V. 86, N 4

JULY — AUGUST 2019

JOURNAL OF APPLIED SPECTROSCOPY

МОНИТОРИНГ ОБЩЕГО СОДЕРЖАНИЯ ОЗОНА В АТМОСФЕРЕ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ РОССИЙСКОЙ АППАРАТУРЫ ИКФС-2

А. В. Поляков*, Ю. М. Тимофеев, Я. А. Виролайнен, Д. А. Козлов

УДК 543.42.062;546.214

Санкт-Петербургский государственный университет, 199034, Санкт-Петербург, Университетская наб., 7-9, Россия; e-mail: a.v.polyakov@spbu.ru

(Поступила 6 сентября 2018)

Описаны методика и алгоритмы определения общего содержания озона (OCO) по данным измерений спектров уходящего теплового излучения аппаратурой ИКФС-2 (спутник "Метеор-М № 2"). Алгоритмы основаны на использовании искусственных нейронных сетей и спутниковых измерений OCO с помощью аппаратуры ОМІ. Сопоставлены результаты измерений ОСО прибором ИКФС-2 с наземными измерениями (приборы Добсона, Брюера и М-124). Показано, что систематические различия измерений ИКФС-2 и приборами Добсона и Брюера, как правило, не превышают 1 %, а среднеквадратические 3.0—4.5 %. Определены случайные погрешности измерений ОСО приборами Добсона и Брюера при использовании прямого солнечного излучения (~1%), спутниковых приборов ОМІ и ИКФС-2 (2.8 и 3.6 %).

Ключевые слова: атмосферная ИК-Фурье-спектрометрия, газовый состав атмосферы, общее содержание озона, обратные задачи атмосферной оптики.

The method and algorithm for ozone total column (OTC) determining based on spectroscopic measurements of outgoing thermal radiation by IKFS-2 spectrometer (on-board "Meteor-M2 N 2" satellite) are described. Algorithm is based on an artificial neural network method and OMI satellite measurements. The results of comparison of OTC measurements by IKFS-2 spectrometer and by ground-based instruments (Dobson, Brewer, and M-124 ozonometer) are given. It is shown that systematic discrepancy between satellite and ground-based measurements in most cases is not higher than 1%, RMSD values are within 3.0–4.5%. The empirical assessment of retrieval errors demonstrates that Dobson and Brewer OTC measurement random total errors are 1% (in direct solar radiation measurements mode), OMI and IKFS-2 satellite measurements give 2.8 and 3.6% random errors, respectively.

Keywords: atmospheric Fourier transform IR spectrometry, atmospheric gaseous composition, ozone total columns, inverse problems of atmospheric optics.

Введение. Озон — один из важнейших климатических параметров в силу своего влияния на радиационный режим атмосферы, УФ освещенность земной поверхности и загрязнение тропосферы [1, 2]. В настоящее время измерения общего содержания озона (ОСО) осуществляются различными наземными и спутниковыми дистанционными методами, каждый из которых характеризуется случайными и систематическими погрешностями, пространственным разрешением, периодичностью и т. д. и имеет свои преимущества и недостатки. Значительную роль в мониторинге ОСО играют спутниковые методы измерений. Среди них можно выделить спутниковый метод, основанный на измерениях спектров уходящего теплового ИК излучения. Отметим, что важное преимущество надирного ИК метода теплового излучения заключается в том, что он применим в любое время суток и сезон, в том числе в период полярной ночи, т. е. позволяет получать непрерывные поля распределения озона с относительно высоким горизонтальным разрешением. Первые измерения содержания озона этим методом были осуществлены еще в 1969 г. на спутнике Нимбус-3 с помощью Фурье-спектрометра

ATMOSPHERIC OZONE MONITORING WITH RUSSIAN SPECTROMETER IKFS-2 A. V. Polyakov*, Y. M. Timofeyev, Y. A. Virolainen, D. A. Kozlov (Saint Petersburg State University, 7-9 Universitetskaya Nab., Saint Petersburg, 199034, Russia; e-mail: a.v.polyakov@spbu.ru) IRIS [3]. В дальнейшем этот метод интенсивно использовался на многих спутниках как в надирной, так и в лимбовой геометрии измерений [4—8].

