СПЕКТРОСКОПИЯ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ

УДК 504.38

О возможности определения ¹³СО₂ из спектров спутниковых Фурье-спектрометров типа IASI/METOP

К.Г. Грибанов¹, И.В. Задворных¹, В.И. Захаров^{1,2}*

¹ Институт естественных наук и математики УрФУ 620000, г. Екатеринбург, пр. Ленина, 51 ² Институт математики и механики им. Н.Н. Красовского УрО РАН 620990, г. Екатеринбург, ул. Софьи Ковалевской, 16

Поступила в редакцию 15.06.2020 г.

Изучена возможность создания метода для определения относительного содержания ${}^{13}\text{CO}_2/{}^{12}\text{CO}_2$ в атмосфере в результате решения обратной задачи спутникового зондирования атмосферы в тепловом диапазоне спектрометрами типа IASI. В модельном эксперименте использовались синтетические спектры с разрешением и уровнем шума, характерными для улучшенной версии спектрометра IASI-NG. В вычислительных экспериментах показано, что вертикальные профили концентрации ${}^{13}\text{CO}_2$ и относительного содержания ${}^{13}\text{CO}_2/{}^{12}\text{CO}_2$ в атмосфере удовлетворительно восстанавливаются в тропосфере для интервала высот 2–11 км, что представляется перспективным для будущих приложений предлагаемого метода.

Ключевые слова: атмосфера, спутниковое зондирование, IASI, изотопологи углекислого газа; atmosphere, satellite remote sensing, IASI, carbon dioxide isotopologues.

Введение

Для оценки климатических последствий деятельности человека, связанной с возмущением планетарного углеродного цикла, с помощью биогеохимических моделей (см., например, [1]) необходимо не только осуществлять мониторинг содержания углекислого газа в атмосфере [2], оценивать мощности различных стоков и источников [3], но и использовать информацию об относительном содержании стабильных изотопов углерода в атмосферном углекислом газе. Различия в изотопном составе резервуаров углерода позволяют верифицировать модели обмена потоками с использованием ¹³С в качестве изотопического трассера. Для количественного описания относительного содержания ¹³С используется величина

$$\delta^{13} C = \left(\frac{R_{\text{sample}}}{R_{\text{standart}}} - 1\right) \cdot 1000\%, \qquad (1)$$

где R_{sample} — молярное отношение ${}^{13}\text{C}{}^{16}\text{O}_2/{}^{12}\text{C}{}^{16}\text{O}_2$ в образце; R_{standart} — стандартное молярное отношение, соответствующее естественной распространенности изотопов и международному стандарту PDB.

В наземных экосистемах изотопную дискриминацию на уровне ~18‰ осуществляют в основном растения, использующие в своем метаболизме С₃-фотосинтез [4]. Доля растений, обеспечивающих фотосинтез другого типа и с меньшим уровнем дискриминации изотопа 13 С (C₄, CAM), в целом по планете невелика, и поэтому величина дискриминации для наземных растений оценивается в [4] как 17,44‰. Таким образом, потребляя углекислый газ из атмосферы, растения запасают углерод, обедненный изотопом 13 С на величину дискриминации по сравнению с составом углекислого газа атмосферы. Это приводит к обогащению этим изотопом углекислого газа, который остается в атмосфере. При сжигании же органического топлива происходит обратное, т.е. обеднение изотопом 13 С углекислого газа в атмосфере.

С точки зрения верификации глобальных биогеохимических моделей представляется перспективным получение глобального покрытия распределения δ¹³С с использованием спутникового гиперспектрального зондирования. В связи с этим актуален поиск информации о возможной изменчивости $\delta^{13}C$ в атмосферном углекислом газе у поверхности и в тропосфере. В [4] представлен ряд наблюдений за 1978-2000 гг., проведенных на девяти станциях, расположенных преимущественно в Тихом океане на значительном удалении как от источников антропогенной эмиссии, так и от наземных фотосинтезирующих растений. Отмечен многолетний тренд снижения величины δ¹³C, а также сезонные вариации с амплитудой, не превышающей 2‰, наиболее заметные в Северном полушарии. Временные ряды, полученные в [5] с 1983 по 1994 г. и с 2000 по 2004 г. на территории Центральной Европы, демонстрируют уже бо́льший разброс значений, от -12 до -7‰. И наконец, в недавней работе [6]

^{*} Константин Геннадьевич Грибанов (kgribanov@ remotesensing.ru); Илья Викторович Задворных (i.zadvornykh @wsibiso.ru); Вячеслав Иосифович Захаров (v.zakharov@ remotesensing.ru).

