

Анализ синергетического наземного МКВ + ИК-метода определения вертикальных профилей содержания озона

Ю.И. Бордовская[✉], Ю.М. Тимофеев, Я.А. Виролайнен, А.В. Поберовский*

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

Поступила в редакцию 11.06.2024;
после доработки 07.08.2024;
принята к печати 07.08.2024

Озон является одним из важнейших малых газовых составляющих атмосферы Земли. В данной работе анализируется наземный синергетический МКВ + ИК-метод измерения содержания озона с использованием функционирующих в Петергофе (СПбГУ) приборов: МКВ-озонметра и ИК-Фурье-спектрометра Bruker IFS 125HR. Вычислены погрешности дистанционных измерений озона, которые меняются от 5 до 20% и более. Вертикальное разрешение МКВ + ИК-метода варьируется от ~10 до ~12 км. Представленные оценки показывают потенциальные возможности определения содержания озона в Петергофе с помощью наземных комбинированных МКВ- и ИК-измерений.

Ключевые слова: дистанционные измерения, наземный синергетический метод, профиль озона, погрешности, априорная информация, вертикальное разрешение; remote measurements, ground-based synergetic method, ozone profile, errors, *a priori* information, vertical resolution.

Введение

Атмосферный озон является основным поглотителем опасного для живых организмов ультрафиолетового (УФ) излучения Солнца в стратосфере, а также парниковым и загрязняющим газом в тропосфере [1–3]. Все это стимулировало создание и регулярное использование различных локальных и дистанционных методов и средств измерений озона [4–7]. В настоящее время активно применяются наземные, самолетные, аэростатные и спутниковые методы измерений общего содержания озона (ОСО) и его вертикальных профилей (ВП). Разные дистанционные методы используют различные области спектра (от УФ-области до радиоволн), естественные и искусственные виды излучения различной природы (солнечное, звездное, собственное тепловое, инфракрасное (ИК) неравновесное, свечение атмосферы, отраженное и рассеянное солнечное излучение, лазерное и т.д.).

Важную роль в мониторинге ОСО и его ВП играют наземные пассивные методы, использующие поглощение молекулами озона солнечного ИК-излучения, а также собственное тепловое излучение в микроволновых (МКВ) вращательных линиях полосы поглощения озона. В частности, подобные

измерения регулярно проводятся на станциях международной сети наблюдений NDACC (Network for the Detection of Atmospheric Composition Change) [8], в том числе в районе Санкт-Петербурга (Петергоф, 59,88° с.ш. и 29,82° в.д.). В большинстве случаев для определения содержания озона эти измерения анализируются по отдельности, но в работах [9, 10] показано, что объединение МКВ- и ИК-измерений повышает информативность дистанционного наземного зондирования озоносферы.

Цель работы – анализ характеристик (погрешности и вертикального разрешения) синергетического МКВ + ИК-метода дистанционных наземных измерений ВП содержания озона, а также МКВ + МКВ-метода, основанного на объединении измерений двух МКВ-приборов, поскольку зачастую ИК-измерений значительно меньше, чем МКВ-измерений.

Материалы и методы

Физико-математические основы используемых методов

Наземный МКВ-метод основан на измерениях спектров нисходящего теплового излучения в линиях поглощения озона [11–14]. Уравнение переноса излучения для поставленной обратной задачи приведено в [15]. Конкретный вид коэффициента поглощения зависит от используемой модели ослабления излучения в атмосфере и рассматриваемой спектральной

* Юлия Игоревна Бордовская (bordovskayay@gmail.com); Юрий Михайлович Тимофеев (y.timofeev@spbu.ru); Яна Акселевна Виролайнен (yana.virolainen@spbu.ru); Анатолий Васильевич Поберовский (avp@troll.phys.spbu.ru).

области. В настоящей работе исследуются безоблачная атмосфера и нисходящее МКВ-излучение в линиях озона и водяного пара, а также в полосе поглощения кислорода, поэтому коэффициент ослабления обусловлен молекулярным поглощением озоном, кислородом и водяным паром (селективная и континуальная компоненты). Кроме того, присутствует вклад в поглощение за счет соударений молекул азота и кислорода, который слабо меняется с длиной волны.

