

ОБРАТНЫЕ ЗАДАЧИ ОПТИКИ АТМОСФЕРЫ И ОКЕАНА

УДК 551.510.41

Новый метод интерпретации спутниковых измерений с использованием наземных эталонных измерений общего содержания озона

Ю.М. Тимофеев¹, Г.М. Неробелов^{1,2}, Г.В. Кобзарь¹,
А.А. Соломатникова^{3*}

¹ Санкт-Петербургский государственный университет
199034, г. Санкт-Петербург, Университетская наб., 7/9

² СПб ФИЦ РАН – Научно-исследовательский центр экологической безопасности РАН
187110, г. Санкт-Петербург, ул. Корпусная, 18

³ Главная геофизическая обсерватория им. А.И. Воейкова
194021, г. Санкт-Петербург, ул. Карбышева, 7

Поступила в редакцию 29.09.2022 г.;

после доработки 28.10.2022 г.;

принята к печати 8.12.2022 г.

Предложен и исследован новый метод восстановления общего содержания озона (ОСО) путем интерпретации спутниковых измерений уходящего теплового излучения Земли (спектрометр ИКФС-2, российский спутник «Метеор-М» № 2). Метод основан на построении обратного оператора, характеризующего связь между эталонными наземными измерениями ОСО (приборы Добсона и Брюера) и спутниковыми измерениями теплового излучения планеты. Новый метод исследуется для данных наземных эталонных измерений в пос. Воейково, Ленинградская обл. (ГГО им. А.И. Воейкова). Показано, что множественная линейная регрессия между наземными и спутниковыми данными позволяет аппроксимировать ОСО в пос. Воейково за 2015–2020 гг. с погрешностью 2,8% и коэффициентом корреляции 0,97. Погрешность восстановления ОСО путем решения обратной задачи методом множественной линейной регрессии равна 3,1% с коэффициентом корреляции 0,97. Предложенный метод можно применять в различных регионах земного шара с использованием наземных измерений ОСО на различных озонметрических станциях Всемирной метеорологической организации.

Ключевые слова: общее содержание озона, обратная задача, метод множественной линейной регрессии, ИКФС-2, спектрофотометр Добсона; total ozone columns, inverse problem, multilinear regression method, IKFS-2, Dobson spectrophotometer.

Введение

Озон ответствен за радиационный и термический режим стратосферы, УФ-освещенность поверхности Земли и экологическое состояние нижней тропосферы [1]. Это обусловило создание методов и аппаратуры для измерений общего содержания озона (ОСО) как во всей толще атмосферы, так и в отдельных вертикальных слоях (например, в тропосфере). Уже длительное время проводятся регулярные наземные, самолетные, аэростатные и спутниковые наблюдения, позволяющие контролировать состояние озоносферы, ее пространственные и временные вариации. Важным компонентом

этой наблюдательной системы являются спутниковые измерения озона.

В настоящее время для определения содержания озона используются различные дистанционные методы и специализированные приборы на полярных и геостационарных метеорологических спутниках. Методы основаны на измерениях прозрачности атмосферы, теплового излучения (ТИ), отраженного и рассеянного солнечного излучения (ОРСИ) и атмосферных свечений [2].

Для глобальных наблюдений с высоким пространственным и временным разрешением широко применяются методы ТИ и ОРСИ. Они реализуются с помощью различных приборов: SBUV, GOME, OMI, TROPOMI, AIRS, TES, IASI, CrIS, ИКФС-2 и т.д. [3]. В последние десятилетия метод ОРСИ является основным для получения глобальных данных ОСО с малыми погрешностями и высоким пространственным разрешением (3–30 км). Однако его

* Юрий Михайлович Тимофеев (y.timofeev@spbu.ru);
Георгий Максимович Неробелов (akulishe95@mail.ru);
Григорий Владимирович Кобзарь (kobzargv@mail.ru);
Анна Александровна Соломатникова (pulsin@mail.ru).

существенный недостаток — использование только на освещенной стороне планеты. Поэтому популярен спутниковый метод ТИ. Он позволяет исследовать озоносферу в любое время суток, в том числе при длительном отсутствии солнечного излучения, т.е. в период полярной ночи [3]. Однако погрешности метода ТИ, как правило, выше, чем у ОРСИ.