В июле 2014 г. запущен российский метеорологический спутник "Метеор-М" № 2, на борту которого находится разнообразная аппаратура для дистанционного зондирования атмосферы и поверхности Земли. Один из основных приборов спутника — Фурье-спектрометр ИКФС-2, предназначенный для измерений спектров уходящего теплового излучения в ИК области и получения информации об атмосфере и поверхности для численных прогнозов погоды и изучения современных изменений климата Земли [9, 10]. Область измерений прибора (660—2000 см⁻¹) позволяет определять ОСО по измерениям в полосе озона 9.6 мкм. В работах [11, 12] описана и проанализирована методика интерпретации измерений ИКФС-2 и получения ОСО для условий безоблачной и облачной атмосферы, а также приведены примеры ее использования для небольшого объема спутниковых данных.

В настоящей работе приведены результаты регионального мониторинга ОСО с помощью прибора ИКФС-2 в 2015—2017 гг. и анализ качества этого мониторинга на основе массовой интерпретации измерений ИКФС-2 (20 млн спектров) на севере Евразии, где в этот период наблюдались существенные аномалии содержания ОСО (озоновые минидыры) [13, 14].

Методика интерпретации измерений ИКФС-2 для получения ОСО является развитием методики, описанной в [11, 12]. В ее основе лежат метод искусственных нейронных сетей (ИНС) и использование для обучения ИНС данных спутниковых измерений прибором ОМІ уровня 2, т. е. единичных измерений ОСО. Преимущество такого подхода состоит в том, что проблема калибровки данных измерений ОСО прибором ИКФС-2 относительно международной сети измерений решается автоматически.

Для обучения ИНС использована специально подготовленная в Центре Келдыша выборка измерений спектров ИКФС-2 улучшенного качества за два года. Эта выборка содержит два файла за месяц по ~12 ч измерений каждый, преимущественно после технического обслуживания (ТО) прибора, т. е. с минимальным случайным шумом. Перекрывается период август 2015—июль 2017 гг. Вся обучающая выборка содержит ~2 млн 900 тыс. спектров. Отметим, что такой объем данных при обучении ИНС излишен и конкретные учебники содержали 10 или 25 % этих данных, выбранные (псевдо) случайным образом. Итоговый полный объем данных учебника составил ~10⁶ пар "спектр уходящего излучения ИКФС-2—ОСО по данным прибора ОМІ".

В роли входных параметров ИНС выступают не сами спектры, т. е. интенсивности излучения, а главные компоненты (ГК) эмпирической ковариационной матрицы спектров уходящего теплового излучения, измеренных ИКФС-2. Используются совместно ГК всего спектра и ГК участка спектра в полосе озона 9.6 мкм. Численные эксперименты показали, что выбор числа ГК в [12] близок к оптимальному — постепенное увеличение числа ГК всего спектра и полосы озона до использованных 25 и 50 векторов вело к улучшению точности аппроксимации учебника обучаемой ИНС, уменьшающемуся до малозначимых величин с дальнейшим ростом числа ГК. На основе численных экспериментов для расчета ГК полосы поглощения озона нами выбран интервал 980—1080 см⁻¹, а не 1000— 1200 см⁻¹, как в [12]. Кроме упомянутой двухлетней выборки также собрана непрерывная (за вычетом технических пропусков на ТО прибора) подборка данных зимы 2015—2016 гг., а именно с 3 октября 2015 по 30 апреля 2016 гг., для специальных исследований резких аномалий (минидыр) в содержании озона [13, 14]. Объем выборки ~20 млн спектров. На рис. 1 показан временной ход ОСО в районе Тикси во время полярной ночи.

Общее содержание озона, е. д.



