V. 87, N 5

JOURNAL OF APPLIED SPECTROSCOPY

SEPTEMBER — OCTOBER 2020

ВЗАИМНАЯ КАЛИБРОВКА СПУТНИКОВЫХ И НАЗЕМНЫХ СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИХ ИЗМЕРЕНИЙ СОДЕРЖАНИЯ СО₂ НА СТАНЦИИ NDACC St. Petersburg

Я. А. Виролайнен *, А. А. Никитенко, Ю. М. Тимофеев

УДК 543.42.062:542.74

Санкт-Петербургский государственный университет, 199034, Санкт-Петербург, Россия; e-mail: yana.virolainen@spbu.ru

(Поступила 22 апреля 2020)

Проведено сопоставление наземных (Фурье-спектрометром Bruker 125HR) и спутниковых (OCO-2) измерений содержания CO₂ вблизи Санкт-Петербурга. Коррекция наземных измерений величин XCO₂ на 2.5 % и выбор оптимальной схемы интерпретации спектроскопических данных позволяют согласовать два типа измерений со средними различиями в -0.01—0.16 ppm (-0.00—0.04 %) и стандартными отклонениями средних 1.42—1.49 ppm (0.35—0.37 %) при пространственной согласованности измерений 100—300 км. Малые значения рассогласований позволяют использовать оба типа данных измерений XCO₂ для решения обратной задачи атмосферного переноса — определения антропогенных эмиссий CO₂.

Ключевые слова: валидация спутниковых измерений, Фурье-спектроскопия, OCO-2, Bruker 125HR, мониторинг углекислого газа.

We compared ground-based (Bruker 125 HR) and satellite (OCO-2) datasets of simultaneous CO₂ measurements in the vicinity of St. Petersburg. It is shown that correcting the ground-based XCO₂ values by 2.5% and choosing an optimal setup during the spectra analysis allowed us to reach good agreement between the satellite and ground-based measurements. The bias between the two datasets is -0.01-0.16 ppm (-0.00-0.04%) for the means, and the standard deviation of the means is 1.42-1.49 ppm (0.35-0.37%) with a spatial mismatch of XCO₂ data pairs of 100-300 km. Such small disagreement between the two types of measurements permits to use both methods for solving the inverse task of atmospheric transfer — the estimation of anthropogenic emissions of CO₂.

Keywords: satellite measurements validation, Fourier transform spectrometry, OCO-2, Bruker 125 HR, carbon dioxide monitoring.

Введение. Современные изменения климата Земли, обусловленные ростом содержания парниковых газов [1], стимулировали создание и использование специализированной спутниковой аппаратуры для мониторинга количественных характеристик и распределения этих газов в атмосфере. Регулярные измерения содержания углекислого газа и метана начали осуществляться с помощью аппаратуры и спутников SCIAMACHY, GOSAT, OCO-2 [2, 3]. На основе этих измерений исследуют пространственные и временные вариации содержания парниковых газов, а также решают обратную задачу атмосферного переноса — определение эмиссий анализируемых газов, например, антропогенного характера [4, 5]. Упомянутая спутниковая аппаратура позволяет осуществлять измерения общего содержания CO₂ (средние отношения смеси в сухой атмосфере XCO_2) со случайными погрешностями 0.25—0.50 % (1—2 ppm) [3]. Кроме указанных выше приборов определенную информацию о содержании углекислого газа дают также ИК-приборы высокого спектрального разрешения типа AIRS, IASI, TES и CrIS, но погрешности этих измерений содержания CO₂ в 1.5—2.0 раза больше [2].

Для повышения точности оценок антропогенных эмиссий различных газов используются комплексные измерения их содержания, включающие в себя наземные локальные и дистанционные изме-

INTERCALIBRATION OF SATELLITE AND GROUND-BASED MEASUREMENTS OF CO₂ MEAN MOLE FRACTIONS AT THE NDACC SITE St. Petersburg

Ya. A. Virolainen^{*}, **A. A. Nikitenko, Yu. M. Timofeyev** (Saint Petersburg State University, Saint Petersburg, 199034, Russia; e-mail: yana.virolainen@spbu.ru)

рения, спутниковые, самолетные и судовые измерения, а также измерения на высотных вышках [3]. При этом важное значение имеет взаимная калибровка различных типов измерений, которая позволяет как уменьшить погрешности серий измерений, так и гармонизировать ряды измерений отдельными приборами. Так, в работе [6] осуществлена калибровка измерений СО₂ с помощью спутника ОСО-2 и наземных спектроскопических измерений на станциях международной сети наблюдений TCCON (Total Carbon Column Observing Network) [7].

