2005年),并按行业和燃料类型分类。

然而,清单调查法一般只能估算相对“静态”碳排放(通常是年尺度的);该方法所依据统计数据通常不完整甚至存在错误,而且排放因子差异大、误差大,这些限制因

素和误差的存在,决定了依据清单调查方法估算得到的排放通量结果存在很大的不确定性[2,6–7,12–16]。随着多源 $\text{CO}_2$ 浓度观测数据的出现,包括高精度的地基观测数据、GOSAT [17]、GOSAT-2 [18]、OCO-2 [19–20]、OCO-3 [21]、TanSat [22–23]等,这些卫星观测数据为全球/区域碳同化系统的研究提供了数据支持[24]。因此,自上而下人为碳通量估算方法越来越受到国内外学者的青睐[25–30]。 $\text{CO}_2$ 卫星观测同化将在全球和区域碳循环研究和人为 $\text{CO}_2$ 核算中发挥重要作用[31]。欧洲航天局(ESA)计划使用同样的方法来估计人为 $\text{CO}_2$ 排放,并支持2028年的全球盘点研究[32]。

中国提出2030年碳达峰、2060年碳中和的承诺,但是,落实减排措施以及评估所采取的减排措施是否合适、有效,迫切需要精准计算不同地区人为源排放量。为了响应国家的碳中和战略,本文研发了一个区域高精度碳同化系统——中国碳源汇监测核校支持系统(CCMVS-R)。在未来研究中,系统将引入更多高精度的地基 $\text{CO}_2$ 浓度观测网络数据和多源卫星观测数据,有望以较高的时空分辨率反演省域/城市尺度的人为碳排放。本文的结构如下:第1部分为引言;第2部分为材料与方法;第3部分为CCMVS-R理想实验和山西反演结果分析;第4部分为结论。

## 2. 材料与方法

### 2.1. 数据资料

#### 2.1.1. 气象驱动数据

CCMVS-R系统所用的边界场气象驱动数据为NCEP再分析数据FNL<sup>†</sup>,其分辨率为 $1^\circ\times 1^\circ$ ,包含26个标准等压层(10–1000 hPa)、对流层和地表边界层信息。时间段00、06、12、18 UTC时,每6 h进行一次全球数据分析。

#### 2.1.2. 人为碳通量数据

人为碳通量数据主要包括化石燃料燃烧导致的碳排放和火烧碳通量,化石燃料燃烧排放是人类影响全球碳循环的直接因素。本文选取的人为碳排放数据如表1所示[6–7,12,33–36]。

#### 2.1.3. VPRM模型驱动数据

VPRM模型是基于遥感数据的碳通量估算模式,模型驱动所需要的目标区域内的空间信息和气象场资料(2 m温度和向下短波辐射)由中尺度大气传输模式(WRF)提供[37];模型输入所需的地表覆被数据,由高精度植被类

<sup>†</sup><https://rda.ucar.edu/datasets/ds083.2/>.

表1 CO<sub>2</sub>排放清单信息

No.	Emission inventory	Refs.
1	Emissions database for global atmospheric research (EDGAR)	[12,33]
2	Open-source data inventory for anthropogenic CO <sub>2</sub> (ODIAC)	[6,34]
3	Global carbon project (GCP)	[7]
4	Global infrastructure emission database (GID)	[35]
5	China high-resolution emission gridded data (CHRED)	[36]

型数据 (SYNMAP, 分辨率为1 km) 提供; 模型输入所需要的增强型植被指数 (EVI) 和地表水指数 (LSWI) 从高分辨率遥感数据 (MOD09A1)<sup>†</sup>提取, 并运用空间插值的方法将EVI和LSWI及其他参数数据对应于目标区域网格。

#### 2.1.4. CO<sub>2</sub>浓度初始场和边界场

各类CO<sub>2</sub>浓度场 (人为源和背景场) 的初始条件和边界条件采用 CarbonTracker 系统的全球输出产品[38–39]。CarbonTracker 系统的数据产品在中国区域的空间分辨率为1° × 1°, 垂直划分为34层, 时间分辨率为3 h。该产品中包含的CO<sub>2</sub>浓度场有CO<sub>2</sub>总浓度、生物燃烧源浓度和化石燃料源浓度等。

#### 2.1.5. CO<sub>2</sub>浓度观测数据

本文观测数据包含伪观测数据和真实观测数据。其中, 伪观测数据是指WRF-GHG [40]基于理想人为碳排放模拟的CO<sub>2</sub>浓度提取后作为观测值参与同化。真实观测数据为山西省6个高精度地面观测站, 用其对山西省的人为碳排放进行同化反演并分析。在进入同化系统之前, 需要对CO<sub>2</sub>观测数据进行严格的质量控制。目前采用的Picarro温室气体分析仪理论上可以通过多股已知浓度的标气校正, 实现0.1 ppm的观测精度, 但在实际观测中存在标气浓度偏移缺失、样气异常偏移、水汽去除不到位等多种问题, 影响观测质量, 因此需要严格、统一的数据质量控制确保观测数据可靠、精度达标。本研究使用了一套温室气体观测质控、筛分及拟合一体化处理系统对山西省6个地面观测站的CO<sub>2</sub>浓度数据进行处理, 形成一套质控完整、标准统一的地基高精度CO<sub>2</sub>浓度数据集。

#### 2.2. WRF-GHG 模式简介

CCMVS-R 是基于版本V3.9.1的WRF-GHG模型进行的研发, WRF-GHG模式是基于中尺度天气预报模式WRF发展而来, 主要用来模拟温室气体CO<sub>2</sub>、CO和CH<sub>4</sub>。WRF模型由国家大气研究中心 (NCAR) 于20世纪90年代开发。WRF-GHG模式可以模拟大气和陆地生态系统之间的温室气体交换, 同时考虑大气扩散和输送等过程对温

室气体的影响, 模拟和预测温室气体在时间和空间上的分布特征。WRF-GHG最初被发展用来在BARCA (Balanço Atmosférico Regional de Carbono na Amazônia) 项目中模拟亚马逊流域的大气温室气体 (CO<sub>2</sub>、CH<sub>4</sub>和CO)。对于温室气体CO<sub>2</sub>, 它是WRF模型和植被光合呼吸模型VPRM的直接动态耦合, 主要用来模拟高分辨率自然碳通量的时空分布。在结构上, WRF-GHG是在WRF-Chem的基础上进行开发的, 在registry.ghg注册表中添加了相应输入和输出变量 (ebio\_gee、ebio\_res、e\_co2、co2\_ant、co2\_bio、co2\_oce、co2\_bck等), 并增加了module\_ghg\_fluxes.F等温室气体模块。

各种来源浓度变量CO<sub>2</sub>\_ANT、CO<sub>2</sub>\_BIO、CO<sub>2</sub>\_OCE、CO<sub>2</sub>\_BCK如表2所示, 分别代表人为源产生的CO<sub>2</sub>浓度变化、生物活动产生的CO<sub>2</sub>浓度变化、海洋通量产生的CO<sub>2</sub>浓度变化和大气背景浓度值。有关CO<sub>2</sub>通量源不仅可以调用外部文件即离线调用 (ext.), 也可以模式在线计算 (int.)。时间步长可以按照半小时、一天或者WRF时间步长来设定, 上述设置均可以通过namelist.input文件来控制。

表2 registry.ghg中定义的CO<sub>2</sub>浓度变量

Concentration variable (ppm)	Variable description
CO <sub>2</sub> _ANT	Changes in CO <sub>2</sub> concentration from anthropogenic emissions
CO <sub>2</sub> _BIO	Changes in CO <sub>2</sub> concentration from biogenic activity
CO <sub>2</sub> _OCE	Changes in CO <sub>2</sub> concentration from ocean fluxes
CO <sub>2</sub> _BCK	Atmospheric CO <sub>2</sub> background concentration

由于文章篇幅的限制, CCMVS-R区域高精度碳同化系统针对VPRM生态诊断模型对自然碳通量的模拟优化研究, 将会在其他研究成果中做详细描述。该研究所用自然碳通量为优化之后的结果, 因此在本研究中认为自然碳通量不存在误差, 仅同化反演人为碳排放。

#### 2.3. CCMVS-R 构建流程

区域高精度碳同化系统CCMVS-R主要采用FORTRAN和Python研发, 实现多核并行计算。FORTRAN语言作为一门科学计算语言, 受到国内外众多学者的青睐。Python语言是一种面向对象的解释型计算机编程语言, 具有强大而丰富的计算库。CCMVS-R构建流程主要包括四部分:

(1) 运行蒙特卡洛的方法产生集合扰动, 然后运用本

<sup>†</sup> <https://ladsweb.modaps.eosdis.nasa.gov/missions-and-measurements/products/MOD09A1>.

