

ДИСТАНЦИОННОЕ ЗОНДИРОВАНИЕ АТМОСФЕРЫ, ГИДРОСФЕРЫ И ПОДСТИЛАЮЩЕЙ ПОВЕРХНОСТИ

УДК 551.510.41

Анализ наземного микроволнового метода измерений вертикального профиля содержания озона

Ю.И. Бордовская[✉], Ю.М. Тимофеев, А.В. Поберовский, Х. Имхасин*

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

Поступила в редакцию 15.02.2023 г.;
после доработки 23.03.2023 г.;
принята к печати 27.03.2023 г.

Важную роль в региональном мониторинге содержания О₃ играют наземные микроволновые спектрометры, измеряющие нисходящее тепловое излучение в различных линиях поглощения озона. В работе с помощью численного моделирования изучены информативность типичных наземных измерений нисходящего микроволнового теплового излучения в линии поглощения озона при 110,836 ГГц, погрешности определения вертикальных профилей содержания озона на высотах 20–60 км, а также влияние на них используемой априорной информации о профиле и типе обратного оператора в регрессионной методике решения обратной задачи.

Ключевые слова: дистанционные измерения, наземный МКВ-метод, профиль озона, информативность, погрешности, априорная информация; remote measurements, ground-based MW method, ozone profile, information content, errors, *a priori* information.

Введение

Важная роль в земной атмосфере озона, определяющего в существенной степени УФ-климат поверхности, радиационный режим стратосферы, парниковый эффект и загрязнения тропосферы, является причиной создания и использования различных методов измерений его содержания [1]. Наземные системы включают в себя локальные измерения с помощью озонозондов, спектрофотометров Добсона и Брюера, озонометров M-124, DOAS-приборов, лидаров и микроволновых (МКВ) спектрометров. В региональном мониторинге содержания О₃ часто используются наземные МКВ-спектрометры, измеряющие нисходящее тепловое излучение в различных линиях поглощения озона и других газов [2, 3]. Одновременные МКВ-измерения вертикальных профилей температуры и содержания озона рассмотрены в работе [4]. В настоящее время создана региональная сеть наземного МКВ-зондирования, включающая более 10 станций наблюдения в различных регионах в рамках рабочей группы NDACC (Network for the Detection of Atmospheric Composition Change) [5]. Так, на станциях NDACC измеряются элементы вертикальных профилей содержания таких газов, как H₂O, O₃, ClO, HNO₃, N₂O и т.д.

В СПбГУ МКВ-измерения содержания озона в области линии поглощения озона 110,836 ГГц были начаты в 2008 г. с помощью озонометра, изготовленного в Институте прикладной физики Российской академии наук (Нижний Новгород) [6]. Микроволновый озонометр, использующийся на физическом факультете СПбГУ (59,88° с.ш., 29,82° в.д.), представляет собой гетеродинный радиометрический приемник миллиметрового диапазона длин волн и многоканальный анализатор спектра. Прибор регистрирует спектр нисходящего радиотеплового излучения (в терминах яркостных температур) в линии поглощения озона 110,836 ГГц. При общем числе спектральных каналов, равном 31, полная полоса анализа исследуемого сигнала составляет 240 МГц, спектральное разрешение – от 1 до 10 МГц. Расчеты весовых функций [7] показали, что МКВ-озонометр чувствителен к вариациям содержания озона на высотах 20–60 км.

Цель работы – изучить информативность МКВ-озонометра и погрешности определения вертикальной структуры содержания озона, а также влияние используемой априорной информации на точность метода.

Наземный МКВ-метод измерений содержания озона

Исходным соотношением для обратной задачи восстановления содержания озона по наземным МКВ-измерениям является интегральная форма уравнения переноса микроволнового излучения, записанная

* Юлия Игоревна Бордовская (bordovskayay@gmail.com); Юрий Михайлович Тимофеев (y.timofeev@spbu.ru); Анатолий Васильевич Поберовский (avp@troll.phys.spbu.ru); Хамуд Имхасин (kh.imkhasin@spbu.ru).

в приближении Рэлея–Джинса, для яркостной температуры (ЯТ), регистрируемой прибором:

$$T_b(v) = \int_0^{s_0} T(s) \alpha(v, s) \exp \left[- \int_0^s \alpha(v, s') ds' \right] ds + \\ + T_0 \exp \left[- \int_0^{s_0} \alpha(v, s) ds \right], \quad (1)$$

где $T_b(v)$ – яркостная температура нисходящего излучения на частоте v ; s – координата вдоль оптической трассы; s_0 – условная верхняя граница атмосферы; T – температура атмосферы; α – коэффициент поглощения; T_0 – яркостная температура фонового космического излучения (2,7 К). В общем случае учитываются излучение и поглощение излучения кислородом, водяным паром, жидкокапельной влагой облаков и озоном.

