

中华人民共和国国家计量技术规范

 **JJF XXXX-XXXX**

基于机器学习的网格化温室气体微型空气站在线校准规范

**Online Calibration Specification for Gridded Greenhouse Gas Micro Air Stations Based on Machine Learning**

**（征求意见稿）**

202X-XX-XX发布202X-XX-XX实施

国家市场监督管理总局 发 布

**JJF XXXX-XXXX**

|  |  |
| --- | --- |
| 基于机器学习的网格化温室气体微型空气站在线校准规范Online Calibration Specification for Gridded Greenhouse Gas Micro Air Stations Based on Machine Learning | **JJF XXXX**—**XXXX XXXXXX-XXXX** |

归口单位: 全国碳达峰碳中和计量技术委员会

 主要起草单位: 中国计量科学研究院

郑州计量先进技术研究院

 参加起草单位: 中国环境监测总站

本规范委托全国碳达峰碳中和计量技术委员会负责解释

**JJF XXXX-XXXX**

本规范主要起草人：

参加起草人：

**JJF XXXX-XXXX**

目 录

[引 言 II](#_Toc195192045)

[1 范围 1](#_Toc195192046)

[2 引用文件 1](#_Toc195192047)

[3 术语和定义 1](#_Toc195192048)

[4 概述 2](#_Toc195192049)

[5 计量特性 2](#_Toc195192050)

[6 校准条件 3](#_Toc195192051)

[7 校准项目和校准方法 3](#_Toc195192052)

[8 校准结果表达 4](#_Toc195192053)

[9 复校时间间隔 5](#_Toc195192054)

[附录A 6](#_Toc195192055)

[附录B 9](#_Toc195192056)

[附录C 10](#_Toc195192057)

**JJF XXXX-XXXX**

# 引 言

JJF 1071《国家计量校准规范编写规则》、JJF 1001《通用计量术语及定义》、JJF 1059.1《测量不确定度评定与表示》共同构成支撑本规范制定工作的基础性系列规范。

本规范主要参考JJF 1907—2021《环境空气在线监测气体分析仪校准规范》、JJG 635—2011《一氧化碳、二氧化碳红外气体分析器》等技术法规、标准编制而成。

本规范为首次发布。

**JJF XXXX-XXXX**

基于机器学习的网格化温室气体微型空气站在线校准规范

# 1 范围

本规范适用于基于机器学习的网格化温室气体微型空气站（微型空气站数量不少于20个）的在线校准。本规范涉及的温室气体包括二氧化碳（CO2）和甲烷（CH4）。

# 2 引用文件

本规范引用了下列文件：

JJG 635—2011 一氧化碳、二氧化碳红外气体分析器

JJF 1001—2011 通用计量术语及定义

JJF 1059.1—2012 测量不确定度评定与表示

JJF 1071—2010 国家计量校准规范编写规则

JJF 1907—2021 环境空气在线监测气体分析仪校准规范

GB/T 10111—2008 随机数的产生及其在产品质量抽样检验中的应用程序

ISO 14061-1—2018 组织层次上对温室气体排放和清除的量化和报告的规范及指南（Specification with guidance at the organization level for quantification and reporting of greenhouse gas emissions and removals）

凡是注日期的引用文件，仅注日期的版本适用于本规范；凡是不注日期的引用文件，其最新版本（包括所有的修改单）适用于本规范。

# 3 术语和定义

3.1 温室气体 greenhouse gas

大气层中自然存在的和由于人类活动产生的能够吸收和散发由地球表面、大气层和云层所产生的、波长在红外光谱内的辐射的气态成分。

[来源：GB/T 32150-2015，3.1]

3.2 微型空气站 micro air station

采用光散射、电化学、金属氧化物、光离子或非分散红外等的传感器检测方法的，体积小于0.1 m3、重量小于5 kg且可在室外直接连续自动监测大气污染状况变化趋势的监测设备。

[来源：DB13/T 2544-2017，3.2，有修改]

3.3 高精度温室气体分析仪 high-precision greenhouse gas analyzer

用于检测和分析大气中温室气体浓度，具有高灵敏度、精确度和准确度的仪器。

3.4 机器学习 machine learning

功能单元通过获取新知识或技能，或通过整理已有的知识或技能来改进其性能的过程，包括线性回归算法、支持向量机算法、决策树算法、随机森林算法、梯度增强算法等。

[来源：GB/T 5271.31-2006，31.01；GB/T 5271.28-2001，28.01，有修改]

3.5 交叉验证 cross validation

初始采样分割成K个子样本，一个单独的子样本被保留作为验证模型的数据，其他K-1个样本用来训练。交叉验证重复K次，每个子样本验证一次，平均K次的结果或者使用其它结合方式，最终得到一个单一估测，这是一种用于评估机器学习算法性能的技术。