征正交分解 (POD) 和四维变分 (4DVar) 计算集合的特征值和特征向量;

(2) 将获取的基向量 (即人为碳排放) 以及均值状态向量替换掉 WRF-GHG 模式的 CO<sub>2</sub> 初始人为碳排放, 并在 Linux 系统上提交并行集合任务;

(3) 运行脚本程序动态监听集合任务, 所有任务完成后, 解析每个集合及其均值的模拟结果, 结合 CO<sub>2</sub> 浓度观测数据运用 POD 4DVar 的方法构建代价函数;

(4) 通过代价函数求解获取的后验人为碳排放数据更新 WRF-GHG 模式的人为碳排放输入, 模式重新运行该同化窗口, 由此得到的 CO<sub>2</sub> 浓度产品即为人为碳排放清单优化之后的 CO<sub>2</sub> 浓度模拟值。

区域碳同化系统按照以上操作一直循环运行下去, 直至所有同化结束, 其示意图如图 1 所示。

2.4. POD 4DVar 高效同化方法介绍

本研究将本征正交分解法 (POD) 应用到四维变分同化 (4DVar) 算法中 [41-42], CCMVS-R 是基于 WRF-GHG 模型构建的, 它在很大程度上降低了同化反演所需的计算机资源, 提高了运算效率和估算精度, 其空间分辨率可达公里尺度。POD 4DVar 是一种简单易行的方法, 它运用蒙特卡洛的方法生成类似于集合卡尔曼滤波方法 (EnKF) 的四维样本集合, 其分布为高斯分布, 均值为

0, 不确定性为 30%。由于 POD 正交基具有最小二乘意义上的最优性, 将 POD 方法应用于四维空间的预报集合提取正交基, 可以捕获预报集合的更多能量, 更好地表征四维变量的空间结构和时间演变特征。该方法无需积分伴随模式, 在运行和维护上都较为简便。

由于传统的 4DVar 数据同化方法需要求取切线和伴随线性算子, 然而对于非线性的模型算子是非常困难的。POD 4DVar 能够把隐式的优化问题显式化, 用一组基向量捕捉数据的时空演变特征。这种方法不仅简化了数据同化的过程, 而且保留了传统 4DVar 的两大优势: ①物理模型提供了强大的动态约束; ②在一个同化窗口中可以把多个时次的观测数据同时引入。尤其当初始场误差和预报模型不确定性明显的模式运用 POD 4DVar 方法进行数据同化, 其同化效果尤为明显。传统的 4DVar, 通过模型的模拟值与观测值之间的差异构造代价函数 [式 (1)], 对代价函数求导获取后验人为碳排放  $\vec{x}_a$ 。

$$J(\vec{x}_0) = (\vec{x}_0 - \vec{x}_b)^T B^{-1}(\vec{x}_0 - \vec{x}_b) + \sum_{j=1}^S [\vec{y}_j - H_j(\vec{x}_j)]^T R_j^{-1}[\vec{y}_j - H_j(\vec{x}_j)] \quad (1)$$

$$\vec{x}_j = M_{t_0 \rightarrow t_j}(\vec{x}_0) \quad (2)$$

式中, T 代表矩阵转置;  $\vec{x}_b$  为背景值;  $j$  代表 CO<sub>2</sub> 浓度观测时间序列;  $H_j$  代表观测算子;  $\vec{y}_j$  代表观测时间序列  $t_j$  ( $j=$

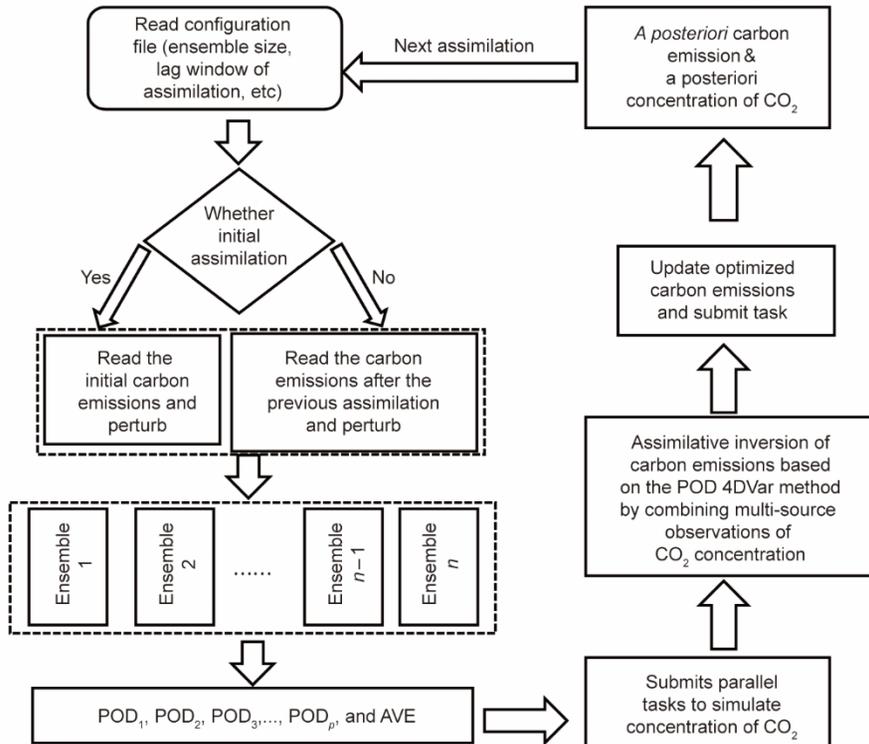


图 1. CCMVS 构建流程示意图。AVE 表示集合的平均值;  $p$ : POD 模式数。

1, ..., S) 对应的观测值;  $M_{t_0 \rightarrow t_j}$  代表预测模型; 矩阵  $\mathbf{B}$  和  $\mathbf{R}$  分别代表背景误差和浓度观测误差协方差。  $\vec{x}_0$  代表同化窗口初始时刻的控制变量。在代价函数中,  $\vec{x}_j$  通过前向积分公式 (2) 与  $\vec{x}_0$  联系在一起。很显然代价函数关于  $\vec{x}_0$  的梯度值很难获取, 然而 POD 4DVar 方法大大简化了其计算过程。在 POD 4DVar 同化算法中, 假设在同化窗口中有  $S$  个时间序列, 用蒙特卡洛方法在  $t=t_0$  时刻对初始背景场添加扰动, 生成  $N$  个初始场集合  $\vec{x}_n(t_0), n=1, 2, \dots, N$ 。通过公式 (2) 获得所用同化窗口内的, 所有集合的状态变量:

$$\vec{X}_n = (\vec{x}_n(t_0), \vec{x}_n(t_1), \dots, \vec{x}_n(t_s)), n=1, 2, \dots, N \quad (3)$$

下一步是计算适当的基向量。  $N$  组状态向量的平均值表示如下:

$$\bar{X} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \vec{X}_n \quad (4)$$

$$\delta X_n = \vec{X}_n - \bar{X}, n=1, \dots, N \quad (5)$$

其构建的矩阵  $\mathbf{A}(M \times N) = (\delta X_1, \dots, \delta X_N)$ ,  $M = M_g \times M_v \times (S+1)$ , 其中,  $M_g$ 、 $M_v$  分别表示模式空间格点数和模型变量数 (这里仅代表人为碳排放)。为了计算 POD 模式, 需要求解特征值问题:

$$(\mathbf{A}\mathbf{A}^T)_{M \times M} \mathbf{V} = \lambda \mathbf{V} \quad (6)$$

在实际中  $M \gg N$ , 因此, 为了高效便捷地求解, 将其转化为  $N \times N$  的特征值问题, 转化方式如下:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{V} &= \lambda \mathbf{V} \\ \mathbf{A}\mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{V} &= \mathbf{A} \lambda \mathbf{V} \\ \mathbf{A}\mathbf{A}^T (\mathbf{A} \mathbf{V}) &= \lambda (\mathbf{A} \mathbf{V}) \end{aligned} \quad (7)$$

此时转化为求取  $N \times N$  矩阵特征值的问题, 计算效率大大提高, 可以满足具有大维度特征和高时空分辨率的区域同化系统的高效计算需求。

$$T^* \mathbf{V}_n = \lambda_n \mathbf{V}_n, n=1, 2, \dots, N \quad (8)$$

式中,  $T^* = (\mathbf{A}^T \mathbf{A})_{N \times N}$ ;  $\mathbf{V}_n$  是特征向量  $\mathbf{V}$  的第  $n$  列;  $\lambda_n$  是特征值  $\lambda$  第  $n$  行。选择非零特征值  $\lambda_n (1 \leq n \leq N)$  进行正交化, POD 模式由  $\phi_n = \frac{\mathbf{A} \mathbf{V}_n}{\sqrt{\lambda_n}} (1 \leq n \leq N)$  给出。在四维空间中,  $\vec{X}_a$

可以用 POD 重写, 其表示如下:

$$\vec{X}_a = \bar{X} + \sum_{n=1}^p \beta_n \phi_n \quad (9)$$

式中,  $p$  为 POD 模式的数目, 其大小的确定按照下面的公式:

$$p = \min \left\{ p, I(p) = \frac{\sum_{n=1}^p \lambda_n}{\sum_{n=1}^N \lambda_n} : I(p) \geq \gamma \right\} \quad (10)$$