Наземное МКВ-зондирование параметров атмосферы является некорректной обратной задачей (в классическом смысле) и требует априорной информации об искомом решении. В настоящее время разработаны различные численные методы решения некорректных задач по Адамару, описываемые интегральными уравнениями Фредгольма первого рода [8, 9]. В нашем случае мы применили регрессионный метод решения обратной задачи. В данном методе используется широкий ансамбль состояний атмосферы (вертикальных профилей температуры, влажности, давления и содержания озона), сформированный из данных измерений или результатов численного моделирования. Решается прямая задача (проводятся расчеты спектров нисходящего излучения на выбранном ансамбле) и рассчитываются ковариационные и взаимоковариационные матрицы. Обратная задача решается с помощью соотношения

$$\varphi = Rf, \quad (2)$$

где φ – искомая вариация вертикального профиля атмосферного параметра (в нашем случае вариация профиля содержания озона); R – решающий оператор; f – вектор вариаций измерений ЯТ МКВ-излучения относительно среднего. Решающий оператор

$$R = \mathbf{C}_{O_3, T_b} (\mathbf{C}_{T_b} + \alpha \mathbf{I})^{-1}, \quad (3)$$

где \mathbf{C}_{O_3, T_b} – взаимоковариационная матрица «озон – ЯТ»; \mathbf{C}_{T_b} – ковариационная матрица измеренных ЯТ; \mathbf{I} – единичная матрица; α – параметр регуляризации, равный дисперсии случайных погрешностей измерений. Матрицы \mathbf{C}_{O_3, T_b} и \mathbf{C}_{T_b} описывают статистические связи между измерениями ЯТ и содержанием озона и статистические свойства измеряемого МКВ-излучения соответственно.

Для реализации метода регрессии использовался статистический ансамбль параметров атмосферы, подготовленный в CNRM (Centre National de Recherches Météorologiques, Франция, https://iasi.aeris-data.fr/IASI-NG_4A_data/, дата обращения:

10.05.2022). Из всего ансамбля были отобраны те реализации атмосферы, которые удовлетворяли следующим требованиям:

- 1) широтный пояс 50–70° с.ш. Выбор такого пояса обусловлен координатами расположения микроволнового радиометра, ширина пояса в 20° и отсутствие ограничений по долготе позволяют получить большее количество статистических данных;
- 2) безоблачная атмосфера;

3) реализации атмосферы соответствуют весне и всему году в Северном полушарии. Отобраны ансамбли, которые в дальнейшем будем называть весенними и годовыми. Выбор весны обусловлен появлением в последние десятилетия значительных аномалий в содержании озона в субполярных широтах Северного полушария (озоновые мини-дыры).

Всего по этим критериям было отобрано 22338 реализаций параметров безоблачной атмосферы для весеннего ансамбля и 83829 реализаций для годового, каждая из реализаций представляет собой набор высотных профилей температуры, давления, счетной концентрации озона и плотности водяного пара в диапазоне высот 1013–0,2 мб (примерно от 0 до 60 км, всего 60 высотных уровней). Для обоих ансамблей были рассчитаны ковариационные матрицы температуры, плотности водяного пара и содержания озона.

Анализ полученных ковариационных матриц для весны показал, что температура слабо варьируется по выбранному ансамблю: меньше 10 К во всем диапазоне высот. Плотность водяного пара варьируется от 50 до 65% на высотах от 0 до ~13 км, выше эти вариации меньше 10%. Для годового ансамбля вариации температуры меньше 20 К во всем диапазоне высот; вариации плотности водяного пара – от 60 до 80% на высотах от 0 до ~13 км, выше эти вариации меньше 10%. В атмосферном слое 20–60 км, исследуемом МКВ-озонометром, вариации содержания озона относительно невелики: весной – 4–14%, годовые – 9–36%. Приведенные цифры характеризуют априорную неопределенность в наших предположениях о содержании озона весной и в течение года.

Моделирование МКВ-спектров яркостной температуры

Наземные измерения спектров ЯТ МКВ-озонометром для обоих ансамблей моделировались с помощью свободно распространяемой программы с открытым исходным кодом (<https://tools.grss-ieee.org/rscl1/coderecord.php?id=483>). Расчеты были выполнены для спектральных каналов микроволнового озонометра в области линии поглощения озона 110,836 ГГц.