Важными факторами, определяющими погрешности спутниковых измерений ОСО, являются методика решения обратной задачи и качество априорной информации. В последние годы для интерпретации спутниковых измерений применяются методы регрессии (линейная и множественная) и искусственные нейронные сети (ИНС). В работах [4, 5] ИНС привлекались для интерпретации спутниковых измерений прибора ИКФС-2 в задачах температурного и влажностного зондирования и при определении ОСО. В работе [5] для обучения ИНС использовались высококачественные спутниковые измерения прибора ОМІ, которые предварительно оценивались с помощью наземных эталонных измерений ОСО спектрометрами Добсона и Брюера (см., например, [6]). Исследование показывает, что данный метод позволяет восстанавливать ОСО в глобальном масштабе с относительно небольшими систематической и случайной погрешностями ~ 1,5 и 2,6% относительно эталонных наземных измерений.

Однако разработка ИНС на основе глобальных спутниковых данных, ее проверка и калибровка могут быть затратными с точки зрения вычислительных ресурсов и времени. Поэтому требуется параллельно исследовать методы решения обратной задачи по восстановлению ОСО на примере одних станционных измерений.

Цель настоящей работы — исследовать возможности использования наземных эталонных измерений ОСО для решения обратной задачи по определению ОСО методом регрессии с помощью анализа спутниковых измерений спектров уходящего ИК-излучения.

1. Данные и методы

1.1. Наземные измерения ОСО и спутниковые измерения спектров уходящего ИК-излучения

Анализ эффективности нового подхода к интерпретации спутниковых измерений для определения ОСО с помощью наземных измерений и измерений спектров уходящего ИК-излучения Земли проводится на основе расчетов коэффициентов корреляции между наземными и спутниковыми данными. Также для оценки эффективности подхода анализируются погрешности множественной линейной регрессии (МЛР) при аппроксимации связи между изменениями ОСО и ИК-излучения. Использовались согласованные в пространстве и времени ансамбли наземных измерений ОСО прибором Добсона в пос. Воейково (филиал ГГО им. А.И. Воейкова) и спутниковых измерений уходящего ИК-излучения

прибором ИКФС-2 в радиусе 100 км от пос. Воейково в 2015–2020 гг. В настоящее время приборы Добсона считаются эталонами в мировой озонометрической сети, в том числе в Росгидромете. Они восстанавливают ОСО по прямому солнечному излучению в УФ-диапазоне с погрешностями 1–2% в зависимости от состояния атмосферы [7, 8].

Фурье-спектрометр ИКФС-2, функционирующий на российском спутнике «Метеор-М» № 2, измеряет уходящее тепловое ИК-излучение в спектральной области 660–2000 см⁻¹ с разрешением 0,37–0,45 см⁻¹ и радиометрическим шумом в диапазоне 0,15–0,45 мВт/м² · ср · см⁻¹. ИКФС-2 более 6 лет стабильно функционирует на борту спутника, обеспечивая измерения около 130 000 спектров/сут [9–11]. В [12] показано, что ОСО, восстановленные из измерений ИКФС-2 с использованием ИНС, восстановленные отличаются от эталонных измерений прибором Добсона в среднем на 2,4% со стандартным отклонением ошибки 3,6% при очень высоком коэффициенте корреляции 0,97.

1.2. Решение обратной задачи методом регрессии

При решении обратной задачи методом МЛР строится обратный оператор [13, 14]:

$$R = K_{\phi f} (K_f + I\alpha^2)^{-1}, \quad (1)$$

где $K_{\phi f}$ — ковариационная матрица между известными данными ОСО (ϕ) и уходящим ИК-излучением (f); K_f — ковариационная матрица уходящего ИК-излучения; I — единичная матрица; α — параметр регуляризации (определяется погрешностью измерений излучения, принят в исследовании за 0,15 мВт/м² · ср · см⁻¹). Символ «-1» обозначает процедуру обращения матрицы.

Оценка решения обратной задачи при регрессионном подходе для восстановления вариации ОСО $\left(\phi_i - \sum_{i=1}^N \frac{\phi_i}{N} \right)$ (N — размер выборки измерений ОСО) на основе обратного оператора и измерений ИК-излучения может быть найдена по формуле

$$\bar{\phi} = R\bar{f}, \quad (2)$$

где $\bar{\phi}$ и $\bar{f}$ — вариации ОСО и уходящего ИК-излучения относительно средних значений.