式中,  $0 < \gamma < 1$  表示由降维空间  $D^p = \text{span}\{\phi_1, \dots, \phi_p\}$  所捕

捉到的信息占信息总量的百分比。为了捕捉 POD 基的大部分能量, 允许  $\gamma$  在 1 附近取值。根据公式 (9) 重构代价函数 (1), 控制变量  $\beta = (\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_p)^T$  代替初始时刻的状态变量  $\vec{X}_0$ , 如此控制变量在代价函数中被显式处理, 在求取代价函数最小值的过程中, 不再需要切线算子和伴随模式。求取代价函数的最小值问题, 转化成用一般的优化算法求取  $\beta$  的问题。然而  $\beta$  的求取仍然需要迭代过程, 依旧有很高的计算量。该问题的解决流程如下。首先构建 POD 模式矩阵:

$$\Phi = (\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_p) \quad (11)$$

式中,  $\phi_n = (\phi_n(t_0), \phi_n(t_1), \dots, \phi_n(t_s))^T, n=1, 2, \dots, p$ 。公式 (11) 变换如下:

$$\Phi = (\Phi_0, \Phi_1, \dots, \Phi_S)^T \quad (12)$$

式中,  $\Phi_j = (\phi_1(t_j), \phi_2(t_j), \dots, \phi_p(t_j))$ , 公式 (9) 被重写如下:

$$\vec{X}_a = \bar{X} + \Phi \beta \quad (13)$$

利用公式 (13) 重写成本函数:

$$J(\beta) = (\bar{x}(t_0) + \Phi_0 \beta - \bar{X}_b)^T \mathbf{B}^{-1} (\bar{x}(t_0) + \Phi_0 \beta - \bar{X}_b) + \sum_{j=1}^S [\vec{y}_j - H_j \bar{x}(t_j) - H_j \Phi_j \beta]^T \mathbf{R}_j^{-1} [\vec{y}_j - H_j \bar{x}(t_j) - H_j \Phi_j \beta] \quad (14)$$

式中,  $\vec{y}_j = (y_{j1}, \dots, y_{jm_j})$  为  $\text{CO}_2$  浓度观测向量,  $m_j$  是观测向量  $\vec{y}_j$  的大小, 利用高斯分布扰动可以生成  $N$  组观测数据, 其不确定性为站点观测精度, 表示如下:

$$Y_{ij} = \vec{y}_j + \varepsilon_i, i=1, \dots, N \quad (15)$$

式中,  $\varepsilon_i = (\varepsilon_{i1}, \varepsilon_{i2}, \dots, \varepsilon_{im_j})^T$ ,  $N$  个集合的扰动平均值为 0, 用矩阵表示为:  $\mathbf{E}_j = (\varepsilon_{1j}, \varepsilon_{2j}, \dots, \varepsilon_{Nj})$ , 观测误差协方差矩阵可按式求得:

$$\mathbf{R}_j = \frac{\mathbf{E}_j \mathbf{E}_j^T}{N-1}, j=1, \dots, S \quad (16)$$

背景误差协方差  $\mathbf{B}$  的构造方式类似于观测误差协方差  $\mathbf{R}$  的构造方式。

由于  $\mathbf{R}_j^{-1}$  是对称矩阵, 代价函数的梯度  $[\nabla J(\beta)]$  通过简单的计算就能获得:

$$\begin{aligned} \nabla J(\beta) &= (\Phi_0)^T \mathbf{B}^{-1} (\bar{x}(t_0) - \bar{x}_b + \Phi_0 \beta) + \\ &\sum_{j=1}^S - [H_j \Phi_j]^T \mathbf{R}_j^{-1} [\vec{y}_j - H_j \bar{x}(t_j) - H_j \Phi_j \beta] \end{aligned} \quad (17)$$

为了求取代价函数最小值, 需要  $\nabla J(\beta) = 0$ , 即:

$$\begin{aligned} &\left( (\Phi_0)^T \mathbf{B}^{-1} \Phi_0 + \sum_{j=1}^S - [H_j \Phi_j]^T \mathbf{R}_j^{-1} [H_j \Phi_j] \right) \beta = \\ &\sum_{j=1}^S [H_j \Phi_j]^T \mathbf{R}_j^{-1} [\vec{y}_j - H_j \bar{x}(t_j)] - (\Phi_0)^T \mathbf{B}^{-1} (\bar{x}(t_0) - \bar{x}_b) \end{aligned} \quad (18)$$

经过上述一系列变换后,公式(18)可以不需要迭代过程直接计算获取,这大大简化了计算,提高了同化反演效率。

## 2.5. CCMVS-R 实验方案设置

本文通过两套实验方案对系统的模拟效果进行验证,方案1主要为了验证系统的有效性和敛散性,因此观测数据也是假定的伪观测数据;方案2基于山西省高精度地基观测数据,对2019年山西省的人为碳排放进行同化反演。两套实验方案除了观测数据不同,其他设置保持一致,采用两层区域嵌套模拟,分辨率为27 km和9 km,两层区域x-y方向的网格点分别为64×56个和64×91,核心嵌套区选择碳排放大省山西省(图2),其中绿色圆圈代表山西省6个CO<sub>2</sub>浓度观测站。同化反演仅在9 km嵌套区域内进行,外层嵌套为该区域提供边界条件。

本次实验同化窗口大小设置为8天,模拟时间为9天,1天的spin-up使气象场模拟结果尽可能稳定(图3)。同化窗口的大小作为同化系统中的一个关键参数,需要根据地基和卫星观测数据的实际情况进行设定。WRF-GHG模拟中使用的主要物理过程参数化方案包括:RRTM(rapid radiative transfer model)长波辐射方案[43]、Dudhia短波辐射方案[44]、YSU(Yonsei University)边界层参数方案[45]、Noah LSM(land surface model)陆面参数方案[46]、

Kain-Fritsch积云参数化方案[47],这些物理参数化方案已经过大量实验验证,具有很好的模拟效果。

本文采用80个集合样本进行同化反演。理论上,足够多的样本可以覆盖更多的状态变量信息,同化效果应该更好,但考虑到计算成本和成本,集合的大小应根据计算资源合理分配。此外,使用10个节点,约300个核进行同化反演计算。方案1设置如下:

(1) 假定EDGAR的原始输入数据为理想碳排放,基于此清单模拟的CO<sub>2</sub>浓度作为伪观测数据,参与理想实验的同化;

(2) 在EDGAR原始清单的基础上加上500%的不确定性,  $FF_{pri} = FF + FF \times rand$  作为初始排放数据参与同化(其中产生的负值取绝对值),式中,  $FF_{pri}$  为先验人为碳排放,  $FF$  为假定的理想人为碳排放,  $rand$  为随机扰动系数;

(3) 模式采用的CO<sub>2</sub>浓度和边界条件数据来自CarbonTracker系统(1°×1°);

(4) VPRM模式输入数据来自MOD09A1数据(500 m, 8天);

(5) WRF气象边界场数据为FNL数据(2019年, 1°×1°);

(6) 伪观测站点6个,其中站点位置为山西省的6个CO<sub>2</sub>浓度监测站所处位置(图2),图中红色符号标记位置

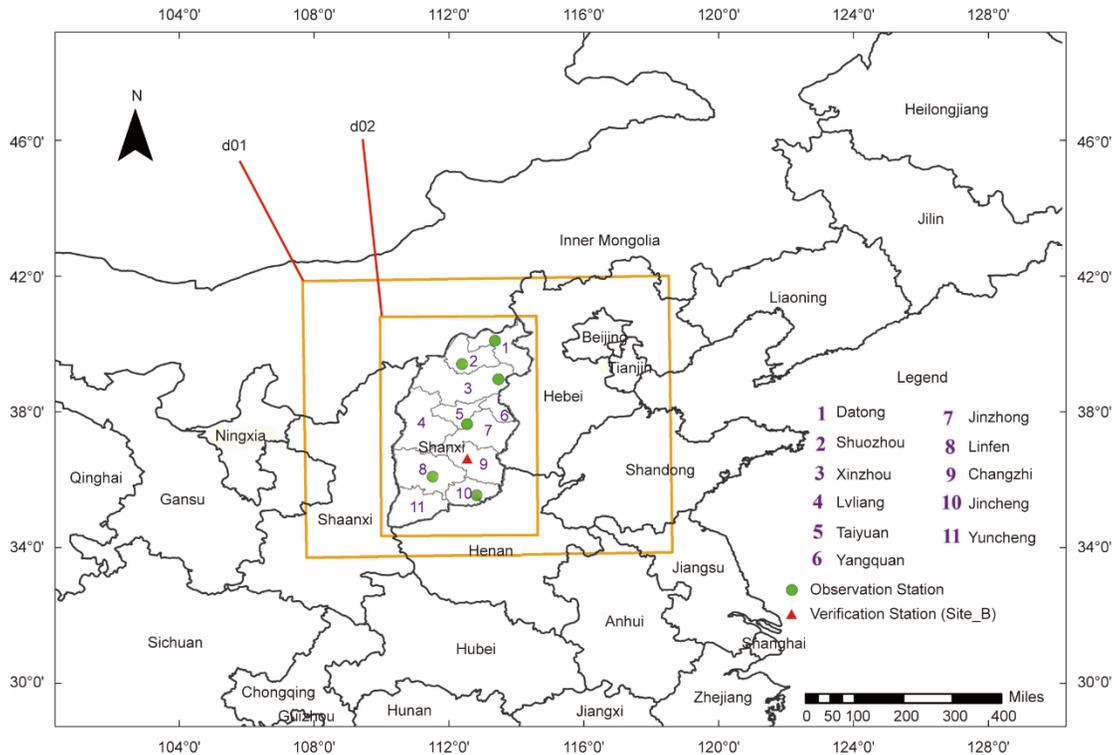


图2. 嵌套模拟区域示意图。d01代表第一层, d02代表内部嵌套层。

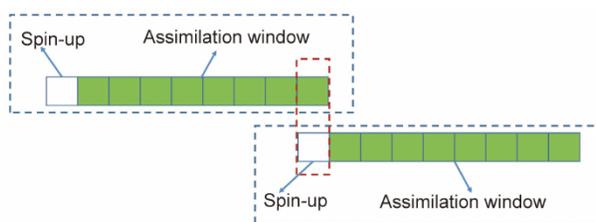


图3. 同化系统运行周期示意图。

为未参与同化的假定理想验证站（图2）。

方案2在气象驱动数据、边界条件、初始条件等方面与理想方案设置保持一致，但观测数据来自山西省6个高精度地面观测站，参与同化的先验人为碳排放采用2018年EDGAR排放清单。