Весной вариации ЯТ за счет вариаций плотности водяного пара и температуры достигают 18–20 К. Амплитуда ЯТ в линии озона – примерно 7–10 К, что при случайных погрешностях измерений ~0,3 К дает отношение сигнал/шум ~20–30. Вариации ЯТ за счет вариаций содержания озона слабые – не более 2 К.

В годовом ансамбле вариации ЯТ за счет вариаций содержания водяного пара и температуры достигают 30–35 К. Вариации ЯТ за счет вариаций содержания озона для года мало отличаются от таковых для весны и достигают ~3,5 К. Увеличение вариаций ЯТ при переходе от весны к году обусловлено большими вариациями в содержании озона в годовом ансамбле. Если учесть, что новая информация о содержании озона, полученная по измерениям МКВ-прибора, обусловлена вариациями ЯТ в линии озона, то корректирующие оценки отношения сигнал/шум составляют 20–35, 7–10 и 2–3 при погрешностях измерений ЯТ в 0,1; 0,3 и 1,0 К соответственно. Отметим, что вариации ЯТ за счет вариаций температуры атмосферы и содержания водяного пара учитываются при решении обратной задачи относительно среднего профиля озона и привлечения данных радиозондирования или реанализа.

При решении задачи восстановления профиля содержания озона методом линейной регрессии в качестве обучающих выборок, на которых проводился расчет матриц \mathbf{C}_{O_3, T_b} и \mathbf{C}_{T_b} и, следовательно, решающего оператора R , были взяты наборы из 11169 и 41913 реализаций атмосферы из весенних и годовых ансамблей соответственно (примерно половина всего ансамбля в каждом случае); реализации из другой половины соответствующего ансамбля рассматривались в качестве тестовых выборок. Обучающая выборка для годового ансамбля составлялась из реализаций атмосферы каждого сезона в одинаковых пропорциях. Оператор R , построенный на обучающей выборке из весеннего ансамбля, в дальнейшем будет называться весенным решающим оператором, а оператор, построенный на обучающей выборке из годового ансамбля, годовым решающим оператором.

Численный анализ информативности и погрешностей МКВ-метода

Анализ \mathbf{C}_{T_b} позволяет оценить информативность измерений с использованием информационной матрицы Козлова; собственные числа матрицы больше 1 показывают число независимых параметров, которые можно определить из измерений (например, число слоев, в которых можно восстановить искомый атмосферный параметр) [10]. Расчет собственных чисел информационной матрицы Козлова для ковариационной матрицы ЯТ для весеннего ансамбля и модельных матриц ошибок измерений, соответствующих ошибке, распределенной по нормальному закону с различными стандартными отклонениями σ , показал, что при случайных погрешностях измерений ЯТ в 0,1; 0,3 и 1 К число независимых параметров равно 3, 2 и 2 соответственно. Анализ информативности для годового ансамбля оказался более сложной задачей и на данный момент требует дополнительных исследований.

Для оценок погрешностей наземного МКВ-метода определения содержания озона были проведены численные эксперименты по замкнутой схеме,

включающие расчеты спектров исходящего МКВ-излучения для 1000 реализаций атмосферы из тестовых выборок для весны и года и с добавлением к ним случайных погрешностей измерений с $\sigma = 0,1; 0,3$ и 1,0 К. Обратная задача решена методом множественной линейной регрессии для 1000 реализаций; рассчитаны средние рассогласования δ , стандартные отклонения σ и суммарные погрешности E при сравнениях с исходными профилями в процентах относительно среднего профиля содержания озона.

Влияние случайных погрешностей измерений на погрешности МКВ-метода показано на рис. 1 и 2, где приведены суммарные погрешности для трех случайных ошибок измерений для весны и года. При высокой точности измерений (0,1–0,3 К) погрешности восстановления профиля озона для весны и года меньше соответствующих естественных вариаций в два–три раза. Особенно они малы относительно естественных вариаций в слое 25–35 км для весны и 40–55 км для года.