# 4 概述

基于机器学习的网格化温室气体微型空气站是可以连续自动监测温室气体浓度变化趋势的设备，监测参数包括但不限于二氧化碳和甲烷。仪器由采样单元、检测单元、信号处理单元、通信单元及机器学习算法处理单元等核心模块组成。环境空气采样后进入检测单元，被测气体通过传感器件经信号处理单元转化为电信号，经电子部件处理形成数字信号，输出原始浓度数据。通信单元将原始浓度数据实时传输到云服务平台，随后由机器学习算法处理单元进行校准。基于历史监测数据与对应的参考浓度值构建的训练数据集，通过建立的校准模型，对原始浓度数据进行校准，最终得到基于机器学习的温室气体浓度值。

# 5 计量特性

5.1 温室气体浓度示值误差

基于机器学习的微型空气站温室气体小时浓度示值相对误差一般不超过±15%，日均浓度示值相对误差一般不超过±5.0%。

5.2 温室气体浓度示值重复性

基于机器学习的微型空气站温室气体小时浓度示值重复性一般不大于3.0%，日均浓度示值重复性一般不大于1.0%。

注：以上指标不适用于仪器设备的合格性判定，仅供参考。

# 6 校准条件

6.1 环境条件

环境温度：（-10～45） ℃。

相对湿度：（5～95）%。

大气压：（40～120） kPa。

供电电源：电压（220±22） V，频率（50±1） Hz。

工作环境应无影响仪器正常工作的电磁场及干扰气体。

6.2 校准用计量器具及配套设备

高精度温室气体分析仪：CO2标称区间为（350~600）μmol/mol，CO2测量5分钟平均浓度精密度（2小时内）≤0.025 μmol/mol；CH4标称区间为（1300~4000）nmol/mol，CH4测量5分钟平均浓度精密度（2小时内）≤0.025 nmol/mol。

# 7 校准项目和校准方法

7.1 准备工作

网格化温室气体微型空气站中各仪器均能正常工作，电缆线的接插件应接触良好。采用抽样检验的方式选定微型空气站，抽样检验原则应符合表1规定。将高精度温室气体分析仪依次分别与选定微型空气站并排放置并保持相同高度，随后通电预热，保持正常工作状态。

表1 网格化微型空气站抽样数量及原则

|  |  |
| --- | --- |
| 微型空气站总数量（个） | 抽样数量（个） |
| ≤50 | 5 |
| ＞50 | 抽样比例≥10% |

7.2 示值误差

基于交叉验证，将训练集数据随机分为6等份，每次选取其中5等份数据，利用机器学习算法构建相关模型，重复六次，共得到六个不同的模型。将选定的微型空气站新收集的温室气体原始监测数据分别输入各模型，输出6组基于机器学习的微型空气站温室气体浓度值。按公式（1）计算基于机器学习微型空气站温室气体浓度的示值误差。

$δ\_{k,j}=\frac{\overbar{X\_{k,i,j}}-X\_{k,h,j}}{X\_{k,h,j}}×100\%$ （1）

$δ\_{k,j}$——第*k*个选定的微型空气站第*j*个样本浓度误差，%；

$\overbar{X\_{k,i,j}}$——第*k*个选定的微型空气站第*j*个样本6次基于机器学习结果的算术平均值，μmol/mol；

$X\_{k,h,j}$——第*k*个选定的微型空气站对应的高精度温室气体分析仪第*j*个样本浓度测量值，μmol/mol。

7.3 示值重复性

根据6组基于机器学习的微型空气站温室气体浓度值，按照公式（2）计算基于机器学习微型空气站温室气体浓度的重复性。

$s\_{r,k,j}=\frac{1}{\overbar{X}\_{k,j}}\sqrt{\frac{\sum\_{i=1}^{n}\left(\hat{X}\_{k,j,i}-\overbar{X}\_{k,j}\right)^{2}}{n-1}}×100\%$ （2）