2. Результаты

2.1. Корреляционные связи между ОСО и уходящим ИК-излучением

Результаты расчета коэффициента корреляции между наземными измерениями ОСО спектрометром Добсона и спектрами уходящего излучения, измеренными ИКФС-2 в области 660–1090 см⁻¹ в районе пос. Воейково в 2015–2020 гг., представлены на рис. 1. В данной спектральной области

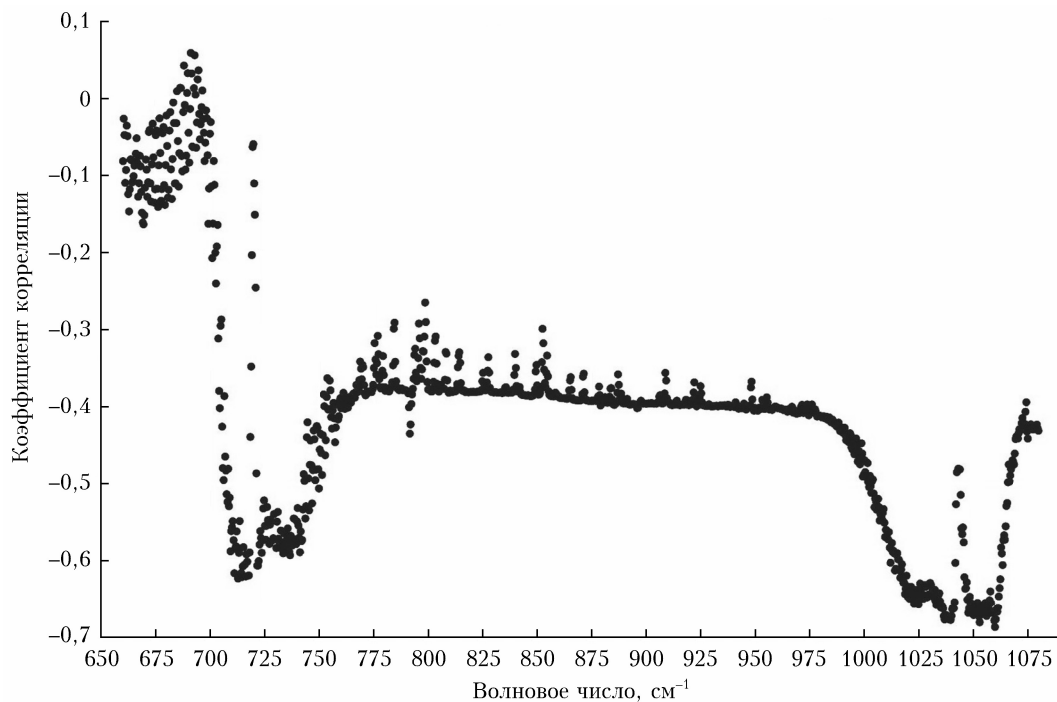


Рис. 1. Спектральный ход коэффициента корреляции между наземными измерениями ОСО в пос. Воейково и спутниковыми измерениями уходящего ИК-излучения в 2015–2020 гг.

расположены полоса поглощения озона (9,6 мкм) и часть полосы CO_2 (15 мкм).

Из рис. 1 следует, что коэффициент корреляции между наземными измерениями ОСО и спутниковыми измерениями ИК-излучения в большей части рассмотренной спектральной области мал и близок по модулю к 0,4. Максимальные его значения достигают по модулю 0,5–0,7 в двух спектральных областях: в полосе поглощения озона 9,6 мкм (1010–1060 cm^{-1}) и в крыле полосы поглощения CO_2 15 мкм (720–740 cm^{-1}). Значительная корреляция в полосе поглощения озона 9,6 мкм обусловлена существенным влиянием изменения содержания озона на уходящее тепловое излучение в данном диапазоне длин волн. Высокая корреляция в полосе 15 мкм вызвана двумя причинами. Во-первых, сильной корреляцией содержания озона с температурой атмосферы, информация о которой содержится в измерениях уходящего излучения. Во-вторых, наличием в полосе поглощения CO_2 линий поглощения озона ($\sim 720 \text{ cm}^{-1}$).