### 3. 结果与讨论

#### 3.1. 基于理想实验评估同化效果

本文设计的理想实验均是在完美模式下进行的，目的是为了检验构建的CCMVS-R区域碳同化系统能否很好地同化反演人为碳排放。图4（a）为采用2018年EDGAR排放清单假定的理想人为碳排放，从分布上可以明显看出太原市、临汾市、长治市和大同市等部分区域排放较高，其他区域则排放较低，这与山西省的工业和居民区分布密切相关。图4（b）为在理想人为碳排放的基础上每个格网随机赋予500%的不确定性扰动所获得的分布图，从图中可以看出整个分布明显高于理想人为碳排放，将其作为先验人为碳排放进行CCMVS-R同化效果的分析。图4（c）为同化后的人为碳排放分布图，空间分布更趋向为假定的

理想人为碳排放，对先验人为碳排放的一些高值区域有了明显的纠正。对理想人为碳排放、先验人为碳排放和后验人为碳排放对应格网进行统计分析，先验人为碳排放与理想人为碳排放的相关性为0.89，均方根误差（RMSE）为 $4.89 \times 10^4 \text{ mol} \cdot \text{km}^2 \cdot \text{h}^{-1}$ ，同化后的人为碳排放与理想人为碳排放的相关性提高到0.94，均方根误差降为 $5.18 \times 10^3 \text{ mol} \cdot \text{km}^2 \cdot \text{h}^{-1}$ ，相关性虽然提升不高，相对于先验人为碳排放只提高了5.5%，但是均方根误差却显著降低，与先验人为碳排放相比降低了89.4%，同化效果明显。

图5（a）为山西省在一次同化过程中人为碳排放的累计柱状图，理想碳通量为 $5.24 \times 10^6 \text{ mol} \cdot \text{h}^{-1}$ ，扰动之后的先验碳通量为 $1.82 \times 10^7 \text{ mol} \cdot \text{h}^{-1}$ ，同化之后的后验人为碳排放为 $5.97 \times 10^6 \text{ mol} \cdot \text{h}^{-1}$ ，先验人为碳排放为理想人为碳排放的3.47倍，后验人为碳排放是理想人为碳排放的1.14倍。图5（b）为同化前后的人为碳排放与理想人为碳排放相应格网点的差值，黑线为先验人为碳排放与理想人为碳排放之间的差值，红线为后验人为碳排放与理想人为碳排放之间的差值，从图中可以看出同化之后格网之间的差值主要集中在0轴线附近，同化之后的人为碳排放有了非常明显的改善。

图4和图5从空间分布和排放量统计上评估了同化效果，图6从同化前后的 $\text{CO}_2$ 浓度模拟值与伪观测值之间的差异来分析同化效果。其中，黑线代表 $\text{CO}_2$ 浓度伪观测值，红线代表人为碳排放同化之前的 $\text{CO}_2$ 浓度模拟值，蓝线代表同化之后的 $\text{CO}_2$ 浓度模拟值，其中图6（a）和（b）分别为参与同化的太原站和未参与同化的验证站的小时浓度平均值，从图中可以看出未参与同化的验证站Site\_B同

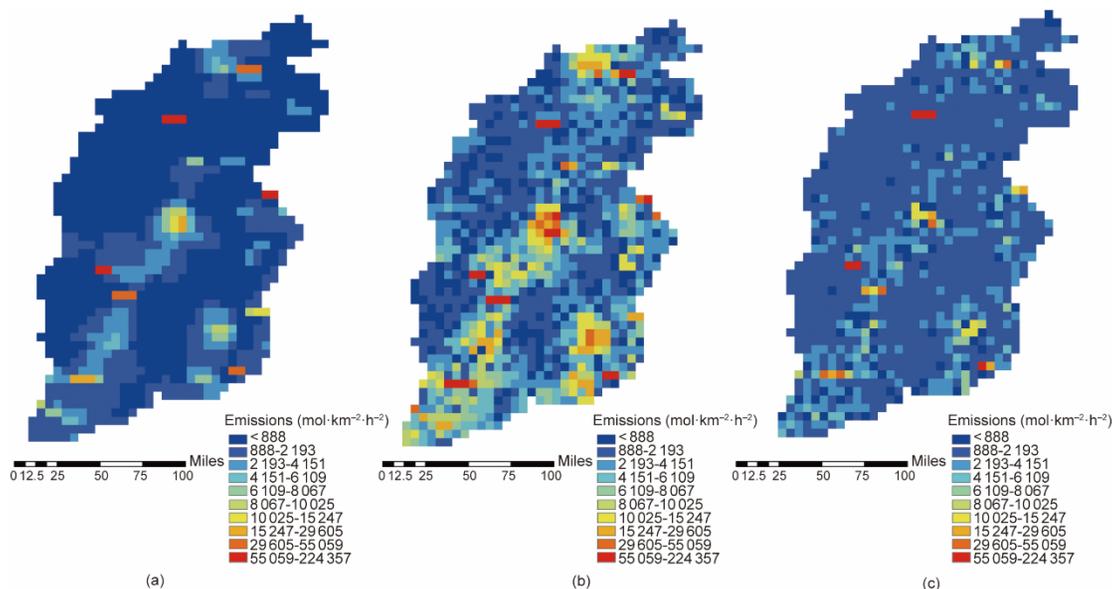


图4. 同化前后的人为碳排放与理想人为碳排放分布图。其中，（a）理想人为碳排放；（b）先验人为碳排放；（c）后验人为碳排放。

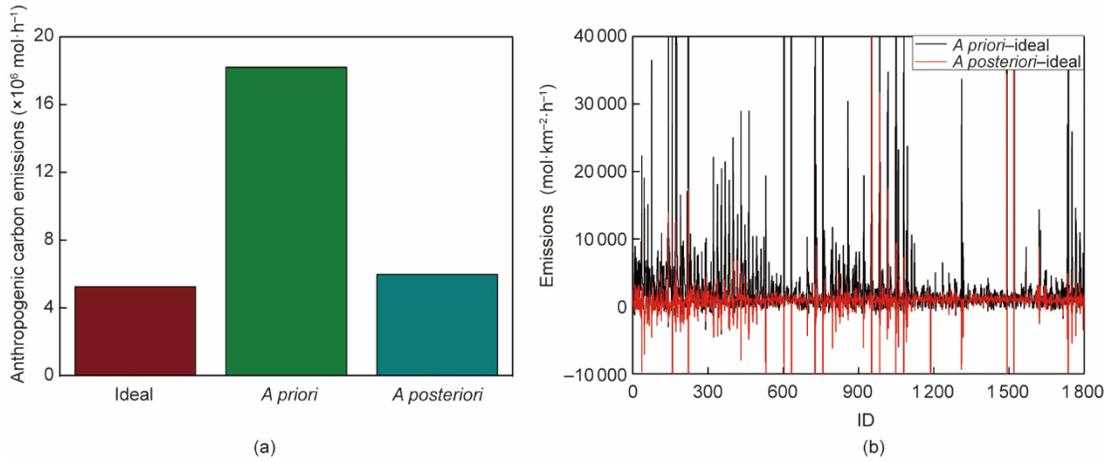


图5. 山西省同化前后人为碳排放与理想人为碳排放对比图。(a) 统计柱状图；(b) 差值折线图。ID表示人为碳排放网格点的编号。

化前后  $\text{CO}_2$  浓度模拟值与伪观测数据虽有一定偏差但也基本吻合。图6 (c) 和 (d) 显示了参与同化的太原站和未参与同化的验证站在一次同化过程中的  $\text{CO}_2$  小时浓度模拟值，与图6 (a) 和 (b) 一致，同化之后模拟效果明显提高，两个监测站同化之后的相关性接近于1，均方根误差接近于0。这些结果表明，CCMVS-R在理想实验中能很好地捕捉到站点的日变化信息，有望基于高精度的地基观测数据，较高准确度地同化反演区域人为碳排放。

### 3.2. 山西省高分辨率人为 $\text{CO}_2$ 排放反演

图7为CCMVS-R反演的2019年山西省9 km后验人为碳排放与先验人为碳排放的对比分析，这一对比表明，

“自下而上”的统计方法可能低估了该地区的排放量。山西省人为碳排放总体呈中部较强、东西两侧较弱的分布特征。中部地区人为碳排放呈南北向线状聚集特征，且存在三个强度较高的排放中心，分别位于朔州大同交接处、太原市南部及临汾运城交界处。

