DOI:10.16853/j.cnki.1009-3575.2026.05.010

基于OCO-3与ERA5数据的双分支大气CO_2浓度反演网络

邓天民[1],赵西崇[1],彭扬洋[2]
(1.重庆交通大学交通运输学院,重庆 400074;2.重庆交通大学信息科学与工程学院,重庆 400074)

摘要:针对卫星遥感数据易受轨道、云层和气溶胶等因素干扰,导致在复杂气溶胶场景下XCO_2反演精度低等问题,提出了一种用于大气二氧化碳浓度反演的双分支特征增强网络CCFM-DBNet(CO_2 Concentration Feature-Merging Dual-Branch Network)。首先,在光谱分支中将全局分组坐标注意力模块(GGCA)嵌入2D-CNN主干,强化对关键CO_2吸收波段的响应,抑制气溶胶和水汽干扰;其次,在气象分支中设计多尺度残差注意力模块(MSRA),结合多尺度卷积、残差连接与通道注意力机制,实现气象垂直剖面特征的高效建模。最后,将两个分支的输出特征向量在特征维度进行拼接,实现物理信息的互补与XCO_2浓度的端到端预测。实验结果表明,本方法的决定系数R^2较于基线提高了0.65%,RMSE与MAE分别下降了7.83%、9.02%,验证了该方法在提高XCO_2反演精度上的有效性。

关键词:XCO_2反演;双分支特征增强网络;OCO-3;ERA5;全局分组注意力
中图分类号:X831;TP183 **文献标志码:**A **文章编号:**1009-3575(2026)05-0089-12

Dual-branch Feature-enhanced Network for Atmospheric CO_2 Concentration Retrieval Based on OCO-3 and ERA5 Data

DENG Tianmin[1], ZHAO Xichong[1], PENG Yangyang[2]
(1. *College of Traffic and Transportation, Chongqing Jiaotong University, Chongqing* 400074, *China*;
2. *College of Information Science and Engineering, Chongqing Jiaotong University, Chongqing* 400074, *China*)

Abstract: Atmospheric CO_2 retrieval from satellite observations is often hindered by orbital variability, clouds, and aerosols, resulting in degraded accuracy under complex aerosol conditions. To address these challenges, this study introduced a CO_2 Concentration Feature-Merging Dual-Branch Network (CCFM-DBNet), a dual-branch feature-enhanced architecture designed for precise atmospheric CO_2 inversion. The spectral branch integrated a Global Grouped Coordinate Attention (GGCA) module into a 2D convolutional backbone to strengthen responses to key CO_2 absorption bands while suppressing aerosol and water-vapor interference. The meteorological branch employed a Multi-Scale Residual Attention (MSRA) module that combines multi-scale convolutions, residual connections, and channel attention to effectively capture vertical meteorological profiles. Feature vectors from both branches were fused along the feature dimension, enabling complementary physical information and achieving end-to-end XCO_2 prediction. Experimental results demonstrated that the CCFM-DBNet increased the coefficient of determination (R^2) by 0.65% and reduced RMSE and MAE by 7.83% and 9.02%, respectively, compared with the baseline model. These improvements confirmed the method's effectiveness in enhancing XCO_2 retrieval accuracy under complex atmospheric conditions.

Key words: XCO_2 retrieval; Dual-branch feature-enhanced network; OCO-3; ERA5; Global grouped coordinate attention

二氧化碳作为地球上影响人类最为重要的气体之一[1],一直受到世界各界的广泛关注。适度的温室效应是地球维持生命的必要条件(使地球平均温度保持在约15 ℃),但人类活动导致温室气体过量排放,引发了"增强的温室效应",即全球变暖[2]。因此二氧化碳反演监测在控制碳排放中扮演着重要角色,在实现"双碳"目标的背景下,对各地区碳达峰路径的预测至关重要[3]。

目前,基于卫星遥感的监测技术在点源和城市尺度CO_2排放量化方面具有较强潜力[4],但观测易受到轨道、云层和气溶胶等外界因素的干扰[5],限制了二氧化碳浓度信号的观测,从而影响排放反演的准确性。段锋华等[6]利用主成分分析和光程概率分布的统计概率方法,解决了薄卷云和气溶胶散射引起的光子路径变化而导致的吸收谱线变化的问题。孙志强等[7]构建了气体吸收截面和气溶胶光学厚度参数查找表,与TCCON站点的结果平均绝对误差符合精度要求。

收稿日期:2025-10-17
基金项目:重庆市技术创新与应用发展专项重点项目(CSTB2022TIAD-KPX0118);国家重点研发计划项目(2022YFC3800502);重庆市技术创新与应用发展专项重点项目(CSTB2022TIAD-KPX0113)
作者简介:邓天民(1979—),男,博士,教授,主要从事交通环境感知、碳排放监测等方面的研究,E-mail:dtianmin@cqjtu.edu.cn

基于卫星XCO_2的数据进行二氧化碳反演的方法目前大多数是传统物理模型和传统机器学习,如基于大气传输模型的反演[8]、差分吸收激光雷达法[9]等。然而,基于物理模型进行二氧化碳反演对先验数据依赖性强,反演过程需依赖高精度先验数据,如大气廓线、地表反射率等,若先验数据存在误差,将直接影响反演结果。此外,在一定复杂条件下,气溶胶散射会改变光子传输路径,传统模型难以完全剥离其对二氧化碳吸收光谱的干扰。樊增昌等[10]运用卡尔曼平滑算法进行二氧化碳反演时,先构建基于WRF-GHG模拟的XCO_2伪真值序列,叠加观测误差形成伪观测序列,测试不同状态转移矩阵后选用卡尔曼平滑算法。Danjou等[11]以巴黎为例,用合成XCO_2卫星图像评估计算量小的反演方法(质量平衡法和高斯羽流模型反演)。郭文月等[12]基于OCO-2/3卫星数据和高斯羽流模型对中国超大型燃煤电厂进行二氧化碳反演,代入模型并结合气象数据估算排放量,再与其他清单对比验证。

随着技术的不断发展,二氧化碳反演方法主流方向已经由传统物理模型转向机器学习,大量研究表明,对于数据较多的情况下,利用机器学习更能够捕捉复杂非线性关系,提升反演精度,尤其在处理云、气溶胶干扰时表现更好。胡凯等[13]提出ST-SAN模型,融合多源数据,结合软注意力机制突出重要特征,验证显示与卫星和地面数据高度一致。付子骏等[14]提出的TD-LSTM-S模型,采用SLSQP算法进行优化,使LSTM能够有效利用变量间的内在联系,提高模型的预测性能。Liu等[15]提出空间特征深度融合的XCO_2估算方法,结合机器学习方法,利用相关数据构建模型,提升了反演性能。Tian等[16]整合OCO-2、CT、CAMS等数据及植被、气象辅助数据,用FNN分两阶段训练,使用时间序列特征提升了精度。

虽然上述基于机器学习的方法相对于传统物理模型进行二氧化碳反演已经有了很大的进展,然而,现有机器学习处理数据通常将多源数据简单拼接或用同构网络简易处理,忽略高光谱与气象数据的结构差异,从而导致单一机器学习过程中对数据的处理未能保证其二氧化碳反演的精确度。在充分考虑高光谱数据与气象垂直剖面数据在空间结构和物理特性上的本质差异的基础上,本文构建了双分支异构数据集,并基于OCO-3高光谱数据和ERA5气象数据设计了CCFM-DBNet(CO_2 Concentration Feature-Merging Dual-Branch Network),通过双分支通道对异构数据分别进行最优处理并拼接进行深度融合。