[©] Грибанов К.Г., Задворных И.В., Захаров В.И., 2020

описаны измерения в городском воздушном бассейне за период с марта 2013 г. по август 2015 г. с часовым интервалом в дельте р. Янцзы (Китай), которые демонстрируют разброс значений от -10 до –7‰. Кроме того, в [6] выполнены оценки изотопного состава различных источников СО₂, связанных с промышленными предприятиями г. Нанкин, от -39 до -25‰. В [7] выполнялись одновременные измерения средней по атмосферному столбу величины δ^{13} C (с помощью солнечного Фурье-интерферометра IFS 125HR) и ее приповерхностного значения (Picarro G2101-i). Средние по атмосферному столбу величины в [7] варьировались от -9 до -6‰ в течение одного дня в июне 2012 г., приповерхностные же значения опускались до -12‰, причем минимальные значения соответствовали максимальным концентрациям СО2 в моменты, когда ветер был направлен от промышленных предприятий в окрестности точки наблюдения. В [8] была предпринята попытка предложить метод для определения изотопологов углекислого газа в атмосфере при гиперспектральном зондировании атмосферы в ближнем ИК-диапазоне сенсором TANSO-FTS/ GOSAT.

Цель настоящей работы — исследование возможностей метода для определения ¹³CO₂ из результатов гиперспектрального зондирования атмосферы в тепловом диапазоне сенсором типа IASI с борта спутника METOP.

Шумовая характеристика IASI/IASI-NG и моделирование шума

Спутниковый спектрорадиометр IASI на борту европейского спутника МЕТОР [9] измеряет спектры уходящего теплового инфракрасного излучения в диапазоне 645-2760 см⁻¹ со спектральным разрешением 0,5 см⁻¹. Шумовые характеристики IASI и его планируемой версии анализируются в [10]. В полосе углекислого газа в интервале 725-765 см⁻¹, в котором поглощение обусловлено как основным изотопологом ¹²C¹⁶O₂, так и его более тяжелой изотопической модификацией ¹³С¹⁶О₂, эквивалентная шумовая температура действующего спектрометра оценивается примерно в 0,15 К для сцены с яркостной температурой 280 К (*T*_{ref}). Планируемый сенсор IASI-NG должен иметь аналогичную характеристику менее 0,1 К. В полосе спектра 2230-2300 см⁻¹, где поглощение обусловлено в наибольшей степени молекулой ¹³С¹⁶О₂, действующий прибор имеет шумовую температуру в интервале от 0,2 до 0,3 К для $T_{\rm ref} = 280$ К, растущую от низкочастотного (длинноволнового) края к высокочастотному (коротковолновому). У планируемой версии эта величина должна быть постоянной (~0,1 К).

При моделировании спектров IASI или IASI-NG эквивалентную шумовую температуру для произвольной яркостной температуры в спектре можно пересчитать по формуле [10]:

$$\Delta T_{NE}(T_B(\mathbf{v})) = \frac{\Delta T_{NE}(T_{\rm ref}, \mathbf{v}) \frac{\partial B_{\mathbf{v}}}{\partial T}(T_{\rm ref})}{\frac{\partial B_{\mathbf{v}}}{\partial T}(T_B(\mathbf{v}))}, \qquad (2)$$

где ΔT_{NE} — эквивалентная шумовая температура; $T_B(\mathbf{v})$ — яркостная температура в спектральном канале с центральным волновым числом \mathbf{v} ; $B_{\mathbf{v}}$ — яркость абсолютно черного тела. При модельном расчете синтетических спектров в размерности спектральной плотности энергетической яркости (в настоящей работе это Вт/($\mathbf{M}^2 \cdot \mathbf{cm}^{-1} \cdot \mathbf{cp}$)) можно вычислить эквивалентную яркость шума в каждом спектральном канале

$$\Delta R_{\rm v} = \frac{\partial B_{\rm v}}{\partial T} (T_B({\rm v})) \cdot \Delta T_{NE} (T_B({\rm v})), \qquad (3)$$

а затем использовать эту величину в качестве стандартного отклонения при генерации нормально распределенной случайной величины с нулевым средним для моделирования спектра с шумом сенсора. При этом яркостная температура в спектральном канале вычисляется как $T_B(v) = B_v^{-1}(R_v)$, где справа функция, обратная формуле Планка для яркости абсолютно черного тела.