2.2. Множественная регрессия между ОСО и уходящим ИК-излучением

Для предварительной оценки погрешностей предлагаемой методики построена МЛР между эталонными наземными измерениями ОСО и измерениями спектров ИК-излучения. В МЛР при помощи метода наименьших квадратов оцениваются оптимальные коэффициенты регрессии, которые дают минимум погрешности между восстановленными

и измеренными значениями. В качестве предикторов ОСО использовались измерения уходящего излучения в спектральных областях с высоким коэффициентом корреляции: 720–740 и 1010–1060 cm^{-1} (см. рис. 1 и раздел 2.1). Всего было отобрано 76 предикторов, каждый из которых вместе с наземными измерениями ОСО покрывает ~ 169 дней за 2015–2020 гг. Если при этом построении использовать весь ансамбль измерений ОСО прибором Добсона (т.е. 169 значений), то средняя разность (систематическая погрешность) между аппроксимированными при помощи МЛР значениями ОСО и наземными измерениями ОСО прибором Добсона практически нулевая; СКО разности 2,8%; коэффициент корреляции 0,98. Отметим, что естественная вариация (стандартное отклонение от среднего) ОСО, измеренного прибором Добсона, составила 44 е.Д., или 12%.

На рис. 2 приведен пример аппроксимации ОСО в пос. Воейково по данным ИКФС-2 при помощи МЛР. Рисунок демонстрирует высокое качество аппроксимации наземных измерений ОСО. Отметим, что даже его резкие изменения почти на 100 е.Д. хорошо воспроизводятся с помощью спутниковых измерений уходящего теплового излучения. Абсолютные разности между аппроксимацией ОСО с помощью МЛР и наземными измерениями прибором Добсона находятся в большинстве случаев в диапазоне ~ 10 е.Д. (см. нижнюю часть рис. 2).

Анализ показывает, что качество аппроксимации методом МЛР существенно зависит от количества предикторов (т.е. от ИК-излучения на разных длинах волн по данным измерений ИКФС-2).

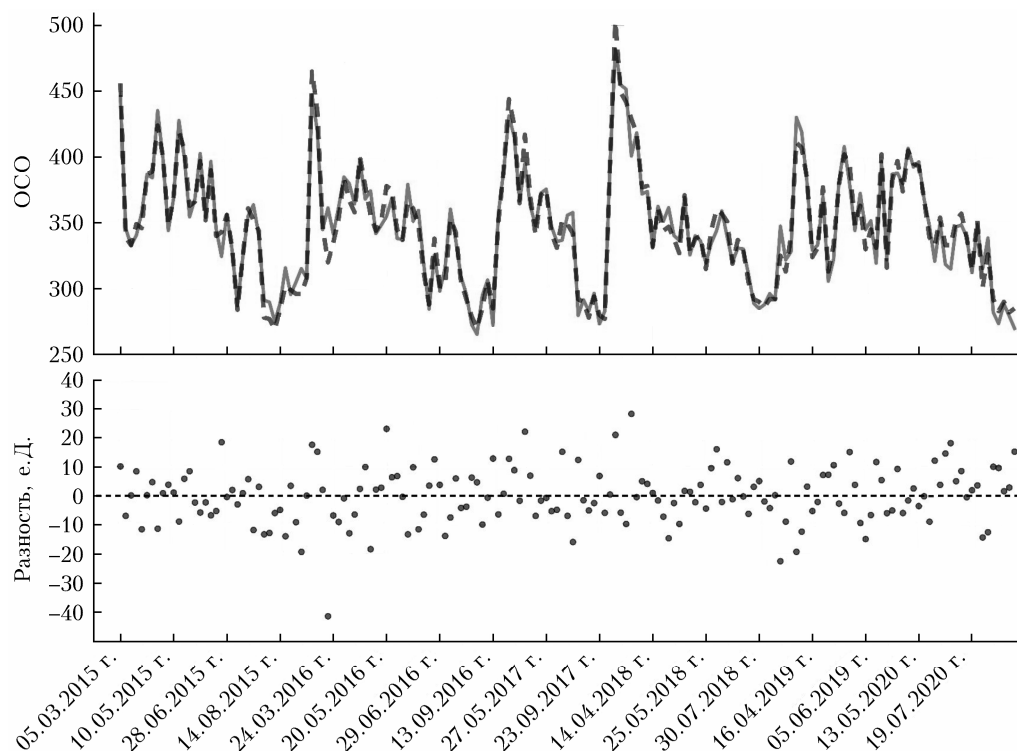


Рис. 2. Временной ряд ОСО в пос. Воейково за 2015–2020 гг. на основе наземных измерений прибором Добсона (серая кривая) и аппроксимация МЛР (штриховая кривая)