В ИК-области спектральные «окна» для мониторинга содержания озона подбираются таким образом, чтобы вклад в поглощение от озона был наибольшим, также учитываются селективная и континуальная компоненты поглощения водяного пара.

Информация о содержании озона в синергетическом МКВ + ИК-методе извлекается из согласованных по времени наземных измерений спектров нисходящего МКВ-излучения и прямого солнечного ИК-излучения высокого спектрального разрешения. Этот метод можно реализовать по-разному в зависимости от выбранных спектральных интервалов (например, в полосе поглощения озона 9,6 мкм) и методов регуляризации при решении некорректной обратной задачи.

В традиционном МКВ-методе определения содержания озона используются дополнительная информация о вертикальном профиле температуры (данные радиозондирования, реанализа, средние температуры тропосферы и стратосферы) и дифференциальный подход для исключения «мешающего» влияния излучения водяного пара и кислорода в тропосфере. В рассматриваемом синергетическом МКВ + МКВ-методе данные о температуре и тропосферном излучении получены из измерений МКВ-прибора, предназначенного для зондирования тропосферы.

Характеристики моделируемой аппаратуры

В настоящее время в Санкт-Петербургском государственном университете (59,88° с.ш.; 29,82° в.д.) функционирует ряд наземных приборов, позволяющих получать информацию о состоянии атмосферы по измерениям нисходящего (теплового и солнечного) излучения в разных областях спектра. В настоящей работе синергетический метод изучения озоносферы анализировался на основе данных следующих приборов.

1. МКВ-озонметра, измеряющего спектры нисходящего теплового МКВ-излучения атмосферы в терминах яркостной температуры в области линии поглощения озона 110,836 ГГц. При общем количестве спектральных каналов 31 полная полоса анализа исследуемого сигнала составляет 240 МГц с разрешением от 1 до 10 МГц. Линия имеет амплитуду ~7–9 К на фоне тропосферного излучения водяного пара. Анализ весовых функций (производных функции пропускания атмосферы по высоте) в рас-

считываемой линии излучения озона показывает, что информация о ВП содержания озона относится к высотам от 20 до 50 км [15].

2. МКВ-радиометра RPG HATPRO, который имеет семь спектральных каналов в области линии поглощения водяного пара 22,235 ГГц и семь каналов в области полосы поглощения кислорода 60 ГГц. Прибор предоставляет информацию о температуре и плотности водяного пара в тропосфере [16].

3. Фурье-спектрометра (ФС) Bruker IFS 125HR, регистрирующего спектры прямого солнечного ИК-излучения с высоким спектральным разрешением (~0,005 см⁻¹). Методические аспекты ИК-метода определения ОСО и его ВП описаны в [17].

При анализе МКВ + ИК-метода моделировались измерения озонметра и ФС Bruker IFS 125HR, поскольку оба прибора позволяют получать данные о содержании озона, но в разных высотных диапазонах и с разными погрешностями и вертикальным разрешением; объединение этих приборов потенциально может улучшить качество получаемой информации о ВП содержания озона. Так как ИК-измерений прямого солнечного излучения меньше, чем МКВ-измерений собственного излучения атмосферы, был дополнительно рассмотрен МКВ + МКВ-метод, в рамках которого моделировались спектры озонметра и радиометра RPG HATPRO. Это позволило учесть вклад тропосферы в излучение в линии поглощения озона 110,836 ГГц.

Решение обратной задачи

Поставленная обратная задача определения содержания озона из наземных измерений спектров нисходящего микроволнового и солнечного излучения является некорректной в классическом смысле (по Адамару) и для своего решения требует специальных методов с привлечением априорной информации. Один из таких методов — метод множественной линейной регрессии, для реализации которого необходимо наличие большого ансамбля состояний атмосферы и соответствующего ему ансамбля измерений. В данном методе используется простое соотношение [18]:

$$\Phi = Rf,$$

где Φ — вектор искомой вариации ВП содержания озона; f — вектор вариаций измерений излучения относительно среднего;

$$R = C_{\Phi, f}(C_f + \alpha I)^{-1}$$

— решающий оператор, $C_{\Phi, f}$ — взаимокорреляционная матрица озон-измерения излучения, C_f — ковариационная матрица измерений, I — единичная матрица, α — параметр регуляризации, равный дисперсии случайных погрешностей измерений.