1 数据

1.1 OCO-3卫星高光谱数据

轨道碳观测站-3(OCO-3)是美国宇航局(NASA)于2019年发射的一颗专门用于CO_2监测的卫星,旨在描述控制其在大气中积累的过程,揭示XCO_2的源汇分布及季节变化规律。OCO-3数据按处理级别分为L1A(原始数据)、L1B(辐射校准数据)、L2(大气柱浓度数据)等,本文使用的数据集为OCO3_L1B_Calibration 10r,该产品属于OCO-3卫星数据中的一级校准数据产品。在空间分辨率方面,OCO-3卫星整体具有2.25 km×0.7 km(沿轨×跨轨)的空间分辨率;在时间分辨率方面,虽然目前没有针对OCO3_L1B_Calibration 10r数据的明确公开信息,但OCO-3卫星平均16 d可以覆盖全球。OCO3_L1B_Calibration 10r的维度为1 024×220(光谱通道方向×空间方向),为了减少边缘噪声,提升数据可靠性,且由于探测器监测的边缘数据噪声通常高于中心区域,因此进行数据预处理。在原始数据220行的基础上,舍弃两侧各30行边缘数据,保留信号更稳定、信噪比更高的中间160行,再将160行按每组20行组合,生成8个足迹。为了剔除质量较低的高光谱数据,保留光谱中心区域,进一步舍弃光谱方向边缘的8个样本,最终每个波段保留8×1 016维数据。

1.2 ERA5气象数据

ERA5数据集是欧洲中期天气预报中心(ECMWF)提供的全球再分析数据,在二氧化碳反演研究中,ERA5数据集常作为大气辅助数据(如气象参数)支撑反演模型的构建或结果校正,时间分辨率为1 h,空间分辨率为0.25°×0.25°。本研究将ERA5的主要子数据集整理如表1所示。

1.3 TCCON站点数据

TCCON(Total Carbon Column Observing Network)建立于2004年,基于地基傅里叶变换光谱仪的观测网络,通过记录近红外光谱区域的太阳直射光谱,来反演大气中CO_2的浓度(TCCON检测的CO_2浓度精度为0.1×10^{-6},CH_4浓度精度为2×10^{-9})是验证卫星CO_2数据的重要来源。TCCON全球共有30多个站点,分布于欧洲、美洲、亚洲等多个国家和地

表 1　ERA5 数据库主要子数据集

Table 1　Main sub-datasets of the ERA5 database

子数据集	概述
ERA5 Hourly Data on Single Levels	提供全球单层面（即地表或特定参考高度，如 2 m、10 m 等）的每小时再分析数据
ERA5 Hourly Data on Pressure Levels	提供全球多个标准气压层（如 1 000 hPa 到 1 hPa）的每小时大气再分析数据
ERA5 Land Data	ERA5 Land 是 ERA5 数据在陆地表面部分的高分辨率版本
ERA5 Monthly Means Data	从 ERA5 每小时数据中计算得到的月均值产品，包括单层面和气压层数据
ERA5 Climate Reanalysis Ensemble	提供基于观测误差和模型误差估计的集合再分析数据
ERA5 Land Monthly Means	基于 ERA5 Land 高分辨率数据计算的月均值

区，合肥站和香河站为中国区域监测CO_2的TCCON站点，因此本文选择这两个站点来评估CO_2的反演精度，将提供的精准地基观测数据作为真值，用于后续深度学习模型的训练与验证。

2　研究方法

本研究的核心是利用OCO-3高光谱与ERA5气象数据作为输入，通过特征融合之后的数据与TCCON站点数据做对比，从而推算出二氧化碳的反演精度。XCO_2光谱矩阵波段间存在强物理关联性，且空间位置具有相同的物理意义，这种连续的空间结构特性适合以二维矩阵形式保留，便于2D卷积捕捉从局部到全局的光谱特征；而气象数据矩阵各层气象参数随高度呈指数变化，呈现出垂直序列特性，这种离散的层级分布更适合以特定维度矩阵单独组织，便于1D卷积精准建模气象参数随气压层变化的序列特征。因此，基于异质数据源的特征差异，本文提出一种CCFM-DBNet（CO_2 Concentration Feature-Merging Dual-Branch Network）。

首先针对3×8×1 016维的高光谱数据矩阵和4×16×37维的气象数据矩阵分别进行归一化处理，以消除量纲差异，避免特征权重失衡。归一化计算如下所示：

$$x_{\text{norm}} = \frac{x - \mu}{\sigma} \tag{1}$$

式中，x是原始数据中的光谱特征或气象特征；μ是该特征的均值，σ是该特征的标准差。

鉴于OCO-3高光谱数据的空间连续性特征，光谱分支采用2D-CNN架构并插入GGCA模块，GGCA将通道分为4组独立计算高度-宽度注意力，特别强化CO_2吸收波段（1.61/2.06 μm）的响应。其次针对ERA5气象参数的垂直剖面特性，气象分支构建了MSRA模块，以增加捕捉气象参数在37个气压层间的非线性变化。两个分支并行处理，其输出的多尺度特征图通过上采样或下采样操作统一至相同空间维度，完成特征尺度对齐。对齐后的特征图在空间维度上进行逐点乘积操作实现特征交互融合，最终输出特征融合图，为XCO_2预测提供了数据支持。具体模型框架如图1所示。

2.1　时空特征提取模块

为了确保多源数据（如OCO-3卫星数据、ERA5气象数据、TCCON地基数据）在空间位置和时间节点上的一致性，消除空间错位影响并且保证时间同步性，本文采用时空协同对齐的方法来提升数据关联性。对于空间匹配方面，ERA5数据空间分辨率为0.25°，若直接运用0.25°网格的ERA5数据匹配OCO-3卫星数据，会受到TCCON地基站点边缘数据覆盖不完整的影响，从而降低二氧化碳反演的精确度。因此首先以TCCON站点为中心，获取0.5°矩形区域的OCO-3数据，保证站点处于该区域的几何中心；再提取该区域对应的4个0.25°网格的ERA5气象数据。这种以TCCON站点为中心、精细化ERA5覆盖的空间匹配机制，有效解决了上述边界问题。经过上述空间匹配后，所下载数据已具备较高的空间重合度。鉴于ERA5数据的时间分辨率为1 h，时间匹配首先找出TCCON站点观测时间与OCO-3卫星采集时间一致的数据，以此确保两种核心数据在时间上的同步性，避免因时间差异导致的信息不匹配。再依据该时间获取对应时间的ERA5数据，使得气象数据能精准对应到卫星和地面观测的时间点，保证了三者在时间维度上的一致性，为后续分析不同时间点的CO_2特征提供了准确的时间基准。

经过数据预处理之后，将OCO-3 1B级光谱辐射数据构建为3×8×1 016维矩阵，ERA5数据构建为4×16×37维矩阵，图2展示了此过程及后续的异构处理流程。由于两类数据的内在结构特性和物理意义的差异，需要先单独进行处理，OCO-3高光谱数据的8个footprint和1 016个光谱通道具有连续性，即相邻footprint在空间位置上连续排列，覆盖的地表区域无显著断裂，1 016个光谱通道对应连续的波长区