反演结果与5套人为碳排放清单产品进行对比，5套清单产品为：GID (Global Infrastructure Emission Database)、ODIAC (Open-source Data Inventory for Anthropogenic  $\text{CO}_2$ )、EDGAR (Emissions Database for Global Atmospheric Research)、CHRED (the China High Resolution Emission Gridded Data) 和 GCP (Global carbon budget)。对

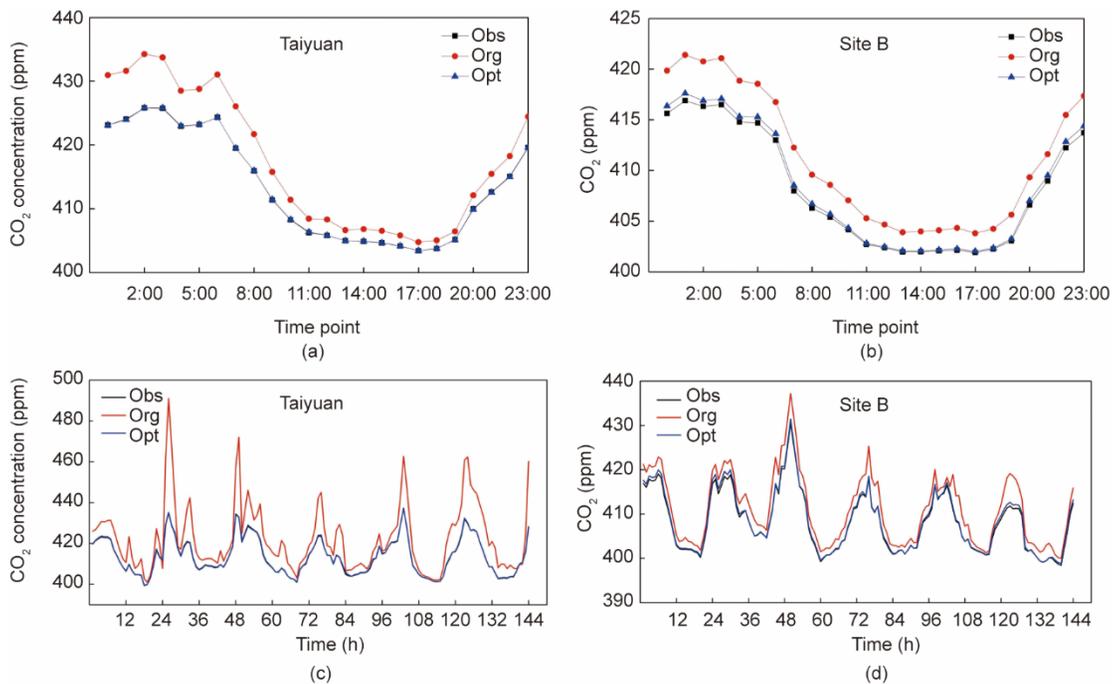


图6. 同化前后  $\text{CO}_2$  浓度模拟值与伪观测值对比分析图。其中，(a) 和 (b) 分别为太原站和 Site B 的  $\text{CO}_2$  浓度小时平均值；(c) 和 (d) 分别为太原站和 Site B 在一次同化过程中的小时  $\text{CO}_2$  浓度模拟值。Obs 表示伪观测的  $\text{CO}_2$  浓度，Org 表示同化前的模拟  $\text{CO}_2$  浓度，Opt 表示同化后的模拟  $\text{CO}_2$  浓度。

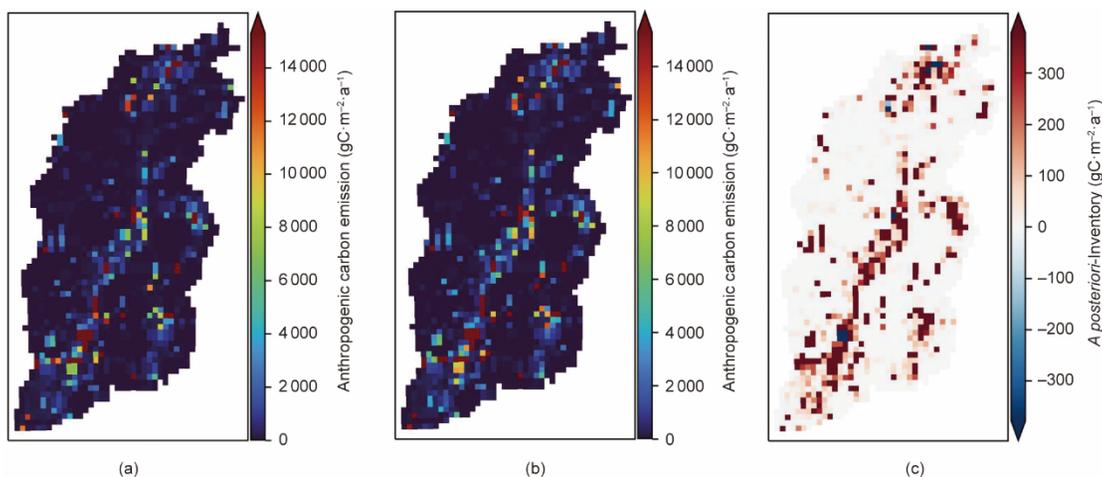


图7. 山西省人为碳排放(9 km)同化前后对比分析图。(a) 先验人为碳排放; (b) 后验人为碳排放; (c) 后验与先验人为碳排放之间的差值。

比结果(表3)表明, 后验清单在山西省各个城市的统计值与CHRED较为接近, 但总体而言CCMVS-R同化反演的后验人为碳排放量比5套清单产品高出约28.6%(17%~38%), 尤其是ODIAC人为碳排放清单产品排放量可能存在较大低估。

表3 后验清单与5套清单产品对比分析表

City/Province	GCP	ODIAC	EDGAR	CHRED	GID
Datong	0.90	1.07	0.84	0.86	0.68
Taiyuan	0.87	0.77	0.70	1.04	0.78
Xinzhou	1.20	1.14	1.14	1.05	1.11
Jinzhong	0.69	0.45	0.65	0.63	0.65
Jincheng	1.72	1.07	1.43	0.80	1.58
Shuozhou	0.40	1.08	0.79	0.95	0.85
Yuncheng	0.60	0.39	0.56	0.79	0.63
Changji	1.48	0.80	1.10	0.75	0.89
Yangquan	0.58	0.71	0.86	0.82	0.58
Linfen	0.24	0.19	0.25	0.80	0.46
Lvliang	0.82	1.30	1.15	0.75	2.20
Shanxi	0.70	0.62	0.67	0.83	0.75
Mean	0.38	0.31	0.29	0.18	0.39

Value: inventory products divided by the post-assimilation inventory. Mean: AVERAGE (ABS (Value-1)).

图8为山西省地级市后验人为碳排放和5套排放清单产品统计柱状图, 图中显示后验的人为碳排放最高城市是临汾市, 以山西省两大碳排放城市临汾市和太原市为例, 基于2019年的后验排放量和GCP、GID、ODIAC三种清单产品进行统计分析。结果显示, GID数据产品临汾市人为碳排放量的统计值大于太原市, 这与后验排放量的统计结果一致; 但对其他两套排放清单(GCP和ODIAC)而

言, 大同市的碳排放量更高。

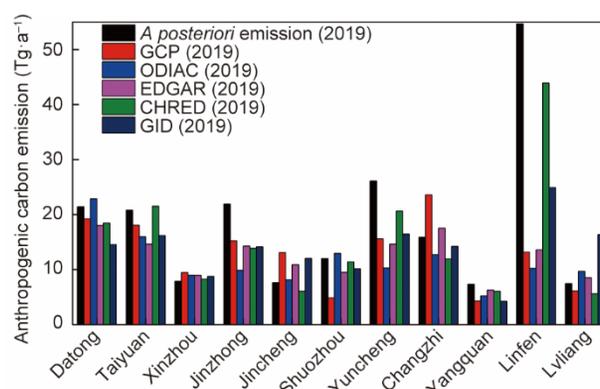


图8. 山西省地级市后验人为碳排放与清单产品统计对比分析。

为了验证后验人为碳排放的合理性, 分析CO<sub>2</sub>的伴生气体CO在大气中的污染浓度, CO污染浓度观测数据来自中国环境监测总站<sup>†</sup>, 把所收集的2019年大同市和临汾市内的6+6个监测站CO浓度观测资料, 分别按站点所在城市、月份进行统计分析, 以此代表大同市和临汾市的平均观测浓度。图9(a)为大同市(黑线)和临汾市(红线)CO浓度月平均观测值。除了3月、5月和7月临汾市的CO浓度低于大同市以外, 其他月份临汾市的CO浓度与大同市相近或者明显高于大同市, 尤其是冬季。图9(b)为大同市和临汾市CO浓度年平均观测, 临汾市(红色柱状体)约比大同市(黑色柱状体)高0.16 mg·m<sup>-3</sup>, 并且临汾市的面积约为大同市的1.43倍。这些结果验证了, 后验人为碳排放临汾市高于大同市是合理的, ODIAC和GCP清单产品由于采用时间的滞后性和“自下而上”统计方法确定排放因子, 这些方法差异很大, 误差也很大[48-49], 因此, 得出的结果可能存在较大偏差。

<sup>†</sup> <http://www.cnemc.cn/>.