Наземные спектроскопические измерения XCO₂ осуществляются также на станциях другой международной измерительной сети NDACC (Network for the Detection of Atmospheric Composition Change) [8], однако, как показано в [9, 10], эти измерения содержат заметное систематическое рассогласование с данными сети наблюдений TCCON (~2.5 %), прежде всего из-за разных усредняющих ядер дистанционных методов измерений в различных спектральных интервалах. При этом, как показано в [10], корректировка данных наземных измерений в Петергофе позволяет существенно снизить рассогласования между наземными и спутниковыми измерениями ОСО-2. Если без корректировки средние и среднеквадратические (СК) отклонения между наземными и спутниковым измерениями XCO_2 составляли 11—13 ppm, то после корректировки СК-отклонения уменьшились до 2.1—3.4 ppm (0.5—1.0 %), что сравнимо с полученными в [6]. Отметим, что XCO_2 при анализе общего содержания углекислого газа используется для исключения влияния вариаций приземного давления и водяного пара.

В настоящей работе осуществлена взаимная калибровка спутниковых (ОСО-2) и наземных спектроскопических (Bruker 125HR) измерений содержания CO₂ на станции NDACC St. Petersburg, расположенной в Петергофе — пригороде Санкт-Петербурга, за период 2014—2019 гг.

Наземные и спутниковые измерения углекислого газа. Спектроскопические наземные измерения содержания CO_2 по прямому солнечному излучению осуществляются как в ближнем (сеть TCCON с 2004 г.), так и среднем ИК-диапазонах спектра (сеть NDACC с 1991 г.). В Петергофе (59.88°N, 29.82°E) измерения в средней ИК-области с помощью Фурье-спектрометра Bruker 125HR со спектральным разрешением 0.005 см⁻¹ были начаты в 2009 г. [11]. В 2016 г. измерительный комплекс был сертифицирован, и станция в Петергофе официально вошла в международную сеть NDACC, получив название St. Petersburg. Интерпретация спектров ИК солнечного излучения в СПбГУ проводится с помощью двух программных комплексов (ПК) для анализа спектров на станциях сети NDACC — SFIT4 и PROFFIT [12]. В настоящей работе данные получены с помощью ПК PROFFIT при анализе измерений прямого солнечного излучения в четырех микро-окнах: 2620.55—2621.1, 2626.4—2626.85, 2627.1—2627.6 и 2629.275—2629.95 см⁻¹ [13].

В июле 2014 г. запущен спутник ОСО-2 с надирным прибором, измеряющим солнечное отраженное излучение в ближней ИК-области спектра с высоким спектральным разрешением (~17000), высоким динамическим диапазоном (10^4), хорошим отношением сигнал/шум (~400), достаточно высоким горизонтальным разрешением (~ $1.5 \times 2.5 \text{ km}^2$) и высокой частотой измерений. Прибор фиксирует отраженное и рассеянное солнечное излучение в безоблачной атмосфере в трех полосах поглощения — слабой (1.61 мкм) и сильной (2.06 мкм) полосах углекислого газа и полосе кислорода (0.76 мкм). Использование трех полос поглощения, специальные методики и алгоритмы интерпретации спутниковых данных и, наконец, специальная калибровка и валидация результатов определения XCO_2 с помощью самолетных измерений и наземной спектроскопической сети TCCON позволили достичь высокой абсолютной и относительной точности измерений прибором ОСО-2. По данным [6], средние абсолютные и СК отличия от наземных спектроскопических измерений (сеть TCCON) составляют <0.4 ppm и 1.5 ppm соответственно.

Результаты и их обсуждение. Для взаимной калибровки спутниковых и наземных измерений *X*CO₂ взяты осредненные по соответствующей области и попадающие в круг радиусом 100, 200 и 300 км от места расположения станции St. Petersburg данные OCO-2 версии 9 LITE level 2 [14] с флагом качества "0". Флаг качества "0" гарантирует высокое качество измерений, прошедших через целый ряд фильтров, анализирующих разнообразные факторы, влияющие на качество измерений [15]. Отметим, что данных с флагом качества "0" на порядок и более меньше, чем данных с флагом качества "1".