В настоящей статье в качестве ансамбля состояний атмосферы использовался ансамбль, подготовленный в CNRM (Centre National de Recherches

Météorologiques, Франция, https://iasi.aeris-data.fr/IASI-NG_4A_data/). Он содержит реализации атмосферы по всему земному шару за четыре дня 2013 г., каждый из которых соответствует одному из четырех сезонов. Из всего ансамбля были отобраны те реализации атмосферы, которые удовлетворяли следующим требованиям:

1) широтный пояс 50–70° с.ш. Его выбор согласован с координатами расположения приборов; ширина пояса в 20° и отсутствие ограничений по долготе позволяет сильно расширить объем ансамбля данных;

2) безоблачная атмосфера.

Всего по этим критериям было отобрано 83829 реализаций безоблачной атмосферы, каждая из которых представляет собой набор высотных профилей температуры, давления, счетной концентрации озона и плотности водяного пара на высотах от 1013 до 0,2 мб (примерно от 0 до 60 км, всего 60 высотных уровней, что и есть размерность искомого вектора Φ).

Априорная неопределенность (АН) содержания озона (т.е. естественная изменчивость) для этого ансамбля в узком слое в районе тропопаузы (~ 10 км) очень большая — почти 60% (рис. 1). В слое 10–20 км она составляет от 45 до 15%; в слое 20–40 км не превышает 15%, 40–50 км — 25%, 50–60 км — увеличивается до 40–45%. Эта изменчивость является первоначальной оценкой погрешности определения ВП содержания озона.

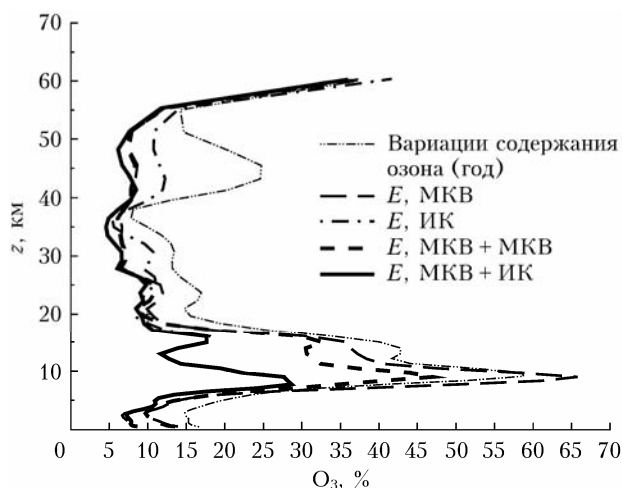


Рис. 1. Оценка потенциальных погрешностей E синергетических МКВ + МКВ- и МКВ + ИК-методов восстановления объемного отношения смеси озона

Для получения ансамбля МКВ- и ИК-измерений, соответствующих выбранному ансамблю реализаций атмосферы, было проведено численное моделирование наземных измерений МКВ-озонметра и радиометра RPG HATPRO с помощью свободно распространяемой программы с открытым исходным кодом [19], а ИК-спектрометра — с помощью кода LBLRTM [20]. Моделирование проводилось

для зенитного угла измерений 70°, что соответствует геометрии измерений приборов. В МКВ-области для обоих приборов в качестве спектральной аппаратной функции использовалась функция Гаусса. Случайная ошибка измерений ИК-спектрометром составляла 1%, МКВ-озонметром — 0,1 К, а МКВ-радиометром RPG HATPRO в каналах в области линии поглощения водяного пара — 0,1 К, кислорода — 0,2 К.