2.3. Восстановление вариации ОСО с помощью обратного оператора

На следующем этапе с помощью построенного обратного оператора и методики, описанной в разделе 1.2, восстановлен временной ряд вариации ОСО. На основе сравнения восстановленного и измеренного прибором Добсона ОСО получены оценки рассогласований (погрешностей по отношению к эталону). Отметим, что оценка погрешностей проводится на основе зависимой выборки. Из анализа результатов численных исследований по восстановлению ОСО при разном количестве предикторов можно заключить, что в среднем при увеличении количества предикторов разность между восстановленным и измеренным ОСО уменьшается. Причем скорость ее уменьшения с увеличением числа предикторов снижается. Например, при увеличении числа предикторов с 2 до 4 СКО разности уменьшается с 9,2 до 6,7% (т.е. на 2,5%), а коэффициент корреляции увеличивается с 0,68 до 0,85. В свою очередь, при увеличении числа предикторов с 426 до 510 СКО уменьшается всего на 0,3% (с 3,4 до 3,1%), а коэффициент корреляции увеличивается лишь на 0,01 (с 0,96 до 0,97). В таблице приведены результаты сопоставления восстановленного ОСО (при учете разного количества предикторов) с эталонными измерениями. Можно сделать вывод, что с увеличением числа используемых предикторов происходит «исчерпание» информации, содержащейся в спутниковых измерениях уходящего излучения.

Расчеты показывают, что лучшее соответствие восстановленных и измеренных прибором Добсона

СКО и коэффициент корреляции (КК) между ОСО по измерениям прибора Добсона и результатам решения обратной задачи методом регрессии при разном количестве предикторов

Количество предикторов	Критерий отбора предикторов	СКО, е.Д. (%)	КК
18	КК < -0,67	20,3 (5,9)	0,89
37	< -0,65	19,1 (5,5)	0,90
76	< -0,60	16,5 (4,8)	0,93
140	< -0,50	14,8 (4,3)	0,94
224	< -0,40	12,9 (3,7)	0,96
510	< 0,2	10,9 (3,1)	0,97

значений ОСО достигается при использовании измерений ИКФС-2 на всех длинах волн диапазона 660–1090 см⁻¹ (510 предикторов). Большое число измерений прибора ИКФС-2 позволяет учесть и определить не только вариации озона, но и исключить влияние «второстепенных» вариаций других атмосферных параметров (температуры атмосферы и поверхности, влажности, облачности и т.д.), от которых зависит уходящее тепловое излучение системы «атмосфера – поверхность». Использование всех 510 предикторов позволяет определить ОСО с наименьшим СКО (10,9 е.Д., или 3,1%) и наибольшим коэффициентом корреляции (0,97).

3. Анализ результатов

Современные требования к погрешностям измерения ОСО заметно различаются в зависимости от рассматриваемой задачи и колеблются от 1 до 5% [15]. Полученные в настоящей работе

погрешности восстановления ОСО с помощью решения обратной задачи методом регрессии (3,1%) удовлетворяют указанным требованиям и близки к погрешностям, реализуемым в настоящее время различными методами интерпретации спутниковых измерений.

В работе [12] рассогласования между значениями ОСО, восстановленными из наземных измерений солнечного ИК-излучения высокого разрешения и измеренными прибором Добсона в районе Санкт-Петербурга, составляли 3,9% (систематические) и 2,8% (случайные). Это соответствует СКО разности (4,8%) между наземными и спутниковыми измерениями при помощи современных методов и приборов. Сравнение спутниковых измерений ОСО прибором ИКФС-2 с наземными и независимыми спутниковыми данными показало, что суммарные среднеквадратические погрешности разработанных ранее методик составляют в среднем 3–5% [3, 5, 13]. В зависимости от широты, сезона и состояния атмосферы эти погрешности могут достигать больших значений. Многочисленные сопоставления ОСО, полученного с помощью спутникового прибора IASI (метод ТИ), с наземными измерениями приборов Добсона и Брюера показывают постоянное превышение спутниковых измерений на ~5% на всех широтах, за исключением высоких, где отличия данных обоих наземных приборов от спутниковых достигали 9 и 20% в Арктике и Антарктике соответственно [16]. В работе [17] показано, что измерения ОСО спутниковыми приборами IASI совпадают с измерениями приборов GOME-2, Добсона, Брюера, DOAZ и Фурье-спектрометров со средним глобальным отличием в диапазоне 0,2–3,0% в зависимости от прибора и станции наблюдений.