Спектральные интервалы, априорная информация и метод обращения

Для оценки возможности восстановления $\delta^{13}C$ из спектров спектрорадиометра типа IASI были выбраны два спектральных интервала: 725-750 и 2230-2290 см⁻¹, которые попадают в спектральный диапазон действующего орбитального прибора. В первом интервале основное поглощение обусловлено молекулой ¹²СО₂, а во втором – молекулой ¹³СО₂. Выбор спектральных каналов для молекулы ¹³CO₂ выполнен так, чтобы минимизировать влияние неопределенности в вертикальном профиле температуры воздуха [11]. Выбраны те спектральные каналы, в которых относительное изменение яркости, обусловленное изменением δ^{13} CO₂ в 18‰, того же порядка или больше, чем изменение яркости, обусловленное изменением температуры в 1 К. Основные факторы, являющиеся источниками ошибок восстановления содержания в атмосфере указанных компонентов, — это неопределенности в вертикальном профиле температуры воздуха и поглощение, обусловленное N2O. Из-за небольшого изменения δ^{13} C в атмосфере возможности дистанционного зондирования указанной величины со спутников существенно ограничены шумом сенсора. В связи с этим в настоящей работе используются шумовые характеристики планируемого спектрометра IASI-NG. Несмотря на то что в пределах вариации δ^{13} C в атмосфере изменения в спектре малы, большое количество спектральных каналов (241 в нашей работе), чувствительных к вариациям концентрации ${}^{13}CO_2$, позволяет надеяться на успешное развитие спутникового мониторинга изотопного состава углекислого газа в атмосфере.

Для правдоподобного решения обратной задачи атмосферной оптики необходимо располагать априорной информацией о распределении обоих изотопологов углекислого газа в атмосфере. Статистический ансамбль вертикальных профилей основного изотополога ¹²CO₂ был получен из данных ретроспективного анализа CAMS GMG Flux Inversions [12] для одного месяца на территории, лежащей в пределах 50-70° с.ш. и 50-80° в.д. Этот ансамбль был использован для построения ковариационной матрицы вертикальных профилей ¹²CO₂ вертикального профиля среднего по ансамблю, а один из профилей ансамбля использовался в качестве истинного в модельных экспериментах. В качестве профиля начального приближения изотополога ¹³СО₂ использовался вертикальный профиль, соответствующий величине $\delta^{13}C = -8\%$, а в качестве истинного профиля в модельных экспериментах два профиля, соответствующие вертикальным профилям в промилле, моделирующим рост (вследствие активности С₃-фотосинтезирующих растений) и спад этой величины (вследствие сжигания органического топлива, обедненного изотопом ¹³С) у поверхности по формуле $-8,0 \pm 2,0e - \frac{h}{4,0}$ %, где

h – высота над поверхностью, км.

Для решения обратной задачи в модельном эксперименте в соответствии с теорией оптимального оценивания в задачах пассивного зондирования атмосферы со спутников, наиболее полно изложенной в [13], использовалась итеративная схема

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \mathbf{C}_k (\mathbf{y} - F(\mathbf{x}_k)) + (\mathbf{I} - \mathbf{C}_k \mathbf{A}_k) (\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_k),$$
$$\mathbf{C}_k = \left(\mathbf{A}_k^T \mathbf{S}_{\varepsilon}^{-1} \mathbf{A}_k + \mathbf{S}_a^{-1}\right)^{-1} \mathbf{A}_k^T \mathbf{S}_{\varepsilon}^{-1}, \qquad (4)$$