$s\_{r,k,j}$——第*k*个选定的微型空气站第*j*个样本浓度重复性；

$\overbar{X}\_{k,j}$——第*k*个选定的微型空气站第*j*个样本6次基于机器学习结果的算术平均值，μmol/mol；

$\hat{X}\_{k,j,i}$——第*k*个选定的微型空气站第*j*个样本的第$i$次基于机器学习结果，μmol/mol；

*n*——计算次数。

# 8 校准结果表达

8.1 校准结果表达

相对示值误差一般保留2位有效数字。

8.2 校准结果的不确定度评定

微型空气站温室气体浓度示值误差测量结果的不确定度依据JJF 1059.1评定，部分参数的不确定度评定示例见附录A。

8.3 校准证书

微型空气站经校准后出具校准证书，校准证书应包含的信息及推荐的校准证书内页格式见附录C。

# 9 复校时间间隔

仪器复校时间间隔由使用者根据仪器的使用情况、仪器本身性能等因素所决定，因此送校单位可根据实际情况自主决定复校时间间隔。计量特性（示值误差和重复性）验证时间间隔建议一般不超过3个月。

**JJF XXXX—XXXX**

# 附录A

基于机器学习的微型空气站温室气体浓度示值误差的不确定度评定示例

A.1 测量模型

A.1.1 建立测量模型如下：

$δ\_{k,j}=\frac{\overbar{X\_{k,i,j}}-X\_{k,h,j}}{X\_{k,h,j}}×100\%$ （A.1）

$δ\_{k,j}$——第*k*个选定的微型空气站第*j*个样本浓度误差，%；

$\overbar{X\_{k,i,j}}$——第*k*个选定的微型空气站第*j*个样本6次基于机器学习结果的算术平均值，μmol/mol；

$X\_{k,h,j}$——第*k*个选定的微型空气站中对应的高精度温室气体分析仪第*j*个样本浓度测量值，μmol/mol。

A.1.2 方差

由公式（A.1）得方差：

$u\_{c}^{2}\left(δ\_{k,j}\right)=c^{2}\left(\overbar{X\_{k,i,j}}\right)u^{2}\left(\overbar{X\_{k,i,j}}\right)+c^{2}\left(X\_{k,h,j}\right)u^{2}\left(X\_{k,h,j}\right)$ （A.2）

式中:

$u\left(\overbar{X\_{k,i,j}}\right)$——被校微型空气站引入的标准不确定度；

$u\left(X\_{k,h,j}\right)$——高精度温室气体分析仪引入的标准不确定度；

A.1.3 灵敏系数

$c\_{i}\left(\overbar{X\_{k,i,j}}\right)= {∂f}/{∂\overbar{X\_{k,i,j}}}={1}/{X\_{k,h,j}}$ （A.3）

$c\_{i}\left(X\_{k,h,j}\right)= {∂f}/{∂X\_{k,h,j}}=-{\overbar{X\_{k,i,j}}}/{(X\_{k,h,j})^{2}}$ （A.4）

根据公式（A.3）和（A.4）得标准不确定度：

$u^{2}\left(δ\_{k,j}\right)=\left({1}/{X\_{k,h,j}}\right)^{2}u^{2}\left(\overbar{X\_{k,i,j}}\right)+[-{\overbar{X\_{k,i,j}}}/{(X\_{k,h,j})^{2}}]^{2}u^{2}\left(X\_{k,h,j}\right)$ （A.5）

A.2 不确定度来源

A.2.1 由被校微型空气站引入的不确定度分量$u\left(\overbar{X\_{k,i,j}}\right)$

A.2.2 由高精度温室气体分析仪引入的不确定度分量$u\left(X\_{k,h,j}\right)$

A.3 标准不确定度分量

A.3.1 由被校微型空气站引入的不确定度分量$u\left(\overbar{X\_{k,i,j}}\right)$

A.3.1.1 由被校微型空气站温室气体浓度重复性引入的不确定度分量$u\_{1}\left(\overbar{X\_{k,i,j}}\right)$

将训练集数据随机分为6等份，每次选取其中5等份数据，利用机器学习算法构建相关模型，重复六次，共得到六个不同的模型。将选定的微型空气站新收集的温室气体原始监测数据分别输入各模型，输出6组基于机器学习的微型空气站温室气体浓度值（高精度温室气体分析仪浓度值为465.71 μmol/mol）。

表A.1 基于机器学习的微型空气站CO2浓度

|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 次数 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 |
| 基于机器学习CO2浓度（μmol/mol） | 432.13  | 436.05  | 441.73  | 441.80  | 426.57  | 444.36  |

基于机器学习的微型空气站CO2浓度平均值：

$\overbar{C}=\frac{\sum\_{i=1}^{6}C\_{i}}{6}≈$437.11 μmol/mol

实验标准差：

$s\left(CO\_{2}\right)=\sqrt{\frac{\sum\_{i=1}^{n}(C\_{i}-\overbar{C})^{2}}{n-1}}=$6.83 μmol/mol

由重复性引入的标准不确定度为：

$u\_{1}\left(\overbar{X\_{k,i,j}}\right)=\frac{6.83 μmol/mol}{\sqrt{6}}=$2.79 μmol/mol