Оценка погрешностей методов

Для оценки погрешностей наземных синергетических МКВ + ИК- и МКВ + МКВ-методов определения содержания озона были проведены численные эксперименты по замкнутой схеме. Ансамбль состояний атмосферы и соответствующий ему ансамбль измерений были разделены на две части: обучающую выборку для реализации самого метода множественной линейной регрессии и тестовую, непосредственно используемую для оценки погрешности. Обучающая выборка состояла из 7000 состояний атмосферы для каждого сезона, тестовая из 1000, всего 28000 реализаций в обучающей выборке и 4000 в тестовой. Результаты оценки потенциальных погрешностей определения ВП содержания озона приведены на рис. 1 для различных схем измерений.

Согласно рис. 1, добавление измерений RPG HATPRO к измерениям озонметра приводит к уменьшению АН содержания озона вблизи 10 км с 65 до 45%. Еще большее уменьшение наблюдается для МКВ + ИК — в тропосфере погрешности определения озона не превышают 27%. Таким образом, в слое тропосферы вблизи 10 км погрешности наземного метода меньше АН более чем в два раза. В слое 10–20 км синергетический МКВ + ИК-метод также показывает значительное уменьшение АН: с 15–45% до 10–20%. В слое 20–40 км оценка погрешности синергетического МКВ + ИК-метода составляет ~ 5–10%, в слое 40–50 км — 5–8% при АН 14–25%. Выше 50 км наблюдается рост оценки погрешности вместе с ростом АН содержания озона.

Погрешность зависит от множества факторов (например, от используемых в радиационных кодах приближений и качества спектроскопической информации), однако количественная оценка этих факторов выходит за рамки нашей статьи.

Стоит подчеркнуть, что для восстановления ВП содержания озона методом линейной регрессии достаточно иметь измеренный спектр (яркостной температуры и/или пропускания) и матрицу решающего оператора $\mathbf{R}$; результат восстановления будет во многом зависеть от того, насколько хорошо матрица согласуется с текущей реализацией атмосферы. В этом и состоит главная трудность метода: подобрать матрицу решающего оператора, адекватно описывающую текущее состояние атмосферы.

Оценки вертикального разрешения дистанционных измерений

Важной характеристикой дистанционного наземного метода является его вертикальное разрешение, которое обычно определяется как ширина усредняющего ядра на половине его максимума. Потенциальное вертикальное разрешение дистанционного метода оценивалось путем расчета матрицы усредняющих ядер

$$A = (S_a^{-1} + K^T S_e^{-1} K)^{-1} K^T S_e^{-1} K,$$

где S_a — ковариационная матрица содержания озона; K — матрица вариационных производных излучения по содержанию озона; S_e — матрица ошибок; T — знак транспонирования. Матрица K была рассчитана с помощью радиационного кода LBLRTM, матрица S_a построена на обучающей выборке по 28000 реализациям, вариации содержания озона по данной выборке составляли в интервале высот 0–21 км 15–65%, а в области 21–60 км — 9–45%. Качественно вид зависимости АН содержания озона от высоты не изменился. Для простоты матрица S_a была взята диагональной. Результаты для ИК- и МКВ-методов приведены на рис. 2–4 соответственно.

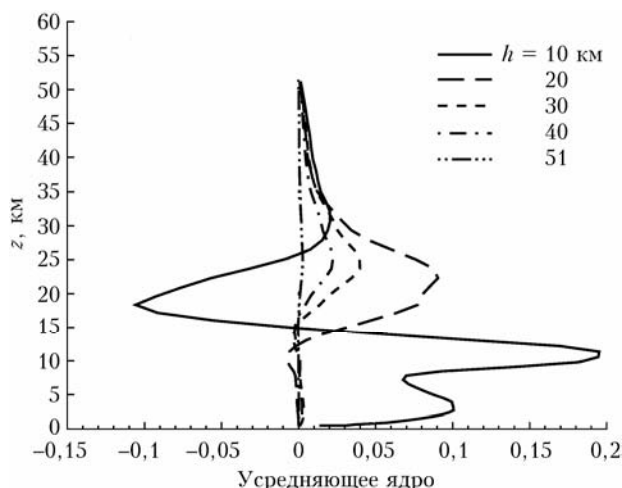


Рис. 2. Усредняющие ядра ИК-метода. Диагональная ковариационная матрица озона; z — высота; h — высота восстановления содержания озона

Согласно рис. 2 ИК-метод дает информацию в основном в слое 0–30 км. На высоте 10 км его вертикальное разрешение (полуширина усредняющего ядра) составляет ~10 км, на высоте 20 км — ~12 км, на высоте 30, 40 и 51 км ядра «расплываются», т.е. вертикальное разрешение ИК-метода ухудшается с высотой.