Рис. 1. Временной ход ОСО в районе Тикси в условиях полярной ночи

Результаты и их обсуждение. Анализ качества разработанной системы оперативного мониторинга ОСО с помощью спутниковых измерений российским прибором ИКФС-2 осуществлен сравнением с наземными измерениями ОСО на многочисленных станциях международной системы наблюдений, полученными по измерениям как прямого, так и рассеянного солнечного излучения [15]. Средние разности данных ИКФС-2 и результатов измерений, выполненных с помощью спектрофотометра Добсона, составляют <1 %. При сопоставлении с данными спектрофотометра Брюера разности увеличиваются до 1.6 % (по рассеянному излучению) и до 2.5 % в случае с фотометром М-124. Среднеквадратические разности 3.0—5.0 %. Коэффициент корреляции результатов измерений спутниковым и наземными приборами изменяется в пределах от 0.937 (измерения М-124) до 0.983 (измерения по прямому Солнцу прибором Добсона). Отметим, что подобные сравнения данных прибора ОМІ дают близкие значения рассогласований, но меньший диапазон их изменений, т. е. максимальные рассогласования для ИКФС-2 больше на 0.5—1.0 %, чем для измерений ОМІ.

Наличие синхронных и пространственно согласованных измерений ОСО несколькими (тремя и более) различными приборами позволяет, анализируя рассогласование между их данными, определить случайные погрешности измерений [16, 17]. Результат измерения x_i^A прибором A можно представить в виде

$$x_i^A = x_{i,\text{MCT}}^A + M^A + \sigma_i^A,$$

где $x_{i,\text{ист}}^{A}$ — истинное значение измеренной величины, M^{A} и σ_{i}^{A} — систематическая и случайная погрешности измерения. Стандартное отклонение разности σ^{A-B} для каждой пары данных в предположении некоррелированности отдельных случайных ошибок измерений, а также в пренебрежении пространственным и временным рассогласованием измерений может быть записано как

$$\sigma^{A-B^2} = \sigma^{A^2} + \sigma^{B^2},$$

где σ^{A^2} и σ^{B^2} — дисперсии погрешностей измерений каждого из ансамблей. В результате решения системы таких уравнений, составленных для каждой пары приборов, на основе экспериментальных данных нами получены оценки (сверху) случайной погрешности определения ОСО (табл. 1). Разброс данных связан с использованием различных ансамблей сопоставлений.

В работах [18, 19] показано, что суммарные погрешности измерений ОСО с помощью приборов Добсона и Брюера при использовании измерений прямого солнечного излучения составляют ~1%, а при измерениях рассеянного излучения 2—3 %, что хорошо согласуется с приведенными в табл. 1 данными. Сравним полученные нами результаты с подобным сопоставлением спутниковых измерений прибором IASI [20], близким по своим основным характеристикам российскому прибору ИКФС-2. При сравнении спутниковых данных IASI использованы только измерения прямого солнечного излучения приборами Добсона и Брюера. Анализ показывает, что относительные разности между спутниковыми и наземными измерениями составляют в среднем 3—12 % в зависимости от широты. При этом в районе Антарктики в условиях озоновой дыры эти разности могут достигать 20 %. В средних широтах северного полушария разности не превышают 4—6 %.

Таблица 1. Эмпирические оценки (%) случайной погрешности измерения ОСО различными приборами

Прибор	Настоящая работа	[16]
OMI	2.8±0.3	1.2±0.2
ИКФС-2	3.6±0.4	
Dobson Sun	1.0 ± 0.2	
Dobson all	2.5±0.3	
Brewer Sun	1.3±0.4	
Brewer all	2.4±0.3	
M-124 all	2.8±0.3	2.8 ± 0.7
IASI		2.9±0.5
Bruker		1.4 ± 0.1

Представляет интерес сопоставление полученных нами оценок погрешностей измерения ОСО с параметрами приборов, широко используемых для таких измерений, хотя и основанных на других физических методах. Так, в [21, 22] сравнивались результаты наземных (приборы Добсона и Брюера) и спутниковых измерений, полученных с помощью разных приборов для измерения рассеянного солнечного УФ излучения (GOME/ERS-2, SCIAMACHY/Envisat, OMI/Aura, GOME-2/MetopA, GOME-2/MetopB). Средние разности спутниковых и наземных данных для различных приборов находились в диапазоне 0.43—1.62 %, среднеквадратические разности близки к 3 %. В [16] приведены эмпирические оценки случайных и систематических погрешностей различных приборов. Сравнивались измерения приборами Добсона и М-124 в пос. Воейково, Фурье-спектрометром Bruker в Петергофе и спутниковые измерения с помощью приборов ОМІ и IASI. Средние и среднеквадратические отклонения ОСО (табл. 1) для приборов всех типов очень близки (различия в среднем 2-4 %). Средняя случайная погрешность измерения ОСО прибором IASI составляет 2.9±0.5 %, М-124 2.8±0.7 %, ОМІ 1.2±0.2 %, ФС Bruker 1.4±0.1 %. Определены систематические погрешности четырех приборов относительно спектрофотометра Добсона: они максимальны для IASI и ФС Bruker (2.1 %) и для ОМІ 1.7 %. Определены также полные погрешности измерений ОСО различными приборами: они минимальны для прибора OMI (~2 %). Измерения ФС Bruker имели полные погрешности 2.4-2.6 %, IASI 3.2-4.1%.