Заключение

Анализ нового метода интерпретации спутниковых измерений уходящего теплового ИК-излучения Фурье-спектрометром ИКФС-2 с использованием эталонных наземных измерений ОСО прибором Добсона на примере измерений в пос. Воейково показывает его перспективность. Аппроксимация связи между ОСО и уходящим ИК-излучением с помощью множественной линейной регрессии позволяет получить погрешности примерно 2,8% с коэффициентом корреляции 0,97. Погрешности восстановления вариации ОСО с помощью решения обратной задачи методом множественной линейной регрессии с использованием спектра уходящего ИК-излучения в области 660–1100 см⁻¹ составляют 3,1% с коэффициентом 0,97. В дальнейшем планируется применение описанного в работе метода на других озонметрических станциях ВМО с использованием соответствующих эталонных измерений ОСО.

Финансирование. Исследование выполнено в лаборатории «Исследований озонного слоя и верхней атмосферы» Санкт-Петербургского государственного университета при финансовой поддержке Мини-

стерства науки и высшего образования РФ (соглашение № 075-15-2021-583).

Список литературы

1. WMO. Scientific Assessment of Ozone Depletion. Report N 58. Geneva, Switzerland, 2018. 588 p.
2. Тимофеев Ю.М. Глобальная система мониторинга параметров атмосферы и поверхности. СПб.: СПбГУ, Физ. факультет. 2010. 129 с.
3. Тимофеев Ю.М., Неробелов Г.М., Поляков А.В., Виrolainen Я.А. Спутниковый мониторинг озоносферы // Метеорол. и гидрол. 2021. Т. 46, № 12. С. 71–79. DOI: 10.52002/0130-2906-2021-12-71-79.
4. Поляков А.В., Тимофеев Ю.М., Виrolainen Я.А. Применение искусственных нейронных сетей в температурно-влажностном зондировании атмосферы // Изв. РАН. Физ. атмосф. и океана. 2014. Т. 50, № 3. С. 373–380. DOI: 10.7868/S0002351514030109.
5. Polyakov A., Virolainen Y.A., Nerobello G., Timofeyev Yu., Solomatnikova A. Total ozone measurements using IKFS-2 spectrometer aboard “Meteor-M” N 2 satellite in 2019–2020 // Int. J. Rem. Sens. 2021. V. 42, N 22. P. 8709–8733. DOI: 10.1080/01431161.2021.1985741.
6. McPeters R., Kroon M., Labow G., Brinksma E., Balis D., Petropavlovskikh I., Veefkind J.P., Bhartia P.K., Levelt P.F. Validation of the Aura Ozone Monitoring Instrument total column ozone product // J. Geophys. Res. 2008. V. 113. D15S14. DOI: 10.1029/2007JD008802.
7. Fioletov V.E., Kerr J.B., McElroy C.T., Wardle D.I., Savastiouk V., Grajnar T.S. The Brewer reference triad // Geophys. Res. Lett. 2005. V. 32. L20805. DOI: 10.1029/2005GL024244.
8. Звягинцев А.М., Иванова Н.С., Кузнецова И.Н., Нахаев М.И., Никифорова М.П. Мониторинг общего содержания озона и УФ-облученности: основные результаты // Проблемы экологического мониторинга и моделирования экосистем. 2017. Т. 28, № 6. С. 85–98. DOI: 10.21513/0207-2564-2017-6-85-98.
9. Головин Ю.М., Завелевич Ф.С., Никулин А.Г., Козлов Д.А., Монахов Д.О., Козлов И.А., Архипов С.А., Целиков В.А., Романовский А.С. Бортовые инфракрасные Фурье-спектрометры для температурно-влажностного зондирования атмосферы Земли // Исслед. Земли из космоса. 2013. № 6. С. 25–37.
10. Timofeyev Yu.M., Uspensky A.B., Zavelevich F.S., Polyakov A.V., Virolainen Y.A., Rublev A.N., Kukhar'sky A.V., Kiseleva J.V., Kozlov D.A., Kozlov I.A., Nikulin A.G., Pyatkin V.P., Rusin E.V. Hyperspectral infrared atmospheric sounder IKFS-2 on “Meteor-M” N 2 – Four years in orbit // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2019. V. 238. 106579. DOI: 10.1016/j.jqsrt.2019.106579.
11. Успенский А.Б., Тимофеев Ю.М., Козлов Д.А., Черный И.В. Развитие методов и средств дистанционного температурно-влажностного зондирования земной атмосферы // Метеорол. и гидрол. 2021. № 12. С. 33–44.
12. Nerobello G., Timofeyev Y., Virolainen Y., Polyakov A., Solomatnikova A., Poberovskii A., Kirner O., Al-Subari O., Smyshlyaev S., Rozanov E. Measurements and modelling of total ozone columns near St. Petersburg, Russia // Remote Sens. 2022. N 14. P. 3944. DOI: 10.3390/rs14163944.
13. Rodgers C.D. Inverse methods for atmospheric sounding. Theory and practice // Ser. Atmos. Ocean. Planet. Phys. 2000. V. 2. P. 256.