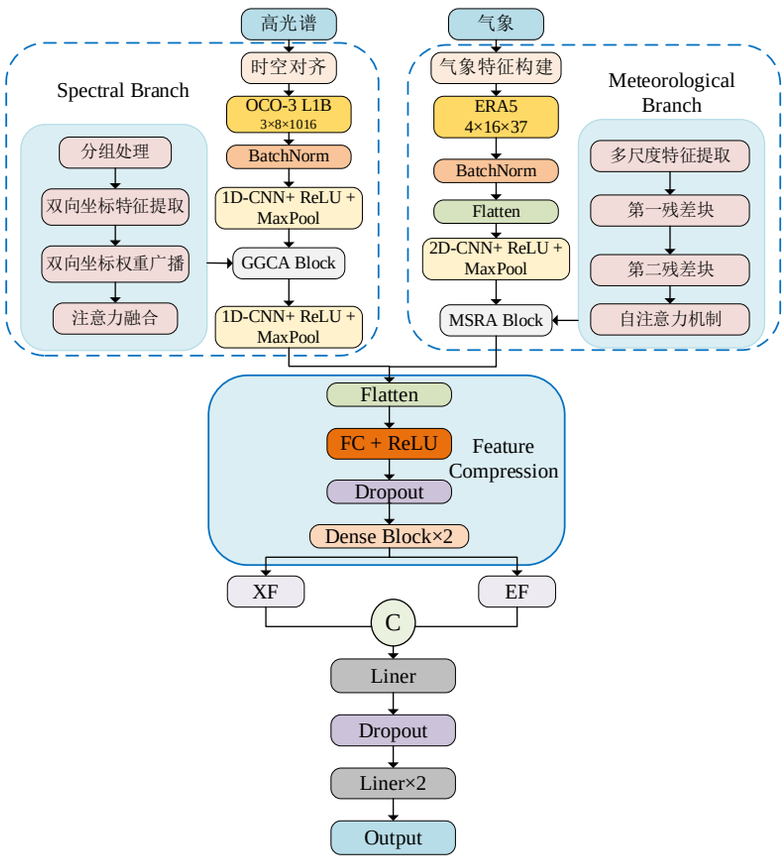


图1 CCFM-DBNet整体网络

Fig. 1 Overall architecture of the CCFM-DBNet

间,相邻通道的波长间隔极小;相反,ERA5气象数据包含37个离散的气压层(如1 hPa、10 hPa、1 000 hPa等),是人为划分的垂直层次,为了简化大气垂直结构的描述而设定的离散节点。因此,分开构建矩阵并分支处理数据的核心意义在于保持光谱数据的空间连续性与气象参数的离散空间分布特性,为后续差异化处理奠定基础,从而更充分地挖掘异质数据的互补信息。

2.2 Global Group Coordinate Attention(GGCA)

传统模块(如SE[17]、CBAM[18])对所有通道统一处理,容易导致异类噪声相互影响,为了减少OCO-3数据中跨物理意义特征的干扰,比如CO_2吸收波段、气溶胶散射波段、水汽吸收波段等,引入了全局分组坐标注意力(GGCA)模块以增强模型的特征表达能力,通过通道分组将光谱维度依据物理特性解耦为多个子组,并采用坐标分离策略,独立计算高度与宽度方向的空间注意力,通过模拟"分波段处理"的物理思想,使模型能够聚焦于CO_2吸收通道。

GGCA首先将输入数据特征按照通道数进行分组,分别使用高度和宽度方向执行自调节池化,随

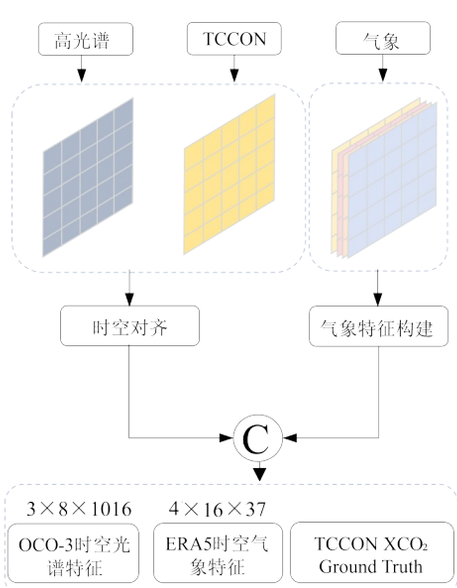


图2 时空特征提取与融合

Fig. 2 Spatiotemporal feature extraction and fusion process

后通过共享的1×1卷积进行编码和压缩,并通过Sigmoid函数生成归一化注意力权重,对关键特征进行增强,对冗余特征进行抑制。由于经上层输出后

权重的空间维度（H、W）和原始特征图不完全一致，因此经广播后与原始特征逐元素融合，形成增强后的特征表示。为充分发挥GGCA模块在多模态特征建模中的优势，本研究在光谱分支的4个关键卷积阶段均嵌入该模块，其通道数分别为64、128、256、512，各个阶段均采用分组和压缩策略，从而实现特征的渐变式增强，模块结构如图3所示。

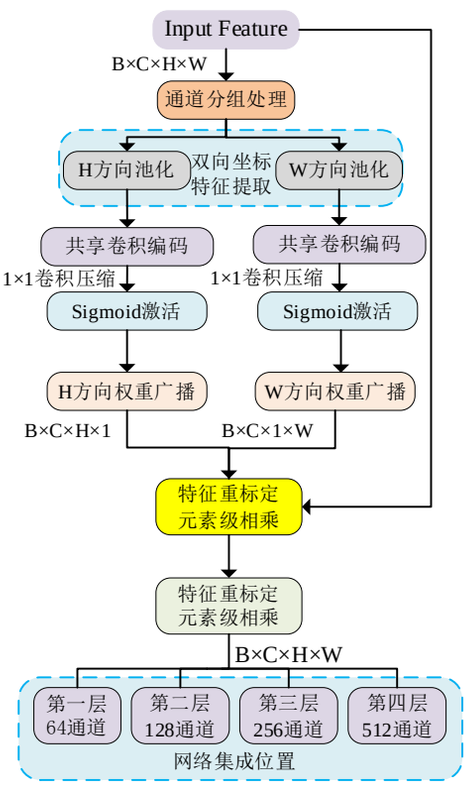


图3　全局分组坐标注意力模块

Fig. 3　Structure of the Global Grouped Coordinate Attention (GGCA) module

2.3　Multi-Scale Residual Attention module (MSRA)

相对于OCO-3高光谱数据，ERA5气象数据在结构上相对规整，但其原始1D卷积分支在建模能力、收敛稳定性与抗噪性等方面存在不足。为了充分挖掘利用ERA5气象再分析数据在多气压层下的复杂特征，提出了多尺度-残差-注意力（MSRA，Multi-Scale Residual-Attention）模块，该模块通过多尺度并行、残差连接和通道注意力机制建立特征关系，以适配“多气压层×小网格”的多尺度、非均衡统计特性，具体网络结构如图4所示。

为了适配网络结构，首先，将ERA5输入的数据张量[B,4,37,16]重排为[B,37,4,16]，通过展平处理，得到[B,37,64]的张量形式，以便后续1D卷积沿气压层维度展开；然后，通过多尺度卷积特征提

