МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ ИНСТИТУТ КОСМИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК (ИКИ РАН)

УДК 528.88::504.31

Номер государственной регистрации 122101700045-7



ОТЧЕТ

О НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЕ

Дистанционный мониторинг распределения концентраций и потоков малых газовых составляющих в атмосфере Земли

по теме:

ЭМИССИЯ

FFWG-2022-0013

(промежуточный, этап 2022/1)

Научный руководитель

Зав. лаб., канд. физ-мат. наук

Е.В. Пашинов

Москва 2022

СПИСОК ИСПОЛНИТЕЛЕЙ

Руководитель темы, научный сотрудник, зав. лаб., к.ф.-м.н.

Ответственный исполнитель, старший научный сотрудник к.ф.-м.н.

Ответственный исполнитель, старший научный сотрудник к.т.н.

Ответственный исполнитель, научный сотрудник

Подпись, дата Подпись, дата 12.12.202

Подпись, дата

217 2022 Подпись, дата

Е.В. Пашинов(разделы 1,5, введение, заключение)И.Н. Садовский(разделы 2,3)

А.В. Кашницкий (разделы 4,5)

А.Ю. Трохимовский (раздел 2)

Исполнители отдела 53

главный научный сотрудник, д.н.

ведущий научный сотрудник, к.н.

старший научный сотрудник, к.н.

научный сотрудник, к.н.

ведущий инженер

ведущий инженер

инженер

инженер

Подпись, дата	О.И. Кораблев (раздел 1)
Полнись лата	А.А. Федорова (раздел 1)
DEM 12.12.2022	Д.А. Беляев (раздел 1)
13.12.2022 Полнись ната	М.В. Пацаева (раздел 1)
Подпись, дага	А.С. Патракеев (раздел 1)
Cillight 12.12. 2022	А.В. Смирнова (раздел 1)
<u>Мај 13-12.2022</u> Полнись лата	М.С. Жарикова (раздел 1)
<u>ди 13.12.2022</u> Полнись вата	Е.С. Федорова (раздел 1)

Подпись, дата

Исполнители отдела 55

главный научный сотрудник, д.н.

ведущий научный сотрудник, к.н.

ведущий научный сотрудник, к.н.

ведущий научный сотрудник, к.н.

ведущий научный сотрудник, к.н.

старший научный сотрудник, к.н.

научный сотрудник, к.н.

научный сотрудник, к.н.

младший научный сотрудник

зав. отделом, д.н.

главный специалист

sill il inin	Е.А. Шарков
allah The 12.20	(разделы 1,3)
Подиись, дата	
ATT 12,12,22	Г.П. Арумов (раздел 1)
Родпись, дата	ζ,
A	А.В. Кузьмин
ATT 12.12.22	(раздел 1)
Подпись, дата	
O. laf 12.12.22	(раздел 3)
Подпись, дата	
Mar 12.12. R.	А.А. Мазуров (раздел 4)
Подпись, дата	
12.12.72	В.В. Тихонов
1900 Quinz com	(раздел 5)
подпись, дата	ПА Кобан
1200 19 19 2032	(разлел 5)
Подпись, дата	(Program)
	Д.С. Сазонов
Tagorion 12.12.22	(разделы 1,2)
Подпись, дата	
Beach 10 10 2000	Е.В. Афанасьева
Harry The Id. and	(раздел 5)
/ Подпись, дага	
Rigger 12 12 2022	(раздел 2)
Подпись, дата	(puszten 2)
. 0	А.А. Ломакин
Noul 12.12.2022	(раздел 2)
Подпись, дата	
Anna 10 10 200	Ю.В. Соколова
12.12. AVX	(раздел 5)
Подпись, дата	ГЛО
Prodel 12 12 22	Е.Д. Стариченко
Полнись дата	(paster 2)
	Л.М. Ермаков
12, 12.12.22	(разделы 1,5)
Подпись, дата	
a final	Н.Ю. Комарова
Acolle f. 12. 2	(раздел 5)

Подпись, дата

А.Ю. Баданов ведущий инженер 12.12.22(раздел 3) Подпись, дата М.А. Кузнецова ведущий инженер 2.12.22 (раздел 3) Подпись, дата С.А. Втюрин ведущий программист 72.12.22 (раздел 3) Подпись, дата А.А. Антошкин инженер 12.12.2022 (раздел 4) Подпись, дата Д.С. Дианова инженер easel 12.12.2022 (раздел 4) Подпись, дата Д.А. Елизаров инженер 12.12.2022(раздел 3) Подпись, дата П.Д. Жаданова инженер (раздел 1) Подпись, дата Ю.А. Илларионова инженер (раздел 3) Подпись, дата Д.В. Лозин (раздел 2) инженер 12,12,2022 Подпись, дата С.А. Павлов инженер 12.12.22 (раздел 5) Подпись, дата Б.П. Руткевич инженер (раздел 4) 12.12.2022 Подпись, дата А.Н. Якушева инженер <u>2022</u> (раздел 1) Подпись, дата Д.М. Ермаков нормоконтролер 12.12.2022 Подпись, дата

РЕФЕРАТ

Отчёт содержит 110 страниц, 81 рисунок, 12 таблиц, 2 источника.

НАСТОЯЩИЙ ОТЧЁТ ПОСВЯЩЁН ОПИСАНИЮ ОСНОВНЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ РАБОТ, ПОЛУЧЕННЫХ В 2022 г. В РАМКАХ ТЕМЫ «ЭМИССИЯ» (№ FFWG-2022-0013), ВЫПОЛНЯЮЩЕЙСЯ В РАМКАХ ГОСУДАРСТВЕННОГО ЗАДАНИЯ ИНСТИТУТОМ КОСМИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК.

Тема «Эмиссия» «Дистанционный мониторинг распределения концентраций и потоков малых газовых составляющих в атмосфере Земли» сформирована для развития средств и методов получения, а также систем обработки и распространения данных о концентрациях и потоках малых газовых составляющих в атмосфере Земли на основе технологий спутникового мониторинга. Работы по теме начаты в 2022 г. в рамках программы Министерства высшего образования и науки по созданию новых молодёжных лабораторий, на основе задела, созданного в других «профильных» темах государственного задания ИКИ РАН.

В ОТЧЁТЕ ПРИВОДЯТСЯ ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ РАБОТ, ЗАПЛАНИРОВАННЫХ НА 2022 г. ПО СЛЕДУЮЩИМ НАПРАВЛЕНИЯМ:

Создание новых методов обработки данных дистанционного зондирования Земли (ДЗЗ) по полям малых газовых составляющих (в том числе, позволяющих восстанавливать детализированную пространственно-временную динамику полей, реализующиеся в них потоки).

Разработка новых методов измерения малых газовых составляющих в атмосфере Земли (в том числе с использованием и комбинированием новых частотных каналов и различных методик зондирования).

Создание технологии и системы дистанционного (спутникового) научного мониторинга концентраций и потоков малых газовых составляющих атмосферы, в том числе — парниковых газов (система будет ориентирована на мониторинг всей территории России и пограничных стран).

Развитие методов усвоения данных ДЗЗ и продуктов их обработки в численных моделях атмосферной циркуляции.

Обеспечение возможности оперативной оценки, на основе существующих и перспективных средств постоянного спутникового мониторинга, пространственных распределений концентраций и потоков парниковых газов на территории России.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА

СПУТНИКОВАЯ СПЕКТРОМЕТРИЯ, ХИМИЧЕСКИЙ СОСТАВ АТМОСФЕРЫ, АТМОСФЕРЫ, МАЛЫЕ ГАЗОВЫЕ СОСТАВЛЯЮЩИЕ, ЛИНАМИКА КОНЦЕНТРАЦИИ И ПОТОКИ ПАРНИКОВЫХ ГАЗОВ, СИСТЕМЫ ОБРАБОТКИ СПУТНИКОВЫХ ДАННЫХ, ДОЛГОВРЕМЕННЫЕ АРХИВЫ СПУТНИКОВЫХ ДАННЫХ, АНАЛИЗ ДОЛГОВРЕМЕННЫХ СЕРИЙ НАБЛЮДЕНИЙ И ПРОДУКТОВ ИХ ОБРАБОТКИ, ИНФОРМАЦИОННЫЕ СЕРВИСЫ, ОБРАБОТКА СПУТНИКОВЫХ ДАННЫХ, ДОСТУП К АРХИВАМ СПУТНИКОВЫХ ДАННЫХ, ЦИРКУЛЯЦИОННЫЕ МОДЕЛИ АТМОСФЕРЫ, УСВОЕНИЕ СПУТНИКОВЫХ ДАННЫХ, ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ, БАЛАНСОВЫЕ ОЦЕНКИ, ВЫБРОСЫ ПАРНИКОВЫХ ГАЗОВ.

СПИСОК ИСПОЛНИТЕЛЕЙ2
РЕФЕРАТ
ВВЕДЕНИЕ
ГЛАВА 1 Создание новых методов обработки данных дистанционного зондирования Земли по полям малых газовых составляющих (в том числе, позволяющих восстанавливать детализированную пространственно-временную динамику полей, реализующиеся в них потоки)
Введение
1.1 Общие сведения об изменении климата и кадастрах парниковых газов11
1.2 Общие сведения о газовом составе атмосферы13
1.2.1 Малые газовые составляющие (МГС)14
1.2.2 Парниковые газы15
1.2.3 Углекислый газ (CO ₂)16
1.2.4 Метан (СН ₄)17
1.2.5 Закись азота (N ₂ O)17
1.2.6 Озон (О3)
1.2.7 Водяной пар (H ₂ O)19
1.2.8 Окись углерода (CO)19
1.3 Физические основы количественной спектроскопии19
1.3.1 Внутримолекулярные колебания20
1.4 Наиболее типичные способы космической спектрометрии атмосферы32
1.4.1 Модели переноса для различной геометрии наблюдений
1.5 Обратные задачи инфракрасной атмосферной спектрометрии высокого спектрального разрешения
1.5.1 Весовые функции и выбор спектральных полос для корректного восстановления вертикальных профилей газовых составляющих атмосферы
Заключение
ГЛАВА 2 Разработка новых методов измерения малых газовых составляющих в атмосфере Земли (в том числе с использованием и комбинированием новых частотных каналов и различных методик зондирования)41
Введение41
2.1 Обзор основных приборов спутникового ДЗЗ парниковых газов
2.2 Особенности применения спутниковых приборов ДЗ парниковых газов44
2.2.1 Пассивные системы
2.2.2 Активные системы
2.3 Перспективные отечественные приборы: космический эксперимент «Дриада»

оглавление

Заключение5	51
ГЛАВА 3 Развитие методов усвоения данных ДЗЗ и продуктов их обработки в	
численных моделях атмосферной циркуляции5	52
Введение	52
3.1 Ассимиляция данных в задачах ДЗЗ5	52
3.2 Математическое описание процесса ассимиляции5	53
3.3 Существующие прогностические модели концентрации парниковых газов, позволяющие проводить ассимиляцию данных ДЗЗ	56
3.4 Освоение циркуляционной модели FLEXPART для дальнейшего использования в системе ассимиляции данных ДЗЗ парниковых газов5	59
Заключение6	50
ГЛАВА 4 Создание технологии и системы дистанционного (спутникового) научного мониторинга концентраций и потоков малых газовых составляющих атмосферы, в том числе — парниковых газов (система будет ориентирована на мониторинг всей территории России и пограничных стран)	52
Введение	52
4.1 Обзор основных систем мониторинга газовых составляющих и доступности их информационных продуктов	52
4.2 Организация работы с информационными продуктами по малым газовым составляющим на базе ЦКП «ИКИ-Мониторинг»	12
Заключение7	15
Глава 5 Обеспечение возможности оперативной оценки, на основе существующих и перспективных средств постоянного спутникового мониторинга, пространственных распределений концентраций и потоков парниковых газов на территории России	a 76
Ввеление	16
5.1 Оценка возможности построения различных информационных продуктов для анализа пространственных распределений концентраций парниковых газов на территории России на основе данных существующих спутниковых систем	76
5.1.1 Примеры годовых информационных продуктов7	76
5.1.2 Примеры «ежемесячных» информационных продуктов	32
5.1.3 Примеры «еженедельных» информационных продуктов	37
5.1.4 Примеры временной динамики концентраций парниковых газов в районах крупных источников загрязнений (на примере крупных городов))9
5.2 Пример анализа динамики выбросов CO ₂ крупными акваториями бореальной субарктической и арктической зоны в период разрушения ледяного покрова	ă,)1
Заключение 10)8
ЗАКЛЮЧЕНИЕ 10)9
ПУБЛИКАЦИИ)9
	-

введение

В рамках исполнения государственного задания на 2022–2024 гг. Институт космических исследований Российской академии наук проводит научно-исследовательские работы по теме «Дистанционный мониторинг распределения концентраций и потоков малых газовых составляющих в атмосфере Земли» (шифр «Эмиссия»). Целью НИР является разработка новых методов, подходов и информационной системы дистанционного мониторинга распределения концентраций и потоков малых газовых составляющих в атмосфере Земли».

Поставленная цель соответствует приоритетным направлениям национального проекта «Наука и университеты» в части климатических исследований, а именно, следующим основным направлениям фундаментальных исследований, перечисленным в Программе фундаментальных исследований в Российской Федерации на долгосрочный период 2021–2030 гг., утверждённой распоряжением Правительства РФ от 31 декабря 2020 г. № 3684-р:

№ п/п	Направление фундаментальных исследований	Номер направления в «Программе»
1	Состав, структура и динамика атмосферы (включая ионосферу и	1.5.9.1
	магнитосферу), изучение атмосферных процессов и явлений, в	
	том числе экстремальных	
2	Химия атмосферы, малые газовые составляющие, аэрозоли, вода	1.5.9.2
	в атмосфере	
3	Создание методов, технологий и аппаратуры атмосферных и	1.5.9.5
	ионосферных явлений	
4	Информационно-вычислительные системы и среды в науке и	1.1.8
	образовании	

Работы по теме «Эмиссия» направлены на решение следующих основных задач:

- 1. Создание новых методов обработки данных дистанционного зондирования Земли по полям малых газовых составляющих (в том числе, позволяющих восстанавливать детализированную пространственно-временную динамику полей, реализующиеся в них потоки).
- 2. Разработка новых методов измерения малых газовых составляющих в атмосфере Земли (в том числе с использованием и комбинированием новых частотных каналов и различных методик зондирования).
- 3. Развитие методов усвоения данных ДЗЗ и продуктов их обработки в численных моделях атмосферной циркуляции.
- 4. Создание технологии и системы дистанционного (спутникового) научного мониторинга концентраций и потоков малых газовых составляющих атмосферы, в том числе парниковых газов (система будет ориентирована на мониторинг всей территории России и пограничных стран).
- 5. Обеспечение возможности оперативной оценки, на основе существующих и перспективных средств постоянного спутникового мониторинга, пространственных распределений концентраций и потоков парниковых газов на территории России.

Рассмотрение базовых физических принципов спутникового мониторинга концентраций малых газовых составляющих атмосферы позволяет проанализировать возможности, а также разделить фундаментальные и временные (обусловленные текущим этапом технологического развития) ограничения, связанные с получением информации о химическом составе атмосферы из космоса. Согласно плану на начальный этап работ (2022) этот круг вопросов обсуждён в главе 1 в рамках решения указанной выше задачи 1.

В соответствии с планом работ по решению задачи 2 обсуждены вопросы, связанные с современным состоянием и возможностями технологий спутникового

дистанционного мониторинга, в том числе, в контексте перспектив дальнейшего развития специализированных средств спутникового ДЗЗ в России и в мире. Внимание сфокусировано на мониторинге парниковых газов, содержание которых в атмосфере испытывает влияние антропогенного фактора. Этот материал изложен в главе 2.

Важно подчеркнуть, что в предложенной парадигме решения задачи мониторинга концентраций и потоков малых газовых составляющих на основе фактических спутниковых наблюдений именно концентрации являются первичными продуктами анализа и обработки дистанционных данных. Потоки, в свою очередь, могут быть получены в результате усвоения данных о концентрациях в моделях атмосферной циркуляции и с помощью балансовых оценок на основе восстановленной атмосферной динамики (задача 3). Стандартная методология ассимиляции данных в моделях атмосферной циркуляции обсуждена в главе 3.

Следующая ключевая группа вопросов касается фактической доступности, объёмов, качества, однородности, пространственно-временного охвата и способов организации оперативных и архивных данных осуществляемых спутниковых экспериментов по мониторингу химического состава и состояния атмосферы Земли. Эти параметры определяют необходимые характеристики входной информации, на обработку которой будет ориентирована создаваемая технология и система дистанционного (спутникового) научного мониторинга концентраций и потоков малых газовых составляющих атмосферы (задача 4). Анализу этих вопросов, и использованием инфраструктурной основы проекта — ЦКП «ИКИ-Мониторинг» посвящена глава 4.

Решение задачи 5, по смыслу проекта, интегрирует результаты решения всех перечисленных выше задач и является их технологическим воплощением. Однако уже на начальных этапах имеется возможность отработки прототипов инфраструктурных решений на основе анализа временных рядов и комплексирования больших объёмов данных из различных источников с использованием (а в дальнейшем — с адаптацией и расширением) инфраструктурных средств ЦКП «ИКИ-Мониторинг». Примеры генерации, сопоставления и первичного анализа некоторых продуктов (прототипов), как интегрально по территории России, так и для выделенного класса объектов, даны в главе 5. Развиваемые инструменты и методики совместного анализа имеют дальнейшую перспективу применения, в том числе, для валидации (кросс-валидации) получаемых оценок концентраций и потоков малых газовых компонент атмосферы Земли.

ГЛАВА 1 СОЗДАНИЕ НОВЫХ МЕТОДОВ ОБРАБОТКИ ДАННЫХ ДИСТАНЦИОННОГО ЗОНДИРОВАНИЯ ЗЕМЛИ ПО ПОЛЯМ МАЛЫХ ГАЗОВЫХ СОСТАВЛЯЮЩИХ (В ТОМ ЧИСЛЕ, ПОЗВОЛЯЮЩИХ ВОССТАНАВЛИВАТЬ ДЕТАЛИЗИРОВАННУЮ ПРОСТРАНСТВЕННО-ВРЕМЕННУЮ ДИНАМИКУ ПОЛЕЙ, РЕАЛИЗУЮЩИЕСЯ В НИХ ПОТОКИ)

Введение

В рамках решения задачи создания новых методов обработки данных дистанционного зондирования Земли (ДЗЗ) по полям малых газовых составляющих (в том числе, позволяющих восстанавливать детализированную пространственно-временную динамику полей, реализующиеся в них потоки), в соответствии с планом на начальный этап работы (2022) выполнен обзор базовых физических принципов спутникового мониторинга концентраций малых газовых составляющих атмосферы, который позволяет проанализировать возможности, а также разделить фундаментальные и временные (обусловленные текущим этапом технологического развития) ограничения, связанные с получением информации о химическом составе атмосферы из космоса. Обзор затронул следующие основные вопросы:

- общие сведения об изменении климата и кадастрах парниковых газов;
- общие сведения о газовом составе атмосферы;
- физические основы количественной спектроскопии;
- наиболее типичные способы космической спектрометрии атмосферы;
- обратные задачи инфракрасной (ИК) атмосферной спектрометрии высокого спектрального разрешения;

Полученные результаты, в частности, были учтены при формировании предложений по перспективным российским космическим экспериментам (см. главу 2).

1.1 Общие сведения об изменении климата и кадастрах парниковых газов

Климат определяют как совокупность всех погодных условий, наблюдавшихся на конкретной территории за некоторый продолжительный промежуток времени. При этом такой территорией может быть, как отдельный регион, или даже населённый пункт, так и целый континент или весь земной шар. Приведённое определение климата не содержит наблюдений. Согласно рекомендациям явного указания на срок Всемирной метеорологической организации (ВМО) оптимальным полагается 30-летний период. За такой период усредняются данные метеорологических наблюдений, чтобы охарактеризовать состояние климата.

Климатическая система Земли включает в себя не только атмосферу, но и гидросферу (океаны, моря, озера и реки) литосферу (сушу), и криосферу (снег, морской и горный лёд, а также лёд, содержащийся в материковых щитах Гренландии, Антарктиды и полярных островов, и, кроме того, вечную мерзлоту), и, наконец, биосферу, объединяющую все виды живого. Все эти составляющие климатической системы находятся в тесной связи друг с другом, обмениваясь энергией и веществом.

Пятый доклад об оценках Межправительственной группы экспертов по изменению климата (МГЭИК) констатирует, что, с вероятностью более 95 %, влияние человека было доминирующей причиной потепления, наблюдаемого с середины XX в.

Текущее изменение климата России в целом следует охарактеризовать как продолжающееся потепление со скоростью, более чем в два с половиной раза превышающей среднюю скорость глобального потепления. Самыми быстрыми темпами на территории России росла температура Северной полярной области, особенно в последние десятилетия. Изменение климата не сводится лишь к повышению средней температуры воздуха у поверхности Земли, но проявляется во всех компонентах климатической системы, в том числе в изменениях газового состава и циркуляции атмосферы. Согласно оценкам, полученным с помощью современных климатических моделей, в течение всего XXI в. Россия останется регионом мира, где потепление климата существенно превышает средние показатели.

Наблюдаемые и ожидаемые в будущем изменения климата на территории России обусловливают многочисленные и, зачастую, важные — отрицательные и положительные — последствия для природных и хозяйственных систем, а также для населения.

Российская Федерация является Стороной РКИК ООН, включённой в Приложение I, и Стороной Киотского протокола, включённой в Приложение «В». В соответствии со своими обязательствами по ст. 4 и 12 РКИК ООН, Российская Федерация разрабатывает, периодически (в настоящее время, на основании решений Конференции Сторон РКИК ООН 18/СР.8 и 24/СР.19 — ежегодно) обновляет, публикует и представляет Конференции Сторон РКИК ООН через ее секретариат национальный кадастр антропогенных выбросов из источников и абсорбции поглотителями всех парниковых газов http://www.global-climate-change.ru/index.php/ru/oficial-(см., например, documents/kadastr-report), не регулируемых Монреальским протоколом. В соответствии с обязательствами по ст. 7 Киотского протокола, раздел 10 национального кадастра дополнительную информацию, необходимую для целей обеспечения включает соблюдения Протокола.