Для получения ансамбля наземных спектроскопических данных использованы осредненные за день данные наземных измерений Фурье-спектрометра Bruker 125HR в Петергофе (при наличии трех и более измерений за день). При этом в качестве критерия предварительного отбора данных взяты изменчивость в течение дня величины *X*CO₂ (<1 %) и спектральной невязки — СК-рассогласования между измеренным и рассчитанным в ходе решения обратной задачи значением сигнала (интен-

сивности излучения), которая не должна превышать 0.1 %, что соответствует отношению сигнал/шум ~1000.

Для всестороннего анализа наземных измерений XCO_2 использованы три схемы интерпретации измеренных спектров: I — стандартная схема ПК PROFFIT, используемая на станциях сети NDACC и предназначенная для проверки качества измеренных спектров [9]; II — оптимизированная схема, дающая наименьшие случайные погрешности восстановления CO_2 из спектроскопических данных Bruker в Петергофе [13]; III — схема, позволяющая более точно скорректировать аппаратную функцию прибора при его разъюстировке. Эта схема отобрана при анализе данных моделирования CAMS (Copernicus Atmospheric Monitoring Service) [16], представляющих собой реанализ, прогноз и анализ в глобальном масштабе пространственно-временного распределения парниковых газов в атмосфере, а также информацию о выбросах таких газов из различных источников (https://www.copernicus.eu).

Схема II определена как оптимальная по данным измерений за 2009—2017 гг. С конца 2017 г. регулярные измерения аппаратной функции с помощью лабораторных кюветных измерений [17] показывали, что параметры аппаратной функции, такие как эффективность модуляции (ЭМ) и сдвиг фазы, превысили допустимые значения. Для того чтобы минимизировать погрешности спектроскопических измерений в первые несколько месяцев 2018 г., когда прибор был разъюстирован, разработаны несколько дополнительных схем интерпретации спектров, позволяющих более точно определять ЭМ аппаратной функции спектрометра. Из всех проанализированных результатов интерпретации (около десятка различных схем анализа спектров) схема III дала наименьшие погрешности определения *X*CO₂ наряду с наилучшим согласием с данными моделирования САМЅ, поэтому она отобрана для сопоставления с данными спутниковых измерений ОСО-2. Схема III из настоящей работы соответствует схеме III [13], но при этом ЭМ подбирается полиномом второй степени, в то время как в [13] она подбиралась в линейном приближении.

Перед сопоставлением с данными спутниковых измерений из-за различия вертикальной структуры усредняющих ядер разных спектральных областей наземных измерений и данных спутника ОСО-2, данные наземных измерений *X*CO₂ в Санкт-Петербурге уменьшены на 2.5 %, как рекомендовано в [9].

В табл. 1 в качестве рассогласования между данными спутниковых и наземных измерений представлены средние разности $M = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (x_i - y_i)$, где N — число сопоставляемых пар измерений, x — спутниковые измерения, y — наземные измерения, их стандартные отклонения $\sigma = \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^{N} (x_i - y_i - M)^2}$, характеризующие случайные рассогласования ансамблей, а также коэф-

фициенты корреляции (КК). Погрешность КК рассчитана по формуле $\sigma_{KK} = \sqrt{\frac{1 - KK^2}{N - 2}}$.

Из табл. 1 видно наилучшее согласие между спутниковыми и наземными измерениями по схеме III, учитывающей квадратическую коррекцию ЭМ аппаратной функции прибора. Схема I дает наибольшее случайное рассогласование со спутниковыми данными, а схема II — наибольшее среднее рассогласование. КК для трех схем интерпретации наземных измерений очень высок 0.95—0.98. При этом он максимальный при использовании схемы III. При увеличении пространственной области отбора двух типов измерений CO₂ (100, 200 и 300 км) характеристики согласованности спутниковых и наземных измерений *X*CO₂ изменяются мало.

В качестве примера наилучшего согласования спутниковых и наземных данных на рис. 1 приведен временной ход средних за день величин XCO_2 , полученных по спутниковым данным в радиусе 200 км от станции St.Petersburg и по наземным измерениям по схеме III. Оба типа измерений демонстрируют типичные сезонные вариации XCO_2 (падение содержания XCO_2 в летний период). При этом амплитуда изменчивости спутниковых измерений несколько больше амплитуды изменчивости наземных измерений, что, скорее всего, вызвано большими погрешностями спутниковых измерений и пространственной неоднородностью полей XCO_2 . В большей степени это характерно для 2017 и 2018 гг. В 2015 г., напротив, сезонная изменчивость спутниковых и наземных измерений величин XCO_2 совпадает.