где предполагается наличие прямой модели $\mathbf{y} = F(\mathbf{x}) + \mathbf{\varepsilon}$, моделирующей вектор спутникового спектра \mathbf{y} в зависимости от вектора состояния атмосферы \mathbf{x} со случайной ошибкой $\mathbf{\varepsilon}$, имеющей нулевое среднее и нормальное распределение размерности вектора спектра. В формуле (4) $\mathbf{A}_k = \left\{ \frac{\partial F_i}{\partial x_j} (\mathbf{x}_k) \right\}$

якобиан прямой модели; S_{ε} — ковариационная матрица ошибки измерения спектра (обычно диагональная); S_a — априорная ковариационная матрица вектора состояния атмосферы; I — единичная матрица. Вектор начального приближения \mathbf{x}_0 — средний вектор по тому же ансамблю, на основе которого вычислена априорная ковариационная матрица. Вектор состояния атмосферы в модельном эксперименте состоял из вертикальных профилей относительной концентрации ${}^{12}\text{CO}_2$ и ${}^{13}\text{CO}_2$ на модельной сетке высот. Следует отметить, что итерационная схема (4) использует яркости спектральных каналов с весами, обратными значениям диагональных

элементов ковариационной матрицы ошибки измерения спектров S_{ϵ} . Других весов в настоящей работе использовано не было.

Поскольку еще нет достаточного статистического ансамбля вертикальных профилей $^{13}CO_2$ (и тем более профилей $\delta^{13}C$ в CO₂), априорная ковариационная матрица моделировалась как блочно-диагональная:

$$\mathbf{S}_{a} = \begin{bmatrix} \mathbf{S}_{\mathrm{CO}_{2}} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \propto \mathbf{S}_{\mathrm{CO}_{2}} \end{bmatrix}, \tag{5}$$

где S_{CO_2} – априорная ковариационная матрица, рассчитанная на основе ансамбля, полученного из данных ретроспективного анализа для основного изотополога; множитель \propto подбирался в интервале 0,0001–0,01 как подтверждение тому, что концентрация ¹³CO₂ в атмосфере в ~100 раз меньше концентрации ¹²CO₂.

Модельный эксперимент и его результаты

Модельный эксперимент был основан на синтетических спектрах IASI, смоделированных для двух «истинных» состояний атмосферы, которые имели один и тот же профиль основного изотополога ¹²CO₂ и два различных профиля ¹³CO₂, моделирующих источник и сток этого изотополога на поверхности. Первоначально итеративный алгоритм (4) был проверен на синтетических спектрах без шума, хотя диагональная ковариационная матрица S₆ не полагалась нулевой; соответствующие стандартные отклонения полагались равными $0.5\cdot10^{-5}$ и $0.5\cdot10^{-6}\,\mathrm{Bt}/$ /(м² · см⁻¹ · ср) для 725-750 и 2230-2290 см⁻¹. Это было необходимо, чтобы все матрицы из (4), которые приходится обращать, были достаточно хорошо обусловлены для применения численных алгоритмов. На втором этапе к синтетическим спектрам был добавлен шум, имеющий нормальное распределение с нулевым средним и стандартным отклонением, рассчитанным по формулам (2) и (3) с параметрами сенсора IASI-NG. При этом части диагонали ковариационной матрицы S_ε, соответствующие двум спектральным интервалам, заполнялись квадратами средних по этим интервалам стандартных отклонений, рассчитанных по тем же формулам. Эти величины в модельном эксперименте равнялись 0,00012 Вт/($M^2 \cdot cM^{-1} \cdot cp$) для 725— 750 см⁻¹ и 0,000002 Вт/($M^2 \cdot cM^{-1} \cdot cp$) для 2230— 2290 см⁻¹. Результаты эксперимента по обращению синтетических спектров показаны на рис. 1, 2. Вычислительный эксперимент был выполнен с использованием модифицированной версии ПО FI-RE-ARMS [14], вспомогательных сценариев пакета Octave [15] и программ, написанных на языках С и FORTRAN, с привлечением библиотеки NetCDF [16] для извлечения данных реанализа CAMS GHG Flux Inversions.