Распоряжением Правительства Российской Федерации от 1 марта 2006 г. № 278-р3 была создана и функционирует российская система оценки антропогенных выбросов из источников и абсорбции поглотителями парниковых газов, не регулируемых Монреальским протоколом по веществам, разрушающим озоновый слой, принятым в Монреале 16 сентября 1987 г. Согласно решению 24/СР.19 Конференции Сторон РКИК ООН, кадастр разрабатывается в соответствии с требованиями пересмотренных «Руководящих принципов для подготовки национальных сообщений Сторон, включённых в Приложение I к Конвенции, часть I: руководящие принципы РКИК ООН для представления информации о годовых кадастрах парниковых газов, включённых в кадастр, являются методологические руководства (доклады), разработанные МГЭИК, дополненные российскими разработками, основанными на опыте национальных инвентаризаций и материалах научных исследований.

В состав представляемых в РКИК ООН материалов кадастра входят Национальный доклад о кадастре (НДК) и электронные таблицы Общей формы доклада (ОФД), содержащие полную количественную информацию по выбросам и абсорбции парниковых газов.

В кадастр включаются данные о выбросах и абсорбции всех парниковых газов, указанных в Приложении «А» Киотского протокола. Оценки выбросов или абсорбции выполняются для всех категорий источников и поглотителей по классификации МГЭИК, за исключением тех категорий, для которых на территории России отсутствует хозяйственная или иная деятельность, приводящая к выбросам/абсорбции, или для которых не существует методик выполнения таких оценок. Для отдельных видов деятельности оценки приводятся в категориях, отличных от предусмотренных классификацией МГЭИК, что связано со специфическими особенностями используемых для выполнения оценок исходных данных о деятельности.

Оценки выбросов и абсорбции охватывают всю территорию Российской Федерации. Природные (не антропогенные) выбросы и абсорбция в кадастре не учитываются. Для пересчёта выбросов парниковых газов в эквивалент диоксида углерода (СО₂-экв.) в кадастре используются 100-летние потенциалы глобального потепления МГЭИК, приведённые в Приложении III к решению 24/СР.19 Конференции Сторон РКИК ООН.

1.2 Общие сведения о газовом составе атмосферы

Атмосфера представляет собой механическую смесь различных газов. На долю трёх основных газов (N₂, O₂, Ar) приходится 99,96 % массы атмосферы, а на долю всех остальных газов — лишь 0,04 %.

Газ	Доля по объёму вблизи поверхности Земли, %
Азот (N ₂)	78,084
Кислород (O ₂)	20,946
Аргон (Ar)	0,934
Диоксид углерода (CO ₂)	0,0375
Неон (Ne)	$1,818 \cdot 10^{-3}$
Гелий (Не)	$5,239 \cdot 10^{-4}$
Криптон (Kr)	$1,14 \cdot 10^{-4}$
Водород (Н2)	$5 \cdot 10^{-5}$
Ксенон (Хе)	$8,7 \cdot 10^{-6}$
Озон (О ₃)	$10^{-6} - 10^{-5}$

Таблица 1.2.1 — Газовый состав сухого воздуха вблизи поверхности Земли

Все газы и примеси, составляющие атмосферу, можно разбить на пять групп:

1. Основные газовые составляющие: азот, кислород и аргон; находятся в атмосфере примерно в постоянном соотношении до высоты порядка 100 км. Эти газы (кроме кислорода) сравнительно инертны в радиационном и химическом отношении.

2. Малые газовые составляющие (МГС) в небольшом количестве постоянно присутствуют в атмосфере, хотя оно может несколько варьировать в различных местах земного шара. Они иногда довольно активны в разных реакциях и химических превращениях и сильно поглощают ИК-радиацию. Поэтому МГС, особенно такие, как озон и диоксид углерода, играют большую роль в изменчивости климата. К МГС можно отнести также и весьма активный в радиационном и химическом отношениях водяной пар.

3. Ненасыщенные и неустойчивые молекулы и атомы (иногда называемые в химии свободными радикалами), весьма активные, хотя и короткоживущие и малочисленные, взаимодействующие с другими МГС. К ним относятся атомный кислород О (в том числе его возбуждённые особо деятельные частицы O(¹D)), гидроксил OH, пергидроксил HO₂, оксид хлора ClO и некоторые другие молекулы и частицы. Многие такие частицы образуются при диссоциации молекул МГС радиацией Солнца (ультрафиолетовой).

4. Аэрозоль — твёрдые и жидкие мелкие частицы, взвешенные в воздухе, весьма разнообразного состава, размеров и свойств (капли и кристаллы облаков, пыль, поднятая с поверхности Земли, а также выброшенная вулканами (в том числе в стратосферу), метеорная пыль, частицы солей морской воды, сажи, цемента и др.). Скорость их падения (оседания) мала, а относительная поверхность велика, так что они могут принимать заметное участие в химических — гетерогенных — реакциях с МГС и радикалами. Кроме того, в атмосфере присутствуют разнообразные загрязняющие вещества, газообразные и твердые.

5. Антропогенные примеси, поступающие в атмосферу в результате хозяйственной деятельности человека. Среди этих примесей большое значение имеет диоксид серы — продукт сжигания содержащего серу каменного угля и т.п. Газ SO₂ сравнительно недолговечен в тропосфере, он легко окисляется в SO₃ и вымывается из неё в виде серной кислоты (кислотные дожди). Однако часть его успевает проникнуть в стратосферу, где способствует образованию сернокислых солей, например сернокислого аммония (NH₄)₂SO₄. При этом на высоте 15–20 км образуется так называемый аэрозольный слой Юнге. Большое значение для химических процессов в атмосфере имеют хлорфторметаны (XФМ), такие как CCl₃F (фреон-11), CCl₂F₂ (фреон-12) и четырёххлористый углеводород.

К ХФМ можно отнести и метилхлорид CH₃Cl, хотя в основном он имеет органическое (морское) происхождение. ХФМ широко применяются в холодильной и других отраслях промышленности. В стратосфере их молекулы разлагаются солнечной радиацией. Освободившиеся при этом атомы фтора F образуют химически устойчивый фтористый водород, который быстро вымывается из атмосферы. Атомы хлора в стратосфере реагируют с озоном и, разрушая его, образуют молекулы оксида хлора ClO. В последующем оксид хлора разрушается по реакции $ClO + O = Cl + O_2$, и атомы хлора могут снова начать каталитический «хлорный цикл» разрушения озона. Наиболее важные антропогенные составляющие в атмосфере приведены в таблице:

Газовая	Название	Концентрация у поверхности, млн ⁻¹ (ррт)
составляющая		
CO_2	Диоксид углерода	375
CH_4	Метан	1,7
CO	Оксид углерода	0,06–0,12
N_2O	Оксид азота	0,31
$NO_x = NO + NO_2$	Суммарные оксиды азота	$1 \sim 20 \cdot 10^{-5}$
CCl ₃ F	Фреон-11	$2,6\cdot 10^{-4}$
CCl_2F_2	Фреон-12	$4, 4 \cdot 10^{-4}$
$C_2Cl_3F_3$	Фреон-113	$3.2 \cdot 10^{-5}$
CH ₃ CCl ₃	Метилхлороформ	$1,2 \cdot 10^{-4}$
CF ₂ ClBr	Ha-1211	$1 \cdot 10^{-6}$
CF ₃ Br	Ha-1301	$1 \cdot 10^{-6}$
SO ₂	Диоксид серы	$(1-20) \cdot 10^{-5}$
COS	Карбонат серы	$5 \cdot 10^{-4}$

Таблица 1.2.2 — Наиболее важные антропогенные составляющие в атмосфере

1.2.1 Малые газовые составляющие (МГС)

Главнейшими МГС принято считать:

Озон. Одна из важных МГС — атмосферный озон — О₃, образующийся при соединении молекулы О₂ и атома О. Большая часть его находится в стратосфере в виде широкого слоя с максимумом концентрации (иногда до 300 мкг·м⁻³) на высоте обычно 20–26 км. На больших высотах его содержание быстро убывает. Общее содержание озона в столбе атмосферы эквивалентно 0,20–0,67 см слоя озона при нормальном давлении и температуре. Оно заметно зависит от сезона, места, от переноса озона воздушными течениями и др. Озон деятельно взаимодействует с другими МГС. Поглощая заметно радиацию с $\lambda = 9,6$ мкм, он может влиять и на температуру атмосферы.

Диоксид углерода. Диоксид углерода CO_2 хорошо перемешан в атмосфере. Его концентрация в атмосфере постоянно растёт вследствие постоянно увеличивающегося объёма и в настоящее время до высоты примерно 80 км составляет около 375 млн⁻¹. Диоксид углерода играет важную роль в радиационном балансе и изменчивости климата Земли, а также влияет на вегетацию растений, которая при прочих равных условиях ускоряется с ростом концентрации CO_2 в воздухе.

Метан. Метан CH₄ — газ; имеет в основном (на 80 %) органическое происхождение. Его концентрация в тропосфере в настоящее время составляет около $1,7 \text{ млн}^{-1}$ (в южном полушарии на 3 % меньше, чем в северном), причём с годами его содержание медленно — на 1,2-1,5 % в год — растёт. Он хорошо перемешан в тропосфере, но выше тропопаузы его содержание быстро убывает в результате его окисления и участия в реакциях с другими МГС.

Оксид углерода. Оксид углерода СО имеет как антропогенное, так и органическое (морское) происхождение. В средних широтах северного полушария его содержание

составляет около 0,25 млн⁻¹, в южном полушарии его гораздо меньше, особенно в стратосфере.

Закись азота. Закись азота N₂O образуется в почве, особенно интенсивно при её более высоких температурах и при удобрении азотными солями. Содержание N₂O в тропосфере составляет около 0,31 млн⁻¹ и увеличивается примерно на 0,3 % в год. Закись азота имеет некоторое значение для парникового эффекта — для обогревания нижней атмосферы. В стратосфере содержание N₂O убывает с высотой примерно на порядок до высоты 35 км, в результате окисления её по реакции N₂O₄ + O(¹D) = NO₂ — в оксид азота, который может окисляться далее до диоксида азота NO₂. Концентрация NO и NO₂ возрастает с высотой примерно от 0,2·10⁻⁹ в нижней стратосфере до 10⁻⁸ на высоте 33 км. Эти МГС могут образовывать также и ряд других соединений азота (N₂O₅, HN₃ и др.).

1.2.2 Парниковые газы

Изменения концентрации некоторых атмосферных газов могут влиять на баланс энергии, циркулирующей между атмосферой, космосом, сушей, морями и океанами (радиационный форсинг). Решающую роль в радиационном форсинге играют газы с высокой прозрачностью в видимом диапазоне спектра, но с большим поглощением в дальнем инфракрасном (ИК) диапазоне спектра — парниковые газы. Присутствие таких газов в атмосфере приводит к появлению парникового эффекта. Основными парниковыми газами Земли являются водяной пар, углекислый газ, метан и озон (в порядке их оцениваемого воздействия на тепловой баланс). К парниковым газам также относятся перфторуглероды (PFC), гидрофторуглероды (HFC), гексафторид серы (SF₆), хлорфторуглероды (CIFC), гидро-хлорфторуглероды (HCFC) и несколько классов галогенов, включая фтор, хлор, или бромид, которые по большей своей части являются результатом исключительно промышленной деятельности человека.

Существует также несколько газов, которые, несмотря на отсутствие прямого вклада в эффект радиационного форсинга, влияют на глобальное радиационное равновесие. Эти тропосферные газы, отнесённые к загрязнителям окружающей среды, включают в себя диоксид азота (NO₂) и диоксид серы (SO₂). Долгоживущие атмосферные молекулы являются наиболее важными парниковыми газами. Эти газы удаляются и возникают в атмосфере под воздействием естественных процессов на Земле, сохраняя сложившийся многовековой баланс. Нарастающие масштабы неконтролируемой индустриальной деятельности могут и уже приводят к аномальному увеличению концентрации парниковых газов в глобальном масштабе и к соответствующим климатическим последствиям.

Совокупность всех выбросов парниковых углеродосодержащих газов, произведённых прямо и косвенно отдельным человеком, организацией, мероприятием или продуктом, называется «углеродным следом» (*англ.* carbon footprint). Парниковые газы, включая диоксид углерода (CO₂) и метан (CH₄), могут выбрасываться при расчистке земель, производстве и потреблении продуктов питания, топлива, производстве и использовании промышленных товаров, материалов, древесины, дорог, зданий, транспорта и различных услуг.

Большая часть углеродного следа жителей развитых стран возникает благодаря «непрямым» источникам, например, сжигание топлива для производства и доставки продукта конечному потребителю. Эти выбросы отличаются от сжигания топлива напрямую в машине или плите, которые обычно называют «прямыми» источниками углеродного следа человека. В большинстве случаев суммарный углеродный след не может быть точно рассчитан из-за недостатка знаний и информации о сложных взаимодействиях между влияющими на него процессами, включая натуральные процессы, аккумулирующие или высвобождающие диоксид углерода.

Снижение углеродного следа является одной из самых важных задач современности, решение которой позволит приблизиться к приемлемому уровню

антропогенного воздействия на биосферу, способствовать смягчению последствий изменения климата.

В соответствии с распоряжением Правительства РФ от 22 октября 2021 г. №2979-р (подготовленному в соответствии с рекомендациями Межправительственной группой экспертов по изменению климата), список, в отношении которых осуществляется государственный учёт выбросов и ведение кадастра парниковых газов, включает в себя: диоксид углерода СО₂, метан СН₄, закись азота N₂O, гексафторид серы SF₆, группу из 19 гидрофторуглеродов (включая трифторметан CHF₃), группу из 9 перфторуглеродов (включая тетрафторметан CF₄) и трифторид азота NF₃.

Из подобных перечней обычно исключают: водяной пар, на долю которого в целом приходится около половины всего выброса атмосферных газов; короткоживущие газы (например, моноксид углерода); аэрозоли (например, минеральная пыль, сажа); многие хладагенты и другие галогенированные газы, производящиеся в малых количествах; а также кислород, азот, аргон.

Краткое описание большинства парниковых газов, содержащихся в атмосфере, и мониторинг которых представляет особый интерес, приведено ниже.

1.2.3 Углекислый газ (СО₂)

В природе углерод циркулирует между атмосферой и минеральными резервуарами земной литосферы. Огромные потоки СО2 возникают между атмосферой и земной биомассой, между атмосферой И поверхностью океанов. Пространственная и временная трансформация атмосферного диоксида углерода является частью глобального углеродного цикла, следовательно, его судьба является сложной функцией геохимических и биологических процессов. Обширный объем проведённых к настоящему времени прямых и косвенных измерений указывает на то, что отношение смеси атмосферного СО2 увеличилась на глобальном уровне почти на 100 ррт (36 %) в течение последних 250 лет от величины 280 ppm в доиндустриальной эпохе (1000–1750 н.э.) до 379 ppm в 2006 г. В течение этого периода, абсолютная скорость роста концентрации CO₂ в атмосфере постоянно увеличивалась, достигнув в последние 30 лет величины 1,4 ppm в год. Такая скорость увеличения концентрации СО₂ не имела прецедентов за последние 20 тыс. лет. К 2019 г. средний уровень СО₂ увеличился до 410 ppm.

Для понимания и прогнозирования кругооборота углерода, интенсивности его источников и стоков принципиальное значение имеет высокая точность, систематичность и глобальный характер измерений.

Согласно существующим оценкам, примерно 57 % антропогенной эмиссии CO_2 остаётся в атмосфере, 30 % поглощается океаном, а остальная часть усваивается биосферой. Однако долгоживущие в атмосфере малые газовые примеси, в частности CO_2 и CH_4 , являются химически устойчивыми и могут существовать в масштабах от десятилетий до столетия и более. Известные исследования показывают, что после попадания CO_2 в атмосферу потребуется примерно 30 лет, чтобы 30 % этого газа было выведено из атмосферы в результате естественных процессов; ещё 30 % может быть удалено за несколько столетий и, наконец, 20 % может оставаться в ней в течение многих тысяч лет.

Парниковое воздействие атмосферного углекислого газа обусловлено влиянием полос поглощения в диапазоне спектра 4–15 мкм. При этом известные полосы 9,6 и 10,4 мкм являются «горячими», то есть функция спектрального пропускания CO₂ сильно зависит от температуры. Заметная температурная зависимость функции пропускания наблюдается не только в горячих полосах, но и в крыльях полосы поглощения 15 мкм, где спектральные линии, происходящие с возбуждённых колебательно-вращательных уровней, перекрываются с линиями, обусловленными переходами с основного колебательного состояния. Полосы поглощения CO₂, лежащие в более короткой части

спектра 1–3,5 мкм не проявляются в парниковом эффекте, но влияют на формирование спектрального альбедо планеты.

1.2.4 Метан (СН4)

В настоящее время изучению метана уделяется особое внимание. Парниковый эффект, создаваемый метаном, обусловлен присутствием сильной полосы поглощения 7,6 мкм в области известного окна спектральной прозрачности атмосферы (радиационный форсинг), а также выделением большого количества тепла при его окислении. Окисление метана происходит при его взаимодействии с O₂ или оксидами, например, NO, NO₂, CO и др.

Метан преимущественно образуется путём анаэробного разложения органического вещества в биологических системах. Агропромышленные процессы, такие как выращивание риса на заболоченных территориях, желудочная ферментация у животных, и разложение животных отходов производят CH₄, также, как и разложение городских твёрдых отходов. Метан также образуется при производстве и распределения естественного газа и нефти, при добыче угля и неполного сжигания ископаемого топлива. Важным источником метана является водная поверхность планеты. Хотя, по данным, скорость его образования в донных осадках относительно невелика: 6–300 мкг·м⁻²·сут⁻¹, но, учитывая площадь океанов, этот вклад оказывается весьма существенным. Выбросы метана в атмосферу увеличиваются в периоды вулканической активности за счёт выделения газогидратов, и при сильном загрязнении прибрежных вод.

Основными стоками метана являются окисление его в атмосфере до CO_2 и микробиологические процессы, происходящие в аэрированных почвах. Детальный анализ этих процессов выполнен в, отметим только, что в результате микробиологических механизмов стока выводится порядка $(1-3) \cdot 10^{13}$ г метана в год, что составляет 10 % от максимальных оценок фотохимического стока.

В целом, смещение природного баланса привело к тому, что глобальное содержание CH₄ увеличилось с 715 ppb (*англ.* parts per billion — частиц на миллиард) в доиндустриальный период до 1774 ppb в 2005 г., т.е. в 2,5 раза. При этом следует обратить внимание на то, что в атмосфере концентрация метана за последние 10 тыс. лет медленно увеличивалась с 580 до 730 ppb и за последние 250 лет увеличилась на 1000 ppb. В конце 1970-х и начале 1980-х гг. скорость увеличения концентрации метана в атмосфере была максимальной и составляла около 1 % в год. Однако с начала 1990-х гг. эта тенденция значительно уменьшилась, и за период 1999–2005 гг., в период действия Киотского протокола, увеличение концентрации CH₄ в атмосфере фактически прекратилось. Несмотря на замедление увеличения концентрации метана за последние 15 лет, наблюдается его значительная межгодовая изменчивость, причины которой недостаточно ясны. К 2019 г. средний уровень CH₄ составил 1877 ppb.

1.2.5 Закись азота (N₂O)

Несмотря на относительно низкую концентрацию, закись азота относится к малым газовым примесям, создающим заметный парниковый эффект. Причиной этого является то обстоятельство, что молекулы N₂Oимеют ряд сильных полос во всей области окна прозрачности 7–14 мкм и в силу химических особенностей обладают существенно большей (примерно в 300 раз) поглощательной способностью, чем диоксид углерода, который обычно принимают за эталон. Наиболее заметный вклад в интегральный парниковый эффект вносят полосы поглощения N₂O в области 5,4; 7,8 и 8,6 мкм. Концентрация N₂O, которая составляла 270 ppb и практически не увеличивалась за последние тысячелетия, в 2005 г. составила 319 ppb, то есть увеличилась на 18 % по сравнению с доиндустриальным периодом. Это увеличение происходило практически линейно и составило 0,8 ppb/год за последние несколько десятков лет. К 2019 г. средний уровень N₂O составил 332 ppb. Данные ледниковых кернов показывают, что за последние 2000 тыс. лет концентрация N₂O от естественных источников изменилась менее чем на

3 %. Естественными источниками поступления оксидов азота в атмосферу является подстилающая поверхность суши. Они образуются в почве в результате цикла химических превращений органического азота, как правило с участием аммиака (NH₃). В биоте азот присутствует в белках и нуклеиновых кислотах. При разложении органических материалов, катализируемых ферментами, синтезируется аммиак. В результате процессов денитрификации под действием анаэробных бактерий происходит выделение азота и оксидов азота. Химические процессы образования оксидов азота в воде принципиально не отличаются от их генерации в почве. Важно отметить, что одним из мощнейших природных источников оксидов азота являются молнии. По данным эффективность этого источника достигает от 7 до 30 Тг/год, что соизмеримо с его количеством, поступающим из океана.

Основной сток N₂OB атмосфере определяется комплексом химических процессов, связанных с образованием азотной и азотистой кислот и последующей генерацией мелкодисперсной фракции аэрозоля. В последнее время все больше фактов свидетельствуют о стоке соединений азота через механизмы взаимодействия с летучими органическими соединениями. Постоянным стоком N₂O, определяющим многолетний баланс его содержания в окружающем пространстве, является подстилающая поверхность. Соответствующие данные, систематизированные в, показывают, что глобальный сток оксидов азота в почвенный, лесной и океанический покров планеты близок к объёму их выбросов в атмосферу от перечисленных выше природных источников. Помимо всего прочего N₂O принадлежит важная роль в химии атмосферы, ибо этот газ является источником двуокиси азота NO₂, разрушающей стратосферный озон. В тропосфере NO₂ способствует образованию озона и в значительной степени определяет природный химический баланс.

Возникшее в последние десятилетия аномальное нарушение природного баланса содержания N₂O в окружающей среде обусловлено интенсификацией индустриальной деятельности, приводящей к тому, что антропогенные источники обеспечивают до 40 % N₂O, поступающего в атмосферу. Антропогенные источники N₂O включают в себя в первую очередь сельскохозяйственные почвы, в особенности при использовании синтетических и навозных удобрений, продукты сжигания автомобильного и ископаемого топлива, производства нейлона и азотной кислоты, результаты очистки сточных вод и сгорания мусора и биомассы. Кратно возрастает количество лесных пожаров вследствие несанкционированной деятельности населения. Отмечен существенный рост выбросов оксидов азота, обусловленных эксплуатацией морского флота и авиатранспорта.

1.2.6 Озон (О3)

Существенный вклад в парниковый эффект, сравнимый по порядку с вкладом метана, даёт тропосферный озон, который составляет лишь 10 % от общего содержания озона (ОСО) в столбе атмосферы. Озон при окислении выделяет большое количество тепла. Основная масса озона, содержащегося в основном в нижней стратосфере, поглощает основную часть коротковолнового ультрафиолетового излучения Солнца и вносит небольшой отрицательный вклад в парниковый эффект. ОСО определяет уровень биологически опасного ультрафиолетового излучения у земной поверхности.