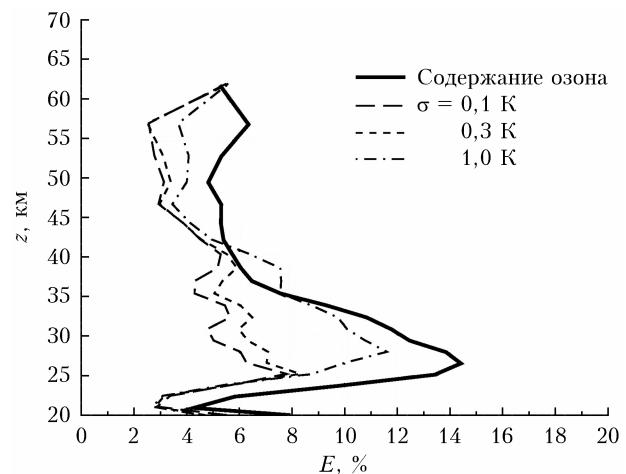


Рис. 1. Суммарные погрешности для трех значений случайных ошибок измерений и априорная неопределенность профилей содержания озона, весна

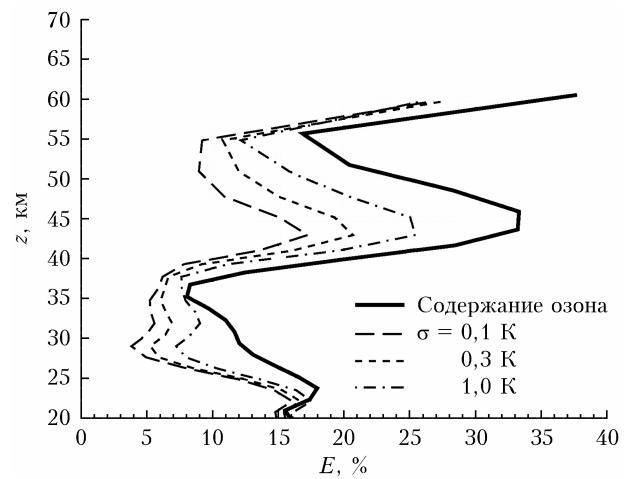


Рис. 2. Суммарные погрешности для трех случайных ошибок измерений и априорная неопределенность профилей содержания озона, год

При погрешностях измерений в 1,0 К ошибки определения вертикальных профилей содержания озона весной близки к априорной неопределенности или даже превышают ее (на высотах 35–40 км). При использовании годового ансамбля возможно получение полезной информации и для случайных погрешностей измерений в 1,0 К, но с относительно высокой погрешностью.

Отметим, что погрешности определения профиля озона при использовании весеннего ансамбля и весеннего оператора решения обратной задачи составляют 3–8% при погрешности измерений в 0,1–0,3 К на высоте 20–60 км. Эти же погрешности измерений для годового ансамбля и годового оператора решения обратной задачи составляют 5–20%. Приведенные цифры наглядно показывают влияние используемой априорной информации на решение обратной задачи.

Важно подчеркнуть, что полученные выше оценки суммарных погрешностей восстановления вертикального профиля содержания озона методом линейной регрессии во многом зависят от использованной априорной информации, т.е. от ансамбля реализаций атмосферы. Для того чтобы изучить ее влияние, были проведены численные эксперименты для 1000 реализаций из тестовых выборок для весны и года, которые использовались в предыдущем разделе, но с заменой решающего оператора: для весны расчеты проводились с годовым решающим оператором, для года – с весенным решающим оператором. Также в расчетах учитывалась случайная ошибка измерений с $\sigma = 0,3$ К. «Чужой» решающий оператор в обоих случаях увеличивает погрешность восстановления профиля содержания озона: профили озона для весеннего ансамбля определяются с погрешностями 6–16% с помощью годового решающего оператора и 3–8% при использовании весеннего оператора. Для годового ансамбля погрешности составляют 6–45% при использовании весенного оператора против 5–20% в случае годового оператора и на большом диапазоне высот превышают априорные неопределенности.

Заключение

В ходе анализа были получены следующие результаты.

1. Количество независимых параметров, которые можно получить из наземных измерений нисходящего теплового МКВ-излучения, составляет 3–1 для весны при случайных погрешностях измерений 0,1; 0,3 и 1,0 К.

2. Погрешности измерений профилей озона существенно зависят от случайных погрешностей измерений МКВ-озонометра и используемой априорной неопределенности (априорного ансамбля). Для ограниченных временных периодов, например весной в широтном поясе 50–70° с.ш., погрешности в слое 20–60 км составляют 3–8% при высокой точности измерений (0,1–0,3 К) и адекватности априорной информации (то, насколько хорошо выбранный ансамбль атмосферных реализаций описывает

состояние атмосферы в месте установки прибора). Для годового ансамбля погрешности заметно возрастают и достигают 5–20% в слое 20–60 км, что обусловлено существенным увеличением изменчивости атмосферных параметров в используемой априорной информации.

3. Важное значение при наземном озонном МКВ-зондировании имеет адекватный выбор априорной информации и соответствующего обратного оператора задачи. При использовании сезонного ансамбля и оператора можно добиться высокой точности дистанционных измерений (3–8%). Если же для того же периода прибегнуть к годовой априорной информации и соответствующему оператору, то существенно снизится оценка точности дистанционных измерений содержания озона.