14. Поляков А.В., Тимофеев Ю.М., Виролайнен Я.А., Козлов Д.А. Мониторинг общего содержания озона в атмосфере с использованием российской аппаратуры ИКФС-2 // Журн. прикл. спектроскопии. 2019. Т. 86, № 4. С. 597–601.
15. European Space Agency Ozone-cci: User Requirement Document (URD). 2021. Version 3.1. P. 48.
16. Boynard A., Hurtmans D., Koukouli M.E., Goutail F., Bureau J., Safieddine S., Lerot Ch., Hadji-Lazaro J., Wespes C., Pommereau J.-P., Pazminol A., Zyrichidou I., Balis D., Barbe A., Mikhailenko S.N., Loyola D., Valks P., Van Roozendaal M., Coheur P.-F., Clerbaux C. Seven years of IASI ozone retrievals from FORLI: Validation with independent total column and vertical profile measurements // Atmos. Meas. Tech. 2016. V. 9. P. 4327–4353. DOI: 10.5194/amt-9-4327-2016.
17. Boynard A., Hurtmans D., Garane K., Goutail F., Hadji-Lazaro J., Koukouli M.E., Wespes C., Vigouroux C., Keppens A., Pommereau J.-P., Pazmino A., Balis D., Loyola D., Valks P., Sussmann R., Smaile D., Coheur P.-F., Clerbaux C. Validation of the IASI FORLI/EUMETSAT ozone products using satellite (GOME-2), ground-based (Brewer–Dobson, SAOZ, FTIR) and ozonesonde measurements // Atmos. Meas. Tech. 2018. V. 11. P. 5125–5152. DOI: 10.5194/amt-11-5125-2018.

Yu.M. Timofeyev, G.M. Nerobelov, G.V. Kobzar, A.A. Solomatnikova. New method for satellite observation interpretation using standard ground-based measurements of total ozone column.

We propose and analyze a new method for total ozone columns (TOC) retrieving by interpreting satellite measurements of outgoing thermal radiation of the Earth (spectrometer IKFS-2, Russian satellite “Meteor-M” N 2). The new method is based on an inverse operator which is constructed using ground-based standard observations of TOC (Dobson and Brewer spectrophotometers) and satellite measurements together with multilinear regression. The method is analyzed using standard ground-based TOC measured by Dobson at Voeikovo station, Leningrad region (Voeikov Main Geophysical Observatory). The analysis shows that multilinear regression between TOC from ground-based measurements and spectra of outgoing Earth radiation by satellite observations approximates TOC in Voeikovo for 2015–2020 with an error of 2.8% and a correlation coefficient (CC) of 0.97. TOC time series retrieved from the solution of the inverse problem by the regression method has an error of 3.1% and a CC of 0.97. The method suggested can be implemented in different Earth regions with satellite observations and TOC retrieved from ozone measurements at World Meteorological Organization (WMO) stations.