Являясь парниковым газом, тропосферный озон оказывает как прямое влияние на климат через поглощение длинноволновой радиации Земли и коротковолновой радиации Солнца, так и косвенное через химические реакции, которые изменяют концентрации других парниковых газов, например, метана (тропосферный озон необходим для образования важного окислителя парниковых газов — радикала ОН). Парниковый эффект, создаваемый озоном, определяется полосами поглощения 9,6 и 14,2 мкм. Парниковое воздействие полосы 4,7 мкм невелико. Сильные полосы поглощения О₃ присутствуют в УФ-части спектра, проявляя себя в инверсии температуры в пределах стратосферного озонового слоя.

Озон образуется в основном выше 25 км за счёт фотохимических процессов и затем переносится в нижнюю стратосферу в результате процессов перемешивания. Здесь он приобретает важное метеорологическое значение как трассер, указывающий на атмосферную циркуляцию.

Многолетние наблюдения за общим содержанием озона (ОСО — интегральное количество в вертикальном столбе атмосферы) показали, что оно подвержено значительным пространственно-временным вариациям. В среднем его распределение имеет выраженную зависимость от широты и сезона. Содержание озона больше в умеренных и полярных широтах, чем в тропических с максимумом весной и минимумом осенью. Здесь же наблюдаются наибольшие вариации среднесуточных значений ОСО, особенно в зимне-весенний период.

Известно, что высотное распределение озона зависит от места и времени измерения, фотохимических процессов образования и распада, горизонтального и вертикального переноса, разрушения в тропосфере и т.п. Всё это обуславливает его большую изменчивость, при которой даже средняя сезонная концентрация озона в слое главного максимума может изменяться в 7–12 раз. Наибольшие суточные изменения концентрации озона наблюдаются в слое атмосферы ниже главного максимума, где они могут достигать 50–80 %. В нижней стратосфере отмечаются и самые большие величины стандартных отклонений содержания атмосферного озона. Несмотря на малые концентрации озона в приземном слое, его содержание здесь может существенно изменяться. Нередки случаи, когда объёмная концентрация озона вблизи земной поверхности изменялась за короткий срок в десятки раз.

1.2.7 Водяной пар (H₂O)

Обладая сильной и широкой колебательно-вращательной полосой в диапазоне спектра 6,3 мкм и рядом вращательных полос в районе 10 мкм, водяной пар поглощает большую часть теплового уходящего излучения поверхности Земли. Полосы поглощения 3,2 и 2,7 мкм, а также другие полосы, лежащие в более короткой части спектра, оказывают слабое тепловое воздействие, однако они заметно влияют на величину альбедо планеты и, следовательно, на температуру подстилающей поверхности.

1.2.8 Окись углерода (СО)

Играет важную роль в химии атмосферы и выступает как опосредованный парниковый газ, стимулируя фотохимические процессы вида ОН–СН₄–О₃. Это очень сильно связано с CH₄, так как окисление CH₄ является важным источником CO, а реакция с OH радикалами обеспечивает общий сток для CH₄ и CO. Источники поступления CO, как и других парниковых газов, разделяются на естественные и антропогенные. К естественным относятся: эмиссия подстилающей поверхности, то есть почвенный и растительный покров и океаническая среда. Источники CO включают сгорание ископаемых топлив, окисление метана и неметановых углеводородов и сжигание биомассы.

1.3 Физические основы количественной спектроскопии

Для восстановления концентрации атмосферных газов используются методы, основанные на поглощении излучения в различных областях электромагнитного спектра. Под спектральным анализом понимают физический метод анализа химического состава вещества, основанный на исследовании спектров испускания и поглощения атомов или молекул. Возможность определения состава вещества по его спектру основана на индивидуальности и аддитивности спектров химических элементов.

1.3.1 Внутримолекулярные колебания

Молекула представляет собой динамическую систему, состоящую из атомов, которые соединены в одно целое силами, обусловленными электронным взаимодействием квантового характера. В квантово-механической модели молекула является устойчивой системой ядер и электронов. В молекуле имеется четыре вида движений: поступательное $E_{\text{пост}}$ (перемещение молекулы как целого), электронное $E_{3Л}$ (движение электронов вокруг ядер), колебательное $E_{\text{кол}}$ (колебание ядер около их положений равновесия) и вращательное E_{BD} (вращение молекулы как целого в пространстве).

В адиабатическом приближении (при пренебрежении поступательной составляющей, как не квантующейся) энергия молекулы может быть представлена в виде суммы энергий отдельных видов движений:

$$E = E_{\rm SM} + E_{\rm KOM} + E_{\rm BD}.$$

Такое разделение возможно, поскольку величины энергий различаются на порядки, а именно: $E_{_{3Л}} >> E_{_{KOЛ}} >> E_{_{BP}}$ или, грубо $E_{_{3Л}} \sim 100E_{_{KOЛ}} \sim 100E_{_{BP}}$.

Согласно квантовым представлениям, молекула может находиться лишь в определённых энергетических состояниях. С хорошей степенью приближения можно квантовать сначала электронную энергию, затем колебательную энергию при заданной электронной энергии и, наконец, вращательную энергию при заданных $E_{3Л}$ и $E_{KOЛ}$. Энергию молекулы можно рассматривать как совокупность относительно далеко расположенных электронных уровней, к каждому из которых примыкают более близко размещённые колебательные уровни, окружённые в свою очередь часто расположенными вращательными уровнями.

У всякой молекулярной системы существуют определённые энергетические состояния, связанные с различными видами движения молекулы, её атомных ядер и электронов, т.е. может осуществляться квантовый переход между каким-то состоянием с собственным значением энергии E'' и некоторым другим состоянием с энергией E'. По закону сохранения энергии разность энергий этих двух состояний:

$$\Delta E = E' - E'' = h\nu.$$

Эта энергия может приобретаться или отдаваться, в частности за счёт поглощения или испускания кванта электромагнитного излучения hv ($h = 6,626 \cdot 10^{-34}$ Дж·с — постоянная Планка), энергия которого совпадает с ΔE . Таким образом, в спектре появляется полоса (линия) поглощения или испускания с частотой v (Гц).

При таком квантовом переходе могут изменяться все три части полной энергии молекулы, причём $\Delta E_{3\pi} >> \Delta E_{KOT} >> \Delta E_{BP}$, что приводит к тому, что электронные, колебательные и вращательные переходы лежат в различных областях спектра.

Спектр можно представить как последовательность квантов энергии электромагнитных колебаний, поглощённых, выделившихся или рассеянных при многочисленных переходах атомов или молекул из одних энергетических состояний в другие. Частота поглощаемого или испускаемого света определяется простым выражением:

$$\mathbf{v} = \frac{\Delta E}{h} = \frac{\Delta E_{_{\mathfrak{I}\mathfrak{I}}}}{h} + \frac{\Delta E_{_{\mathrm{KOII}}}}{h} + \frac{\Delta E_{_{\mathrm{BP}}}}{h}.$$

Электронно-колебательно-вращательные спектры (сокращённо — электронные), требующие наибольшей энергии, располагаются в ультрафиолетовой и видимой областях спектра. Отдельные полосы в этих спектрах соответствуют различным $\Delta E_{\text{кол}}$ при заданных $\Delta E_{\text{эл}}$, а отдельные линии в полосах — различным $\Delta E_{\text{вр}}$ при заданных $\Delta E_{\text{эл}}$ и $\Delta E_{\text{кол}}$.

Если молекула находится в основном электронном состоянии и электронное состояние не изменяется при взаимодействии с излучением, т.е. $\Delta E_{3\pi} = 0$, то возникают

колебательно-вращательные спектры (*сокр.* колебательные), лежащие в инфракрасной области спектра. Отдельные полосы в этих спектрах соответствуют $\Delta E_{\rm вр}$ при заданных $\Delta E_{\rm кол}$.

Если $\Delta E_{3,1} = 0$ и $\Delta E_{KO,1} = 0$ и изменяется только вращательная энергия ΔE_{Bp} , то появляются лишь вращательные спектры, лежащие в дальней инфракрасной и микроволновой областях и состоящие из отдельных линий, соответствующих различным ΔE_{Bp} . Отметим, что название «колебательные спектры» применяют как к инфракрасным колебательно-вращательным спектрам, так и к колебательно-вращательным спектрам комбинационного рассеяния.

Чтобы определить энергетические уровни молекул необходимо решить соответствующее уравнение Шредингера. С учётом того, что построение операторов энергии внутримолекулярного взаимодействия (входящих в уравнение) зачастую невозможно, данная задача не имеет решения. Поэтому, в качестве первого приближения, определение энергетических уровней проводится путём решения упрощённого варианта уравнения Шредингера, а именно, в виде робивронного уравнения (ротационновибрационно-электронного). Приведение строгих выкладок данного решения с рассмотрением всех возникающих сложностей, ограничений и привлекаемых приближений выходит далеко за рамки настоящего обзора. В связи с этим, рассмотрим лишь общие свойства получаемых решений.

Значения энергетических уровней, вызванных переходом электронов на более высокие энергетические уровни, для самого простого случая атома водорода (с зарядом ядра 1*e*), определяется выражением:

$$E_{\rm sn}(n) = -\frac{me^4}{8\pi\epsilon_0^2 h^2} \cdot \frac{1}{n^2} = -\frac{13,59 \, {\rm sB}}{n^2},$$

где *m* и *е* — масса и заряд электрона; ε_0 — электрическая постоянная; *n* — главное квантовое число, принимающее целые положительные значения *n* = 1, 2, 3, Наименьшее приращение энергетического состояния соответствует переходу с *n* = 1 к *n* = 2, что требует увеличения энергии на 10,2 эВ. Это типичная порция энергии, необходимая для электронных переходов.

И, как следует из уравнения, требуемая для такого перехода частота электромагнитного излучения составляет около 10¹⁵ Гц. Соответствующая длина волны составляет несколько десятых микрометра, так что мы можем найти линии поглощения, вызванные электронными переходами, в ультрафиолетовой и видимой областях электромагнитного спектра.

Колебательные уровни энергии можно найти путём решения задачи о движении ядер. По сравнению с перемещением электронов ядра движутся относительно медленно, так что с хорошим приближением их можно считать неподвижными. Тогда изменение положения электронов можно рассматривать при заданном положении ядер. Электронная энергия молекулы будет функцией расстояния между ядрами.

$$E_{\rm KOJI} = h v_0 (\upsilon + 1/2),$$

где $v_0 = \frac{1}{2\pi c} \sqrt{f \frac{m_1 + m_2}{m_1 m_2}}$ — частота основного колебания модели гармонического

осциллятора, образованного двумя атомами с массами m_1 и m_2 ; c — скорость света; f — силовая постоянная связи; v — колебательное квантовое число, которое может принимать только положительные целочисленные значения. При этом разрешённые значения Δv (в отличие от Δn , которое может принимать значения $\pm 1, \pm 2, ...$) равны ± 1 .

Применение указанной формулы для связи С–Н, с учётом значения силовой постоянной для одинарных связей и масс атомов водорода и углерода, частота,

соответствующая данному переходу, лежит в пределах 10¹³-10¹⁴ Гц, что соответствует длинам волн в тепловой инфракрасной области.

Для больших значений υ существует вероятность нарушения условия $\Delta \upsilon = \pm 1$ в силу несимметричности функции потенциальной энергии взаимодействия атомов относительно положения равновесия. Возникающие при этом колебания называются ангармоническими, что для реальных молекул приводит к появлению возможности переходов с $\Delta \upsilon = 2, 3, ...,$ сопровождающимися появлением дополнительных колебаний, называемых обертонами и приводящими появлением в спектрах дополнительных частот.

Энергия вращения жёсткой двухатомной молекулы, как показывает квантовая механика, также может принимать только дискретные значения. С классической точки зрения данная система может вращаться вокруг общего центра масс двух атомов. Момент инерции такой системы (двух атомов с массами m_1 и m_2 , рассоложенными на расстоянии d) определяется формулой:

$$I = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} d^2.$$

Энергия такого состояния выражается формулой:

$$E_{BP} = \frac{J(J+1)h^2}{8\pi^2 I},$$

где *J*— квантовое число, которое может принимать любое неотрицательное целое значение.

Вычисляя соответствующие значения для молекулы оксида углерода, получаем, что переход $J = 0 \rightarrow 1$ проявиться на частоте 116 ГГц, т.е. в микроволновой области. В общем случае, линии поглощения за счёт вращения лежат в микроволновой или дальней инфракрасной областях электромагнитного спектра между частотами $10^{10}-10^{12}$ Гц.

Замечание: существует следующее обозначение переходов между энергетическими уровнями. Переходы, для которых $\Delta J = 0$, формируют, так называемую, ветвь переходов Q, а переходы с $\Delta J = +1$ и $\Delta J = -1$ дают ветви R и P полосы спектра поглощения соответственно.

Молекула, состоящая из N атомов, обладает 3N степенями свободы — по три степени свободы на каждый атом. Вычитая из них внешние степени свободы, учитывающие перемещения и вращения молекулы как целого, получим число ее внутренних степеней свободы. Они-то и определяют колебания молекулы, так как при движениях, им соответствующих, не смещается центр тяжести молекулы и не происходит ее вращения как целого. Нелинейные молекулы имеют три поступательные и три вращательные степени свободы, а линейные — на одну вращательную степень свободы меньше. Таким образом, нелинейные молекулы обладают (3N-6) внутренними (колебательными) степенями свободы, а линейные — (3N-5). Каждой внутренней степени свободы молекулы соответствует своё нормальное (или собственное) колебание.

Существует два типа молекулярных колебаний: валентные колебания и деформационные колебания. Валентные колебания сопровождаются изменением длины связи вдоль её оси, при этом различают симметричные и асимметричные колебания. Деформационные колебания сопровождаются изменением угла между связями. То есть, длины связей и углы представляют средние позиции, вокруг которых колеблются атомы.

Примеры типов колебаний для молекулы H₂O и CO₂ приведены ниже (рисунки 1.3.1 и 1.3.2).

Следует учитывать, что некоторые типы колебаний не вызывают изменение дипольного момента молекулы, как в случае с симметричным растяжением CO₂ (или для многих симметричных двухатомных молекул). Это приводит к тому, что рассчитанные для этих колебаний частоты в спектре излучения отсутствуют.



Рисунок 1.3.2 — Типы колебаний молекулы СО₂

Нормальные колебания называются вырожденными, если они имеют одинаковые частоты, а следовательно, и колебательные энергии. Вырождение может быть случайным, обусловленным чисто динамическими соотношениями, и необходимым, когда оно связано с симметрией молекулы. Таким образом, число ожидаемых колебательных линий в спектре может отличаться от расчётного (3N-6) или 3N-5. В общем случае, при рассмотрении спектров молекул с большим числом атомов, следует оценивать степень их симметричности (низшая, средняя, высшая) с выделением количества осей симметрии и их порядка, количества плоскостей симметрии и т.п. Так, например, молекула бензола C_6H_6 имеет 30 колебательных степеней свободы, при этом лишь 10 из них являются невырожденными, а 20 — дважды вырожденными.

При колебаниях сложных молекул обычно наблюдается ряд закономерностей. Валентные колебания имеют большие частоты, чем деформационные. При этом частоты антисимметричных колебаний превосходят частоты симметричных. В каждом нормальном, колебании в той или иной степени одновременно участвуют многие связи и углы. Возможность разделения колебаний по форме на чисто валентные и чисто леформационные. является редким исключением встречается И лишь V высокосимметричных молекул. Изменение длин связей в валентных колебаниях обычно сопровождается изменением углов. Однако при возбуждении деформационных колебаний углов длины связей изменяются незначительно. Поэтому чисто валентные колебания встречаются очень редко, тогда как появление чисто деформационных колебаний имеет достаточно широкое распространение.

Каждой химической группе соответствуют определённые частоты (волновые числа) колебания, а, следовательно, и полосы поглощения в ИК спектре. Эти полосы называют характеристическими. В зависимости от положения группы в молекуле и непосредственного соседства с ними других групп в спектре наблюдаются некоторые изменения (наложение одних полос на другие, появление дополнительных полос с частотами, кратными основным частотам). Зная характеристические полосы (частоты) поглощения и спектр вещества, можно идентифицировать группы, входящие в состав вещества, а также и само вещество.

1.3.1.1 Интенсивность линий

Интенсивность линий в спектре определяется двумя факторами — количеством участвующих В процессе молекул (заселённость энергетических уровней) И вероятностями переходов между ними (коэффициенты Эйнштейна). Интенсивность полосы характеризует концентрацию данных химических групп, поглощающих свет с длиной волны λ , а также молекулярную структуру вещества. Так, наиболее интенсивными в спектре являются пики, отвечающие валентным колебаниям. Различают интенсивность в максимуме поглощения и интегральную интенсивность (площадь под кривой поглощения). Интегральная интенсивность очень интересная величина, характеризующая молекулярные процессы, однако интенсивность в максимуме проще измерить, и поэтому ею пользуются чаще. Полосы поглощения делят на сильные, средние и слабые в зависимости от высоты полосы в максимуме поглощения или от площади под контуром полосы.

1.3.1.2 Уширение спектральных линий

В отличие от рассмотренных примеров, когда молекулярные переходы происходили на одной частоте, в действительности все линии в спектре имеют некоторую ширину. За меру ширины принимают расстояние (в терминах частоты или волновых чисел), на котором интенсивность линии падает вдвое. Теории оценки ширины и формы линий сложны, поэтому ограничимся рассмотрением трёх, важнейших с точки зрения практики, причин уширения спектральных линий.

Радиационная естественная ширина уровня для свободной неподвижной молекулы определяется в соответствии с принципом неопределённости Гейзенберга и позволяет рассчитать минимальную ширину спектральной линии, но эта величина пренебрежимо мала по сравнению с влиянием других источников уширения. В пропорции к частоте линии данный эффект имеет самую большую величину при электронных переходах, но даже здесь он составляет единицы 10⁻⁸.

Гораздо большее значение имеет эффект теплового движения в газе. Обусловленная данным эффектом ширина линии Δv , которую обычно называют доплеровским уширением, выражается уравнением:

$$\frac{\Delta v}{v} = \sqrt{\frac{RT}{M_m c^2}},$$

где v — частота линии; R — газовая постоянная; T — абсолютная температура; M_m — масса одного газа в 1 моль; c — скорость света. Данная формула показывает, что с увеличением температуры спектральная линия уширяется и что для тяжёлых молекул линии более узкие, чем для лёгких. Относительное уширение, обусловленное данным эффектом, обычно составляет 10^{-6} .

Другим важным механизмом является уширение под действием давления, которое ещё называют ударным уширением. Молекулы газа сталкиваются одна с другой и с другими молекулами в атмосфере, и эти соударения возмущают состояние молекулы. Уширение под действием давления можно записать с помощью следующей приближенной формулы:

$$\Delta v \approx \frac{\sigma N_{\rm A} p}{\sqrt{M_m R T}},$$

где p — давление газа; σ — площадь сечения сталкивающихся молекул (оно равно примерно 10^{-19} м²); N_A — число Авогадро.

Ударное расширение линий поглощения может принимать значения, существенно превышающие первые два типа уширения. Так, например, для водяного пара на уровне

моря доплеровское уширение линии поглощения 22,5 ГГц составляет порядка $1,2 \cdot 10^{-6}$. Оценка ударного расширения для тех же условий составляет $4,1 \cdot 10^2$ (примерно 0,9 ГГц, или 0,03 см⁻¹).

Измерение ширины и формы линий даёт важную информацию о процессах в молекуле. С другой стороны, конечная ширина линий мешает в расшифровке деталей спектра.

1.3.1.3 Спектры наиболее значимых парниковых газов

Спектр поглощения водяного пара. Равновесные положения ядер в молекуле воды образуют равнобедренный треугольник, в вершине которого находится атом кислорода. Электронные переходы в молекуле H₂O приходятся на область с длинами волн меньше 186 нм. Моменты инерции молекулы относительно трёх главных осей вращения сильно различаются, обусловливая тем самым хаотичность и сложность структуры вращательного и колебательно-вращательного спектров. Кроме трёх основных колебательно-вращательных полос, в колебательно-вращательном спектре H₂O имеется много полос обертонов, составных частот, горячих полос. Колебательно-вращательный спектр водяного пара занимает всю видимую область, близкую и среднюю инфракрасную области примерно до частот 1000 см⁻¹ при этом в видимой области находятся весьма слабые полосы поглощения составных частот, в близкой инфракрасной более сильные полосы обертонов и составных частот. Наиболее интенсивной и широкой полосой поглощения является основная полоса v_2 , центр которой располагается около длины волны 6,25 мкм. В вертикальном столбе атмосферы при средней влажности эта полоса полностью поглощает излучение Солнца в диапазоне длин волн 5,5–7,5 мкм. Центр следующей по интенсивности полосы v₃ располагается около длины волны 2,66 мкм. Полосы υ₁ (центр около 2,74 мкм) и 2υ₂ (центр около 3,17 мкм) вместе с полосой υ₃ обусловливает полное поглощение солнечного излучения в вертикальном столбе атмосферы на средних широтах и в спектральном районе 2,6–3,3 мкм. Другие колебательно-вращательные полосы водяного пара, группируясь, образуют в спектре полосы поглощения с центрами около длин волн 1,87; 1,38; 1,1; 0,94; 0,81 мкм и серию слабых полос в видимой области спектра. Большие значения дипольных моментов у молекулы H₂O и её изотопов являются причиной интенсивного вращательного спектра, занимающего весьма широкую спектральную область примерно от длин волн 8 мкм до нескольких сантиметров. Начиная от длин волн свыше 20 мкм чисто вращательный спектр поглощения водяного пара обусловливает полное поглощение солнечного излучения вертикальным столбом атмосферы. С помощью высокочувствительных лазерных спектрометров проведены исследования высоких колебательных состояний H₂O в видимой и ближней ИК-области спектра. В области спектра υ > 8000 см⁻¹, где находятся слабые линии поглощения, определяемые переходами с изменением колебательного квантового числа >3, зарегистрировано несколько тысяч линий поглощения H₂O и её изотопов, обнаружено и интерпретировано большое количество неизвестных ранее полос поглошения.

Современные базы данных спектра поглощения H_2O содержат 142 045 линий в диапазоне 0–25 700 см⁻¹ (см, например, <u>https://lweb.cfa.harvard.edu/hitran/vibrational.html</u>).