Выбор оптимального обратного оператора, особенно при аномальных состояниях озонасферы, например в период «озонных дыр», является нетривиальной задачей и требует дальнейших исследований.

Благодарности. Авторы благодарят коллектив Centre National de Recherches Météorologiques (Франция) за предоставленный ансамбль реализаций атмосферы.

Финансирование. Исследование выполнено в лаборатории исследований озонаского слоя и верхней атмосферы Санкт-Петербургского государственного университета при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение № 075-15-2021-583).

Список литературы

1. Hessler B., Petropavlovskikh I., Staehelin J., August T., Bhartia P.K., Clerbaux C., Degenstein D., Maziure M.D., Dinelli B.M., Dudhia A., Dufour G., Frith S.M., Froidevaux L., Godin-Beekmann S., Granville J., Harris N.R.P., Hoppel K., Hubert D., Kasai Y., Kurylo M.J., Kyrölä E., Lambert J.-C., Levelt P.F., McElroy C.T., McPeters R.D., Munro R., Nakajima H., Parrish A., Raspollini P., Remsberg E.E., Rosenlof K.H., Rozanov A., Sano T., Sasano Y., Shiotani M., Smit H.G.J., Stiller G., Tamminen J., Tarasick D.W., Urban J., van der A R.J., Veefkind J.P., Vigouroux C., von Clarmann T., von Savigny C., Walker K.A., Weber M., Wild J., Zawodny J.M. Past changes in the vertical distribution of ozone – Part 1: Measurement techniques, uncertainties, and availability // Atmos. Meas. Tech. 2014. V. 7, N 5. P. 1395–1427.
2. Network for the Detection of Atmospheric Composition Change (NDACC). URL: <http://www.ndaccdemo.org/> (last access: 25.10.2022).
3. Solomonov S.V., Kropotkina E.P., Lukin A.N., Ponoma-reenko N.I., Rozanov S.B., Ellder J. Some features of the vertical ozone distribution from millimeter wave measurements at Pushchino and Onsala observatories // J. Atmos. Terr. Phys. 1994. V. 56, N 1. P. 9–15.
4. Красильников А.А., Куликов Ю.Ю., Мазур А.Б., Рыскин В.Г., Серов Н.В., Суворов Е.В., Федосеев Л.И., Швецов А.А. Микроволновое зондирование озона и других малых составляющих атмосферы // Физика микроволн. 1999. Т. 1. С. 171–178.
5. Куликов М.Ю., Красильников А.А., Швецов А.А., Федосеев Л.И., Рыскин В.Г., Кукин Л.М., Мухин Д.Н.,

- Беликович М.В., Карапшин Д.А., Скалыга Н.К., Фейгин А.М.* Одновременные микроволновые измерения концентрации озона и температуры средней атмосферы с поверхности Земли // Изв. вузов. Радиофиз. 2015. Т. LVIII, № 6. С. 454–464.
6. *Тимофеев Ю.М., Косцов В.С., Поберовский А.В., Кулаков Ю.Ю., Красильников А.А.* Измерения вертикальных профилей содержания озона над Санкт-Петербургом наземной микроволновой аппаратурой // Вестн. СПбГУ. 2008. Сер. 4, вып. 4. С. 44–53.
 7. *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.
 8. *Rodgers C.D.* Inverse Methods for Atmospheric Sounding: Theory and Practice. Singapore, London: University of Oxford, World Scientific Publishing, 2000. 253 p.
 9. *Тимофеев Ю.М., Поляков А.В.* Математические аспекты решения обратных задач атмосферной оптики. СПб.: СПбГУ, 2001. 188 с.
 10. *Козлов В.П.* Применение информационной метрики в теории спектральных и оптических приборов // Тр. ГОИ. 1974. Вып. 174. С. 49–66.

Yu.I. Bordovskaya, Yu.M. Timofeyev, A.V. Poberovsky, Kh. Imhasin. Analysis of the ground-based microwave method for measuring the ozone vertical profile.

Ground-based MW spectrometers play an important role in the O₃ regional monitoring. They measure the downward thermal radiation in various ozone absorption lines. Using numerical simulation, the information content of typical ground-based measurements of downward MW thermal radiation in the ozone absorption line at 110.836 GHz, the errors in the ozone vertical profiles at altitudes of 20–60 km, and the influence on them of *a priori* information about the solution and type of the inverse operator used in the regression method for solution of the inverse problem are studied.