A.3.1.2 由被校微型空气站示值的数显量化误差引入的标准不确定度$u\_{2}\left(\overbar{X\_{k,i,j}}\right)$

微型空气站CO2数显量化分辨力为5 μmol/mol，其量化误差以等概率分布（矩形分布）落在半宽度为2.5 μmol/mol的区间内，其引入的标准不确定度为：

$u\_{2}\left(\overbar{X\_{k,i,j}}\right)=\frac{2.5 μmol/mol}{\sqrt{3}}=$1.44 μmol/mol

按照JJF 1033-2023《计量标准考核规范》要求，$u\_{1}\left(\overbar{X\_{k,i,j}}\right)$分量大于$u\_{2}\left(\overbar{X\_{k,i,j}}\right)$分量，取$u\_{1}\left(\overbar{X\_{k,i,j}}\right)$作为被校微型空气站引入的不确定度分量，所以：

$u\left(\overbar{X\_{k,i,j}}\right)=$2.79 μmol/mol

A.3.2 由高精度温室气体分析仪引入的不确定度分量$u\left(X\_{k,h,j}\right)$

测量所使用计量标准器为高精度温室气体分析仪，其扩展不确定度*Urel*为0.1%（*k*=2），则标准不确定度：

$u\left(X\_{k,h,j}\right)=\frac{0.1\%×465.71 μmol/mol}{2}=$0.23 μmol/mol

A.4 标准不确定度分量一览表

表A.2 标准不确定度分量

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| 标准不确定度分量 | 不确定度来源 | 标准不确定值*u*（x*i*） | 灵敏系数$$c\_{i}= {∂f}/{∂X\_{i}}$$ | |$c\_{i}$|$×$*u*（x*i*） |
| $$u\left(\overbar{X\_{k,i,j}}\right)$$ | 被校微型空气站校准重复性 | 2.79 μmol/mol | $${1}/{X\_{k,h,j}}$$ | 0.60% |
| $$u\left(X\_{k,h,j}\right)$$ | 高精度温室气体分析仪 | 0.23 μmol/mol | $$-{\overbar{X\_{k,i,j}}}/{(X\_{k,h,j})^{2}}$$ | 0.05% |

注：$X\_{k,h,j}$为465.71 μmol/mol。

A.5 合成不确定度

由于各标准不确定度分量不相关，所以：

$$u\left(δ\_{k,j}\right)=\sqrt{(0.60\%)^{2}+(0.05\%)^{2}}=0.60\%$$

A.6 扩展不确定度评定

取包含因子*k*=2，则

$$U\_{rel}=u\_{c}\left(δ\right)×k=0.60\%×2=1.2\%$$

A.7 测量不确定度报告

由上述分析得到：

基于机器学习的微型空气站CO2浓度示值误差的相对扩展不确定度为：

*U*rel=1.2%，*k*=2

**JJF XXXX-XXXX**

# 附录B

校准记录格式（参考）

微型空气站编号： 微型空气站型号：

温室气体种类： 高精度温室气体分析仪型号：

校准依据：

表B.1 **（编号）** 微型空气站基于机器学习 **温室气体种类** 浓度值的示值误差和重复性

|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 样本号 | 温度（℃） | 相对湿度（%） | 基于机器学习的微型空气站浓度值（μmol/mol） | 高精度分析仪浓度（μmol/mol） | 示值误差（%） | 重复性（%） |
| 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 平均值 |
| 小时值 |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| 日均值 |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |

# 附录C

校准证书（内页）格式（参考）

|  |  |
| --- | --- |
| 校准项目 | 校准结果 |
| 示值误差 | 选定微型空气站编号 | 参数 | 小时浓度示值误差最大值 | 日均浓度示值误差 | 扩展不确定度*k*=2 |
| 小时 | 日均 |
|  | CO2 |  |  |  |  |
| CH4 |  |  |  |  |
|  | CO2 |  |  |  |  |
| CH4 |  |  |  |  |
|  | CO2 |  |  |  |  |
| CH4 |  |  |  |  |
|  | CO2 |  |  |  |  |
| CH4 |  |  |  |  |
|  | CO2 |  |  |  |  |
| CH4 |  |  |  |  |
| 重复性 | 选定微型空气站编号 | 参数 | 小时浓度重复性最大值 | 日均浓度重复性 |
|  | CO2 |  |  |
| CH4 |  |  |
|  | CO2 |  |  |
| CH4 |  |  |
|  | CO2 |  |  |
| CH4 |  |  |
|  | CO2 |  |  |
| CH4 |  |  |
|  | CO2 |  |  |
| CH4 |  |  |