Спектр поглощения углекислого газа. Линейная симметричная молекула CO₂ имеет четыре основные частоты колебания. Вследствие симметрии молекулы при основном колебании v_1 дипольный момент молекулы не изменяется, поэтому эта частота оптически неактивна и в спектре поглощения не проявляется. Основная колебательно-вращательная полоса v_2 с центром около 15 мкм вместе с 14 горячими полосами занимает довольно широкий интервал спектра, примерно 12–20 мкм. В центральной части этой полосы (13,5– 16,5 мкм) вертикальный столб атмосферы полностью поглощает солнечное излучение. Вся эта совокупность полос в литературе часто называется полосой 15 мкм. Эта область спектра весьма богата линиями поглощения. В некоторых работах при расчётах коэффициентов поглощения в районе полосы 15 мкм учитывается более 2000 линий. Основная колебательно-вращательная полоса v_3 обусловливает очень сильное поглощение в атмосфере. Здесь же размещается составная полоса $v_1 + v_3 - 2 v_2$. Вместе эти полосы образуют полосу, называемую в литературе полосой поглощения 4,3 мкм. Интенсивность е` настолько велика, что солнечное излучение полностью поглощается в интервале длин волн примерно от 4,2 до 4,4 мкм в вертикальном столбе атмосферы до высоты 20 км. Кроме рассмотренных полос 15 и 4,3 мкм, углекислый газ имеет совокупности полос, группирующихся в комплексные полосы поглощения с центрами в порядке убывания длин волн, а не в порядке изменения интенсивности: 10,4; 9,4; 5,2; 4,8; 2,7; 2,0; 1,6; 1,4 мкм и ряд более слабых в районе 1,24–0,78 мкм. Ширина всех этих полос около 0,1 мкм.

Современные базы данных спектра поглощения CO_2 содержат 169 292 линий в диапазоне 345–12 785 см⁻¹.

1.3.1.4 Спектр поглощения метана

Равновесная конфигурация молекулы метана CH₄ представляет собой тетраэдр. Молекула относится к типу сферического волчка. Её электронные спектры находятся в далёкой ультрафиолетовой области (длины волн короче 145 нм). Высокая степень симметрии молекулы обусловливает сильное вырождение колебательной энергии. Из девяти основных частот колебаний одна является дважды вырожденной и две трижды вырожденными. Таким образом, у молекулы оказывается всего четыре основные частоты колебаний, различающиеся по величине. В спектре поглощения метана имеются две очень интенсивные полосы $v_3 = 3020,3 \text{ см}^{-1}$ (3,3 мкм) и $v_4 = 1306,2 \text{ см}^{-1}$ (7,7 мкм) и более слабая полоса v_2 , появляющаяся в результате резонансного колебательно-вращательного взаимодействия с полосой v_4 . В ряде теоретических и экспериментальных работ указывается, что в результате колебательно-вращательного взаимодействия в молекуле метана появляется слабый дипольный момент, обусловливающий соответственно слабый чисто вращательный спектр.

Современные базы данных спектра поглощения CH₄ содержат 336 830 линий в диапазоне 0-11502 см⁻¹.

1.3.1.5 Спектр поглощения двуокиси азота

Молекула закиси азота N₂O представляет собой линейную асимметричную молекулу, сильные электронные полосы которой расположены в далёкой ультрафиолетовой области. Все три основные частоты колебания: $v_1 = 1285,6 \text{ см}^{-1}$ (7,8 мкм); $v_2 = 588,8 \text{ см}^{-1}$ (17,0 мкм) — дважды вырожденная и $v_3 = 2223,5 \text{ см}^{-1}$ (4,6 мкм) — активны в инфракрасных спектрах поглощения. Кроме основных частот, колебаний молекула N₂O имеет большое количество обертонов, составных частот и горячих частот поглощения. Большинство этих полос имеют малую интенсивность, тем не менее, как и в других подобных случаях, их роль в поглощении излучения каждый раз должна рассматриваться отдельно.

Современные базы данных спектра поглощения N_2 Осодержат 33 074 линий в диапазоне 0–7797 см⁻¹.

1.3.1.6 Спектр поглощения окиси углерода

Спектр поглощения этой молекулы изучен достаточно подробно. Электронные переходы приходятся на область длин волн короче 1 мкм. Основная колебательно-вращательная полоса поглощения молекулы ${}^{12}C^{16}O$ находится около 2143,2 см⁻¹ (4,67 мкм). Основной обертон имеет центр около 4260 см⁻¹. Расчётные значения центров полос поглощения следующие (см⁻¹): 4260,0646 (0-2); 4207,1664 (1-3); 4154,4056 (2-4); 4101,7820 (3-5);

4049,2958 (4-6); 3996,9466 (5-7); 6350,4404 (0-3); 8414,4708 (0-4). Чисто вращательный спектр молекулы СО расположен в далекой инфракрасной и микроволновой областях.

Современные базы данных спектра поглощения СО содержат порядка 1020 линий в диапазоне 3–8465 см⁻¹.



Рисунок 1.3.1.7.1 — Колебательно-вращательные спектры основных парниковых газов. Построены на основе базы данных HITRAN

1.3.1.7 Спектр поглощения озона

Электронные переходы в молекуле озона создают полосы Хартли и Хюггенса, расположенные в ультрафиолетовой области спектра (длины волн короче 340 нм) и полосы Шаппюи в районе 450-740 нм. Максимальное значение коэффициентов поглощения в полосах Шаппюи обусловливает ослабление солнечной радиации на 7 % при атмосферной массе, равной 2 (рисунок 1.3.1.7.1). Все три основные колебательновращательные полосы молекулы О3 активны в поглощении и расположены в инфракрасной области спектра. Полоса v₁ перекрывается с полосой v₃, чем вызывается сильное взаимодействие между соответствующими уровнями энергии. По интенсивности полоса v₁ значительно слабее полосы v₃. Полоса v₂ перекрывается с центральной частью сильной полосы поглощения СО₂ с центром около 15 мкм. Обертоны и составные частоты колебаний создают совокупности колебательно-вращательных полос, которые, группируясь, образуют сложные полосы поглощения с центрами около 5,75; 4,75; 3,95; 3,36; 2,7 мкм. Ширина каждой из этих полос равна примерно 0,1 мкм. Наиболее интенсивной из них является полоса 4,75 мкм. При рассмотрении вопроса о поглощении солнечной радиации атмосферным озоном принимается во внимание только поглощение полосы 9.6 мкм, расположенной в центре длинноволнового окна прозрачности атмосферы 8-3 мкм. Ее центральная часть шириной около 1 мкм в вертикальном столбе атмосферы поглощает примерно половину солнечного излучения. При количественной оценке поглощения лазерного излучения в атмосфере может оказаться необходимым учёт поглощения любой из полос О₃, так как все полосы поглощения чрезвычайно богаты линиями. Интенсивный чисто вращательный спектр поглощения О3 расположен в микроволновой области спектра.

Современные базы данных спектра поглощения O_3 содержат порядка 261 886 линий в диапазоне 0–6997 см⁻¹.

1.3.1.8 Основные закономерности количественной спектрометрии

Для восстановления концентрации атмосферных газов используются методы, основанные на поглощении излучения в инфракрасной и ультрафиолетовой областях электромагнитного спектра.

Взаимодействие электромагнитного излучения с веществом сопровождается уменьшением энергии световой волны, т.е. поглощением света. Закон поглощения света в дифференциальной форме обычно записывают в виде:

$$-dI = k_{\rm D}Idx.$$

Он показывает, что ослабление света после прохождения достаточно тонкого слоя вещества пропорционально толщине этого слоя dx и интенсивности света *I*. Дифференциальный коэффициент поглощения k_v здесь характеризует поглощение света данной частоты v слоем вещества единичной толщины. Относительное количество поглощённого средой света не зависит от количества падающего излучения и, для случая, когда в условиях исследования различные молекулы не взаимодействуют друг с другом, описывается законом Бугера-Ламберта:

$$I = I_0 \mathrm{e}^{-k_{\mathrm{u}}d},$$

где I_0 — интенсивности падающей на вещество радиации; I — интенсивность прошедшей через слой d радиации. Определяя опытным путём значения I_0 , I и d, можно получить значение дифференциального коэффициента поглощения $k_0 = \frac{1}{d} \ln \frac{I_0}{I}$, где $\ln \frac{I_0}{I} = D$ — оптическая плотность вещества.

Если исследуется не индивидуальное вещество, а раствор поглощающего вещества в прозрачном растворителе, то необходимо учитывать его концентрацию *с*. В этом случае закон поглощения записываются в виде:

$$I = I_0 \mathrm{e}^{-k_{\mathrm{o}} c d},$$

и называется законом Бугера-Ламберта-Беера. При этом оптическая плотность равна $D = \ln \frac{I_0}{I} = k_0 cd$, а $k_0 = \frac{D}{cd}$ и, в случае измерения концентрации в моль на литр, а толщины поглощающего слоя в сантиметрах, обозначается є и называется коэффициентом молярной экстинкции (коэффициентом молярного погашения).

Этот закон хорошо выполняется для не слишком концентрированных растворов, коэффициент поглощения которых не зависит от концентрации вещества c. Также требуется выполнение условий постоянства состава, неизменности поглощающих частиц в растворе. Постоянство температуры в слое и отсутствие флуоресценции. Для индивидуальных веществ c = 1 и закон Бугера-Ламберта-Беера переходит в закон Бугера-Ламберта.

Закон Бугера-Ламберта-Беера является основой всех методов количественного спектрального анализа.

Оптическая плотность смеси *m* соединений, не вступающих в химическое взаимодействие друг с другом, равна сумме парциальных оптических плотностей, отвечающих поглощению света каждым из соединений:

$$D = d(\varepsilon_1 c_1 + \varepsilon_2 c_2 + \dots + \varepsilon_m c_m).$$

Данное уравнение описывает принцип аддитивности оптических плотностей и называется уравнением Фигордта. На использовании принципа аддитивности основаны практически все методы количественного спектрометрического анализа многокомпонентных смесей.

1.3.1.9 Уравнение переноса излучения в атмосфере

В случае изотропного излучения все потоки инфракрасной радиации можно свести к двум потокам: восходящему, объединяющему все потоки в верхней полусфере, и нисходящему, объединяющему все потоки в нижней полусфере (рисунок 1.3.4). Для элементарного слоя атмосферы, заключённого между уровнями z и z + dz, поток монохроматического ИК-излучения с частотой v, поступающий на его нижнюю границу, обозначим W_v . Тогда изменение этого потока при распространении через слой dz можно записать следующим образом:

$$dW_{v} = -K_{v}W_{v}dz + K_{v}B_{v}dz,$$

где K_v — коэффициент поглощения компонентами атмосферы, который можно выразить в виде суммы $K_v = K_v^{gas} + K_v^{abs} + K_v^{sca}$, здесь K_v^{gas} коэффициент поглощения газовыми составляющих атмосферы, K_v^{abs} и K_v^{sca} — коэффициенты поглощения и рассеяния аэрозольными составляющими соответственно; B_v — спектральная плотность потока лучистой энергии, излучаемого единичной поверхностью чёрного тела.

Подобный учёт аэрозольной составляющей атмосферы возможен только для очень слабого аэрозоля. Для существенной аэрозольной составляющей необходимо строить функцию источника с учётом индикатрисы рассеяния и распределений по размерам аэрозольных частиц.

В представленном уравнении первое слагаемое в правой части отвечает за ослабление потока при распространении через элементарный слой, а второе за увеличение потока за счет собственного излучения слоя. Уравнение для нисходящего потока имеет

такой же вид, если изменить на противоположное направление оси Z. Разумеется, для случаев нисходящего и восходящего потоков, решение уравнения нужно искать с различными начальными условиями. Начальное условие для случая нисходящего излучения $W_v(z = H) = 0$ означает, что на верхней границе атмосферы (z = H) ИК радиации случая же восходящей радиации начальное условие нет. Для имеет вил $W_{\nu}^{up}(z=0) = \varepsilon_{\nu}B_{\nu}(T=T_0) + (1-\varepsilon_{\nu})W_{\nu}^{down}(z=0),$ где ε_{ν} — излучательная способность поверхности Земли; T_0 — температура поверхности и $W_v^{down}(z=0)$ — поток ИК-радиации излучаемый атмосферой вниз на уровне поверхности. Первое слагаемое отвечает за излучение земной поверхности как нечёрного излучателя, а второе — за отражение от поверхности излучаемой вниз ИК радиации. Таким образом, при вычислении потока вверх необходимо уже иметь предвычисленный спектр излучения вниз. В случае $\varepsilon_v \approx 1$ отражением от земной поверхности можно пренебречь. Вместо потоков радиации удобнее использовать спектральные плотности яркости, так как именно эту величину измеряют спектрометры.



Рисунок 1.3.1.9.1 — Источники излучения, регистрируемые спутниковыми датчиками (см. пояснения в тексте)

Используя начальные условия, можно записать выражения для спектральной плотности яркости атмосферы в ИК диапазоне при наблюдении в зенит:

$$W_{\nu}^{down} = \int_{0}^{H} K_{\nu} B_{\nu} \exp\left(-\int_{0}^{h} K_{\nu} dh'\right) dh.$$

При наблюдении атмосферы в надир:

$$W_{\nu}^{up} = \varepsilon_{\nu} B_{\nu} \left(T_0 \right) \exp \left(-\int_0^H K_{\nu} dh \right) + \left(1 - \varepsilon_{\nu} \right) W_{\nu}^{down} \exp \left(-\int_0^H K_{\nu} dh \right) + \int_0^H K_{\nu} B_{\nu} \exp \left(-\int_h^H K_{\nu} dh' \right) dh.$$

Коэффициенты K_v^{gas} , K_v^{abs} , K_v^{sca} являются функциями высоты. Коэффициент поглощения K_v^{gas} определяется высотными профилями температуры и концентрации поглощающих ИК радиацию атмосферных газов. Коэффициенты K_v^{abs} и K_v^{sca} определяются высотными профилями и типом атмосферного аэрозоля. Функция чёрного тела B_v также является функцией высоты зависящей от высотного профиля температуры. Коэффициент поглощения газов вычисляется путём суммирования по всем спектральным линиям:

$$K^{gas}(v,h) = K_v^* + N_0(h) \sum_{i=1}^{N_g} n_i(h) \sum_j S_{ij}(T(h)) \Phi_{ij}(v_{ij} - v, T(h), p(h)),$$

где: p(h), T(h), $N_0(h) = \frac{p(h)}{k_b T(h)}$ — давление, температура и концентрация молекул в

атмосфере на высоте *h*; k_b — постоянная Больцмана; n_i — относительная концентрация *i*-го газа; S_{ij} — интенсивность *j*-й линии *i*-го газа; v_{ij} — волновое число центра линии, см⁻¹; Φ_{ij} — профиль спектральной линии. Коэффициент поглощения $K_v^* = K_v^{cont} + K_v^{mix}$ учитывает такие дополнительные эффекты как континуальное поглощение парами воды и смешение линий.

Для коэффициентов K_v^{abs} и K_v^{sca} существуют готовые базы данных модельных высотные профили коэффициентов аэрозольного поглощения и рассеяния, рассчитанные для различных волновых чисел.

Спектральная плотность яркости чёрного тела в удобном для практического применения виде выражается следующим образом:

$$B(v,T) = \frac{1}{\pi} \cdot \frac{3,74177 \cdot 10^{-8} v^3}{\exp\left(\frac{1,43888v}{T}\right) - 1} \dots$$

Представленные соотношения справедливы для описания спектральных зависимостей с высоким разрешением (по частоте). Для оценки спектров, измеренные реальными спектрометрами необходимо учесть ещё инструментальный профиль конкретного спектрометра. Модельный спектр определяется как интегральная свертка модельного спектра высокого разрешения и аппаратного контура спектрометра:

$$W^{low}(\mathbf{v}) = \int_{-\infty}^{+\infty} W^{high}(\mathbf{v}') F_{\rm ILS}(\mathbf{v}-\mathbf{v}') d\mathbf{v}',$$

где W^{high} и W^{low} — спектры высокого и низкого разрешения, а F_{ILS} — инструментальный контур спектрометра, который должен удовлетворять условию нормировки $\int_{+\infty}^{+\infty} F_{ILS}(v) dv = 1.$

К основным компонентам излучения относятся следующие: Іо — солнечное излучение, поступающее на верхнюю границу атмосферы; I₁ —излучение, рассеянное газами и аэрозолями в атмосфере. Этот компонент зависит от плотности воздуха, количества газовых примесей и аэрозолей на разных высотах и представляет собой механизм потерь для источника излучения. Рассеянное излучение I2 от газов и аэрозолей, рассеянных в поле зрения спутника (эта составляющая и I₁ суммируются с полным рассеянием в уравнении переноса излучения); I_3 — излучение, прошедшее через атмосферу к поверхности. Напрямую связанный с законом Бера, коэффициент пропускания даёт оптическую длину пути. Такой прибор как солнечный фотометр, может выполнять прямые измерения величины I₃ у поверхности Земли; I₄ — отражённое излучение от поверхности Земли. Этот компонент в значительной степени является источником фонового излучения, используемого спутниками наблюдения Земли для сравнения с I₂ для детектирования аэрозолей и газов. Этот компонент даёт информацию о характеристиках поверхности и представляет интерес для картографирования растительности, цветности океана и т.д. Для исследования атмосферы это шум. Спутник фиксирует компоненту I_5 , приходящую на верхнюю границу атмосферы. Она ослабляется рассеянием и поглощением в интересующем слое, это значение можно использовать для поиска по ярким рассеивающим поверхностям, но, как правило, это фоновый член, который должен быть небольшим, чтобы можно было обнаружить I_2 . I_6 — восходящее ИК-излучение от поверхности, определяемое законом Планка. Это крупнейший источник радиационного фона для ИК-каналов наблюдения на космических платформах. Этот компонент достаточно велик для большинства длин волн ИК, за исключением центра линий сильного поглощения, и он должен быть известен, а коэффициент излучения поверхности должен быть известен при обработке данных ИК. I_7 — ИК-излучение, приходящее на верхнюю границу атмосферы. Используемые для измерения концентрации газа и воды, уровни этого излучения строго структурированы и зависят от высоты из-за сильно меняющихся атмосферных температур. Определение этого компонента позволяет детектировать облачность, поскольку температура высоких тонких облаков (перистых) намного ниже, чем подстилающая поверхность, облака и аэрозоли под ними.

1.4 Наиболее типичные способы космической спектрометрии атмосферы

Длительное развитие и успехи прикладной атмосферной инфракрасной спектроскопии подготовили хорошую базу для разработки активных и пассивных методов дистанционного зондирования параметров атмосферы.

Технологии дистанционного зондирования атмосферы с целью мониторинга метеорологических параметров и загрязнения атмосферы разрабатываются уже около 40 лет. Основу космической системы мониторинга атмосферных газов составляют современные инфракрасные спектрометры высокого разрешения, которые можно классифицировать по геометрии зондирования. Достаточно распространённым методом является термическое зондирование атмосферы в надир и на наклонных трассах. Данная геометрия позволяет осуществлять зондирование в любое время суток и имеет наиболее широкий высотный диапазон измерений, включающий в себя нижнюю тропосферу и подстилающую поверхность. До недавнего времени термическое зондирование в надир основывалось на данных, получаемых многоканальными спектрорадиометрами, регистрирующими тепловое излучение атмосферы в нескольких или нескольких десятках спектральных интервалах. С появлением спутниковых Фурье спектрометров относительно высокого спектрального разрешения (до 0,1 см⁻¹) с десятками тысяч спектральных каналов в тепловой инфракрасной области существенно повысилась информативность спектров атмосферы, измеряемых со спутников. Произошли качественные изменения в методах обработки и интерпретации спутниковых данных. Обратная задача по определению параметров атмосферы из тепловых спектров высокого разрешения стала существенно переопределённой (число уравнений значительно больше числа неизвестных), с одной стороны. А создание и совершенствование достаточно подробных баз данных спектроскопической информации по атмосферным газам (HITRAN, GEISA), накопление априорной информации по профилям температуры и газовым и аэрозольным составляющим атмосферы в таких базах как TIGR и информационных системах как British Atmospheric Center (http://badc.nerc.ac.uk), способствовало Data прогрессу детектировании важных малых газовых составляющих в атмосфере, таких как H₂O, CH₄, CO, O₃, CO₂ и даже их изотопомеров в атмосфере, в частности HDO, с другой стороны.

Для определения параметров атмосферы используются спектры яркости уходящего теплового излучения, измеряемые со спутника в геометриях надир и по наклонным трассам, а также спектры пропускания атмосферы, измеряемые с Земли в геометрии наблюдения на Солнце. Также активно развиваются лимбовые методы зондирования атмосферы.

Схематичное изображение описанных геометрий сканирования представлено на рисунке 1.4.1.



Рисунок 1.4.1 — Распространённые геометрии наблюдения инфракрасных спектров атмосферы

1.4.1 Модели переноса для различной геометрии наблюдений

Наблюдение с поверхности Земли в зенит:

$$W_{v}^{down} = \int_{0}^{H} K_{v} B_{v} \exp\left[-\int_{0}^{h} K_{v} dh'\right] dh.$$

Наблюдение со спутника в надир:

$$W_{\nu}^{up} = \varepsilon_{\nu} B_{\nu}(T_s) \exp\left[-\int_{0}^{H} K_{\nu} dh\right] + (1 - \varepsilon_{\nu}) W_{\nu}^{down} \exp\left[-\int_{0}^{H} K_{\nu} dh\right] + \int_{0}^{H} K_{\nu} B_{\nu} \exp\left[-\int_{h}^{H} K_{\nu} dh'\right] dh,$$

где $W_{\nu}^{down} = \int_{0}^{H} K_{\nu} B_{\nu} \exp\left[-\int_{0}^{h} K_{\nu} dh'\right] dh.$

Наблюдение со спутника под углом:

$$W_{v}^{up} = \varepsilon_{v} B_{v}(T_{s}) \exp\left(-\int_{0}^{H} K_{v} \sec \theta \, dh\right) + (1 - \varepsilon_{v}) W_{v}^{down} \exp\left(-\int_{0}^{H} K_{v} \sec \theta \, dh\right) + \\ + \int_{0}^{H} K_{v} B_{v} \exp\left[-\int_{h}^{H} K_{v} \sec \theta \, dh'\right] \sec \theta \, dh,$$

или

$$W_{\nu}^{up} = \left(\varepsilon_{\nu}B_{\nu}(T_s) + (1 - \varepsilon_{\nu})W_{\nu}^{down}\right)P_{\nu} + \int_{0}^{H}K_{\nu}B_{\nu}\exp\left[-\int_{h}^{H}K_{\nu}\sec\theta dh'\right]\sec\theta dh,$$

где

$$W_{\nu}^{down} = \int_{0}^{H} K_{\nu} B_{\nu} exp \left[-\int_{0}^{h} K_{\nu} \sec \theta \, dh \right] \sec \theta \, dh, \quad P_{\nu} = \exp(-\tau_{\nu}), \quad \tau_{\nu} = \int_{0}^{H} K_{\nu} \sec \theta \, dh.$$

В приведённых выражениях: ε_v и T_s — излучательная способность и температура поверхности; H — верхняя граница атмосферы; W_v^{down} — спектральная плотность яркости излучения атмосферы «вниз»; W_v^{up} спектральная плотность яркости уходящего с Земли излучения; B_v — функция Планка для излучения чёрного тела; K_v — коэффициент

поглощения компонентами атмосферы; θ — зенитный угол наблюдения; τ_ν и P_ν — оптическая толщина и функция пропускания атмосферы.