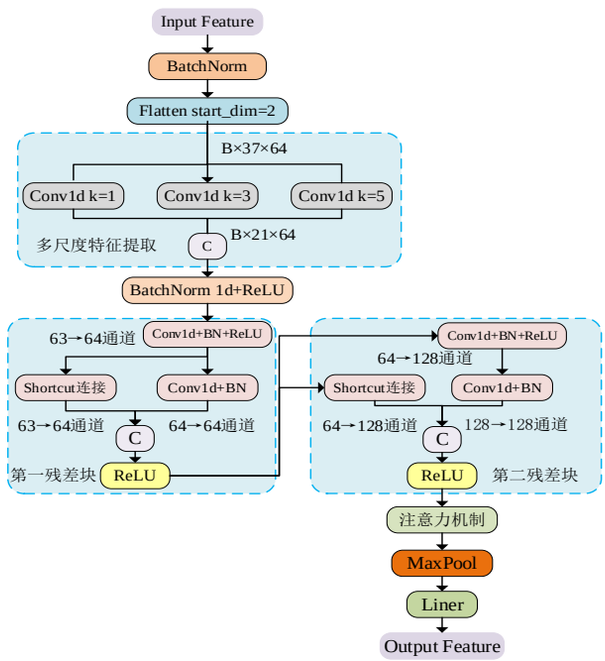


图4　多尺度残差注意力模块

Fig. 4　Structure of the Multi-Scale Residual Attention (MSRA) module

取，引入卷积核长度分别为1、3、5的并行1D卷积路径并拼接成63维度的特征通道，经过归一化和非线性激活后进入下一层网络；在残差连接处理方面，通道维度由63至64再到128，该结构能够有效缓解深层网络中的梯度消失问题，在处理ERA5数据时保持较低参数量的同时具备更强的收敛稳定性和可训练性；接着引入通道注意力机制，通过两层MLP与Sigmoid函数生成权重系数，从而进行自适应特征加权，提高了模型的抗干扰能力；最后，通过后池化与Conv1d（128→256）将长度压缩至16并展平，经全连接映射为128维ERA5语义向量，从而提升模型对异常气象或边缘气象模式的预测鲁棒性。

3　实验与分析

3.1　实验环境及结果

在数据集划分方面，将经过时空对齐后的OCO-3高光谱数据与ERA5气象数据按照8∶2的比例划分为训练集和验证集，设置随机种子为42确保实验可重现性，同时选取合肥TCCON站点与香河TCCON站点作为独立验证点。使用PyTorch的DataLoader进行批量数据加载，Python版本为3.9，批量大小设置为16，模型训练采用200个训练周期，所用cuda版本为Cuda11.8。为确保训练稳定性，设置梯度裁剪阈值为1.0以防止梯度爆炸。网络参数初始化方

面，卷积层采用Kaiming正态分布初始化[19]，全连接层采用Xavier正态分布初始化[20]，以保证网络的有效训练和快速收敛。

本研究模型评估采用4个指标评价：平均绝对误差（MAE）、均方根误差（RMSE）、决定系数（R^2）、平均相对误差（MRE）。公式如下所示：

$$E_{\mathrm{MA}}=\frac{\sum_{i=1}^{N}\left|y_i-Y_i\right|}{N} \tag{2}$$

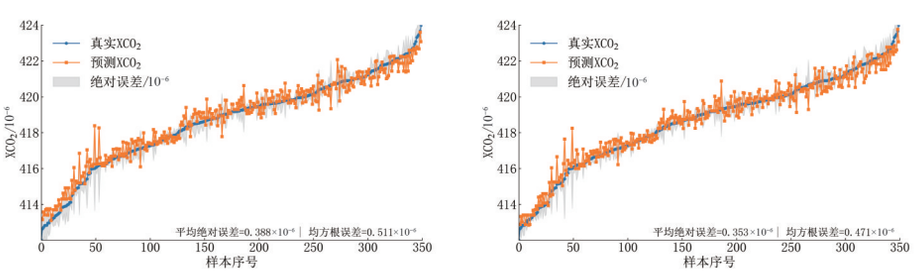
$$E_{\mathrm{RMS}}=\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{N}\left(y_i-Y_i\right)^2}{N}} \tag{3}$$

$$E_{\mathrm{MR}}=\frac{\sum_{i=1}^{N}\left|\frac{y_i-Y_i}{y_i}\right|}{N} \tag{4}$$

$$R^2=1-\frac{\sum_{i=1}^{N}(y_i-Y_i)^2}{\sum_{i=1}^{N}(y_i-\overline{y_i})^2} \tag{5}$$

式中，E_{MA}为平均绝对误差，E_{RMS}为均方根误差，E_{MR}为平均相对误差，y_i为第i次观测值的真实XCO_2值，Y_i为模型中第i次观测值的预测XCO_2值，$\overline{y_i}$为所有观测XCO_2值的平均值，N为用于计算指标的样本数。

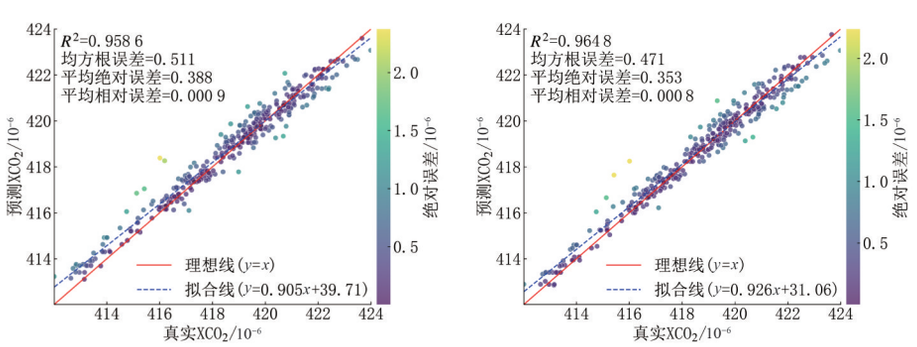
为了验证所提出模型在真实观测条件下的有效性，本研究首先选取合肥TCCON站点数据与基线模型进行检验对比。图5-a、图5-b表示该站点基于基线模型和CCFM-DBNet的XCO_2预测值与真实值的时间序列对比，图6-a、图6-b表示该站点基于基线模型和CCFM-DBNet预测值与真实值的相关性分析。从图中可以看出，基线模型的RMSE、MAE分别为0.511×10^{-6}、0.388×10^{-6}，决定系数R^2为0.958 6。CCFM-DBNet的决定系数R^2达到0.964 8，相较于基线模型提高了0.647%，同时，RMSE、MAE参数均有所下降，表明了本文方法在该站点具有较高的反演精度和稳定性。



（a） Base （b） CCFM-DBNet

图5 合肥TCCON站点的XCO_2真实值与预测值的时间序列对比

Fig. 5 Comparison of time series between true and predicted XCO_2 values at the Hefei TCCON site



（a） Base （b） CCFM-DBNet

图6 合肥TCCON站点的XCO_2预测值与真实值的相关性分析

Fig. 6 Correlation analysis between predicted and true XCO_2 values at the Hefei TCCON site

为了更加清晰直观地展示区域大气CO_2浓度的时空分布特征，图7展示了合肥市反演后2022年四季CO_2浓度的空间分布特征。该图利用三次插值方法将离散观测数据映射到合肥市行政边界内的规则网格，并结合季节划分实现了春、夏、秋、冬4个时期的空间分布可视化。相比于单一的统计量或时间序列曲线，热力图能够直观反映不同季节CO_2浓度的空间异质性和局地高值区，从而揭示大气碳排放与季节性气象条件之间的潜在联系。结果与植被光合作用的季节性变化和人为排放的周期性特征相符，该分布图也为深度学习模型的预测结果提供了重要的时空变化基准，有助于验证模型预测结果的合理性。