Рис. 1. Результат восстановления вертикальных профилей из синтетических спектров без шума: сплошная линия – профиль начального приближения; пунктирная – истинный профиль; кружки – восстановленный профиль



Рис. 2. Результат восстановления вертикальных профилей из синтетических спектров с шумовыми характеристиками сенсора IASI-NG; обозначения те же, что и на рис. 1

754

Грибанов К.Г., Задворных И.В., Захаров В.И.

Заключение

Предложенный метод, включающий в себя набор спектральных каналов сенсора IASI, способ построения модельной ковариационной матрицы и реализующий стандартный для таких задач метод оптимального оценивания, позволяет выполнить удовлетворительную подгонку вертикальных профилей ${}^{13}CO_2$ и $\delta^{13}C$ в интервале высот 2–11 км. В настоящей работе не рассмотрена методология оценки ошибок, связанных с неточным знанием вертикального профиля температуры, влажности и N₂O, а также с неточным знанием спектральных параметров молекулы ¹³CO₂. Однако авторы выражают уверенность в том, что в случае появления на орбите спектрорадиометра с шумовыми характеристиками IASI-NG технологию дистанционного определения вертикальных профилей и среднего по атмосферному столбу значения δ^{13} С в СО₂ необходимо развивать, в том числе, и в части непосредственных измерений вертикальных профилей δ¹³С в атмосфере. Работа выполнена при финансовой поддержке

РНФ (грант № 18-11-00024).

- Scholze M., Kaplan J.O., Knorr W., Heimann M. Climate and interannual variability of the atmosphere-biosphere ¹³CO₂ flux // Geophys. Res. Lett. 2003. V. 30, N 2. P. 1097. DOI: 10.1029/2002GL015631.
- Антохина О.Ю., Антохин П.Н., Аршинова В.Г., Аршинов М.Ю., Белан Б.Д., Белан С.Б., Давыдов Д.К., Дудорова Н.В., Ивлев Г.А., Козлов А.В., Краснов О.А., Максютов Ш.Ш., Machida T., Панченко М.В., Пестунов Д.А., Рассказчикова Т.М., Савкин Д.Е., Sasakawa М., Симоненков Д.В., Скляднева Т.К., Толмачев Г.Н., Фофонов А.В. Исследование динамики концентрации парниковых газов на территории Западной Сибири // Оптика атмосф. и океана. 2019. Т. 32, № 9. С. 777–785.
- Домышева В.М., Сакирко М.В., Пестунов Д.А., Панченко М.В. Сезонный ход процесса газообмена СО₂ в системе «атмосфера-вода» в литорали Южного Байкала.
 Осень // Оптика атмосф. и океана. 2012. Т. 25, № 9. С. 826-832; Domysheva V.M., Sakirko M.V., Pestunov D.A., Panchenko M.V. Seasonal behavior of the CO₂ gas exchange process in the "atmosphere-water" system of littoral zone of Southern Baikal.
 Autumn // Atmos. Ocean. Opt. 2013. V. 26, N 3. P. 252-258.
- Keeling C.D., Piper S.C., Bacastow R.D., Wahlen M., Whorf T.P., Heimann M., Meijer H.A. Atmospheric CO₂ and ¹³CO₂ Exchange with the Terrestrial Biosphere and Oceans from 1978 to 2000: Observations and Carbon Cycle Implications. New York: Springer. 2005. DOI: 10.1007/0-387-27048-5-5.
- 5. Kuc T., Rozansky K., Zimnoch M., Necki J., Chmura L., Jelen D. Two decades of regular observations of ¹⁴CO₂ and ¹³CO₂ content in atmospheric carbon dioxide in

Central Europe: Long-term changes of regional anthropogenic fossil CO_2 emissions // Radiocarbon. 2007. V. 49, N 2. P. 807–816.