Рис. 3 показывает, что при восстановлении содержания озона по измерениям озонметра на высоте 10 км максимум величины усредняющего ядра приходится на высоту ~20 км, т.е. озонметр почти не чувствует озон на высоте 10 км. На высоте 20 и 30 км вертикальное разрешение составляет ~12 км, на высоте 40 км оно равно ~10 км.

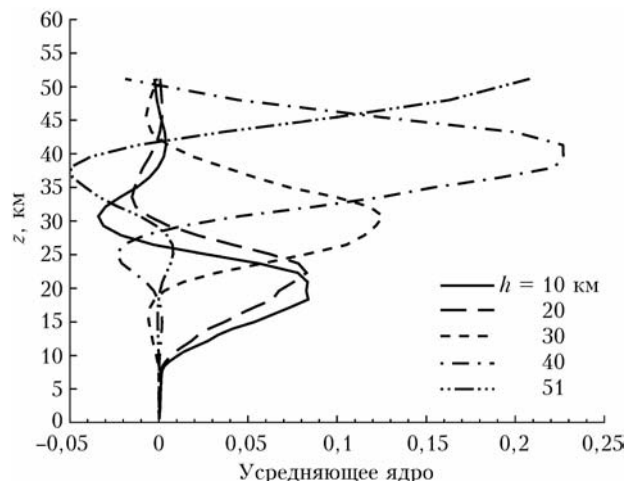


Рис. 3. Усредняющие ядра озонметра для озона. Диагональная ковариационная матрица озона

Усредняющие ядра совместных МКВ- и ИК-измерений (рис. 4) взаимно дополняют друг друга, что приводит к увеличению высотного диапазона дистанционных измерений содержания озона (0–51 км) и улучшению вертикального разрешения до ~10 км на высоте 20 км. Стоит отметить также небольшое увеличение максимума ядра на высоте 20 км для синергетического МКВ + ИК-метода по сравнению с ИК- и МКВ-методами, что указывает на увеличение точности восстановления содержания озона.

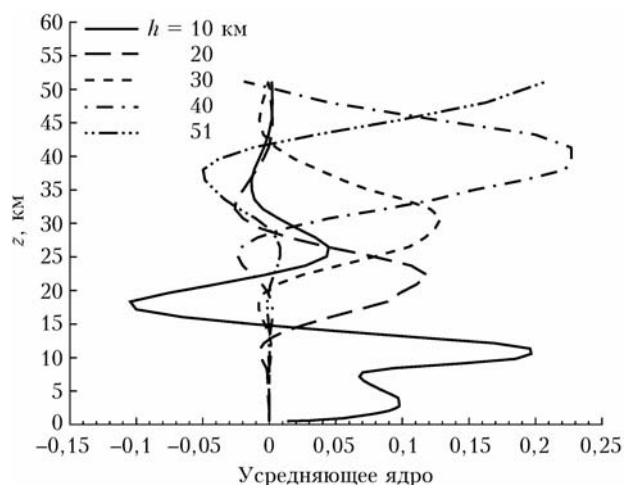


Рис. 4. Усредняющие ядра синергетического МКВ + ИК-метода. Диагональная ковариационная матрица озона

На высоте 30 км вертикальное разрешение составляет ~12 км, на высоте 40 км — ~10 км, что близко к разрешению МКВ-метода.