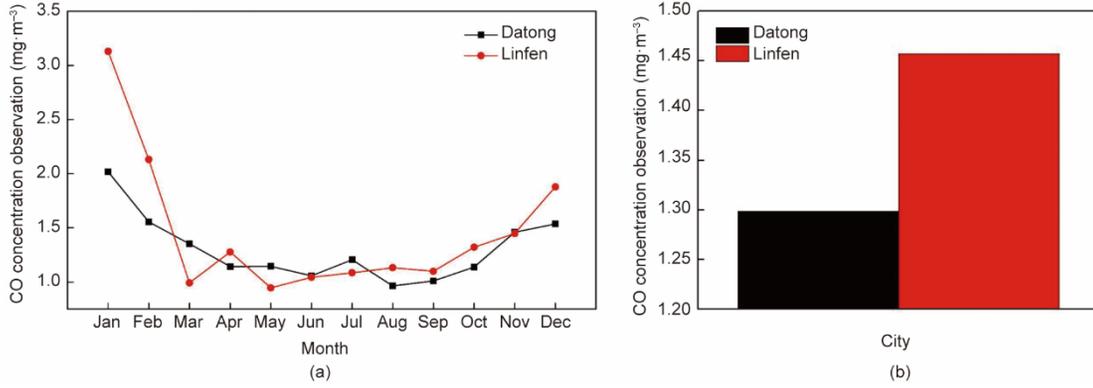


图9. 山西大同和临汾空气质量监测站CO浓度观测对比分析图。(a) CO浓度观测月平均；(b) CO浓度观测年平均。

图10为山西省大同监测站和太原监测站2019年2月1日至4月30日人为碳排放同化前后的CCMVS-R系统模拟的CO<sub>2</sub>浓度与观测值日平均(24 h)的散点图,图中横轴代表观测值,纵轴代表同化前后的模拟值。大同监测站和太原监测站同化之后CO<sub>2</sub>浓度模拟值与观测值之间的相关系数(R)分别高达0.80和0.83,平均偏差(MBE)分别为-0.25和1.01 ppm。与同化前大同和太原监测站的相关系数0.60和0.76、平均偏差-5.92和-11.1 ppm相比,有明显改善。同化前的模拟效果与其他研究报告类似,如Diao等[50]的研究,在没有同化大气CO<sub>2</sub>数据的情况下,运用WRF-GHG模型获得的CO<sub>2</sub>浓度与观测值的相关系数约为0.64,平均偏差约为6.87 ppm。这些结果表明人为碳排放优化之后,更接近实际排放情况。图10结果显示,在某些日期(尤其紫色矩形范围内)系统模拟值与观测值

之间的偏差较大,这与系统偏差、观测误差和小尺度的人为碳排放事件难以捕捉有很大关系。但是,总体来说同化之后的系统模拟值能很好地捕捉到CO<sub>2</sub>浓度的日均值变化信息。

图11为大同监测站和太原监测站2019年2月1日至4月30日CCMVS-R系统模拟值与站点观测数据日平均时间序列图,横轴代表时间,纵轴代表同化后CCMVS-R系统模拟值(红线)与观测值(黑线)的CO<sub>2</sub>浓度值(ppm)。图11的折线图表明CCMVS系统模拟值能很好地捕捉到CO<sub>2</sub>浓度的日平均变化信息,但是太原监测站的模拟效果不如大同监测站,尤其是图11紫色矩形框标注的日期内系统模拟值与观测值的偏差较大。造成这种偏差的可能原因:①太原监测站位于排放密集区(图7),这对观测结果影响较大;此外,观测数据受人为排放影响较

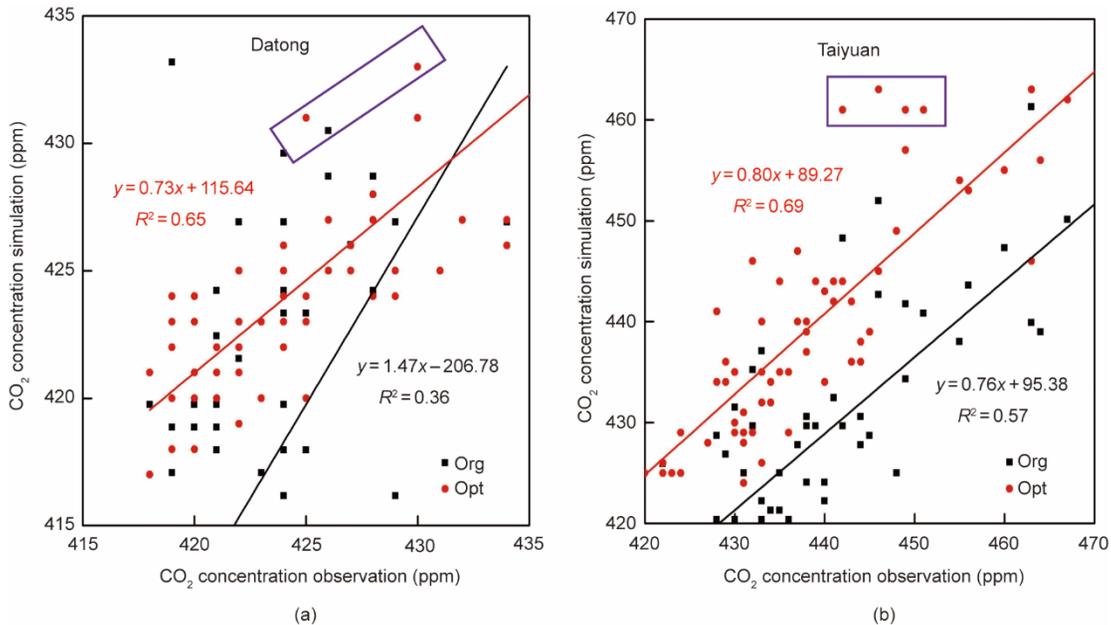


图10. CCMVS-R系统CO<sub>2</sub>浓度模拟值与观测值对比分析。(a)大同监测站；(b)太原监测站。黑色标记表示同化前的模拟值,红色标记表示同化后的模拟值。

大,会导致观测结果一天内波动较大,平均之后与模型的模拟值较大同监测站有较大差异。②日出后,由于太阳辐射,地表受到湍流的强烈混合,植被光合作用也加强,导致近地层大气中的 $\text{CO}_2$ 浓度持续下降,直到15:00左右达到最低值。随着光合作用减弱和大气湍流降低,地表附近的 $\text{CO}_2$ 浓度逐渐增加。在夜晚,大气边界层的稳定性增加,导致 $\text{CO}_2$ 在此层内不断积累,浓度持续增加,并在日出前达到当天的最高值。这些气象因素直接影响大气中的 $\text{CO}_2$ 浓度。因此,WRF-GHG模型对气象因素(包括温度和向下短波辐射等)的模拟精度在一定程度上影响大气 $\text{CO}_2$ 浓度的模拟效果,这也是在某些时间段模拟值与观测值之间存在较大偏差的原因。

### 3.3. CCMVS-R 系统优势

CCMVS-R 系统的良好表现源于其两个主要优势:

① CCMVS-R 是基于 WRF 模型开发的,通过结合大气驱动数据和模型参数化方案,反演的人为碳排放和 $\text{CO}_2$ 浓度数据更为真实。这比 Guo 等[51]使用模型递归的方法从 MODIS 和 GOSAT 数据中获得的人为碳排放有了显著改进。Guo 等的方法缺乏对大气传输模型的考虑,导致缺乏气象因素的进一步限制,因此具有相当大的不确定性。② CCMVS-R 基于 POD 4DVar 同化反演方法构建,在提高计算效率和估算精度的同时,从根本上减少了同化反演所需的计算机资源。该方法在一定程度上解决了区域碳同化系统的时空分辨率高、维数巨大、运行成本和计算效率限制等关键技术问题[49,52–53]。

## 4. 结论

基于 WRF-GHG 区域模式,运用 POD 4DVar 的方法构

建区域高精度碳同化系统 CCMVS-R,该系统实现了公里尺度人为碳排放的同化反演,为区域和局地尺度人为碳排放的精确估测提供了有效手段。为了验证 CCMVS-R 系统的有效性,设计了两个嵌套层,外层和内层区域的分辨率分别设置为 27 km 和 9 km。核心嵌套区选择碳排放大省山西省。