На рис. 2 приведены те же данные в виде диаграммы рассеяния. Видно, что при малых XCO_2 величины спутниковых измерений меньше наземных, а при больших, наоборот, больше, что также свидетельствует о большей изменчивости спутниковых данных. При этом в среднем систематические отклонения близки к нулю, а случайные <0.5 %. КК между ансамблями данных 0.97.

Радиус, км	Схема	N	$M \pm \sigma$, ppm	$M \pm \sigma$, %	КК
100	Ι	23	-1.39 ± 2.45	-0.34 ± 0.61	0.95 ± 0.07
	II	23	-2.17±2.14	-0.54 ± 0.53	0.96 ± 0.06
	Ш	23	0.16±1.49	0.04±0.37	0.98±0.05
200	Ι	50	-1.48 ± 2.18	-0.37 ± 0.54	0.94±0.05
	II	49	-1.93 ± 1.99	-0.48 ± 0.50	0.95 ± 0.04
	Ш	50	-0.01±1.42	-0.00±0.35	0.97±0.03
300	Ι	71	-1.30 ± 2.12	-0.32 ± 0.53	0.95 ± 0.04
	II	69	$-1.84{\pm}2.05$	-0.46 ± 0.51	0.95 ± 0.04
	Ш	71	0.09±1.46	0.02±0.36	0.97±0.03

Таблица 1. Согласование спутниковых и наземных измерений XCO2 в Петергофе

П р и м е ч а н и е: *N* — число сопоставляемых дней измерений, *M* — средние разности (OCO-2 – FTIR), σ — их стандартные отклонения, КК — коэффициент корреляции.



Рис. 1. Временной ход усредненных за день величин *X*CO₂, полученных по спутниковым (с радиусом 200 км от станции St.Petersburg) данным и из наземных спектроскопических измерений (схема интерпретации III)



Рис. 2. Сопоставление усредненных за день величин *X*CO₂ (ppm), полученных по спутниковым (с радиусом 200 км от станции St.Petersburg) данным и из наземных спектроскопических измерений (схема интерпретации III); КК — коэффициент корреляции, Δ — разность между спутниковыми и наземными измерениями

Заключение. Сопоставлены наземные спектроскопические и спутниковые измерения содержания CO₂ для их взаимной калибровки. Коррекция наземных измерений величин *X*CO₂ на 2.5 % и выбор оптимальной схемы интерпретации спектроскопических данных позволили согласовать два типа измерений со средними различиями –0.01—0.16 ppm (–0.00—0.04 %) и стандартными отклонениями средних 1.42—1.49 ppm (0.35—0.37 %) при использовании 100—300 км областей пространственной согласованности измерений. Различия, полученные на станции St.Petersburg в Петергофе, меньше различий между спутниковыми измерениями ОСО-2 и наземными измерениями сети TCCON в [4]. Малые значения рассогласований позволяют использовать оба типа данных измерений XCO₂ для решения обратной задачи атмосферного переноса — определения антропогенных эмиссий CO₂.

Работа выполнена при поддержке грантом СПбГУ COLLAB2019_2 (№ 39455678). Наземные измерения солнечного излучения высокого спектрального разрешения получены на оборудовании ресурсного центра СПбГУ "Геомодель".

[1] T. F. Stocker, D. Qin, G.-K. Plattner, M. Tignor, S. K. Allen, J. Boschung, A. Nauels, Y. Xia, V. Bex, P.M. Midgley. Intergovernmental Panel on Climate Change (2013): https://www.ipcc.ch/site/assets/uploads/2018/03/WG1AR5 SummaryVolume FINAL.pdf

[2] National Institute for Environmental Studies report. A guidebook on the use of satellite greenhouse gases observation data to evaluate and improve greenhouse gas emission inventories (2018): https://www.nies.go.jp/soc/doc/GHG Satellite Guidebook 1st 12d.pdf

[3] Committee on Earth Observing Satellites (CEOS) report. A constellation architecture for monitoring carbon dioxide and methane from space (2018): http://ceos.org/document_management/Virtual_Constellations /ACC/Documents/CEOS_AC-VC_GHG_White_Paper_Version_1_20181009.pdf