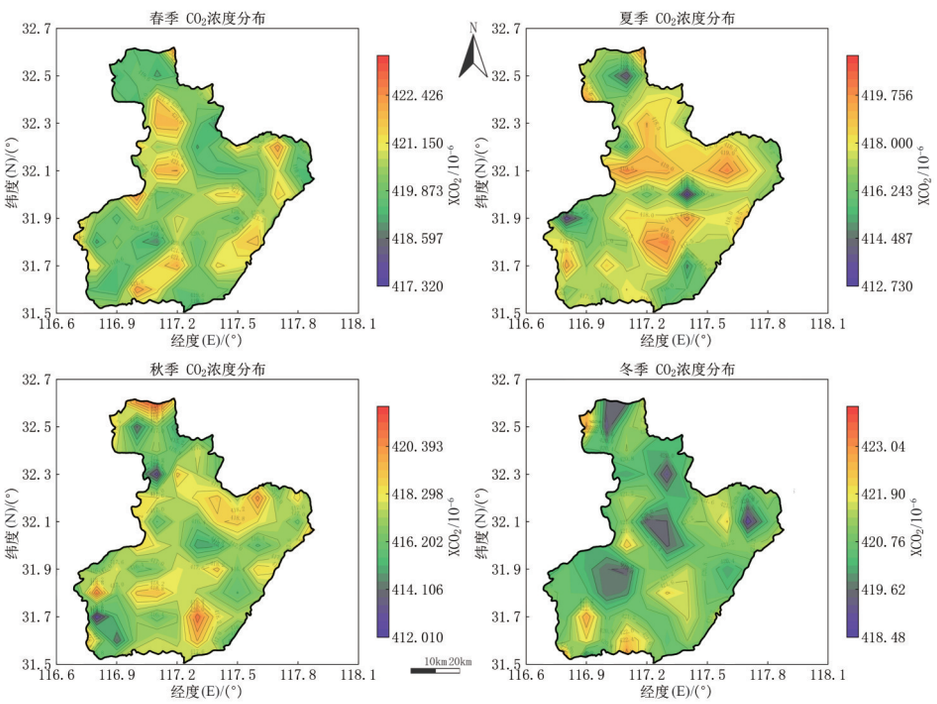


图7　基于CCFM-DBNet反演的合肥市2022年四季XCO_2浓度热力图

Fig. 7　Heat maps of XCO_2 concentrations in Hefei for the four seasons of 2022 retrieved by CCFM-DBNet

3.2　消融实验

为了验证CCFM-DBNet主干网络、全局分组注意力模块GGCA、多尺度残差注意力模块MSRA对网络模型性能提升的贡献，选用合肥TCCON站点的数据进行消融实验，通过对比不同组合的实验结果，可以清晰地反映出各模块以及组合模块在提升模型性能方面的作用，相关性分析结果如图8所示。同样在香河TCCON站点进行消融实验以验证泛化性，实验结果如表2—表3所示。

DBNet-Base主干网络指由1D-CNN和2D-CNN组成的基线二氧化碳浓度反演监测网络架构，其测得合肥的R^2为0.958 6。首先，在合肥地区做消融实验，GGCA模块整体使用全局分组坐标注意力，为检验GGCA模块在不同深度处的贡献，模型a表示在基线模型的基础上引入未分组的GCA模块，将所有通道整体输入注意力机制，计算统一的通道权重，测得R^2仅提高0.031%；模型b在基线模型基础上引入分组设计的GGCA模块，通过对通道分组并独立计算双向坐标注意力，从而突出重要特征并抑制噪声，由表2可知，R^2提高0.532%，验证了全局分组注意力模块的有效性；模型c表示在模型中引入不包含注意力机制的MSRA模块，较于基线模型的R^2有所提升；模型d表示在基线模型的基础上嵌入完整的MSRA模块，实现对气象要素多尺度空间模式与垂直层结关系的自适应特征提取与增强，由表2可知，模型d较于DBNet-Base的R^2提升了0.501%；模型e、模型f表示在模型a的基础上分别引入MSRA_Attention、MSRA，检测的R^2分别提升了0.553%、0.292%，MAE分别下降6.634%、3.405%，验证了GCA模块协同处理OCO-3高光谱数据和ERA-5气象数据的有效提高。模型g表示在模型e的基础上引入全局分组注意力机制，增强数据特征，由表2可得，检测的R^2提升了