基于山西省 6 个高精度地面监测站点设计两套方案进行验证。方案 1 使用从 6 个地面监测站位置提取的 WRF-GHG 模式模拟值作为伪观测数据进行同化反演。方案 2 使用 6 个高精度地面监测站的观测资料进行同化反演,其他设置保持一致。理想实验的模拟结果显示:①同化后的人为碳排放很好地收敛于假定的理想碳通量,对先验碳通量的一些高值区域有了明显的纠正。CCMVS-R 同化前后的人为碳排放与理想碳通量的相关性从同化前的 0.89 提高到同化后的 0.94,均方根误差从同化前的  $4.89 \times 10^4 \text{ mol} \cdot \text{km}^2 \cdot \text{h}^{-1}$  下降为同化后的  $5.18 \times 10^3 \text{ mol} \cdot \text{km}^2 \cdot \text{h}^{-1}$ ,下降了 89.4%,实验说明了 CCMVS-R 系统收敛有效。②同化之后的人为碳排放结果作为 CCMVS-R 系统的输入,CCMVS-R 对 $\text{CO}_2$ 浓度的模拟能力大大提高。本次试验选取山西省参与同化的太原监测站和未参与同化的假定观测站 Site\_B 所模拟的伪观测数据验证 CCMVS-R 同化前后对 $\text{CO}_2$ 浓度的模拟能力。实验结果表明,同化之后模拟效果明显提高,同化后的 $\text{CO}_2$ 浓度与理想值的相关性接近 1,两者之间的均方根误差接近 0。

方案 2 同化了山西省的 6 个高精度地面监测站观测数据,得到了 2019 年的反演人为碳排放量,后验人为碳排放量的空间分布合理。山西省大部分城市的人为碳排放量有所增加,尤其是临汾市,这表明“自下而上”的排放清单可能低估了该市的人为碳排放。将后验人为碳排放统计结果与 5 套人为碳排放清单产品(GID、ODIAC、ED-

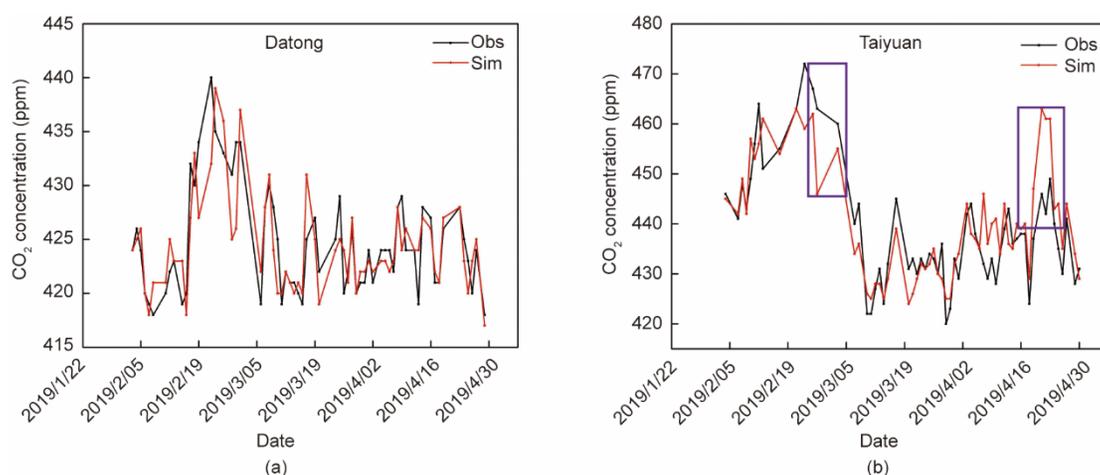


图 11. CCMVS-R 系统模拟值与观测值日变化对比分析(黑线代表观测值,红线代表模拟值)。(a)大同监测站;(b)太原监测站。

GAR、CHRED 和 GCP) 的平均值进行比较, 结果表明 CCMVS-R 同化反演的后验人为碳排放比 5 套清单产品高出约 28.6% (17%~38%), 特别是 ODIAC 清单产品, 由于时间的滞后性和“自下而上”统计方法上的误差, 可能比其他清单产品低估更多。

此外, 对比分析了山西境内的大同监测站和太原监测站 2019 年 2 月 1 日至 4 月 30 日同化之后 CO<sub>2</sub> 浓度模拟值与观测值之间的关系。结果表明, CCMVS-R 具有很好的模拟效果, 同化后模拟和观测的二氧化碳浓度相关系数分别高达 0.80 和 0.83, 平均偏差分别为 -0.25 和 1.01 ppm, 与同化前相比, 大同和太原监测站的相关系数和平均偏差均有明显改善。同化后的系统模拟值能够很好地捕捉到二氧化碳浓度的日均变化信息。反演结果表明, CCMVS-R 区域高精度碳同化系统具有很好的应用前景。

观测数据的数量和质量限制了区域碳同化系统的发展。在未来的研究中, CCMVS-R 将引入多源 CO<sub>2</sub> 浓度观测数据 (即地基观测数据、OCO-2/OCO-3、GOSAT/GOSAT-2、TanSat 等), 并将 CO<sub>2</sub> 的伴生气体 CO 引入区域大气 CO<sub>2</sub> 同化反演系统, 以弥补观测数据不足地区反演精度低的问题。这有可能进一步提高区域碳通量的反演精度。

## 致谢

本研究得到了国家自然科学基金委碳中和专项“多尺度自然-社会模型、数据支持和决策支撑系统顶层设计”(42341202)和中国气象科学研究院基本科学研究基金(2021Z014)的资助。作者感谢所有为本研究提供不可或缺的数据集的组织 and 团体。我们感谢张慧芳博士提供的 CO<sub>2</sub> 边界条件。

## Compliance with ethics guidelines

Lifeng Guo, Xiaoye Zhang, Juntong Zhong, Deying Wang, Changhong Miao, Licheng Zhao, Zijiang Zhou, Jie Liao, Bo Hu, Lingyun Zhu, and Yan Chen declare that they have no conflict of interest or financial conflicts to disclose.

## Appendix A. Supplementary data

Supplementary data to this article can be found online at <https://doi.org/10.1016/j.eng.2023.02.017>.

## References

- [1] Pachauri R, Meyer L, Plattner G, Stocker T. Contribution of working groups I, II and III to the fifth assessment report of the intergovernmental panel on climate change. Geneva: Intergovernmental Panel on Climate Change; 2014.
- [2] Canadell JG, Monteiro PM, Costa MH, Da Cunha LC, Cox PM, Alexey V, et al. Final government distribution—chapter 5: global carbon and other biogeochemical cycles and feedbacks. Report. Geneva: Intergovernmental Panel on Climate Change; 2021 Sep. Report No.: AR6 WGI.
- [3] Chandra N, Patra PK, Niwa Y, Ito A, Iida Y, Goto D, et al. Estimated regional CO<sub>2</sub> flux and uncertainty based on an ensemble of atmospheric CO<sub>2</sub> inversions. *Atmos Chem Phys* 2022;22(14):9215–43.
- [4] Ma J, Li L, Wang H, Du Yi, Ma J, Zhang X, et al. Carbon capture and storage: history and the road ahead. *Engineering* 2022;14:33–43.
- [5] Le Quéré C, Andrew RM, Canadell JG, Sitch S, Korsbakken JJ, Peters GP, et al. Global carbon budget 2016. *Earth Syst Sci Data* 2016;8(2):605–49.
- [6] Oda T, Maksyutov S, Andres RJ. The Open-source Data Inventory for Anthropogenic Carbon dioxide (CO<sub>2</sub>), version 2016 (ODIAC2016): a global, monthly fossil-fuel CO<sub>2</sub> gridded emission data product for tracer transport simulations and surface flux inversions. *Earth Syst Sci Data* 2018;10(1):87–107.
- [7] Jones MW, Andrew RM, Peters GP, Janssens-Maenhout G, De-Gol AJ, Ciais P, et al. Gridded fossil CO<sub>2</sub> emissions and related O<sub>2</sub> combustion consistent with national inventories 1959–2018. *Sci Data* 2021;8(1):2.
- [8] The Central People's Government of the People's Republic of China. China's achievements, new goals and new measures for nationally determined contributions. New York City: The United Nations Framework Convention on Climate Change; 2020. Chinese.
- [9] Liu Z, Sun T, Yu Y, Ke P, Deng Z, Lu C, et al. Real-time carbon emission accounting technology toward carbon neutrality. *Engineering* 2022;14:44–51.
- [10] Wei YM, Chen K, Kang JN, Chen W, Wang XY, Zhang X. Policy and management of carbon peaking and carbon neutrality: a literature review. *Engineering* 2022;14:52–63.
- [11] Zhang HN, Shen RR, Zhang XP, Kang JJ, Yuan JH. Implications and pathways of China's carbon neutrality: a review. *Clim Chang Res* 2022;18(2):240–52. Chinese.
- [12] Crippa M, Solazzo E, Huang G, Guizzardi D, Koffi E, Muntean M, et al. High resolution temporal profiles in the emissions database for global atmospheric research. *Sci Data* 2020;7(1):121.
- [13] Gregg JS, Andres RJ, Marland G. China: Emissions pattern of the world leader in CO<sub>2</sub> emissions from fossil fuel consumption and cement production. *Geophys Res Lett* 2008;35(8):L08806.
- [14] Liu Z, Guan D, Wei W, Davis SJ, Ciais P, Bai J, et al. Reduced carbon emission estimates from fossil fuel combustion and cement production in China. *Nature* 2015;524(7565):335–8.
- [15] Rayner P, Raupach M, Paget M, Peylin P, Koffi E. A new global gridded data set of CO<sub>2</sub> emissions from fossil fuel combustion: methodology and evaluation. *J Geophys Res D Atmospheres* 2010;115:D19306.
- [16] Wang Y, Munger J, Xu S, McElroy MB, Hao J, Nielsen C, et al. CO<sub>2</sub> and its correlation with CO at a rural site near Beijing: implications for combustion efficiency in China. *Atmos Chem Phys* 2010;10(18):8881–97.
- [17] Kuze A, Suto H, Nakajima M, Hamazaki T. Thermal and near infrared sensor for carbon observation Fourier-transform spectrometer on the Greenhouse Gases Observing Satellite for greenhouse gases monitoring. *Appl Opt* 2009;48(35):6716–33.
- [18] Glumb R, Davis G, Lietzke C. The TANSO-FTS-2 instrument for the GOSAT-2 greenhouse gas monitoring mission. In: Proceedings of 2014 IEEE Geoscience and Remote Sensing Symposium (IGARSS 2014); 2014 Jul 13–18; Quebec City, QC, Canada. New York City: IEEE; 2014. p. 1238–40.
- [19] Eldering A, O'Dell CW, Wennberg PO, Crisp D, Gunson MR, Viatte C, et al. The Orbiting Carbon Observatory-2: first 18 months of science data products. *Atmos Meas Tech* 2017;10(2):549–63.
- [20] Eldering A, Wennberg PO, Crisp D, Schimel DS, Gunson MR, Chatterjee A, et al. The Orbiting Carbon Observatory-2 early science investigations of regional carbon dioxide fluxes. *Science* 2017;358:6360.
- [21] Eldering A, Taylor TE, O'Dell CW, Pavlick R. The OCO-3 mission: measurement objectives and expected performance based on 1 year of simulated data. *Atmos Meas Tech* 2019;12(4):2341–70.
- [22] Liu Yi, Wang J, Yao Lu, Chen Xi, Cai Z, Yang D, et al. The TanSat mission: preliminary global observations. *Sci Bull* 2018;63(18):1200–7.
- [23] Yang D, Liu Yi, Cai Z, Chen Xi, Yao Lu, Lu D. First global carbon dioxide maps produced from TanSat measurements. *Adv Atmos Sci* 2018;35(6):621–3.