[4] H. Bovensmann, M. Buchwitz, J. P. Burrows, M. Reuter, T. Krings, K. Gerilowski, O. Schneising, J. Heymann, A. Tretner, J. Erzinger. Atmos. Meas. Tech., 3, N 4 (2010) 781–811

[5] P. Fu, Y. Xie, C. E. Moore, S. W. Myint, C. J. Bernacchi. Earth's Future, 7, N 9 (2019) 1058–1070

[6] D. Wunch, P. O. Wennberg, G. Osterman, B. Fisher, B. Naylor, C. M. Roehl, C. O'Dell, L. Mandrake, C. Viatte, D. W. Griffith, N. M. Deutscher, V. A. Velazco, J. Notholt, T. Warneke, C. Petri, M. de Maziére, M. K. Sha, R. Sussmann, M. Rettinger, D. Pollard, J. Robinson, I. Morino, O. Uchino, F. Hase, T. Blumenstock, M. Kiel, D. G. Feist, S. G. Arnold, K. Strong, J. Mendonca, R. Kivi, P. Heikkinen, L. Iraci, J. Podolske, P. W. Hillyard, S. Kawakami, M. K. Dubey, H. A. Parker, E. Sepulveda, O. E. G. Rodriguez, Y. Te, P. Jeseck, M. R. Gunson, D. Crisp, A. Eldering. Atmos. Meas. Tech., 10, N 6 (2017) 2209–2238

[7] Наблюдательная сеть TCCON: https://tccon-wiki.caltech.edu/

[8] Наблюдательная сеть IRWG/NDACC: https://www2.acom.ucar.edu/irwg

[9] S. Barthlott, M. Schneider, F. Hase, A. Wiegele, E. Christner, Y. González, T. Blumenstock,
S. Dohe, O. E. García, E. Sepúlveda, K. Strong, J. Mendonca, D. Weaver, M. Palm, N. M. Deutscher,
T. Warneke, J, Notholt, B. Lejeune, E. Mahieu, N. Jones, D. W. T. Griffith, V. A. Velazco, D. Smale,
J. Robinson, R. Kivi, P. Heikkinen, U. Raffalski. Atmos. Meas. Tech., 8, N 3 (2015) 1555—1573

[10] Ю. М. Тимофеев, И. А. Березин, Я. А. Виролайнен, М. В. Макарова, А. В. Поляков, А. В. Поберовский, Н. Н. Филиппов, С. Ч. Фока. Изв. РАН ФАО, 55, № 1 (2019) 65—72 [Yu. M. Timofeyev, I. A. Berezin, Ya. A., Virolainen, M. V. Makarova, A. V. Polyakov, A. V. Poberovsky, S. Ch. Foka. Izv. Atm. and Ocean. Phys., 55, N 1 (2019) 59—64]

[11] Y. Timofeyev, Y. Virolainen, M. Makarova, A. Poberovsky, A. Polyakov, D. Ionov, S. Osipov, H. Imhasin. J. Mol. Spectr., 323 (2016) 2—14

[12] F. Hase, J. W. Hannigan, M. T. Coffey, A. Goldman, M. Höpfner, N. B. Jones, C. P. Rinsland,
 S. W. Wood. J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer, 87 (2004) 25—52

[13] **Я. А. Виролайнен.** Журн. прикл. спектр., **85**, № 3 (2018) 453–460 [**Ya. A. Virolainen**. J. Appl. Spectr., **85**, N 3 (2018) 462—469]

[14] База данных ОСО-2 по CO₂ https://co2.jpl.nasa.gov/download/?dataset=OCO2LtCO2v9&product=LITE [15] Orbiting Carbon Observatory-2 (OCO-2) Data Product User's Guide https://docserver.gesdisc.eosdis.nasa.gov/public/project/OCO/OCO2_DUG.V9.pdf

[16] Г. М. Неробелов, Ю. М. Тимофеев, С. П. Смышляев, Я. А. Виролайнен, М. В. Макарова, С. Ч. Фока. Опт. атм. и океана, **33**, № 10 (2020) (в печати)

[17] М. В. Макарова, А. В. Поберовский, Ф. Хазе, Ю. М. Тимофеев, Х. Х. Имхасин. Журн. прикл. спектр., 83, № 3 (2016) 437—444 [М. V. Makarova, А. V. Poberovskii, F. Hase, Yu. Timofeyev, Kh. Kh. Imhasin. J. Appl. Spectr., 83, N 3 (2016) 429—436]