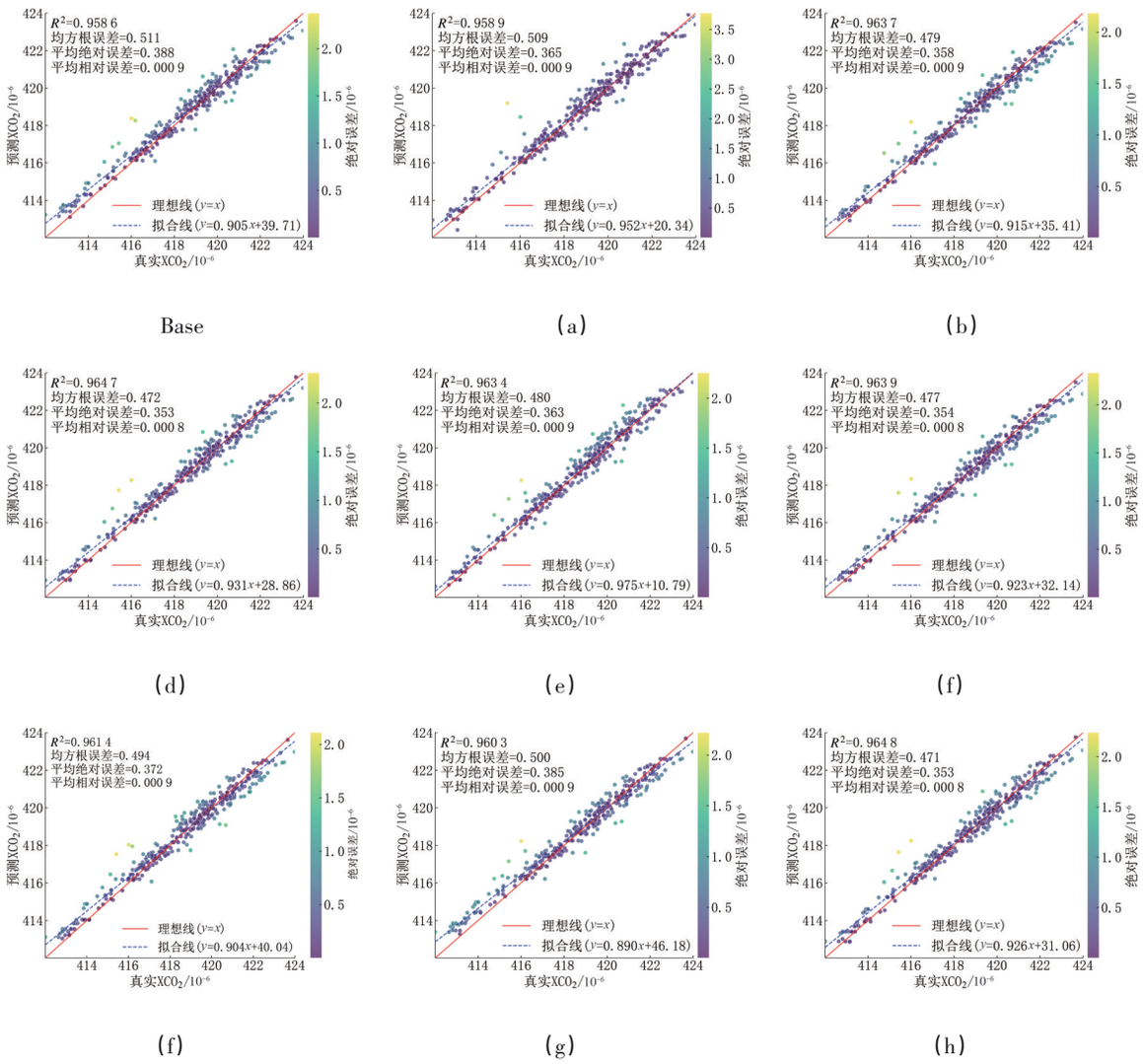


图8 合肥地区不同消融模型的XCO_2预测与观测对比散点图

Fig. 8 Scatter plots comparing predicted versus observed XCO_2 for different ablation models in the Hefei region

表2 合肥地区消融实验结果

Table 2 Ablation experimental results in the Hefei region

模型	Base	GCA	GGCA	MSRA_Attention	MSRA	R^2	均方根误差/10^{-6}	平均绝对误差/10^{-6}
Base	√	—	—	—	—	0.958 6	0.511 0	0.388 0
a	√	√	—	—	—	0.958 9(+0.000 3)	0.509 0	0.365 0
b	√	—	√	—	—	0.963 7(+0.005 1)	0.479 0	0.358 0
c	√	—	—	√	—	0.964 7(+0.006 1)	0.471 8	0.353 0
d	√	—	—	—	√	0.963 4(+0.004 8)	0.480 3	0.362 6
e	√	√	—	√	—	0.963 9(+0.005 3)	0.477 1	0.353 9
f	√	√	—	—	√	0.961 4(+0.002 8)	0.493 6	0.371 9
g	√	√	√	√	—	0.960 3(+0.001 7)	0.500 4	0.384 7
h	√	√	√	√	√	0.964 8(+0.006 2)	0.471 0	0.353 0

注:√表示引入该模块,—表示未引入该模块。

0.177%,MAE下降2.074%;模型h表示在模型g的基础上引入MSRA,模型h较于基线模型检测的R^2提升了0.647%,RMSE、MAE分别下降了7.828%、9.021%,有效验证了GGCA、MSRA模块的有效性。由此可见,嵌入GGCA、MSRA模块的CCFM-DBNet网络在XCO_2反演监测方面要优于其他模块。

表3　香河地区消融实验结果

Table 3　Ablation experimental results in the Xianghe region

模型	Base	GCA	GGCA	MSRA_Attention	MSRA	R^2	均方根误差/10^{-6}	平均绝对误差/10^{-6}
Base	√	—	—	—	—	0.836 2	0.836 0	0.612 0
a	√	√	—	—	—	0.849 9(+0.013 7)	0.800 1	0.567 9
b	√	—	√	—	—	0.846 2(+0.010 0)	0.809 9	0.546 6
c	√	—	—	√	—	0.848 6(+0.012 4)	0.803 7	0.583 0
d	√	—	—	—	√	0.836 3(+0.000 1)	0.836 0	0.587 5
e	√	√	—	√	—	0.846 1(+0.009 9)	0.810 2	0.578 5
f	√	√	—	—	√	0.836 6(+0.000 4)	0.834 8	0.595 9
g	√	√	√	√	—	0.838 6(+0.002 4)	0.892 7	0.577 3
h	√	√	√	√	√	0.853 1(+0.016 9)	0.791 5	0.540 3

注：√表示引入该模块，—表示未引入该模块。

为进一步验证CCFM-DBNet模型在不同地理环境和气候条件下的泛化能力，使用中国环境监测站香河TCCON站点数据进行测试。该站点与合肥在地理位置、气候条件及排放特征方面存在一定差异，能够较好地反映模型在不同区域的适应性。结果如表3所示，同样引入GGCA、MSRA模块的CCFM-DBNet网络在香河地区的R^2在所有模型中提升最多，较于基线模型提高了2.021%，RMSE、MAE较于基线模型分别降低了5.323%、11.716%。这进一步验证了模型的泛化能力。

3.3　SHAP模型可解释性分析

为进一步揭示所提出CCFM-DBNet模型在二氧化碳浓度反演过程中的特征利用机理，本文引入深度学习解释方法SHAP(SHapley Additive exPlanations)开展模型可解释性分析[21]。在深度学习模型中，将每一个特征看作一个变量，模型的预测结果看作总收益，SHAP值就是可以用来量化每个特征变量对模型预测结果的贡献。SHAP值的计算公式如下。

$$\varphi_i = \sum_{S \in \{1,\cdots,n\}/i} \frac{|S|!(n-|S|-1)!}{n!}\left[f(S\cup\{i\}) - f(S)\right] \tag{6}$$

式中，S是特征的一个子集，$|S|$是子集S的元素个数，n是特征样本的个数。该公式的含义是对于所有不包含特征i的特征子集，计算加入特征i前后模型预测值的变化，然后根据子集S的不同组合进行加权平均。本文分别针对ERA5气象要素与OCO-3高光谱通道计算其SHAP值分布，并将结果可视化以揭示模型在预测过程中的关键输入变量。

3.3.1　OCO-3光谱特征重要性分析

为揭示模型在光谱分支中的特征关注模式，本文利用SHAP对OCO-3高光谱数据的主要吸收波段进行重要性排序分析。图9所示，光谱分支中3个主要XCO_2吸收通道的SHAP值及其对模型输出的相对重要性。通道1对应氧气A波段(0.76 μm)，主要用于测量大气中氧气的吸收特征；通道2对应弱CO_2吸收波段(1.61 μm)，该波段对近地表CO_2浓度最为敏感，由于其他大气成分在此光谱范围内的吸收干扰较小，能够提供相对清晰和明确的CO_2测量信息；通道3对应强CO_2吸收波段(2.06 μm)，提供独立的CO_2丰度测量，该波段对气溶胶存在高度敏感，同时对大气压力和湿度变化具有良好的响应特性。由图9可知，通道3的重要性最高，占比42.4%；通道2和通道1占比分别为34.9%、23.1%。分析表明，强CO_2吸收波段能够提供最直接和敏感的CO_2浓度信息，验证了在光谱分支中引入GGCA模块以强化关键波段响应的有效性。

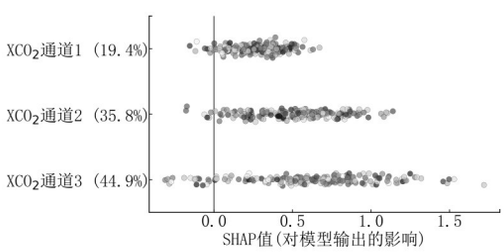


图9　OCO-3高光谱通道的SHAP重要性分布

Fig. 9　SHAP importance distribution of OCO-3 hyperspectral channels

3.3.2　ERA5气象特征重要性分析

在气象分支中，本文同样利用SHAP分析ERA5数据中气压、温度、湿度和风速4类特征的重要性分布。图10为气象分支中气压、风速、湿度与温度的SHAP值分布，平均贡献度分别为22.0%、24.9%、