Соотношения для лимбовых измерений в большей степени повторяют аналогичные выражения для наблюдений в зенит, однако усложняются за счёт необходимости учёта кривизны поверхности Земли (рисунок 1.4.2) и, соответственно, различных атмосферных слоёв и в данном обзоре опущены.



Рисунок 1.4.2 — К вопросу о принципах проведения лимбовых измерений

1.5 Обратные задачи инфракрасной атмосферной спектрометрии высокого спектрального разрешения

Для определения искомых параметров атмосферы из ее спектров теплового излучения необходимо решать обратную задачу. Согласно общему математическому подходу прямую и обратную задачи можно записать в виде:

$$\mathbf{y} = F(x,b) + \varepsilon_{y}, \ \mathbf{x} = F^{-1}(y,b) + \varepsilon_{x},$$

где **у** — вектор *m* величин, измеряемых спектрометром; **х** — вектор *n* искомых атмосферных параметров, подлежащих определению; *b* — параметры модели, считаемые известными; *F* — прямая модель (в данном случае уравнение переноса теплового излучения в атмосфере); F^{-1} — обратная модель, которая в общем случае может быть заданной лишь алгоритмически.

В качестве вектора параметров *b* могут выступать высотные профили тех атмосферных параметров, которые в данном восстановлении считаются известными. Например, профили температуры и водяного пара при восстановлении следовых парниковых газов.

Разработанные в литературе методы решения обратной задачи рассматривают данную задачу как некорректную и применяют различные методы регуляризации, использующие дополнительную априорную информацию о возможном решении. Многообразие разработанных методов обращения условно можно свести к двум типам: а) метод статистической регуляризации и б) методы регуляризации по Тихонову. Методы решения задач атмосферной оптики, описанные в литературе, как правило, основываются на следующей линеаризации прямой модели:

$$\delta y = y - y_0 = \mathbf{A}(x - x_0) + \varepsilon_y = \mathbf{A}\delta x + \varepsilon_y$$

где y_0 — спектр, соответствующий опорному (начальному) состоянию x_0 ; **А** — матрица производных вида $\partial F_i / \partial x_i$.

Статистический подход к решению обратной задачи требует знания ковариационной матрицы *S_x*, построенной по выборке профилей известных заранее,

например, по результатам радиозондовых измерений. Требуется также знание корреляционной матрицы ошибки измерения спектра S_{ε} , которая является частью спецификации спектрометра. Основой статистического оценивания в задачах зондирования атмосферы является метод максимального правдоподобия, который заключается в поиске такой оценки вектора **x**, которая доставляет максимум следующей функции правдоподобия

$$l(x) = \ln\left(P(x|y)\right),$$

где P(x|y) представляет собой условную плотность вероятности наблюдений. Для нормального закона распределения в пространстве *N* измерений плотность распределения имеет вид:

$$P(x) = (2\pi)^{-N/2} \left| S_x \right|^{-1/2} \exp\left\{ -\frac{1}{2} (x - m_x)^T \mathbf{S}_x^{-1} (x - m_x) \right\},\$$

где m_x — математическое ожидание вектора **x**, вычисленное по той же выборке профилей, что и корреляционная матрица S_x . Полагая, что и вектора состояний и ошибки измерения распределены по нормальному закону, можно записать следующую функцию правдоподобия:

$$l(x) = -\frac{1}{2} \left\{ \left[y - F(x) \right]^T S_{\varepsilon}^{-1} [y - F(x)] + \left[[x - m_x]^T S_x^{-1} [x - m_x] + \text{const} \right\} \right\}.$$

Если в последнее выражение подставить линеаризованную модель, то оно примет вид:

$$l(x) = -\frac{1}{2} \Big\{ [\delta y - A \delta x]^T S_{\varepsilon}^{-1} [\delta y - A \delta x] + \delta x^T S_x^{-1} \delta x + \text{const} \Big\}.$$

Дифференцируя его по δx (т.е. применяя операцию градиент) и приравнивая полученное нулевому вектору, можно получить обобщенное статистическое решение для линейного случая, которое в литературе часто называется формулой максимального правдоподобия:

$$\delta x = S_x A^T \left(A S_x A^T + S_\varepsilon \right)^{-1} \delta y.$$

Это выражение получено ещё и с учётом того, что входящие в него матрицы симметричны. Размерность матрицы, которую требуется обращать, равна $m \times m$, где m — число спектральных каналов. В случае спектров высокого разрешения это число намного больше размерности вектора состояния атмосферы. Поэтому, чтобы снизить размерность матрицы, которую требуется обращать, используется матричное тождество

$$S_{x}A^{T}\left(AS_{x}A^{T}+S_{\varepsilon}\right)^{-1}=\left(A^{T}S_{\varepsilon}^{-1}A+S_{x}^{-1}\right)^{-1}A^{T}S_{\varepsilon}^{-1},$$

которое позволяет обращать матрицу размера $n \times n$, где n — размерность вектора **х**.

Для случая нелинейной прямой модели, статистическое решение сводится к минимизации следующей целевой функции:

$$J(x) = [y - F(x)]^T S_{\varepsilon}^{-1} [y - F(x)] + [x - m_x]^T S_x^{-1} [x - m_x].$$

Для минимизации этой функции используются обычно либо метод Ньютона, либо метод Левенберга-Марквардта, который представляет собой сочетание метода Ньютона и метода градиентного спуска. Метод Ньютона описывается следующей итерационной формулой:

$$x_{n+1} = x_n - \left[\nabla^2 J(x_n)\right]^{-1} \nabla J(x_n),$$

где $\nabla^2 J(x)$ — гессиан целевой функции, вычисление которого в общем случае требует вычисления вторых производных прямой модели $F(\mathbf{x})$, что является, в вычислительном плане, трудоёмкой процедурой. В работе Ма нелинейный алгоритм минимизации применяется все-таки для линеаризованной прямой модели и поэтому при вычислении гессиана целевой функции вторыми производными прямой модели пренебрегается. Метод Ньютона характеризуется тем, что, будучи применённым к строго выпуклой квадратичной целевой функции (что означает строго линейную прямую модель), сходится за одну единственную итерацию. Однако данный метод не обладает свойством глобальной сходимости, т.е. он может не сходиться вообще, если начальное приближение \mathbf{x}_0 слишком далеко от истинного состояния атмосферы. Метод Левенберга-Марквардта, обладающий лучшей сходимостью в глобальном смысле, имеет следующую итерационную формулу:

$$x_{n+1} = x_n - \left[\nabla^2 J(x_n) + \gamma \mathbf{I}\right]^{-1} \nabla J(x_n),$$

где I — единичная матрица; у — множитель, определяемый адаптивно в процессе поиска минимума.

Размерность вектора состояния **x** равна $N_p \times N_h + 1$, где N_p — число атмосферных параметров, высотные профиля которых надо восстановить (температура является обязательным параметром), N_h — число узлов высотной сетки, единица отвечает за температуру поверхности. Размерность задачи можно уменьшить, если представить атмосферные профили в виде разложения по собственным векторам корреляционной матрицы **S**_x:

$$x = m_x + \sum_{i=1}^M c_i v_i,$$

где \mathbf{v}_i — *i*-й собственный вектор, а c_i — коэффициент разложения. Ограничивая ряд несколькими первыми членами и сводя задачу к нахождению коэффициентов разложения, можно понизить размерность задачи. Обрезание ряда первыми членами эквивалентно поиску решения на множестве гладких функций, как это делается в случае регуляризации по Тихонову.

Практическая реализация статистического решения требует наличия обширной базы начальных приближений, для того чтобы можно было выбрать начальное приближение как можно более близкое к искомому решению, так как от этого зависит точность решения. Для удовлетворительного восстановления аномальных высотных профилей, выборка радиозондовых измерений также должна содержать достаточное количество аномальных профилей. Аномальными здесь называются такие профиля, вероятность появления которых невысока и в ансамбле, по которому построена матрица S_x , подобные профиля встречаются редко.

Метод регуляризации Тихонова сводится к минимизации следующего сглаживающего функционала:

$$J(\delta x) = A\delta x - \delta y_2^2 + \alpha^2 L \delta x_2^2,$$

где α — параметр регуляризации; **L** — матрица, определяющая меру простоты решения. Если в данном выражении положить $\mathbf{L} = \mathbf{S}_x^{-1/2}$ и $\alpha = 1$, то сглаживающий функционал будет представлять собой выражение для линеаризованной прямой модели, хотя данный метод более подходит для тех случаев, когда априорная информация отсутствует. В самом простом случае $\mathbf{L} = \mathbf{I}$, в других случаях данная матрица строится с использованием дискретных оценок первых или вторых производных вектора состояния по высоте.
Обобщённая обратная матрица имеет вид

$$A^{\#} = (A^T A + \alpha^2 L^T L)^{-} A^T.$$

Основной проблемой при использовании данного метода является выбор параметра регуляризации при заданной погрешности исходных данных. Существует несколько критериев выбора параметра регуляризации. Один из них — это принцип невязки, который заключается в выборе такой величины α , при которой выполняется равенство

$$\|A\delta\hat{x} - \delta y\|_2 = c$$

где $\delta \hat{x}$ — решение, найденное при минимизации, а *с* — верхняя граница погрешностей наблюдения, т.е. $\|\varepsilon\|_2 \le c$. Другой критерий выбора параметра регуляризации — метод L-кривой. Данный метод заключается в построении кривой в координатах логарифма нормы остаточного вектора $\|A\delta x - \delta y\|_2$ от логарифма нормы регуляризированного решения $\|L\delta x\|_2$ и выборе параметра α , соответствующего точке максимальной кривизны этой кривой. Таким образом, сам по себе поиск параметра регуляризации любым из описанных выше способов требует многократной минимизации исходной функции.

ряде работ для восстановления атмосферных параметров предложена В дополнительная обработка интерферограммы, направленная на понижение спектрального разрешения и понижения размерности вектора спектра. При этом улучшается соотношение сигнал/шум и уменьшаются неточности, связанные с определением аппаратной функции прибора. Однако такое искусственное снижение разрешающей способности прибора приводит К снижению высотного разрешения метода восстановления высотных профилей и к невозможности восстановления профиля температуры независимо от восстановления профиля влажности.

Следует сказать и об активном привлечении технологии нейронных сетей в задачах восстановления высотных профилей атмосферных параметров. Однако нейронная сеть нуждается в обучении, а для этого необходимо иметь обучающую выборку, состоящую из измеренного спектра и соответствующего состояния атмосферы в момент измерения. Создать такую выборку сама по себе непростая задача.

Обратная задача в атмосферной оптике в общем случае является некорректной — решение существует, но его единственность и устойчивость нуждаются в доказательстве или проверке. Для обеспечения единственности решения (или сужения коридора неоднозначности), как правило, привлекается дополнительная информация о возможном поведении решения; для обеспечения устойчивости используются методы регуляризации.

Методы регуляризации изначально применялись для многоканальных спектрорадиометров с небольшим числом спектральных каналов, когда число неизвестных (количество определяемых параметров) превышало количество уравнений задачи (число используемых спектральных каналов). В этом случае задача была вырожденной (неоднозначной) и использование любой априорной изначально информации об искомых параметрах было крайне необходимо. С появлением спектрометров высокого спектрального разрешения обратная задача стала существенно переопределённой, т.е. количество информативных спектральных каналов (число уравнений), как правило, на порядок-два превышает число искомых (неизвестных) параметров атмосферы. Поэтому в некоторых случаях становится возможным практически отказаться от регуляризации и для решения обратной задачи использовать минимизацию квадратичной невязки (МКН) измеренных и расчётных спектров с ограничениями, без привлечения дополнительной информации об искомом решении. Целевая функция, используемая в МКН Гаусса, выглядит как:

$$J(x) = \|F(x,b) - y\|_{2}^{2}.$$

Вычислительная трудность применения всех перечисленных методов для анализа спектров высокого разрешения обусловлена большой размерностью обратной задачи: в пространстве измерений — число спектральных каналов, в пространстве решений — число узлов высотной сетки, умноженное на число восстанавливаемых вертикальных профилей.

1.5.1 Весовые функции и выбор спектральных полос для корректного восстановления вертикальных профилей газовых составляющих атмосферы

Весовые функции определены в как высотные зависимости производных модельного спектра по восстанавливаемым параметрам:

$$w_x^i(h) = \frac{\partial W_i^{calc}}{\partial x},$$

где *х* — любой из восстанавливаемых параметров. Практически же, при решении задачи восстановления высотных профилей концентрации газовых составляющих, вычисляется набор дискретных таблиц

$$w_x^i(h_j) = \frac{\partial W_i^{calc}}{\partial x_i}, \ i = 1, \dots, M, \ j = 1, \dots, N,$$

где *М* — число частотных каналов, а *N* — число узлов в высотной сетке.



Рисунок 1.5.1.1 — Весовые функции: (а) для температуры (*T*); (b) влажности воздуха (WV); (c) окиси углерода; (d) метана для инструмента AIRS. Приведён не полный набор наиболее значимых весовых функций. Цифры на вставках — волновые числа (см⁻¹) для каналов AIRS. Расчёт выполнен для случая стандартной атмосферы, 100 мб — 16,2 км, 10 мб — 31,2 км,

1 мб — 48,2 км

Положение максимума *i*-й весовой функции показывает, какой слой атмосферы дает максимальный вклад в изменение интенсивности ИК-излучения атмосферы на *i*-ой частоте. Включение этой частоты в целевую функцию обеспечивает восстановление параметра на высоте, соответствующей максимуму весовой функции для этой частоты. Кроме того, визуальный анализ набора весовых функций позволяет судить об адекватном выборе спектрального интервала, о высотном разрешении метода и о достаточности спектрального разрешения сенсора. Идеальной для восстановления профиля атмосферного параметра представляется ситуация, когда в выбранном спектральном интервале набор весовых функций содержит такие, которые имеют максимумы в каждом узле высотной сетки, причём величина максимумов примерно одинакова для всех высот и плотность распределения максимумов постоянна по высоте. В этом случае нет нужды включать в целевую функцию регуляризующие члены.

На рисунке 1.5.1.1 приведён набор нормированных весовых функций, рассчитанных различных частотных каналов инструмента AIRS.

В случае, когда набор весовых функций для выбранного спектрального интервала содержит для одних высот большее количество максимумов и меньшее для других или эти максимумы для разных высот имеют величины, отличающиеся на порядок и более, предварительный анализ весовых функций позволяет использовать взвешенную целевую функцию на этапе восстановления высотных профилей. Взвешенная целевая функция представляет собой следующую модификацию:

$$F = \sum_{i=1}^{M} g_i^2 \left(\frac{W_i^{calc}}{W_i^{obs}} - \frac{W_i^{obs}}{W_i^{calc}} \right)^2,$$

где веса *g*_i определяются следующим образом:

$$g_{i} = \frac{\max_{i=1,...,M} \left\{ w_{\max}^{i} \left\{ \right\} \right\}}{w_{\max}^{i_{w}^{i}}},$$

где

$$w_{max}^{i} = \frac{\max_{j=1,\dots,N} \left\{ \left| w_{x}^{i}(h_{j}) \right| \right\}}{\sum_{i=1}^{M} \left(\max_{j=1,\dots,N} \left\{ \left| w_{x}^{i}(h_{j}) \right| \right\} \right)}$$

нормированные значения максимумов весовых функций, а n_w^i — число весовых функций, имеющих максимум на той же высоте что и $w_x^i(h_j)$. Применение целевой функции во многих случаях ускоряет поиск решения обратной задачи.

Заключение

Представленные в настоящей главе материалы показывают, что в рамках решения основной задачи проекта — создания новых методов обработки данных дистанционного зондирования Земли (ДЗЗ) по полям малых газовых составляющих (в том числе, позволяющих восстанавливать детализированную пространственно-временную динамику полей, реализующиеся в них потоки) — выполнен обзор физических принципов спутниковой спектрометрии атмосферы Земли и были получены следующие основные результаты:

 собраны и систематизированы основные сведения об изменениях климата и кадастрах парниковых газов (в части задач НИР по мониторингу распределений концентраций и потоков малых газовых составляющих атмосферы);

- собраны и систематизированы общие сведения о газовом составе атмосферы;
- дан краткий обзор физических основ количественной спектроскопии;
- приведены наиболее типичные способы космической спектрометрии атмосферы;
- описан математический аппарат решения обратных задачи инфракрасной атмосферной спектрометрии высокого спектрального разрешения.

С использованием этих результатов, в частности, были сформулированы и обоснованы предложения по перспективным российским космическим экспериментам по мониторингу химического состава атмосферы Земли (см. главу 2).

Представленные материалы позволяют сделать вывод о том, что запланированные работы начального этапа (2022) в рамках основной задачи создания новых методов обработки данных дистанционного зондирования Земли (ДЗЗ) по полям малых газовых составляющих (в том числе, позволяющих восстанавливать детализированную пространственно-временную динамику полей, реализующиеся в них потоки) выполнены в полном объёме.

ГЛАВА 2 РАЗРАБОТКА НОВЫХ МЕТОДОВ ИЗМЕРЕНИЯ МАЛЫХ ГАЗОВЫХ СОСТАВЛЯЮЩИХ В АТМОСФЕРЕ ЗЕМЛИ (В ТОМ ЧИСЛЕ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ И КОМБИНИРОВАНИЕМ НОВЫХ ЧАСТОТНЫХ КАНАЛОВ И РАЗЛИЧНЫХ МЕТОДИК ЗОНДИРОВАНИЯ).

Введение

В настоящей главе, в соответствии с планом работ по решению задачи разработки новых методов измерения малых газовых составляющих в атмосфере Земли (в том числе с использованием и комбинированием новых частотных каналов и различных методик зондирования), проанализировано современное состояние и возможности технологий спутникового дистанционного мониторинга в контексте перспектив развития специализированных средств спутникового ДЗЗ малых газовых составляющих атмосферы в России и в мире. Внимание сфокусировано на мониторинге парниковых газов, содержание которых в атмосфере испытывает влияние антропогенного фактора. Сформулированы предложения по перспективному российскому эксперименту космического мониторинга парниковых газов.

Материал главы представлен в трёх основных подразделах:

Представленный материал также вошёл в публикацию [1].

2.1 Обзор основных приборов спутникового ДЗЗ парниковых газов

Определение параметров содержания парниковых газов в атмосфере из космоса осуществляется с помощью аппаратуры высокого спектрального разрешения. Данную аппаратуру можно разделить на две общие категории: 1) аппаратура пассивного типа, которая регистрирует излучение от источника естественного происхождения, например, Солнечное излучение или собственное излучение Земли (гиперспектральные системы); 2) аппаратура активного типа, которая использует собственный источник излучения (например, лидарные системы).

Анализ существующих спутниковых систем мониторинга парниковых газов позволил сформировать список приборов, используемых в прошлом, настоящем и планируемых к запуску в ближайшее время для дистанционного зондирования парниковых газов из космоса. Они представлены в таблице 2.1.1. В ней зелёным цветом выделены приборы, для которых высокоточное восстановление концентрации указанных газов является приоритетной функцией, жёлтым — те, данные которых также могут быть использованы в целях восстановления концентрации некоторых газовых составляющих.