Заключение

Численное моделирование совместных наземных измерений нисходящего теплового МКВ-излучения в линиях озона, водяного пара и в полосе кислорода, а также ИК-измерений прямого солнечного излучения высокого спектрального разрешения

(полоса поглощения 9,6 мкм) показало, что можно получить информацию об элементах вертикального содержания озона на высотах 0–50 км. На основе моделирования измерений трех наземных приборов, используемых в СПБГУ (МКВ-озонметр, RPG НАТПРО и ФС Bruker IFS 125HR), определены погрешности содержания озона и вертикальное разрешение дистанционного синергетического метода.

ИК-метод дает значительную информацию о содержании озона в тропосфере, нижней и средней стратосфере. Априорная неопределенность уменьшается на некоторых высотах в два и более раза. Вертикальное разрешение метода составляет в тропосфере примерно 10 км, в стратосфере — от ~12 до ~15 км. МКВ-метод информативен в стратосфере в слоях 15–50 км. Вертикальное разрешение метода меняется от ~12 км в нижней стратосфере до ~10 в верхней.

Объединение МКВ- и ИК-методов приводит к увеличению диапазона высот, для которых наблюдается значительное уменьшение априорной неопределенности вертикальных профилей содержания озона. Погрешности в области тропопаузы составляют 25% при априорной неопределенности в 65%. В стратосфере погрешности составляют 5–10%, что примерно в два раза меньше априорной неопределенности. Вертикальное разрешение метода варьируется от ~10 до ~12 км в зависимости от слоя.

Дополнительные измерения МКВ-излучения в линии водяного пара и полосе кислорода (прибор RPG НАТПРО — уточнение профилей температуры и содержания водяного пара в тропосфере) существенно (в два раза) снижают погрешности определения содержания озона в слое 9–16 км.

Финансирование. Работа выполнена в лаборатории исследований озонового слоя и верхней атмосферы Санкт-Петербургского государственного университета при финансовой поддержке СПБГУ (проект № 116234986).