Приведенные выше сравнения показывают, что погрешности российского Фурье-спектрометра ИКФС-2 близки к погрешностям европейского Фурье-спектрометра IASI и на 0.5—1.0 % больше по сравнению со спутниковым прибором OMI, использующим для определения OCO измерения рассеянного солнечного УФ излучения. Последнее объясняется более высоким информационным содержанием измерений прибором OMI (солнечное УФ излучение) по сравнению с приборами, измеряющими уходящее тепловое излучение (IASI и ИКФС-2) [21].

Заключение. Описаны методика и алгоритмы определения общего содержания озона по данным измерений спектров уходящего теплового излучения аппаратурой ИКФС-2 (спутник "Метеор-М № 2"). Методика основана на использовании искусственных нейронных сетей и данных спутниковых измерений общего содержания озона с помощью аппаратуры ОМІ. Такой подход позволяет автоматически осуществлять международную калибровку данных ИКФС-2, так как в настоящее время измерения прибором ОМІ признаны наиболее качественными. Приведены результаты сопоставлений измерений общего содержания озона ИКФС-2 с наземными измерениями (приборы Добсона, Брюера и М-124). Показано, что систематические различия данных ИКФС-2 и результатов измерений приборами Добсона и Брюера не превышают 1 %, а среднеквадратические 3.0—4.5 %. Наличие совмещенных измерений различными приборами позволяет оценить случайные погрешности измерений общего содержания озона: ~1 % для измерений приборами Добсона и Брюера (при использовании прямого солнечного излучения), 2.8 и 3.6 % — для спутниковых приборов ОМІ и ИКФС-2.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант 18-05-00426). Обсуждение и уточнение методики интерпретации спектроскопических измерений выполнены при поддержке гранта №28883514 СПбГУ COLLAB2018.

Авторы благодарят сотрудников НИЦ "Планета" А. Б. Успенского и А. В. Кухарского за поддержку работ данного направления и обсуждение результатов.

[1] WMO. Scientific Assessment of Ozone Depletion: 2010, Global Ozone Research and Monitoring Project – Report No 52, Geneva (2011) 1––8

[2] WMO, IPCC: Climate Change 2013: The Physical Science Basis. Contribution Of Working Group I to the Fifth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change, Ed. Stocker University Press, Cambridge, United Kingdom and New York, NY, USA (2013) 11–18

[3] R. Hanel, B. Conrath. Science, 165, N 3899 (1969) 1258-1260

[4] К. Я. Кондратьев, Ю. М. Тимофеев. Метеорологическое зондирование атмосферы из космоса, Ленинград, Гидрометеоиздат (1978) 59—68

[5] Ю. М. Тимофеев. Изв. АН СССР, ФАО, 25, № 5 (1989) 451—472

[6] В. Н. Досов, Л. П. Пахомов, А. П. Прохоров. В сб. "Дистанционное зондирование атмосферы со спутника "МЕТЕОР", Ленинград, Гидрометеоиздат (1979) 113—119

[7] A. Boynard, C. Clerbaux, P.-F. Coheur, D. Hurtmans, S. Turquety, M. George, J. Hadji-Lazaro, C. Keim, J. Meyer-Arnek. Atmos. Chem. Phys., 9, N 16 (2009) 6255–6271