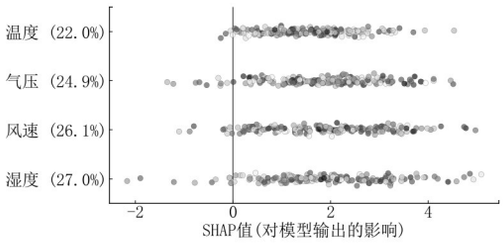


图10 ERA5气象要素的SHAP重要性分布

Fig. 10 SHAP importance distribution of ERA5 meteorological elements

26.1%、27.0%。表明模型在气象分支中更依赖温度与湿度信息，温度与湿度能够通过改变大气透过率与红外光谱吸收特征直接影响CO_2反演精度，而风速决定了局地排放源的扩散与混合，对浓度空间分布的调控作用不可忽视。这一结果与大气辐射传输及气体扩散机理相符，说明模型在气象变量建模上具有合理的物理依据。

3.4 对比实验

在此基础上，为了进一步验证CCFM-DBNet网络架构在CO_2浓度反演精度方面的监测性能，将本文算法与其他7种广泛使用的算法进行对比分析，即随机森林（RF）、量化共轭梯度法、极端随机森林、CNN-LSTM-XGB、LightGBM、CatBoost以及深度森林。实验结果如表4所示，其相关性分析结果如图11所示。CCFM-DBNet网络模型的合肥地区的R^2相较于其他7种模型分别提高3.999%、4.597%、0.626%、3.364%、3.165%、3.176%、1.547%，RMSE与MAE两个参数也有所下降。由表4可知，极端随机森林与深度森林的效果比其他传统回归模型拟合能力好，但整体误差仍然偏高，说明其特征表达能力不能够充分捕获高光谱特征与气象因子之间的非线性关系。根据图11各模型预测值与真实值的相关散点图可知，CCFM-DBNet的散点最接近理想拟合线并且离群点数最少，进一步说明模型在预测稳定性、泛化能力和抗噪声性能方面具有明显优势。由此可见，CCFM-DBNet网络模型在CO_2浓度反演精度方面在目前反演模型中达到了良好的效果，可以有效且高精度地实现CO_2浓度反演监测。

表4 合肥地区对比实验结果

Table 4 Comparative experimental results in the Hefei region

模型	R^2	均方根误差/10^{-6}	平均绝对误差/10^{-6}
RF[22]	0.927 7	0.675 0	0.481 0
量化共轭梯度[23]	0.922 4	0.699 7	0.500 0
极端随机森林[24]	0.958 8	0.509 6	0.347 5
CL-XGB[25]	0.933 4	0.648 2	0.419 5
LightGBM[26]	0.935 2	0.639 3	0.417 8
CatBoost[26]	0.935 1	0.639 6	0.454 4
深度森林[27]	0.950 1	0.561 2	0.388 5
CCFM-DBNet	0.964 8	0.471 0	0.353 0

4 讨论

由实验分析可知，CCFM-DBNet在合肥TCCON站点上实现XCO_2反演的决定系数R^2达到0.964 8，较基线模型提升0.647%，RMSE与MAE分别下降7.828%与9.021%，表明该模型在复杂气溶胶场景下仍能保持较高的反演精度与稳定性。同时，在香河TCCON站点的泛化实验中，R^2较基线提升2.021%，RMSE与MAE也有所下降，进一步验证了模型在不同地理与气象条件下的适应能力。通过消融实验、多个模型对比及SHAP可解释性分析，系统证明了各模块在特征增强与干扰抑制方面的有效性，以及双分支结构在处理异构数据方面的优势。然而，本研究在一些方面仍存在局限性：

①本文所使用的验证数据仅基于合肥与香河两个TCCON站点，虽然在一定程度上反映了模型在典型区域的性能，但其在全球其他TCCON站点的泛化能力仍需进一步验证。

②双分支网络结构虽提升了特征提取能力，同时也带来了参数量与计算复杂度的增加。

因此，针对以上问题未来的研究重点应关注以下两个方面：一方面是收集更多地区、更长时序的TCCON站点数据，以全面评估模型在不同气候带、地表类型下的适用性。另一方面是在保持精度的同时降低模型参数量与推理时间。

5 结论

本文针对传统二氧化碳反演方法在复杂气溶胶场景下精度低的问题，提出了一种双分支特征增强的大气CO_2浓度反演方法（CCFM-DBNet）。该方法利用OCO-3高光谱数据与ERA5气象数据的互补特性，在光谱分支中引入GGCA模块，显著提升了对关键吸收波段的特征提取能力并有效抑制了水汽与气溶胶干扰；在气象分支中嵌入MSRA模块，增强了对气象垂直剖面的建模能力。实验结果表明，所提出的方法在合肥TCCON站点实现了高精度反演，平均误差小于0.5×10^{-6}，显著优于传统物理模型及