- 6. Xu J., Lee X., Xiao W., Cao C., Liu S., Wen X., Xu J., Zhang Z., Zhao J. Interpreting the ¹³C/¹²C ratio of carbon dioxide in an urban airshed in the Yangtze River Delta, China // Atmos. Chem. Phys. 2017. V. 17. P. 3385–3399. DOI: 10.5194/acp-17-3385-2017.
- Rodica L., Manvendra K.D., Bradley G.H., Zachary T.B., Jay R.H., Thom R., Sang-Hyun L. Multiscale observations of CO₂, ¹³CO₂, and pollutants at Four Corners for emission verification and attribution // PNAS, 2014. V. 111, N 23. P. 8386–8391.
- Reuter M., Bovensmann H., Buchwitz M., Burrows J.P., Deutscher N.M., Heymann J., Rozanov A., Schneising O., Sutob H., Toon C., Warneke T. On the potential of the 2041–2047 nm spectral region for remote sensing of atmospheric CO₂ isotopologues // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2012. V. 113, iss. 16. P. 2009–2017. DOI: 10.1016/j. jqsrt.2012.07.013
- Clerbaux C., Boynard A., Clarisse L., George M., Hadji-Lazaro J., Herbin H., Hurtmans D., Pommier M., Razavi A., Turquety S., Wespes C., Coheur P.-F. Monitoring of atmospheric composition using the thermal infrared IASI // Atmos. Chem. Phys. 2009. V.9. P. 6041-6054. DOI: 10.5194/acp-9-6041-2009.
- Crevoisier C., Clerbaux C., Guidard V., Phulpin T., Armante R., Barret B., Camy-Peyret C., Chaboureau J.-P., Coheur P.-F., Crépeau L., Dufour G., Labonnote L., Lavanant L., Hadji-Lazaro J., Herbin H., Jacquinet-Husson N., Payan S., Péquignot E., Pierangelo C., Sellitto P., Stubenrauch C. Towards IASI-New generation (IASI-NG): Impact of improved spectral resolution and radiometric noise on the retrieval of thermodynamic, chemistry and climate variables // Atmos. Meas. Tech. 2014. V. 7. P. 4367–4385. DOI: 10.5194/ amt-7-4367-2014.
- 11. Задворных И.В., Грибанов К.Г., Захаров В.И., Имасу Р. Предварительная оценка возможности определения содержания ¹³CO₂ из спектров IASI/METOP // Оптика атмосф. и океана. Физ. атмосф.: Материалы XXV Междунар. симпоз. Томск: Изд-во ИОА СО РАН, 2019. С. С-530–533. URL: https://symp.iao.ru/ files/symp/aoo/25/C.pdf (дата обращения: 17.07.2020).
- CAMS Greenhouse Gases Flux Inversions. [Электронный pecypc]. URL: https://apps.ecmwf.int/datasets/ data/cams-ghg-inversions/ (дата обращения 19.03.2020).
- Rodgers C.D. Inverse Methods for Atmospheric Sounding. Theory and Practice. Singapore: World Scientific Publishing, 2000. 240 p.
- 14. Gribanov K.G., Zakharov V.I., Tashkun S.A., Tyuterev Vl.G. A new software tool for radiative transfer calculations and its application to IMG/ADEOS data // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2001. V. 68, N 4. P. 435–451.
- GNU Octave [Электронный ресурс]. URL: https:// gnu.org/software/octave/ (дата обращения: 19.03.2020).
- Unidata NetCDF [Электронный ресурс]. URL: https: //www.unidata.ucar.edu/software/netcdf/ (дата обращения: 19.03.2020).

K.G. Gribanov, I.V. Zadvornykh, V.I. Zakharov. On the feasibility of ¹³CO₂ retrieval from the spectra of satellite Fourier transform spectrometers of the IASI/METOP type.

The feasibility of developing a method for retrieval of the relative content of ${}^{13}\text{CO}_2/{}^{12}\text{CO}_2$ in the atmosphere as a result of solving the inverse problem of satellite sounding of the atmosphere in the thermal infrared range with IASI spectrometers has been studied. In the model experiment, synthetic spectra were used with resolution and noise level characteristic of an improved version of the IASI-NG spectrometer. In computational experiments, it was shown that the vertical profiles of the ${}^{13}\text{CO}_2$ concentration and the relative ${}^{13}\text{CO}_2/{}^{12}\text{CO}_2$ content in the atmosphere are quite satisfactorily retrieved in the troposphere for the altitude range 2–11 km, which seems promising for future applications of the method suggested.

О возможности определения ¹³CO₂ из спектров спутниковых Фурье-спектрометров типа IASI/METOP 755