No	Поррания	Химическая	TMEC	пг	Приборы ДЗЗ, 1	которые могут определять ко	онцентрацию
JND	пазвание	формула	IMIC	111	Закончили работу	Действуют	Планируются к запуску
1	Диоксид углерода	CO_2	++	++	ACGS (TANSAT)	ACDL (DQ-1)	ACDL (DQ-2)
					AIUS (GF-5)	ACE-FTS (SCISAT-1)	ACS-limb(Meteor-MP N1)
					GMI (GF-5)	AIUS (GF-5-02)	ACS-limb(Meteor-MP N2)
					ILAS-I (ADEOS)	GAS (FY-3D)	ACS-nadir (Meteor-MP N1)
					ILAS-II (ADEOS-2)	GHGSat-spectrometer	ACS-nadir (Meteor-MP N2)
					IMG (ADEOS)	(GHGSat)	GAS-2 (FY-3H)
					MIPAS (Envisat)	GMI (GF-5-02)	GeoCarb (GeoCarb)
					SCIAMACHY-limb (Envisat)	OCO (OCO-2)	MicroCarb (MicroCarb)
					SCIAMACHY-nadir (Envisat)	OCO (ISS)	
					TES-limb (AURA)	TANSO-FTS (GOSAT)	
					TES-nadir (AURA)	TANSO-FTS/2 (GOSAT-2)	
							IASI-NG (Metop-SG-A2)
							IASI-NG (Metop-SG-A3)
							IASI-NG (Metop-SG-A1)
2	Метан	CH_4	++	++	GMI (GF-5)	ACE-FTS (SCISAT-1)	ACS-limb(Meteor-MP N1)
					ILAS-I (ADEOS)	GAS (FY-3D)	ACS-limb(Meteor-MP N2)
					IMG (ADEOS)	GHGSat-spectrometer	ACS-nadir (Meteor-MP N1)
					MIPAS (Envisat)	(GHGSat)	ACS-nadir (Meteor-MP N2)
					SCIAMACHY-limb (Envisat)	GMI (GF-5-02)	GAS-2 (FY-3H)
					SCIAMACHY-nadir (Envisat)	MOPITT (Terra)	GeoCarb (GeoCarb)
					TES-limb (AURA)	TANSO-FTS (GOSAT)	IPDA lidar (MERLIN)
					TES-nadir (AURA)	TANSO-FTS/2 (GOSAT-2)	Sentinel-5 (Metop-SG-A2)
						TROPOMI (Sentinel-5P)	Sentinel-5 (Metop-SG-A3)
							Sentinel-5 (Metop-SG-A1)
					AIUS (GF-5)	AIUS (GF-5-02)	IASI-NG (Metop-SG-A2)
							IASI-NG (Metop-SG-A3)
							IASI-NG (Metop-SG-A1)

Таблица 2.1.1 — Спутниковые системы мониторинга парниковых газов

No	Царрания	Химическая	ГМГС	пг	Приборы ДЗЗ, н	которые могут определять ко	энцентрацию
JN⊻	пазвание	формула	IMIC	111	Закончили работу	Действуют	Планируются к запуску
3	Закись азота	N ₂ O	++	+	AIUS (GF-5) ILAS-I (ADEOS) IMG (ADEOS) MIPAS (Envisat) SCIAMACHY-limb (Envisat) SCIAMACHY-nadir (Envisat) TES-limb (AURA) TES-nadir (AURA)	ACE-FTS (SCISAT-1) AIUS (GF-5-02) GAS (FY-3D) MLS (Aura) SMR (Odin) TROPOMI (Sentinel-5P)	ACS-limb(Meteor-MP N1) ACS-limb(Meteor-MP N2) ACS-nadir (Meteor-MP N1) ACS-nadir (Meteor-MP N2) GAS-2 (FY-3H) Sentinel-5 (Metop-SG-A2) Sentinel-5 (Metop-SG-A3) Sentinel-5 (Metop-SG-A1) IASI-NG (Metop-SG-A3) IASI-NG (Metop-SG-A1)
4	Гексафторид серы	SF ₆		+	CLAES (UARS) ILAS-I (ADEOS) ILAS-II (ADEOS-2) IMG (ADEOS) MIPAS (Envisat) TES-limb (AURA) TES-nadir (AURA)	ACE-FTS (SCISAT-1)	
							IASI-NG (Metop-SG-A2) IASI-NG (Metop-SG-A3) IASI-NG (Metop-SG-A1)
5	Гидрофторуглероды. 19 газов, включая: Трифторметан Дифторметан Фторметан и др.	$\begin{array}{c} CHF_3\\ CH_2F_2\\ CH_3F \end{array}$		+	_	_	_
6	Первторуглероды 9 газов, включая: Тетрафторметан Гексафторэтан и др.	CF_4 C_2F_6		+	_	_	_
1	I рифторид азота	NF ₃		+	-	-	-

2.2 Особенности применения спутниковых приборов ДЗ парниковых газов

В последнее десятилетие активно реализуются программы спутникового мониторинга, позволяющие, при меньшей абсолютной точности измерений, обеспечить больший охват и лучше характеризовать источники и стоки. Наиболее эффективным методом дистанционного мониторинга метана и углекислого газа признан спектральный анализ солнечного света, отражённого от поверхности в ближнем ИК-диапазоне. В нем находятся полосы поглощения углекислого газа на 1,58 мкм и 1,6 мкм, и метана на 1,65 мкм. Измерительная аппаратура для космического мониторинга строится вокруг спектрометров высокого спектрального разрешения. Необходимо отметить, что для значительной части подстилающей поверхности, особенно снежных покровов и водной поверхности, значения альбедо в окрестности длины волны 1,5 мкм имеют провал вплоть до ~5 %. Современные детекторы ближнего ИК-диапазона на основе InGaAs близки по своим параметрам к теоретическому пределу чувствительности, следовательно, увеличение чувствительности при прочих равных условиях возможно лишь за счёт изменения оптической схемы и увеличения геометрического фактора, или светосилы прибора, или охлаждения детекторов до криотемператур. Для измерения содержания парниковых газов также применяются наблюдения блика: зеркального отражения солнечного диска от поверхности воды или суши. Для этого требуется обеспечить специальное наведение оптической оси прибора.

Как правило, в атмосфере в большей или меньшей степени присутствует аэрозоль, отражающий часть солнечного излучения прежде, чем оно достигает поверхности. Следовательно, для определения относительного содержания малых составляющих необходимо параллельное определение эффективной зондируемой воздушной массы. Для этого измеряется количество молекул кислорода (обильный и хорошо перемешанный атмосферный газ) на оптическом пути по поглощению в полосах или 0,76 мкм, или 1,27 мкм. Полоса 1,27 мкм находится рядом с полосами поглощения углекислого газа и она загрязнена свечением синглетного кислорода, требует метана, но что дополнительного моделирования, и обычно используется полоса 0,76 мкм. Так как диапазоны 0,76 мкм, где измеряется O₂, и ~1,6 мкм, где измеряются CO₂ и CH₄, в различной степени подвержены влиянию аэрозоля, то для выборки спектров необходима дополнительная информация о свойствах и количестве аэрозоля, которую можно получить, проводя одновременные измерения в нескольких участках видимого диапазона спектра, аналогично эксперименту GOSAT (англ. Greenhouse gases Observing SATellite). Особый тип облачности представляют собой перистые облака, вносящие систематические погрешности в измерения парниковых газов, но малозаметные в видимом диапазоне. Одним из методов детектирования таких облаков являются измерения в насыщенных полосах водяного пара, например, в диапазоне 1.38 мкм или 2 мкм. При наблюдениях солнечного блика влияние атмосферного аэрозоля на точность измерений существенно снижается.

Современные гиперспектральные приборы ближнего ИК-диапазона — это как правило большие научные комплексы, требующие значительных ресурсов космического аппарата. Так, например, аппаратура всех реализованных за последние 10 лет космических экспериментов по исследованию парниковых газов GOSAT, OCO-2, TanSat, TROPOMI имела массу порядка 200 кг и энергопотребление более 150 Вт.

Как отмечено выше, в дистанционном зондировании парниковых газов (как и других системах ДЗЗ) находят применение как пассивные, так и активные методы измерений.

2.2.1 Пассивные системы

Гиперспектральные системы, работающие в диапазоне длин волн от 0,24 до 2,4 мкм (КВ диапазон 0,2–1,3 мкм), являются наиболее точными для определения содержания

парниковых газов (CH₄, CO₂, N₂O, O₃, H₂O). Это подтверждается данными BMO по потенциальным точностям гиперспектральных приборов КВ и ТИК (6–15 мкм) диапазонов спектра. При необходимости съёмки на ночной стороне Земли необходимо использовать инфракрасные Фурье-спектрометры.

К современным гиперспектральным приборам КВ-диапазона (таблица 2.2.1.1) относятся Orbiting Carbon Observatory-2 (OCO-2 NASA), Chinese CO₂ satellite (CarbonSpec) на КА CarbonSat (TanSat, Китай), TROPOMI (*англ.* TROPOspheric Monitoring Instrument) на КА Sentinel-5p (Европа), также существуют проекты TEMPO (*англ.* Tropospheric Emissions: Monitoring of Pollution) на геостационарный КА (США). Этот прибор будет измерять загрязнение Северной Америки с высоким разрешением и ежечасно. Sentinel-4 UVN (*англ.* Ultra-violet/Visible/Near-Infrared) нагеостационарный КА MTG-S (*англ.* Meteosat Third Generation satellite), UVNS. Проекты CO2M (*англ.* Copernicus Carbon Dioxide Monitoringmission) миссии Copernicus, Sentinel-5 на КА MetOp-SG-A, GeoCarb (*англ.* Geostationary Carbon Cycle Observatory) NASA на геостационарной орбите, которая будет измерять углеродный цикл.

Прибор	КА	Орбита геоцент- рическая, солнце- синхрон- ная, км	Страна/ агентство	Год запуска	Спектральные интервалы, мкм	Спектральное разрешение в интервалах, нм	Измеряемые газы	Пространственн ое разрешение, км	Полоса захвата, км
OCO-2	OCO-2	705	NASA	2014	0,758– 0,772 1,594– 1,619 2,042– 2,082	0,042 0,07 0,12	CO ₂ , O ₂	1,3×2,3	10,6
CarbonSpe c	TanSat/ CarbonSat	700	Китай	2016	0,758– 0,778 1,594– 1,624 2,042– 2,082	0,044 0,081 0,103	CO ₂ , O ₂	2	20
TROPOMI	Sentinel-5p	824	ESA	2017	$\begin{array}{c} 0,270-\\ 0,300\\ 0,300-\\ 0,320\\ 0,310-\\ 0,405\\ 0,405-\\ 0,500\\ 0,675-\\ 0,725\\ 0,725-\\ 0,775\\ 2,305-\\ 2,385 \end{array}$	0,5 0,5 0,55 0,55 0,5 0,5 0,25	CH ₄ , H ₂ O, CO, O ₂ , O ₃ , O ₄ , HCHO, CHOC HO, SO ₂ , BrO, OCIO, CIO, NO, NO ₂	7	2000

Таблица 2.2.1.1 — Характеристики современных гиперспектрометров КВ-области спектра

В настоящее время данные ОСО-2 являются своеобразным эталоном спутниковых измерений СО₂, однако метан в рамках миссии не измеряется. Запущенный в июле 2014 г. ОСО-2 (*англ*. Orbiting Carbon Observatory-2) представляет собой спутниковую миссию

НАСА по наблюдению за земной атмосферой. Данный проект является преемником ОСО-1, который был потерян из-за аварии ракеты-носителя в феврале 2009 г. Миссия ОСО-2 посвящена изучению атмосферного углекислого газа и кислорода, включая глобальное географическое распределение источников и поглотителей углекислого газа и кислорода. Работа аппаратуры продлена до середины 2023 г. ОСО-2 содержит один прибор, название которого совпадает с названием самой миссии. Прибор состоит из трёх спектрометров NIR/SWIR (ближнего инфракрасного/коротковолнового инфракрасного диапазона), два из которых оптимизированы для наблюдений за атмосферным углекислым газом, а ещё один оптимизирован для наблюдений за атмосферным кислородом. Космический аппарат может вести измерения в трёх режимах: режим надира непосредственно под космическим кораблём, режим блика и режим цели — наблюдение указанной цели на поверхности. В приборе ОСО-2 используется метод сканирования pushbroom с шириной полосы захвата 10 км и пространственным разрешением 1,29 км в поперечном направлении и 2,25 км в продольном направлении. Для наблюдения и измерения атмосферного кислорода используется спектральный диапазон 758-772 нм со спектральным разрешением 0,04 нм. Для наблюдения углекислого газа в атмосфере прибор использует два диапазона: один со спектральным диапазоном 1594–1619 нм и спектральным разрешением 0,08 нм, а другой имеет спектральный диапазон 2042–2082 нм со спектральным разрешением 0,10 нм. Все три диапазона имеют 1024 канала. Космический аппарат ОСО-2 работает на солнечно-синхронной орбите высотой 705 км с наклонением 98,2°, периодом обращения 98,8 мин и ЕСТ (время пересечения экватора) 1330 ч на восходящем узле, а также 16-дневным повторяющимся циклом.

К современным инфракрасным фурье-спектрам относятся GAS (*англ.* Greenhousegases Absorption Spectrometer) на KA FY-3D (Китай), TANSO-FTS-2 (*англ.* Thermal And Near infrared Sensor for carbon Observation — Fourier Transform Spectrometer-2) на KA GOSAT-2 (Япония), CrIS (*англ.* Cross-Track Infrared Sounder) на KA NOAA-20 (США), HIRAS (*англ.* Hyperspectral Infrared Atmospheric Sounder) на KA FY-3D (Китай), IASI (*англ.* Infrared Atmospheric Sounding Interferometer) на KA MetOp-C (Европа), ИКФС-2 (*англ.* Инфракрасный фурье-спектрометр) на KA «Метеор-М» № 2-2 (Россия). Существует проект IASI-NG (*англ.* Infrared Atmospheric Sounding Interferometer — New Generation) на KA MetOp-SG-A, у данного проекта есть большой потенциал в измерении парниковых газов, облачности, аэрозолей, озона и остаточных следов газов.

В мировом сообществе активно используются данные миссии GOSAT. Миссия является совместным проектом JAXA (англ. Japan Aerospace Exploration Agency, Японское агентство аэрокосмических исследований) и NIES (англ. National Institute for Environmental Studies. Национальный институт экологических исследований) разработке/финансировании приборов Министерством окружающей среды Японии. В этой договорённости ЈАХА отвечает за разработку спутников и приборов, запуск и эксплуатацию космического корабля (включая сбор данных), а NIES отвечает за анализ данных (разработку алгоритмов) и их использование. Аппаратура работает на орбите Земли с 2009 г., солнечно-синхронная круговая орбита имеет высоту 666 км, наклонение 98°, цикл повторного посещения три дня, LTAN (англ. local time of the ascending node, местное время в восходящем узле) в 13:00. Концентрации парниковых газов восстанавливаются из данных Фурье спектрометра в близкой инфракрасной области TANSO-FTS. Также на борту космического аппарата находиться прибор определения облаков и аэрозолей TANSO-CAI (Cloud/Aerosol Imager). Для определения облачности используются отношения интенсивности излучения в трёх спектральных полосах: 0,412, 0,67 и 0,86 мкм, шириной 10 нм каждая. Данные длины волн являются в определённом смысле стандартными, используемые для определения облачности (миссии GOSAT, MODIS (англ. Moderate Resolution Imaging Spectroradiometer) и др.), что позволяет использовать готовые алгоритмы и проводить валидацию с другими спутниками. Также в октябре 2018 г. был запущен спутник GOSAT-2, продолжение миссии GOSAT. Научные

задачи совпадают с первой миссией: мониторинг парниковых газов, наблюдение за углекислым газом, метаном, озоном, окисью углерода, двуокисью азота и водяным паром в атмосфере. За счёт усовершенствования аппаратуры GOSAT-2 нацелен на измерения концентраций парниковых газами с более высоким уровнем точности (примерно в семь раз лучше).

Прибор	КА	Орбита геоцент- рическая, солнце- синхрон- ная, км	Страна/ агентство	Год запуска	Спектральные интервалы, мкм	Спектральное разрешение в интервалах, нм	Измеряемые газы	Пространственн ое разрешение, км	Угол сканиро- вания, град
GAS	FY-3D	836	Китай	2017	0,75–0,77 1,56–1,72 1,92–2,08 2,20–2,38	0,035 0,073 0,112 0,142	CH ₄ , CO ₂ , N ₂ O, CO, O ₂	10	_
TANSO -FTS-2	GOSAT-2	613	Япония	2018	0,755– 0,772 1,563– 1,695 1,923– 2,381 5,56–8,45 8,45– 14,29	0,011 0,052 0,08 1,0 2,5	CH ₄ , CO ₂ , CO,	9,7	±40
CrIS	NOAA-20	824	США	2017	3,92–4,64 5,71–8,26 9,14– 15,38	0,36 1,96 11,9	CO ₂ , CH ₄ , N ₂ O, CO	14	±48
HIRAS	FY-3D	836	Китай	2017	3,92–4,64 5,71–8,26 8,80– 15,39	4,5 6,1 9,1	$\begin{array}{c} CO_2, \ O_3, \\ H_2O, \ SO_2, \\ SF_6, \ NO_2, \\ HNO_3, \\ C_2H_2, \\ C_2H_6, \\ CFC-11, \\ CFC-12, \\ COS \end{array}$	16	±53
IASI	MetOp-C	817	ESA	2018	3,62–5,00 5,00–8,26 8,26– 15,50	2,7 2,2 4,9	$\begin{array}{c} CH_4, CO_2, \\ N_2O, \ O_3, \\ H_2O, CO \end{array}$	48	±48
ИКФС- 2	«Метеор- М» № 2-2	832	РФ	2019	5-15	1–9	$\begin{array}{c} CH_4, CO_2, \\ N_2O, O_3, \\ H_2O \end{array}$	35	±35

Таблица 2.2.1.2 — Характеристики современных инфракрасных фурье-спектрометров

Альтернативный метод зондирования в тепловом ИК-диапазоне позволяет получать информацию о содержании углекислого газа по поглощению излучения поверхности Земли в 15-мкм полосе CO₂. На этом принципе работает, например, отечественный прибор ИКФС и один из каналов GOSAT. Изменения в тепловом диапазоне существенно зависят от температурного профиля атмосферы, и для измерения CO₂ необходимо использовать априорную информацию, например, параллельные измерения в миллиметровом диапазоне или модель среднесрочного прогноза погоды. Также, ослаблена чувствительность к содержанию CO₂ в самых важных, приповерхностных слоях атмосферы, снижается сигнал при низкой температуре поверхности. В результате, этот метод обеспечивает меньшую точность по сравнению с ближним ИК-диапазоном. С другой стороны, тепловые измерения не зависят от отражающей способности поверхности и меньше подвержены влиянию облачности. Желательно использовать оба взаимодополняющих метода, например, как это сделано на КА GOSAT.

К геостационарным спектрометрам относятся: американский геостационарный изображающий фурье-спектрометр GIFTS (англ. Geosynchronous Imaging Fourier Transform Spectrometer) и европейский геостационарный ИК-зондировщик IRS (англ. InfraRed Sounder), разработанный для КА МТG. Следует отметить, что американский прибор GIFTS прошёл наземные испытания, но проект закрыт в 2004 г. ввиду проблем с механикой, в космосе пока не эксплуатировался. В таблице 2.2.1.2 приведены основные технические характеристики вышеуказанных геостационарных фурье-спектрометров.

У геостационарных спектрометров предусмотрено два режима работы: режим глобального покрытия и режим регионального покрытия. В режиме глобального покрытия наблюдается весь видимый диск Земли, а в режиме регионального покрытия — только заданная соответствующими координатами его часть. Это обуславливается тем, что потребителям может потребоваться более оперативная информация (время покрытия региона будет составлять от 15 до 30 мин), полученная путём зондирования относительно небольшой площади поверхности Земли. Например, в приборе GIFTS — это площадь Европы.

Технические	GIFTS	IRS	ИКФС-ГС
характеристики			
Платформа/ дата	GOES	МТG-S, 2022 г.	«Электро-М» (2025)
запуска	(закрыт в 2004 г.)		
Срок активного	7 лет	8,5 лет	10 лет
существования			
Спектральный	MW: 4,4–6,0 мкм	MW: 4,4–6,3 мкм	MW: 4,4–6,3 мкм
диапазон	LW: 8,8–14,6 мкм	LW: 8,3–14,7 мкм	LW: 8,3–14,7 мкм
Номинальное	0,625–36 см ⁻¹	0,625 см ⁻¹	$0,5/0,25 \text{ cm}^{-1}$
спектральное			
разрешение			
Погрешность радио-	0,5 K	0,5 K	0,5 K
метрической			
калибровки			
Поле зрения	512×512 км	640×640 км ²	640×640 км
Пространственное	4 км	4 км	4 км
разрешение			
Время глобального	60 мин	60 мин	60 мин
покрытия			
Время съёма ИФГ	10–11 c	9,5 c	10 c
Диаметр входного	240 мм	250 мм (320 мм)	270 мм
зрачка			
Фотоприемное	КРТ, 128×128, 60 мкм	КРТ, 160×160, 90 мкм	КРТ, 160×160, 90 мкм
устройство (ФПУ)	суперпиксель (2×2)	суперпиксель (3×3)	суперпиксель (3×3)
	$T_{\Phi\Pi Y} = 55-60 \text{ K}$	$T_{\Phi\Pi Y} = 50-55 \text{ K}$	$T_{\Phi\Pi Y} = 55-60 \text{ K}$
Macca	200 кг	300 - 350 кг	250-300 кг
Энергопотребление	535 Вт	520 - 650 Вт	350-400 Вт
Информативность	160 Мбит/с	150 - 190 Мбит/с	150 Мбит/с

Таблица 2.4 — Характеристики фурье-спектрометров на геостационарных КА

Общей отличительной особенностью всех геостационарных ИК-фурье-спектрометров является то, что их рабочий спектральный диапазон не покрывает всего необходимого для получения вертикальных профилей параметров атмосферы спектрального диапазона (3–16 мкм). Это связано с тем, что фурье-спектрометры для геостационарной орбиты должны обеспечивать высокую частоту обновления информации (не более часа) и в условиях ограничений на объём передаваемых данных приходится выбирать только те участки спектра, которые наиболее информативны с точки зрения решения стоящих перед прибором задач. Характеристики этих приборов сведены в таблице 2.1.1.3.

Мониторинг локальных эмиссий парниковых газов может быть решён более простыми средствами. Например, 21 июня 2016 г. был запущен демонстрационный КА типа кубсат GHGSat-D Claire (Канада) для локального мониторинга эмиссий метана от отдельных предприятий. Масса данного КА составляет 15 кг при габаритах 20×30×40 см. В качестве полезной нагрузки на данном КА установлен изображающий гиперспектрометр массой 6 кг, работающий по принципу статичного интерферометра Фабри-Перо (ИФП). Параметры данного гиперспектрометра подобраны таким образом, чтобы перекрыть необходимый спектральный диапазон для мониторинга эмиссий метана от 1630 до 1675 нм, при этом достигается пространственное разрешение 50 м и полоса захвата 12 км с высоты 514 км. Параметры ИФП и матричного приёмника излучения позволяют достичь спектрального разрешения лучше 0,1 нм. Оценочная точность определения содержания метана составляет от 8 до 25 % от фонового значения, что эквивалентно возможности обнаружения точных источников выброса метана от 1000 до 3000 кг/ч. На 2020 г. фирма GHGSat имела уже три КА для мониторинга эмиссий метана (Claire, Hugo и Iris) и планирует довести свою группировку до 10 КА в 2022 г.

2.2.2 Активные системы

Лидары космического базирования могут быть использованы для контроля содержания и определения высотных профилей важных парниковых газов углекислого газа и метана. Используется метод дифференциального поглощения с интегрированием по трассе (*англ.* integrated-path differential absorption — IPDA), основанный на измерении спектрального поглощения на нескольких длинах волн — в центре линии поглощения, на ее периферии и вне её. Этот метод предполагает измерение поглощения лазерного излучения на нескольких длинах воль всей трассы луча и последующее восстановление высотных профилей распределения концентрации газа. В основе метода лежит факт зависимости уширения линии поглощения от общего давления атмосферы, которое убывает по мере роста высоты.

Основные преимущества лидарных методов по определения концентрации и вертикального профиля атмосферных газов по сравнению с пассивными методами это: возможность измерения в любое время суток; точность определения концентрации, удовлетворяющая требованиям ВМО; возможность определения параметров локального природного или техногенного выброса парниковых газов (метан, диоксид азота).

Лидар MERLIN (англ. Methane Remote Sensing Lidar Mission), предназначен для контроля содержания метана в атмосфере Земли из космоса. Импульсный лазер энергией в импульсе 9 Дж и частотой 20 Гц, размещённый на орбите высотой 506 км, может обеспечить измерения содержания метана с точностью менее 2 % на фоне растительности с разрешением 50 км по Земле при использовании приёмного телескопа с диаметром 690 мм. В качестве рабочего диапазона выбран спектральный диапазон вблизи 1,645 мкм. Для создания лидара MERLIN разработчиками была выбрана технология лазера, основанная на накачке твердотельным NdYAg лазером параметрических генераторов.