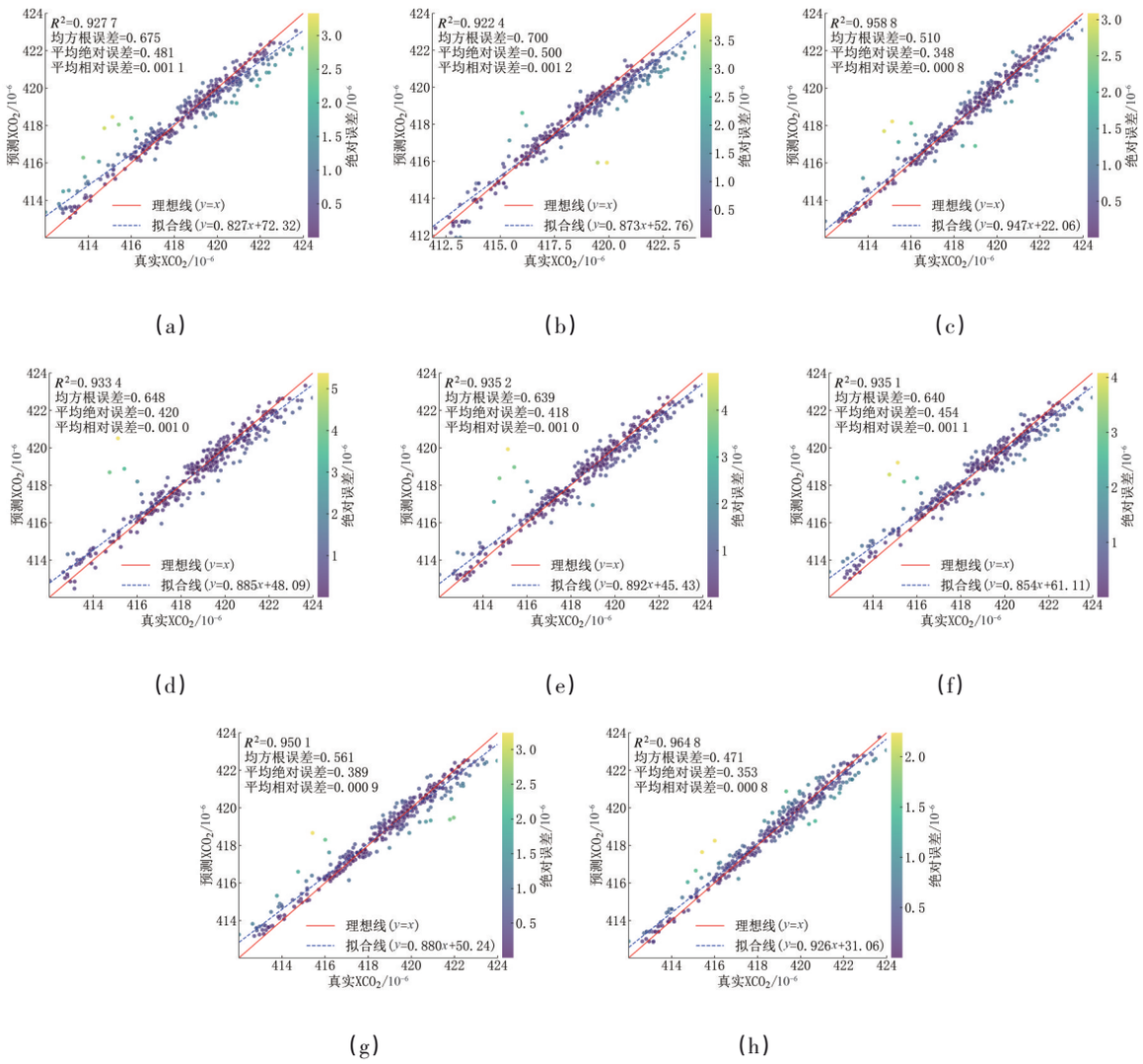


图 11　合肥地区对比实验散点图

Fig. 11　Scatter map of comparative experiment in Hefei area

现有深度学习方法。此外，在香河数据集上进行了实验测试进一步验证了所提方法的有效性与泛化性。本研究结果表明，双分支融合策略与特征增强机制在大气CO_2反演中具有重要意义，为构建高精度的全球碳监测体系提供了新思路。

参考文献：

[1] JEFFRY L, ONG M Y, NOMANBHAY S, et al. Greenhouse gases utilization: A review[J]. Fuel, 2021, 301: 121017.

[2] CHEN Y F, LUBABU M M. Investigating the interrelationship among renewable energy consumption, green finance, agriculture, green technology, industry, and urbanization on CO_2 Emissions: Evidence from BRICS-M-a countries[J]. Renewable Energy, 2026, 256: 124052.

[3] 伊德日夫，王路航，解宇龙，等. 基于主成分回归的内蒙古自治区碳达峰预测研究[J]. 内蒙古农业大学学报(自然科学版)，2022，43(6)：102-107.

[4] ZHANG T, ZHANG W C, YANG R Z, et al. CO_2 capture and storage monitoring based on remote sensing techniques: A review[J]. Journal of Cleaner Production, 2021, 281: 124409.

[5] 王元祖，孙东松，韩於利，等. 大气模式对气溶胶光学参量反演及分类的影响研究[J]. 红外与激光工程，2023，52(1)：20220262.

[6] 段锋华，王先华，叶函函，等. 基于统计与光程分布的二氧化碳反演方法[J]. 光学学报，2017，37(5)：0501003.

[7] 孙志强，王先华，叶函函，等. 基于GF-5卫星遥感数据的大气CO_2快速反演方法[J]. 光学学报，2024，44

(18):281-290.

[8] 胡 诚,张俊清,刘慧丽,等. 城市尺度温室气体排放反演研究进展及发展趋势[J]. 中国环境科学,2024,44(12):7036-7045.

[9] 卜令兵,方静怡,毛志华,等. 大气环境监测卫星二氧化碳探测激光雷达研究进展及应用展望[J]. 光学学报,2025,45(18):11-25.

[10] 樊增昌,杨海龙,卜令兵,等. 基于卡尔曼平滑算法重建高时空分辨率星载IPDA激光雷达XCO_2观测的方法研究[J]. 光学学报,2025,45(12):117-127.

[11] DANJOU A, BROQUET G, LIAN J H, et al. Evaluation of light atmospheric plume inversion methods using synthetic XCO_2 satellite images to compute Paris CO_2 emissions[J]. Remote Sensing of Environment, 2024, 305: 113900.

[12] 郭文月,石玉胜. 基于OCO-2/3卫星的中国超大型燃煤电厂CO_2排放量的遥感反演[J]. 中国科学院大学学报(中英文),2024,41(4):490-502.

[13] 胡 凯,刘滋然,邵鹏飞,等. 面向碳卫星数据的高时空分辨率XCO_2浓度估算的研究[J]. 大气科学学报,2024,47(6):976-992.

[14] 付子骏,吴永明,徐 计. TD-LSTM-S模型在二氧化碳浓度预测中的应用[J]. 重庆理工大学学报(自然科学),2023,37(4):192-199.

[15] LIU W C, LI R, CAO J, et al. Mapping high-resolution XCO_2 concentrations in China from 2015 to 2020 based on spatiotemporal ensemble learning model[J]. Ecological Informatics, 2024, 83: 102806.

[16] TIAN W J, ZHANG L L, YU T, et al. Using multisource data and time series features to construct a global terrestrial CO_2 coverage by deep learning[J]. IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, 2024, 62: 4109814.

[17] HU J, SHEN L, SUN G. Squeeze-and-excitation net-works [C]//IEEE Computer Society. 2018 IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR). Salt Lake City: IEEE, 2018: 7132-7141.

[18] WOO S, PARK J, LEE J Y, et al. CBAM: convolutional block attention module [C]//European ComputerVision Association. 2018 Proceedings of the European Conference on Computer Vision (ECCV). Cham: Springer, 2018: 3-19.

[19] HE K, ZHANG X, REN S, et al. Delving deep into rectifiers: surpassing human-level performance on ImageNet classification [C]//IEEE Computer Society. 2015 IEEE International Conference on Computer Vision (ICCV). Santiago: IEEE, 2015: 1026-1034.

[20] GLOROT X, BENGIO Y. Understanding the difficulty of training deep feedforward neural networks[C]//JMLR Workshop and Conference Proceedings. 2010 International Conference on Artificial Intelligence and Statistics (AISTATS). Sardinia: JMLR, 2010: 249-256.

[21] UNDBERG S M, LEE S I. A unified approach to interpreting model predictions [C]//NeurIPS Foundation. 2017 Advances in Neural Information Processing Systems (NeurIPS). Long Beach, CA: Curran Associates, 2017: 4768-4777.

[22] ZHANG W H, WANG Z Y, LI T, et al. Random forest-based retrieval of XCO_2 concentration from satellite-borne shortwave infrared hyperspectral [J]. Atmosphere, 2025, 16(3): 238.

[23] 缪云飞,邹铭敏,盛书丽,等. 基于机器学习的二氧化碳卫星反演方法[J]. 中国环境科学,2023,43(S1):20-27.

[24] 李静波,张 莹,盖荣丽. 基于机器学习的星载短波红外CO_2柱浓度估算[J]. 中国环境科学,2023,43(4):1499-1509.

[25] WEI W, BAO Z Y, SU Y, et al. Research of rapid retrieving models for GOSAT XCO_2 based on machine learning [J]. Computational Geosciences, 2025, 29(5): 35.

[26] HE S C, YUAN Y B, WANG Z H, et al. Machine learning model-based estimation of XCO_2 with high spatiotemporal resolution in China [J]. Atmosphere, 2023, 14(3): 436.

[27] CAI K, GUAN L Y, LI S S, et al. Full-coverage estimation of CO_2 concentrations in China *via* multisource satellite data and Deep Forest model [J]. Scientific Data, 2024, 11: 1231.