- [24] Zhang Q, Li M, Wei C, Mizzi AP, Huang Y, Gu Q. Assimilation of OCO-2 retrievals with WRF-Chem/DART: a case study for the Midwestern United States. *Atmos Environ* 2021;246:118106.
- [25] Bréon F, Broquet G, Puygrenier V, Chevallier F, Xueref-Remy I, Ramonet M, et al. An attempt at estimating Paris area CO<sub>2</sub> emissions from atmospheric concentration measurements. *Atmos Chem Phys* 2015;15(4):1707–24.
- [26] Kort EA, Frankenberg C, Miller CE, Oda T. Space-based observations of megacity carbon dioxide. *Geophys Res Lett* 2012;39:L17806.
- [27] Pillai D, Buchwitz M, Gerbig C, Koch T, Reuter M, Bovensmann H, et al. Tracking city CO<sub>2</sub> emissions from space using a high-resolution inverse modelling approach: a case study for Berlin. *Germany Atmos Chem Phys* 2016; 16(15):9591–610.
- [28] Schneising O, Heymann J, Buchwitz M, Reuter M, Bovensmann H, Burrows J. Anthropogenic carbon dioxide source areas observed from space: assessment of regional enhancements and trends. *Atmos Chem Phys* 2013;13(5):2445–54.
- [29] Wong K, Fu D, Pongetti T, Newman S, Kort E, Duren R, et al. Mapping CH<sub>4</sub>: CO<sub>2</sub> ratios in Los Angeles with CLARS-FTS from mount Wilson. *California Atmos Chem Phys* 2015;15(1):241–52.
- [30] Ye X, Lauvaux T, Kort EA, Oda T, Feng S, Lin JC, et al. Constraining fossil fuel CO<sub>2</sub> emissions from urban area using OCO-2 observations of total column CO<sub>2</sub>. *J Geophys Res Atmos* 2020;125(8):e2019JD030528.
- [31] Zhongming Z, Linong X, Xiaona Y, Wangqiang Z, Wei L. 2019 refinement to the 2006 IPCC guidelines for National Greenhouse Gas Inventories. Geneva: Intergovernmental Panel on Climate Change; 2019.
- [32] Janssens-Maenhout G, Pinty B, Dowell M, Zunker H, Andersson E, Balsamo G, et al. Toward an operational anthropogenic CO<sub>2</sub> emissions monitoring and verification support capacity. *Bull Am Meteorol Soc* 2020;101(8):E1439–51.
- [33] Crippa M, Oreggioni G, Guizzardi D, Muntean M, Schaaf E, Lo Vullo E, et al. Fossil CO<sub>2</sub> and GHG emissions of all world countries. Luxembourg: Publication Office of the European Union; 2019.
- [34] 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. *Atmos Chem Phys* 2011;11(2):543–56.
- [35] Liu J, Tong D, Zheng Y, Cheng J, Qin X, Shi Q, et al. Carbon and air pollutant emissions from China's cement industry 1990–2015: trends, evolution of technologies, and drivers. *Atmos Chem Phys* 2021;21(3):1627–47.
- [36] Cai B, Liang S, Zhou J, Wang J, Cao L, Qu S, et al. China high resolution emission database (CHRED) with point emission sources, gridded emission data, and supplementary socioeconomic data. *Resour Conserv Recycling* 2018; 129:232–9.
- [37] Grell GA, Peckham SE, Schmitz R, McKeen SA, Frost G, Skamarock WC, et al. Fully coupled “online” chemistry within the WRF model. *Atmos Environ* 2005;39(37):6957–75.
- [38] Peters W, Jacobson AR, Sweeney C, Andrews AE, Conway TJ, Masarie K, et al. An atmospheric perspective on North American carbon dioxide exchange: CarbonTracker. *Proc Natl Acad Sci USA* 2007;104(48):18925–30.
- [39] Zhang HF, Chen BZ, van der Laan-Luijkx IT, Chen J, Xu G, Yan JW, et al. Net terrestrial CO<sub>2</sub> exchange over China during 2001–2010 estimated with an ensemble data assimilation system for atmospheric CO<sub>2</sub>. *J Geophys Res D Atmospheres* 2014;119(6):3500–15.
- [40] Beck V, Koch T, Kretschmer R, Marshall J, Ahmadov R, Gerbig C, et al. The WRF Greenhouse Gas Model (WRF-GHG). Jena: Max Planck Institute for Biogeochemistry; 2010.
- [41] Tian X, Xie Z. Effects of sample density on the assimilation performance of an explicit four-dimensional variational data assimilation method. *Sci China Ser D Earth Sci* 2009;52(11):1849–56.
- [42] Tian X, Xie Z, Sun Q. A POD-based ensemble four-dimensional variational assimilation method. *Tellus A Dyn Meteorol Oceanogr* 2011;63(4):805–16.
- [43] Iacono MJ, Delamere JS, Mlawer EJ, Shephard MW, Clough SA, Collins WD. Radiative forcing by long-lived greenhouse gases: calculations with the AER radiative transfer models. *J Geophys Res D Atmospheres* 2008; 113(D13): D13103.
- [44] Dudhia J. Numerical study of convection observed during the winter monsoon experiment using a mesoscale two-dimensional model. *J Atmos Sci* 1989; 46(20):3077–107.
- [45] Hong SY, Noh Y, Dudhia J. A new vertical diffusion package with an explicit treatment of entrainment processes. *Mon Weather Rev* 2006;134(9):2318–41.
- [46] Chen F, Dudhia J. Coupling an advanced land surface–hydrology model with the Penn State–NCAR MM5 modeling system. Part I: model implementation and sensitivity. *Mon Weather Rev* 2001;129(4):569–85.
- [47] Kain JS. The Kain-Fritsch convective parameterization: an update. *J Appl Meteorol* 2004;43(1):170–81.
- [48] Feng T, Zhou W, Wu S, Niu Z, Cheng P, Xiong X, et al. High-resolution simulation of wintertime fossil fuel CO<sub>2</sub> in Beijing, China: characteristics, sources, and regional transport. *Atmos Environ* 2019;198:226–35.
- [49] Martin CR, Zeng N, Karion A, Mueller K, Ghosh S, Lopez-Coto I, et al. Investigating sources of variability and error in simulations of carbon dioxide in an urban region. *Atmos Environ* 2019;199:55–69.
- [50] Diao Y, Huang J, Liu C, Cui J, Liu S. A modeling study of CO<sub>2</sub> flux and concentrations over the Yangtze River Delta using the WRF-GHG model. *Chin J Atmos Sci* 2015;39:849–60. Chinese.
- [51] Guo M, Xu J, Wang X, He H, Li J, Wu L. Estimating CO<sub>2</sub> concentration during the growing season from MODIS and GOSAT in East Asia. *Int J Remote Sens* 2015;36(17):4363–83.
- [52] Fischer ML, Parazoo N, Brophy K, Cui X, Jeong S, Liu J, et al. Simulating estimation of California fossil fuel and biosphere carbon dioxide exchanges combining in situ tower and satellite column observations. *J Geophys Res D Atmospheres* 2017;122(6):3653–71.
- [53] Zheng T, French NH, Baxter M. Development of the WRF-CO<sub>2</sub> 4D-Var assimilation system v1.0. *Geosci Model Dev* 2018;11(5):1725–52.