В лидаре ASCENDS, предназначенном для контроля содержания углекислого газа в атмосфере Земли из космоса. Лидар ASCENDS для генерации излучения использует перестраиваемый по длине волны импульсный лазер, обеспечивающий сканирование на 30 длинах волн в пределах линии поглощения CO₂ 1572,335 нм с частотой 300 Гц. Спектральная ширина лазерного излучения составляет 15 МГц (0,0005 см⁻¹), что обеспечивает высокое спектральное разрешение, и, следовательно, более высокую точность измерений.

Данные по перечисленным приборам представлены в таблице 2.2.2.1.

Аппаратура	Космический аппарат (год запуска)	Исследуемые параметры атмосферы	Примечание
A-SCOPE	A-SCOPE (проект	CO ₂ < 0,5 ppm, 0,1 %, 2,05 мкм,	(Advanced Space
	разрабатывается с	1,57 мкм, IPDA, телескоп 0,5,	Carbon and Climate
	2006 г.)	диаметр телескопа 1 и 1,2 м,	Observation of Planet
		энергия в импульсе 50 мДж, 50 Гц	Earth) ESA
MERLIN	MERLIN	1,645 мкм, CH ₄ < 2 %, IPDA,	(Methane Remote
	(план: конец 2021 г.)	апертура телескопа 0,69 м,	Sensing Lidar Mission),
		λ_{on} : 1645,552 nm, λ_{off} : 1645,846 nm,	Германия, Франция
		9 мДж, 12 Гц	
ASCENDS	Проект закрыт	CO ₂ ~ 1 ppm, 0.1 %, 1,57 мкм,	NASA
		IPDA, полоса 200 м, 2 К	

Таблица 2.2.2.1 — Проекты космических лидаров

2.3 Перспективные отечественные приборы: космический эксперимент «Дриада»

Представляет интерес готовящийся в ИКИ РАН космический эксперимент «Дриада» для установки на МКС и картирования парниковых газов (CO₂, CH₄, H₂O) посредством регистрации солнечного излучения, отраженного земной поверхностью. Полное название — «Измерения спектров поглощения земной атмосферы в ближнем ИКдиапазоне и восстановление концентраций парниковых газов». Подготовка включает в себя положительный опыт реализации эксперимента «РУСАЛКА»., проводимый ИКИ РАН на РС МКС в 2009–2012 гг., что позволило отработать методику измерения спектров ближнего инфракрасного диапазона при высоком спектральном разрешения и восстановления из них концентраций парниковых газов. Этот эксперимент проводился силами космонавтов из гермоотсека станции. Он носил пилотный характер и не был предназначен для постоянного мониторинга, однако был накоплен положительный опыт и задел для создания соответствующей аппаратуры и средств обработки данных.

Эксперимент «Дриада» предполагает установку научной аппаратуры на выносную платформу на внешней стороне МКС и непрерывную работу на светлой половине трассы в надир. Орбита МКС имеет наклонение 52°, поэтому высокие широты недоступны для наблюдения. Однако наблюдаемых широт достаточно для наблюдения за основными регионами источников истоков CO₂ и CH₄ и непрерывного мониторинга территорий южной части России, стран СНГ (кроме Белоруссии) и большинства стран Европы, Африки и Америки в течение не менее трёх лет. Начало реализации космического эксперимента запланировано на 2024/2025 гг. В состав аппаратуры входят два инфракрасных спектрометров высокого разрешения и камеры. Телевизионная камера служит для получения изображений подстилающей поверхности в ряде спектральных диапазонов видимого излучения что позволяет определять состояние облачности, и проводить селекцию данных. Один инфракрасный спектрометр предназначен для измерения поглощения кислорода в полосе 0,76 мкм и реализован на основе эшелле спектрометра, работающим в единственном дифракционном порядке. Второй спектрометр является ключевым и регистрирует с высоким разрешением и высокой чувствительностью спектры ненасыщенных полос углекислого газа и метана. Для обеспечения максимальной чувствительности применяется инфракрасный детектор на основе InGaAs с ограниченным диапазоном (≤1,67 мкм). Это позволит регистрировать поглощение углекислого газа в

полосах 1,58 мкм и 1,6 мкм и метана в полосе 1,65 мкм. Для регистрации спектрального диапазона 1,4–1,67 мкм, содержащего полосы парниковых газов и водяного пара, достаточно одного кадра, содержащего разумное число дифракционных порядков эшелле, разделённых при помощи скрещенной дисперсии. Соответствующий диапазон позволяет решить ряд дополнительных задач, в частности, измерения изотопного отношения H₂O/HDO, и оценку содержания в атмосфере перистых облаков по части насыщенной полосе водяного пара 1,38 мкм.

Заключение

Представленные в настоящей главе материалы показывают, что в рамках решения основной задачи проекта — разработки новых методов измерения малых газовых составляющих в атмосфере Земли (в том числе с использованием и комбинированием новых частотных каналов и различных методик зондирования) — в соответствии с планом работ на начальный этап (2022 г.) были получены следующие основные результаты:

- систематизированы типы и характеристики ранее применявшихся, функционирующих в настоящее время и перспективных приборов спутникового базирования для мониторинга химического состава атмосферы Земли (в части парниковых газов);
- проанализированы особенности работы указанных типов приборов в контексте задачи разработки новых методов измерения;
- сформулированы предложения по перспективному проекту российского космического эксперимента «Дриада» мониторинга малых газовых составляющих атмосферы Земли.

Представленные материалы позволяют сделать вывод о том, что запланированные работы начального этапа (2022) в рамках основной задачи разработки новых методов измерения малых газовых составляющих в атмосфере Земли (в том числе с использованием и комбинированием новых частотных каналов и различных методик зондирования) выполнены в полном объёме.

ГЛАВА З РАЗВИТИЕ МЕТОДОВ УСВОЕНИЯ ДАННЫХ ДЗЗ И ПРОДУКТОВ ИХ ОБРАБОТКИ В ЧИСЛЕННЫХ МОДЕЛЯХ АТМОСФЕРНОЙ ЦИРКУЛЯЦИИ.

Введение

В настоящей главе в соответствии с планом работ на 2022 г. по решению основной задачи проекта — развития методов усвоения данных ДЗЗ и продуктов их обработки в численных моделях атмосферной циркуляции — выполнено исследование возможностей ассимиляции (усвоения) данных ДЗЗ в моделях атмосферной циркуляции с целью восстановления полной картины состояния и динамики полей малых газовых составляющих, в том числе по следующим пунктам:

- общая характеристика процесса ассимиляции данных в задачах ДЗЗ;
- математическое описание процесса ассимиляции;
- обзор существующих прогностических моделей концентрации парниковых газов, позволяющих проводить ассимиляцию данных ДЗЗ;
- результаты освоения циркуляционной модели FLEXPART для дальнейшего использования в системе ассимиляции данных ДЗЗ парниковых газов.

3.1 Ассимиляция данных в задачах ДЗЗ

Современные подходы к решению задач ДЗЗ часто включают в себя моделирование многомасштабных динамических процессов, протекающих в различных природных средах, в том числе, в атмосфере. Диагностику состояния окружающей среды по данным наблюдений в этом случае производят с привлечением прогностических моделей на основе систем усвоения данных. Под усвоением данных (data assimilation) принято понимать регуляризацию решений математической модели граничными условиями, определяемыми данными реальных наблюдений для наиболее точной оценки пространственно-временного распределения исследуемых величин.

При оценке потоков парниковых газов с помощью процедуры усвоения данных в настоящее время используют подход, называемый inverse modelling (обратное моделирование). В общем случае обратное моделирование — формальный подход к использованию результатов наблюдений за физической системой для определения оптимальных значений переменных, управляющих этой системой. Обычно это делается путем статистической оптимизации оценок переменных с учётом всей имеющейся информации наблюдений. Переменные, подлежащие оптимизации, называются переменными состояния или вектором состояния **x**. Оптимизация осуществляется на основе известных векторов наблюдений **y**. Взаимосвязь между **x** и **y** описывается моделью **F** физической системы, называемой прямой моделью:

$$y = F(x, p) + \varepsilon_o$$
,

где **р** — вектор параметров, не подлежащих оптимизации, а ε_o — вектор ошибок, включающий ошибки измерений и моделирования. Прямая модель предсказывает следствие (*y*), как функцию причины (*x*), обычно с помощью уравнений, описывающих физические закономерности в наблюдаемой системе. Путём обращения модели можно количественно определить причину (*x*) по наблюдениям за следствием (*y*). При наличии ошибки ($\varepsilon_o \neq 0$) решение является наилучшей оценкой *x* с некоторой статистической погрешностью. Это решение для **x** называется оптимальной оценкой, апостериорной оценкой или восстановлением. Выбор вектора состояния (т.е., выбор переменных модели, которые будут включены в *x*, а не в *p*) полностью зависит от исследователя. На этот выбор влияет как постановка задачи исследования и потенциально содержащаяся в наблюдениях информация, так и вычислительные затраты, связанные с процедурой обращения модели. Для уменьшения неопределённости при восстановлении используется априорная оценка *x_a*, которая имеет ошибку ε_a . Тогда задача может быть линеаризована относительно априорной оценки:

$$y = F(x_a, p) + K(x - x_a),$$

где $K = \partial y / \partial x$ — Якобиан.

Обратное моделирование используется в настоящее время при анализе состава атмосферы для двух классов задач:

- 1. Определение характеристик источников парниковых газов или загрязнений. В этом случае используются измеренные атмосферные концентрации (вектор наблюдения **y**) для определения поверхностных потоков (вектор состояния **x**). Прямая модель *F* представляет собой модель химического переноса (СТМ) или модель циркуляции (ТМ). Вектор параметров **p** включает метеорологические переменные, такие как скорость ветра, химические переменные и др., которые необходимы для моделирования, но не оптимизируются как часть вектора состояния. Предварительную оценку \mathbf{x}_a можно основывать на кадастровых данных, наших знаниях о процессах, определяющих поверхностные потоки (таких как статистика сжигания топлива, базы данных о типах земных покровах и т.д.).
- 2. Усвоение данных о составе атмосферы. В этом случае строится сеточное трёхмерное поле концентраций х, обычно зависящее от времени, на основе измерений у этих концентраций или связанных величин в различных местах и в разное время. Соответствующие векторы состояния при этом обычно очень велики. В задаче, зависящей от времени, априорная оценка представляет собой атмосферы, которая переводит модель прогноза x(t)ранее ИЗ оптимизированного состояния во времени t₀ в состояние прогноза на следующем временном шаге усвоения до $t_0 + h$. Модель обычно реализует численный прогноз погоды, который может включать описание химических превращений веществ.

3.2 Математическое описание процесса ассимиляции

Теоретической основой математического аппарата обратного моделирования является теорема вероятностей Байеса и линейная алгебра. Чтобы получить оптимальную оценку вектора состояния **x** (размерностью *n*) на основе вектора наблюдений **y** (размерностью *m*), нужно иметь априорную информацию о состоянии x_a , прямую модель **F** и ковариационные матрицы ошибок априорного состояния S_a и наблюдений S_o . Ковариационные матрицы ошибок **S** это квадратные матрицы размерностью $n \times n$ или $m \times m$, на главной диагонали которых лежат дисперсии ошибок. Матрица S_a включает в себя статистическую информацию о том, насколько неопределённа информация об априорном состоянии. Матрица S_o включает в себя статистическую информацию о том, вычислений и т.д. При этом считается, что все эти величины подчиняются нормальному распределению. Для нахождения оптимальной оценки **x** необходимо минимизировать специальную ценовую функцию:

$$J(x) = (x - x_a)^T S_a^{-1} (x - x_a) + (y - F(x))^T S_o^{-1} (y - F(x)).$$

Минимум ценовой функции можно найти, решая уравнение:

$$\nabla_{x}J(x) = 2S_{a}^{-1}(x - x_{a}) + 2K^{T}S_{o}^{-1}(F(x) - y) = 0.$$

На практике для поиска величин эмиссии парниковых газов и загрязняющих веществ из дополнительных данных определяются основные источники — заводы, пожары, болота и т.д. и характерные для них величины продукции загрязнений. Эти величины используются как априорная информация *x*_a. Далее, либо минимум ценовой функции находится аналитически, либо многократно запускается модель переноса (TM) при варьирующихся параметрах источников загрязнения до тех пор, пока модельное поле

концентраций вещества не будет наиболее близко к измеренному, например, со спутника. Тогда подобранные величины выбросов из заданных источников считаются оптимальной оценкой.

Другой задачей процесса ассимиляции является оптимизация зависящего от времени трёхмерного модельного поля концентраций, наложенного на координатную сетку, на основе разрозненных во времени и в пространстве наблюдений за этими концентрациями. Это бывает нужно для построения начальных условий прогнозов погоды или создания согласованного архива метеорологических данных. Оптимизированное состояние, возникающее в результате усвоения наблюдений, называется анализом. Усвоение данных обычно включает в себя химический прогноз, который служит предварительной оценкой, и здесь он будет называться моделью прогноза. Эта прогностическая модель обычно представляет собой числовую модель прогноза погоды, инициализированную ассимилированными метеорологическими данными и включающую моделирование химических переменных, которые необходимо ассимилировать.

Вектор состояния х при этом представляет собой трёхмерное поле концентраций на координатной сетке в данный момент времени, которое изменяется со временем согласно модели прогноза и усвоенными наблюдениями. В стандартной задаче анализа химических данных модель прогноза, инициализированная с помощью $x_{(0)}$ в момент времени t_0 , даёт прогноз $x_{(1)}$ в момент времени $t_1 = t_0 + h$, где h — временной шаг усвоения, обычно порядка нескольких часов. Для анализа можно использовать две разные стратегии, рисунок 3.2.1. При трёхмерном вариационном усвоении данных (3DVAR) наблюдаемые концентрации собираются и усваиваются через фиксированные интервалы времени h. Наблюдения $y_{(0)}$ в момент времени t_0 используются для оптимизации $x_{(0)}$, а затем модель прогноза интегрируется по интервалу времени $[t_0, t_1 = t_0 + h]$, чтобы получить предварительную оценку $x_{(1)}$. Наблюдения в момент времени t_1 используются для оптимизации оценки x₍₁₎ и так далее. В некоторых случаях минимизация ценовой функции может быть выполнена аналитически, вместо вариационного метода; тогда ассимиляция называется фильтром Калмана. При четырёхмерном вариационном усвоении данных (4DVAR) совокупность наблюдений, разбросанных по временному интервалу [t₀, t₁], используется для оптимизации х₍₀₎ путём применения модели прогноза назад во времени по $[t_1, t_0]$. Затем модель прогноза используется для получения априорной оценки $x_{(1)}$, наблюдения за $[t_1, t_1 + h]$ используются для оптимизации $x_{(1)}$ и так далее.



Рисунок 3.2.1 — Схема усвоения данных измерений во времени 3D и 4DVAR подходами

Рассмотрим применение фильтра Калмана для 3DVAR подхода. Пусть имеется ансамбль наблюдений, собранных на временных шагах усвоения t_0 , t_1 , t_2 и т.д. Пусть $y_{(0)}$ — ансамбль наблюдений, собранных в момент времени t_0 , а $x_{(0)}$ — значение вектора состояния в этот момент. Начиная с некоторых априорных знаний ($x_{a,(0)}$, $S_{a,(0)}$), мы используем наблюдения $y_{(0)}$ для минимизации ценовой функции:

$$J(x_{(0)}) \Big(\Big) = (x_{(0)} - x_{a,(0)})^T S_{a,(0)}^{-1} (x_{(0)} - x_{a,(0)}) + \Big(y_{(0)} - F(x_{(0)}) \Big)^T S_o^{-1} \Big(y_{(0)} - F(x_{(0)}) \Big).$$

Здесь уже **F** может быть не моделью прогноза, а функцией интерполяции вектора состояния на наблюдения. Если вектор наблюдения имеет ту же размерность, что и вектор состояния и находится в тех же узлах координатной сетки, то **F** является единичной матрицей.

Минимум ценовой функции

$$\nabla_{x(0)}J(x_{(0)}) = 2S_{a,(0)}^{-1}(x_{(0)} - x_{a,(0)}) + 2K^T S_o^{-1} \left(F(x_{(0)}) - y_{(0)}\right) = 0$$

в 3DVAR задаче может быть найден аналитически с помощью фильтра Калмана, но только в случае линейной прямой модели (например, используется линейная интерполяция по пространству). Его преимущество состоит в том, что он характеризует ошибку решения путём вычисления матрицы ковариации апостериорной ошибки. Начиная с априорной оценки ($x_{(0)}, S_{a,(0)}$), усвоение наблюдений $y_{(0)}$ даёт оптимальную оценку и её ковариационную матрицу ошибок ($\hat{x}_{(0)}, \hat{S}_{(0)}$) через соотношения:

$$\hat{x}_{(0)} = x_{a,(0)} + G(y_0 - Kx_{a,(0)}), \quad G = S_{a,(0)}K^T \left(KS_{a,(0)}K^T + S_o\right)^{-1}, \quad \hat{S}_{(0)} = \left(K^T S_o^{-1}K + S_{a,(0)}^{-1}\right)^{-1}.$$

Применяется модель прогноза для расчёта эволюции $(\hat{x}_{(0)}, \hat{S}_{(0)})$ на временном шаге прогнозирования $[t_0, t_1]$, что приводит к априорной оценке $(x_{a,(1)}, S_{a,(1)})$ в момент времени t_1 (расчёт $S_{a,(1)}$ описан ниже). Затем выполняется ассимиляция наблюдений $y_{(1)}$ в момент времени $t_{(1)}$, следуя приведённым выше уравнениям, чтобы получить оптимальную оценку $(\hat{x}_{(1)}, \hat{S}_{(1)})$. Далее применяется модель прогноза к $[t_1, t_2]$ и так далее.

Ковариационная матрица априорной ошибки $S_{a,(1)}$ является суммой ковариационной матрицы ошибки модели прогноза $S_{\rm M} = E[\varepsilon_{\rm M}\varepsilon_{\rm M}^T]$ и матрицы ковариации ошибки начального состояния $\hat{S}_{(0)} = E[\hat{\varepsilon}_{(0)}\hat{\varepsilon}_{(0)}^T]$, модифицированной моделью прогноза за $[t_0, t_1]$. Её можно полностью вычислить, если модель прогноза является линейной (*M*). В этом случае:

$$x_{a,(1)} = x_{(1)} + M\hat{\varepsilon}_{(0)} + \varepsilon_{\rm M},$$

где $x_{(1)}$ это истинное значение в момент времени t_1 . Таким образом

$$S_{a,(1)} = E\left[M\hat{\varepsilon}_{(0)}\hat{\varepsilon}_{(0)}^TM^T\right] + E\left[\varepsilon_{\rm M}\varepsilon_{\rm M}^T\right] = M\hat{S}_{(0)}M^T + S_{\rm M}.$$

Член $M\hat{S}_{(0)}M^T$ переносит ковариационную матрицу апостериорной ошибки от одного временного шага усвоения к другому, таким образом распространяя информацию об ошибках.

Подход 3DVAR ассимилирует наблюдения, собранные с дискретными временными шагами ассимиляции, например, один раз в день, и применяет модель прогноза для обновления вектора состояния в течение этого интервала. Однако наблюдения часто проводятся в любое время суток и поэтому разбросаны в пределах интервала времени прогнозирования. При усвоении данных 4DVAR наблюдения, разбросанные в моменты времени t_i в течение интервала времени прогноза $[t_0, t_1]$, используются для оптимизации начального состояния $x_{(0)}$. Это включает минимизацию ценовой функции

$$J(x_{(0)}) = (x_{(0)} - x_{a,(0)})^T S_{a,(0)}^{-1}(x_{(0)} - x_{a,(0)}) + \sum_{t_i = t_0}^{t_1} (y_{(i)} - F(x_{(i)})^T S_{o,(i)}^{-1} (y_{(i)} - F(x_{(i)})).$$

В этом случае минимизация выполняется численными итерационными методами.

3.3 Существующие прогностические модели концентрации парниковых газов, позволяющие проводить ассимиляцию данных ДЗЗ

Главная цель моделей химического состава атмосферы (численного прогноза распространения примеси) состоит в моделировании эволюции *n* взаимодействующих химических веществ в атмосфере. Это делается путём решения связанной системы уравнений неразрывности, которую в фиксированной системе отсчёта можно записать в общем виде

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = -v \cdot \nabla C_i + P_i(C) - L_i(C), \quad i = 1, \dots, n.$$

Решение уравнения зависит от метеорологических переменных через трёхмерный вектор ветра *v*, обычно включает параметризацию для учёта мелкомасштабных турбулентных вкладов в член расходимости потока. Условия генерации и потерь *P_i* и *L_i* вещества также могут зависеть от метеорологических переменных.

Многие модели химического состава атмосферы не генерируют собственные метеорологические переменные, а вместо этого используют трёхмерные данные, зависящие от времени (включая ветер, влажность, температуру и т.д.), генерируемые Такие метеорологической модели называются внешней моделью. «офлайн». Метеорологические входные должны определять воздушный поток с данные согласованными значениями различных переменных, влияющих на перенос, P_i и L_i. «онлайн» модели атмосферной химии интегрируются в исходную Напротив. метеорологическую модель, так что в них решаются уравнения химической непрерывности вместе с метеорологическими уравнениями сохранения воздушной массы, импульса, тепла и воды. Онлайновые модели имеют преимущество в том, что они полностью связывают химический перенос с динамикой и гидрологическим циклом. Они позволяют избежать необходимости использовать метеорологические архивы с высоким разрешением и не подвержены ошибкам усреднения по времени, связанным с использованием офлайн метеорологических полей. Но с ними гораздо сложнее работать и, чем с офлайн моделями. Термин модель химического переноса (СТМ) обычно относится к офлайн трёхмерным моделям.

В настоящее время при численном прогнозе распространения примеси в пограничном слое атмосферы, как правило, выбирается либо лагранжева дисперсионная стохастическая модель, либо эйлерова модель атмосферной диффузии. В рамках первого подхода пространственный перенос примеси в атмосфере оценивается по траекториям движения одиночных частиц, поступающих из источников загрязнений в воздушный бассейн. В зависимости от характера источников выбросов (мгновенный или непрерывный) осуществляется разовая или постоянная подача трассеров, где под воздействием ветра и турбулентности происходит их рассеяние. Второй подход опирается на уравнение конвекции-диффузии, которое интегрируется на конечно-разностной эйлеровой сетке.

Лагранжев и эйлеров методы описания турбулентности используются при решении различных задач, как правило, независимо, взаимно дополняя друг друга.