Список литературы

1. World Meteorological Organization (WMO). Scientific Assessment of Ozone Depletion. GAW Report N 278. WMO: Geneva, 2022. 509 p. URL: <https://library.wmo.int/idurl/4/58360> (last access: 22.08.2024).
2. Seinfeld J.H., Pandis S.N. Atmospheric Chemistry and Physics: From Air Pollution to Climate Change. USA: John Wiley & Sons, 2006. 1225 p.
3. World Health Organization. WHO Global Air Quality Guidelines. Particulate Matter (PM_{2.5} and PM₁₀), Ozone, Nitrogen Dioxide, Sulfur Dioxide and Carbon Monoxide. Geneva. 2021. URL: <https://www.who.int/publications/i/item/9789240034228> (last access: 24.08.2024).
4. Word Ozone and Ultraviolet Radiation Data Centre. Canada, 2024. URL: <https://woudc.org/> (last access: 17.07.2024).
5. Harmonization and Evaluation of Ground-Based Instruments for Free Tropospheric Ozone Measurements. URL: <https://hegiftom.meteo.be/> (last access: 17.07.2024).
6. GES DISC. URL: <https://disc.gsfc.nasa.gov/> (last access: 17.07.2024).
7. The CCI (ESA Climate Change Initiative). URL: <https://climate.esa.int/en/projects/ozone/> (last access: 17.07.2024).
8. De Maziure M., Thompson A.M., Kurylo M.J., Wild J.D., Bernhard G., Blumenstock T., Braathen G.O., Hannigan J.W., Lambert J.-C., Leblanc T., McGee T.J., Nedoluha G., Petropavlovskikh I., Seckmeyer G., Simon P.C., Steinbrecht W., Strahan S.E. The Network for the Detection of Atmospheric Composition Change (NDACC): History, status, and perspectives // Atmos. Chem. Phys. 2018. V. 18. P. 4935–4964. DOI: 10.5194/acp-18-4935-2018.
9. Виролайнен Я.А., Тимофеев Ю.М. Комплексный метод определения вертикальных профилей содержания озона для валидации спутниковых измерений // Изв. РАН. Физ. атмосф. и океана. 2010. № 4. С. 61–665.
10. Timofeyev Yu., Kostsov V., Virolainen Ya. Synergetic ground-based methods for remote measurements of ozone vertical profiles // AIP Conf. Proc. 2013. V. 1531, N 1. P. 380–383. DOI: 10.1063/1.4804786
11. Parrish A., Zafra R.L., Solomon P.M., Barrett J.W. A ground-based technique for millimeter wave spectroscopic observations of stratospheric trace constituents // Radio Sci. 1988. V. 23, N 2. P. 106–118.
12. Parrish A., Connor B.J., Tsou J.J., McDermid I.S., Chu W.P. Ground-based microwave monitoring of stratospheric ozone // J. Geophys. Res. D. 1992. V. 97, N 2. P. 2541–2546.
13. Connor B.J., Parrish A., Tsou J.J., McCormick M.P. Error analysis for the ground-based microwave ozone measurements during STOIC // J. Geophys. Res. D. 1995. V. 100, N 5. P. 9283–9291.
14. Куликов Ю.Ю., Красильников А.А., Рыскин В.Г. Результаты микроволновых исследований структуры озонового слоя полярных широт во время зимних аномальных потеплений стратосферы // Изв. РАН. Физ. атмосф. и океана. 2002. Т. 38, № 2. С. 182.
15. Косцов В.С., Поберовский А.В., Осипов С.И., Тимофеев Ю.М. Комплексная методика интерпретации наземных микроволновых спектральных измерений в задаче определения вертикального профиля содержания озона // Оптика атмосф. и океана. 2012. Т. 25, № 4. С. 354–360; Kostsov V.S., Poberovskii A.V., Osipov S.I., Timofeev Yu.M. Multiparameter technique for interpreting ground-based microwave spectral measurements in the problem of ozone vertical profile retrieval // Atmos. Ocean. Opt. 2012. V. 25, N 4. P. 269–275.
16. Munoz-Martin J.F., Bosch-Lluis X., Pradhan O., Brown S.T., Kangaslahti P.P., Tanner A.B., Ogut M., Misra S., Lim B.H. The Microwave Temperature and Humidity Profiler: Description and preliminary results // Sensors. 2023. V. 23. P. 8554. DOI: 10.3390/s23208554.
17. Виролайнен Я.А., Тимофеев Ю.М., Поберовский А.В., Еременко М., Дюфор Г. Определение содержания озона в различных слоях атмосферы с помощью наземной Фурье-спектроскопии // Изв. РАН. Физ. атмосф. и океана. 2015. Т. 51, № 2. С. 191–200.
18. Rodgers C.D. Inverse Methods for Atmospheric Sounding. Theory and Practice. Singapore, New Jersey, London, Hong Kong: World Scientific, 2000. 238 p.

19. *Rosenkranz P.W.* Line-by-line microwave radiative transfer (non-scattering) // MWRnet – an international network of ground-based Microwave Radiometers. 2017. URL: https://cetemps.aquila.infn.it/mwrnet/lblmrt_ns.html (last access: 24.08.2024).
20. *Clough S.A., Shephard M.W., Mlawer E.J., Delamere J.S., Iacono M.J., Cdy-Pereira K., Boukabara S., Brown P.D.* Atmospheric radiative transfer modeling: A summary of the AER codes // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* 2005. V. 91, N 2. P. 233–244. DOI: 10.1016/j.jqsrt.2004.05.058.

Yu.I. Bordovskaya, Yu.M. Timofeyev, Ya.A. Virolainen, A.V. Poberovsky. Analysis of the synergetic ground-based MW + IR method for determining vertical profiles of ozone content.

Ozone is one of the important trace gases of the Earth's atmosphere. This study analyses ground-based synergetic MW + IR method for remote measurements of ozone using ground-based instruments at Peterhof (SPbSU) – MW ozonometer and Bruker IFS-125HR Fourier transform infrared spectrometer. Numerical estimates of the errors and vertical resolution of remote measurements showed that uncertainties of remote ozone measurements at different altitudes vary from 5 to 20% or more. The vertical resolution of the MW + IR method varies from ~ 10 to ~ 12 km. These estimates demonstrate the potential for determining ozone in Peterhof using ground-based combined MW and IR measurements.