600

[8] А. Б. Успенский, А. Н. Рублев. Исслед. Земли из космоса, № 6 (2013) 4—15

- [9] Ю. М. Головин, Ф. С. Завелевич, А. Г. Никулин, Д. А. Козлов, Д. О. Монахов, И. А. Козлов, С. А. Архипов, В. А. Целиков, А. С. Романовский. Исслед. Земли из космоса, № 6 (2013) 25—37
- [10] Ю. М. Головин, Ф. С. Завелевич, Д. А. Козлов, И. А. Козлов, Д. О. Монахов, А. Г. Никулин,
- **Н. Н. Ушаков, А. В. Поляков, Ю. М. Тимофеев.** Космонавтика и ракетостроение, **85**, № 6 (2015) 51—58
- [11] А. С. Гаркуша, А. В. Поляков, Ю. М. Тимофеев, Я. А. Виролайнен. Изв. РАН, ФАО, 53, № 4 (2017) 493—501
- [12] А. С. Гаркуша, А. В. Поляков, Ю. М. Тимофеев, Я. А. Виролайнен, А. В. Кухарский. Исслед. Земли из космоса, № 2 (2018) 58—64
- [13] А. М. Звягинцев, Н. С. Иванова, М. П. Никифорова, И. Н. Кузнецова, П. Н. Варгин. Метеорология и гидрология, № 5 (2016) 122—128
- [14] Y. M. Timofeyev, S. P. Smyshlyaev, Y. A. Virolainen, A. S. Garkusha, A. V. Polyakov, M. A. Motsakov, O. Kirner. Ann. Geophys., 36 (2018) 1485—1505
- [15] Измерительная сеть WOUDC: http://woudc.org/home.php
- [16] Я. А. Виролайнен, Ю. М. Тимофеев, А. В. Поберовский, А. В. Поляков, А. М. Шаламянский. Оптика атм. и океана, **30**, № 2 (2017) 170—176
- [17] Y. A. Virolainen, Y. M. Timofeyev, V. S. Kostsov, D. V. Ionov, V. V. Kalinnikov, M. V. Makarova, A. V. Poberovsky, N. A. Zaitsev, H. H. Imhasin, A. V. Polyakov, M. Schneider, F. Hase, S. Barthlott, T. Blumenstock. Atmos. Meas. Tech., 10 (2017) 4521-4536
- [18] M. Van Roozendael, P. Peeters, H. K. Roscoe, H. De Backer, A. E. Jones, L. Bartlett, G. Vaughan, F. Goutail, J.-P. Pommereau, E. Kyro, C. Wahlstrom, G. Braathen, P. C. Simon. J. Atm. Chem., 29, N 1 (1998) 55-83
- [19] J. B. Kerr, I. A. Asbridge, F. J. Evans. J. Geophys. Res., 93 (1988) 11129-11140
- [20] A. Boynard, D. Hurtmans, M. E. Koukouli, F. Goutail, J. Bureau, S. Safieddine, C. Lerot, J. Hadji-Lazaro, C. Wespes, J.-P. Pommereau, A. Pazmino, I. Zyrichidou, D. Balis, A. Barbe, S. N. Mikhailenko, D. Loyola, P. Valks, M. Van Roozendael, P.-F.Coheur, C. Clerbaux. Atmos. Meas. Tech., 9 (2016) 4327-4353
- [21] K. Garane, C. Lerot, M. Coldewey-Egbers, T. Verhoelst, I. Zyrichidou, D. S. Balis, T. Danckaert, F. Goutail, J. Granville, D. Hubert, M. E. Koukouli, A. Keppens, J.-C. Lambert, D. Loyola, J.-P. Pommereau, M. Van Roozendael, C. Zehner. Atmos. Meas. Tech., 11 (2018) 1385—1402
- [22] A. Keppens, J.-C. Lambert, J. Granville, D. Hubert, T. Verhoelst, S. Compernolle, B. Latter, B. Kerridge, R. Siddans, A. Boynard, J. Hadji-Lazaro, C. Clerbaux, C. Wespes, D. R. Hurtmans, P.-F. Coheur, J. C. A. van Peet, R. J. van der A, K. Garane, M. E. Koukouli, D. S. Balis, A. Delcloo, R. Kivi, R. Stübi, S. Godin-Beekmann, M. Van Roozendael, C. Zehner. Atmos. Meas. Tech., 11 (2018) 3769—3800