Эйлерово представление турбулентности связано с заданием поля случайных величин в пространстве и во времени посредством уравнения или системы уравнений, например уравнений гидродинамики. Последовательно усредняя эти уравнения получают систему уравнений, описывающую какие-либо процессы в турбулизованной среде. В этом случае аргументом является совокупность координат точек пространства, а компоненты вектора скорости движения среды и значения концентрации примеси в данной точке пространства являются функциями этих координат и времени.

В лагранжевом методе рассматривают некоторую бесконечно малую частицу жидкости в фиксированный момент времени с координатами и, перемещаясь вслед за ней, рассматривают её координаты в последующие моменты как функции времени ее начальных координат, с последующим усреднением параметров траектории или групп траекторий по флуктуациям среды. Скорости частиц представляют собой производные от координат и времени. Примесь, поступившая от точечного источника, обычно представляется в виде ансамбля дискретных клубов или частиц. Для каждого клуба рассчитывается траектория его движения в меняющемся во времени и пространстве поле ветра и рассчитывается диффузионный перенос. Это делается, например, с помощью стохастических моделей, причём часто турбулентная структура считается гауссовой. Изучение переноса и рассеяния большого числа (несколько тысяч) частиц трассеров позволяет моделировать дрейф и дисперсию примеси в турбулизованном атмосферном пограничном слое. Концентрацию примеси в любой точке пространства представляют как сумму вкладов от каждого лагранжева элемента.

К достоинствам лагранжевой дисперсионной стохастической модели относится детальное представление начального периода распространения выброса (включая учет подъема нагретой примеси за счет плавучести). Кроме того, данная модель удобна при оценке переноса и осаждения газодисперсных примесей, содержащих взвешенные частицы с широким спектром размеров. К недостаткам этого подхода следует отнести слабое моделирование химических трансформаций примеси и хорошие результаты моделирования на не больших расстояниях (до 1000 км).

Эйлерова модель атмосферной диффузии, наоборот, сравнительно просто решает залачи. связанные с предсказанием мезомасштабного переноса выбросов И сопровождающих их химических превращений, требует меньшего объёма эмпирической информации для замыкания моделей турбулентной диффузии. Однако в силу использования относительно грубой сетки (линейный размер по горизонтали — несколько трудности километров более) возникают адекватного представления или концентрационных градиентов от точечных и линейных источников.

Для учёта недостатков рассматриваемых подходов используют их комбинацию, при которой на начальном этапе распространения выброса используется лагранжев дисперсионный стохастический подход, а при прогнозе последующего переноса и трансформации загрязнения на большие расстояния применяется эйлерова модель атмосферной диффузии. Тем не менее, при использовании данного способа остаются проблемы, связанные с сопряжением двух разных подходов для описания примеси.

Наиболее известные на сегодняшний день и актуальные не региональные эйлеровы модели химического переноса, распространяемые в свободном доступе:

WRF-Chem — это 3D онлайн модель химического переноса полностью интегрированная с прогностической погодной моделью WRF. Позволяет моделировать выбросы, перенос, смешивание и химическое преобразование газовых примесей и аэрозолей одновременно с метеорологией, т.е. оба компонента полностью связаны и используют одну и ту же схему переноса, одни и те же горизонтальные и вертикальные сетки, одни и те же физические схемы и одинаковый временной шаг для транспортировки и вертикального смешивания. Модель имеет несколько вариантов пространственной дискретизации, диффузии, вложенности, граничных условий и схем параметризации для физических процессов суб-сеточного масштаба. Физика модели состоит из микрофизики, турбулентности планетарного пограничного кучевой конвекции, слоя, земной поверхности, длинноволнового и коротковолнового излучения. WRF-Chem используется, среди прочего, для исследования качества воздуха в региональном масштабе, анализа полевых программ, взаимодействий между облаками и химическим компонентами, а также включает программу инициализации для подготовки начальных и граничных условий для любой области.

CMAQ — это офлайн 3D модель химического транспорта, которая моделирует почасовую концентрацию большого количества химических веществ для нескольких вертикальных слоёв, от поверхности земли до тропопаузы. Выходные данные CMAQ представляют собой средние по объёму концентрации загрязняющих веществ для каждой

ячейки сетки и вертикального слоя в области моделирования. Эта модель очень похожа на модель WRF-Chem и была создана специально для Агентства по защите окружающей среды США (*англ*. Environmental Protection Agency, USA, EPA), как альтернатива WRF. Некоторые работы показывают лучшую корреляцию для этой модели с измерениями на территории США.

САМх — это современная 2D оффлайн модель химического транспорта, которая с 1996 года широко используется местными, государственными, региональными и федеральными государственными учреждениями, академическими и исследовательскими учреждениями, а также частными консультантами для оценки нормативных требований и общих исследований в США и во всем мире. САМх используется более чем в 20 странах почти на всех континентах. Предоставляет огромный выбор учёта различных химических, фотохимических и физических механизмов эволюции загрязняющих веществ, множество из которых уже встроены в модель, а также позволяет добавление собственных механизмов пользователем.

GEOS-Chem — это офлайн глобальная 3D модель химического состава атмосферы, созданная на основе метеорологических данных Системы наблюдения за Землей имени Годдарда (GEOS) Управления глобального моделирования и ассимиляции НАСА. Она применяется исследовательскими группами по всему миру для решения широкого круга проблем состава атмосферы. Позволяет проводить моделирование на сетке 0,25×0,25° и 72 модельных слоях. При этом входными параметрами могут служить только метеорологические поля системы GEOS.

CHIMERE — это многомасштабная химическая модель переноса предназначенная для точного анализа случаев загрязнения, ежедневных прогнозов озона, аэрозолей и других загрязняющих веществ, долгосрочного моделирования (целых сезонов или лет) для разных сценариев контроля выбросов.

Модель работает в диапазоне пространственных масштабов, от полушария до городского масштаба с разрешением от 1 км до нескольких градусов. Имеет множество различных вариантов моделирования, что делает её мощным исследовательским инструментом.

Наиболее известная на сегодняшний день и актуальная не региональная лагранжева модель химического переноса, распространяемая в свободном доступе:

FLEXPART — это офлайн 3D модель дисперсии частиц, которая в своём первоначальном варианте середины 1990-х годов была предназначена для расчёта дальнего и мезомасштабного рассеяния вредных веществ от точечных источников, например, выбросов после аварии на атомной электростанции. За последние десятилетия эта модель превратилась в сложный инструмент для многомасштабного моделирования и анализа атмосферного переноса и привлекла глобальное сообщество пользователей. Области её применения были расширены до широкого спектра атмосферных газов и аэрозолей, например, парниковых газов, в том числе короткоживущих, частиц — сажи и вулканического пепла, а также она использовался для изучения атмосферного круговорота воды. При наличии подходящих входных метеорологических данных её можно использовать для моделирования на масштабах от десятков метров до глобальных. Большой интерес получила возможность модели выполнять обратное моделирование, которое основано на взаимосвязях источник-рецептор, то есть эмиссия загрязняющих веществ может быть найдена не с помощью 3D или 4DVAR моделирования, а запуском модели во обратную сторону относительно времени.

Для оценки эмиссии парниковых газов на территории Сибири хорошо подходит модель FLEXPART. Она уже применялась для подобных целей рядом исследователей для усвоения данных наземных наблюдений. Поэтому в этом году основное внимание лаборатории было сосредоточено на освоении данной модели с целью её дальнейшего использования для усвоения данных дистанционного зондирования парниковых газов.

3.4 Освоение циркуляционной модели FLEXPART для дальнейшего использования в системе ассимиляции данных ДЗЗ парниковых газов

Одной из наиболее широко используемых лагранжевых моделей диффузии является модель FLEXPART с открытым исходным кодом, которая моделирует перенос, диффузию, сухое и влажное осаждение, радиоактивный распад и химические реакции 1-го порядка (например, окисление) трассеров, выбрасываемых из точки, линии, поверхностного объекта или объёма, либо заполняющих всю атмосферу.

FLEXPART можно запускать как вперёд, так и назад во времени. Для прямого моделирования частицы выбрасываются из одного или нескольких источников, а концентрации (или соотношения смешивания) определяются на регулярной сетке широтадолгота-высота. В обратном режиме место, где высвобождаются частицы, представляет собой рецептор (место измерения). Как и в прямом режиме, частицы отбираются на сетке широта-долгота-высота, что в данном случае соответствует потенциальным источникам. Полученные функциональные значения представляют собой отношение источникрецептор, также называемое чувствительностью источника-рецептора или просто чувствительностью к выбросу, и связаны со временем переноса частиц в выходные ячейки сетки. FLEXPART также можно использовать в режиме заполнения доменов, когда вся атмосфера представлена (например, несколькими миллионами) частицами одинаковой массы. Нескольких миллионов частиц, распределённых по всему миру, часто бывает достаточно для исследования статистических свойств переноса воздушных масс, но этого недостаточно для тематического исследования воздушных потоков, связанных с к конкретной синоптической ситуацией.

FLEXPART — это офлайн модель, которая использует метеорологические поля (анализы или прогнозы) в качестве входных данных. Такие данные доступны из нескольких различных моделей численного прогнозирования погоды (ЧПП). Для последней версии модели, v10.4, могут быть использованы входные данные прогностической модели (IFS) Европейского центра среднесрочных прогнозов погоды (ECMWF) и данных Глобальной системы прогнозирования (GFS) национальных центров прогнозирования окружающей среды США (NCEP). Пространственное разрешение для IFS в зависимости от приложения может быть $1 \times 1^{\circ}$ и временное разрешение 3 ч (стандарт для более старых продуктов, например, ERA-Interim), $0.5 \times 0.5^{\circ}$ и временное разрешение 1 ч (стандарт для более новых продуктов, например, ERA5) и 0,1×0,1° и временное разрешение 1 ч (текущие оперативные данные ECMWF). Модель ECMWF IFS в настоящее время имеет 137 вертикальных уровней. Входные файлы NCEP GFS обычно используются с разрешением 1×1° по горизонтали, с 64 уровнями по вертикали и разрешением по времени 3 ч. Входные файлы NCEP GFS также доступны с горизонтальным разрешением 0.5×0.5 и $0.25 \times 0.25^{\circ}$. Есть так же другие версии модели, которые позволяют использовать на входе данные других метеорологических моделей, например — WRF.

В ходе работы по теме в 2022 г. была проведена установка и тестовый запуск модели FLEXPART на тестовых примерах, входящих в пакет установки. Для установки использовалась подсистема Linux для Windows (*анел.* Windows Subsystem for Linux — WSL), версия Windows: Microsoft Windows [Version 10.0.19044.2251], версия образа WSL: Ubuntu 20.04.5 LTS

Была загружена последняя стабильная версия исходного кода с сайта FLEXPART community (<u>https://flexpart.eu/wiki/FpDownloads</u>). Также можно клонировать репозиторий: git clone <u>https://www.flexpart.eu/gitmob/flexpart</u>. Далее требуется установить значения переменных в файле makefile для указания расположения библиотек libeccodes (или libgrib_api), libjasper. Также возможна установка вычислительных опций в файле par_mod.f90: таких как размер сетки, максимальное количество частиц и т.п. Значения по умолчанию уже установлены оптимальными для работы с примерами, поэтому на данном этапе такая модификация не проводилась. Однако в будущем возможна модификация (с перекомпиляцией) для обеспечения работы с более объёмными реальными данными.

Далее, был установлен пакет flex_extract, который необходим для автоматизации получения данных с сайта ECMWF. В данном случае описан случай установки для пользователя, не обязательно являющегося клиентом ECMWF. Для работы flex_extract, так же были установлены необходимые библиотеки ecCodes и ECMWF WebAPI (Python) (ecmwf-api-client).

Всего модель имеет 36 тестовых примеров. Эти примеры разделены на 10 различных групп; каждая группа исследует различные возможности модели. Первая группа включает в себя пример по умолчанию и исследует различные варианты создания выходных данных модели с координатной сеткой (например, выходные единицы, выходные форматы) для простого прогона прямой модели с одной начальной точкой над Северной Атлантикой. Вторая группа примеров представляет возможности обратного моделирования FLEXPART. Третья группа демонстрирует различное использование вывода частиц. В четвертой группе приведены примеры использования единиц соотношения массы и массы смешивания как в источнике, так и в рецепторе, а также для прямого и обратного моделирования для установления взаимосвязей между источником и рецептором. Пятая группа выпускает частицы различных химических соединений и аэрозолей. Шестая группа показывает прямой 2-дневный прогон, имитирующий мгновенные выбросы SO2 от гипотетического извержения вулкана Гримсвётн. Последний пример был запущен после установки, и иллюстрация результатов запуска представлена на рисунок 3.4.1.



Рисунок 3.4.1 — Гипотетическое извержение вулкана Гримсвётна (*исл.* Grímsvötn) 1 апреля 2015 г. в 00:00 UTC (мгновенный выброс). Показаны интегральные концентрации SO₂ в столбе (мг/м²) через 18 ч после извержения

Заключение

Представленные в настоящей главе материалы показывают, что в рамках решения основной задачи проекта — развития методов усвоения данных ДЗЗ и продуктов их обработки в численных моделях атмосферной циркуляции — в соответствии с планом работ на начальный этап (2022 г.) были получены следующие основные результаты:

- Дана общая характеристика процесса ассимиляции данных в задачах ДЗЗ.
- Приведено математическое описание процесса ассимиляции.

- Проведён обзор существующих прогностических моделей концентрации парниковых газов, позволяющих проводить ассимиляцию данных ДЗЗ.
- Осуществлена установка программно-математического обеспечения, реализующего расчёты по циркуляционной модели FLEXPART на рабочую станцию для дальнейшего использования в системе ассимиляции данных ДЗЗ парниковых газов.

Представленные материалы позволяют сделать вывод о том, что запланированные работы начального этапа (2022 г.) в рамках основной задачи развития методов усвоения данных ДЗЗ и продуктов их обработки в численных моделях атмосферной циркуляции выполнены в полном объёма.

ГЛАВА 4 СОЗДАНИЕ ТЕХНОЛОГИИ И СИСТЕМЫ ДИСТАНЦИОННОГО (СПУТНИКОВОГО) НАУЧНОГО МОНИТОРИНГА КОНЦЕНТРАЦИЙ И ПОТОКОВ МАЛЫХ ГАЗОВЫХ СОСТАВЛЯЮЩИХ АТМОСФЕРЫ, В ТОМ ЧИСЛЕ — ПАРНИКОВЫХ ГАЗОВ (СИСТЕМА БУДЕТ ОРИЕНТИРОВАНА НА МОНИТОРИНГ ВСЕЙ ТЕРРИТОРИИ РОССИИ И ПОГРАНИЧНЫХ СТРАН).

Введение

Ключевыми факторами успешного решения задачи создания технологии и системы дистанционного (спутникового) научного мониторинга концентраций и потоков малых газовых составляющих атмосферы, в том числе — парниковых газов являются фактическая доступность, объемы, качество, однородность, пространственно-временной охват и способы организации оперативных и архивных данных осуществляемых спутниковых экспериментов по мониторингу химического состава и состояния атмосферы Земли. Эти параметры определяют необходимые характеристики входной информации, на обработку которой будет ориентирована создаваемая технология и система научного мониторинга концентраций и потоков малых газовых составляющих атмосферы. Анализ этих вопросов, с использованием инфраструктурной основы проекта — ЦКП «ИКИ-Мониторинг», представленный в настоящей главе, проведён по следующим основным направлениям:

- обзор основных систем мониторинга газовых составляющих и доступности их информационных продуктов;
- организация работы с информационными продуктами по малым газовым составляющим на базе ЦКП «ИКИ-Мониторинг».



4.1 Обзор основных систем мониторинга газовых составляющих и доступности их информационных продуктов

Рисунок 4.1.1 — Пример данных ежедневных измерений метана, полученный по информации прибора TROPOMI (спутник Sentinel 5P)

Для решения задач оценки концентраций малых газовых составляющих в атмосфере могут быть использованы данные, предоставляемые с различных спутниковых систем дистанционного зондирования Земли. Такие данные позволяют получать оперативную информацию о концентрации газов в различных слоях атмосферы в режиме близком к реальному времени (в основном интегрально во всем столбе атмосферы). При этом из-за ряда мешающих факторов, в том числе чувствительности прибора, наличия облачности и др., спутниковой информации обычно недостаточно, чтобы даже ежедневно получать концентрации веществ в атмосфере по всей территории Земли. Характерный пример карты ежедневных спутниковых измерений метана приведён на рисунке 4.1.1. В то же время, в перспективе, спутниковые данные совместно с различными схемами численного моделирования могут дать информацию о состоянии и динамике малых газовых составляющих по всей территории нашей планеты, которую невозможно получить другими способами. Особенно это касается труднодоступных территорий.

На сегодняшний день, существует несколько программ, направленных на мониторинг и изучение малых газовых составляющих и на загрязнение атмосферы на основе данных спутниковых систем. Для получения концентраций различных газовых составляющих атмосферы сегодня используются различные спутниковые системы, например: OCO-2, Sentinel-5P, GOSAT, AURA и др.

В 2014 г. NASA был успешно запущен полярно-орбитальный спутник Orbiting Carbon Observatory-2 (OCO-2), на котором установлен одноименный прибор, предназначенный для получения концентрации углекислого газа в атмосфере. На рисунке 4.1.2 представлены характеристики прибора ОСО.

В 2017 г. Европейским космическим агентством ESA, в рамках программы Copernicus был запущен спутник Sentinel-5 Precursor, который оснащён прибором TROPOMI, целью которого является обеспечение точных и своевременных наблюдений за ключевыми элементами состава атмосферы для мониторинга качества воздуха, климата и озонового слоя. На рисунке 4.1.3 представлены характеристики прибора TROPOMI.

Acronym	000	000						
Full name	Orbiting Carbo	Drbiting Carbon Observatory						
Purpose	CO2 profile.	CO2 profile.						
Short description	3 NIR/SWIR g µm (CO2) - 30	NIR/SWIR grating spectrometer, 3 bands, 0.76 µm (O2), 1.61 and 2.06 Im (CO2) - 3000 channels total [see detailed characteristics below]						
Background	Reflight of the	Reflight of the unit on OCO, failed at launch						
Scanning Technique	Pushbroom, c pixels/line. Th specific target	ross-track swat ree pointing mo	h 10 km, 160 p odes: nadir, tow	ixels/line binneo /ards sun glint a	d to 10 super- and towards a			
Resolution	1.29 km (cross	s-track), 2.25 kr	n (along-track)					
Coverage / Cycle	Global covera	Global coverage in one month for cells of 100 km side, in daylight						
Mass	150 kg	Power	165 W	Data Rate	1 Mbps			

Рисунок 4.1.2 — Характеристики прибора ОСО

Acronym	TROPOMI	TROPOMI					
Full name	Tropospheric	Monitoring Inst	rument				
Purpose	Atmospheric HCHO, N2O,	Atmospheric chemistry. Tracked species: BrO, CH4, CIO, CO, CO2, H2O, HCHO, N2O, NO, NO2, NO3, O2, O3, O4, OCIO, SO2 and aerosol					
Short description	Grating spect nm [see detai	Grating spectrometers covering 3 spectral bands in the range 270-2385 nm [see detailed characteristics below]					
Background	New develop	ment					
Scanning Technique	Pushbroom, s	swath 2600 km					
Resolution	7 km at s.s.p.	7 km at s.s.p.					
Coverage / Cycle	Global covera	Global coverage every day, in daylight					
Mass	220 kg	Power	170 W	Data Rate	310 Mbps		

Рисунок 4.1.3 — Характеристики прибора TROPOMI

Ac	ronym	MLS (EOS-Au	ura)							
Fu	ll name	Microwave Lir	Aicrowave Limb Sounder							
Pu	irpose	Chemistry of t HCI, HCN, HM	the high atmosp NO3, HO2, HOC	ohere. Tracked Cl, N2O, O3, O	species: BrO, (H and SO2	CIO, CO, H2O,				
Sh	ands), 190 GHz nds) and 2500 ((6 sub-bands), 3Hz (5 sub-								
Ва	ckground	Follow-on of t	Follow-on of the MLS flown on UARS.							
Sc	anning Technique	Limb sounding	Limb sounding							
Re	esolution	Vertical: 1.5 ki resolution: ~ 3	km. Horizontal e	ffective						
Co	overage / Cycle	Global coverage every 3 d for cells of 300 km side								
Ma	155	430 kg	Power	530 W	Data Rate	100 kbps				
/										

Acronym	OMI							
Full name	Ozone Monit	zone Monitoring Instrument						
Purpose	Ozone profile species: BrO	e and total-colur , NO2, O3, OCI	mn or gross p O, SO2 and a	rofile of other sp aerosol	oecies. Tracked			
Short description	UV/VIS gratii [see detailed	V/VIS grating imaging spectrometer, three bands, 1560 channels total see detailed characteristics below]						
Background	New develop	New development						
Scanning Technique	Pushbroom, swath 725 kr	² ushbroom, cross-track swath 2600 km - Zoom mode available, with swath 725 km						
Resolution	13 x 24 km2 profiles. 13 x	13×24 km2 associated to 2600 km swath, reduced to 36 \times 48 km2 for profiles. 13 \times 12 km2 in zoom mode						
Coverage / Cycle	Global coverage every day, in daylight							
Mass	65 kg	Power	66 W	Data Rate	800 kbps			

Рисунок 4.1.4 — Характеристики прибора MLS (а); характеристики прибора OMI (б)

Acronym	TANSO-FTS/	TANSO-FTS/2						
Full name	Thermal And Transform Sp	Thermal And Near infrared Sensor for carbon Observations - Fourier Transform Spectrometer / 2						
Purpose	Measurement	Veasurements of CH4, CO2, H2O, O2, O3 and aerosol						
Short description	5-band interfe	5-band interferometer (3 in NIR/SWIR, 2 in TIR). Polarisation observation in the 3 short-wave bands [see detailed characteristics below]						
Background	Evolution of T	ANSO-FTS. Sp	lit TIR range					
Scanning Technique	Cross-track m	nechanical point	ting, swath 790) km				
Resolution	10.5 km at s.s	10.5 km at s.s.p.						
Coverage / Cycle	Global covera	Blobal coverage in 3 days						
Mass	329 kg	Power	400 W	Data Rate	5.9 Mbps			

Рисунок 4.1.5 — Характеристики прибора TANSO-FTS/2

Acronym	SMR	SMR						
Full name	Sub-Millimetre Radiometer	Sub-Millimetre Radiometer						
Purpose	Chemistry of the high atmosp HNO3, HO2, N2O, O3, tempe	Chemistry of the high atmosphere. Tracked species: CIO, H2O, H2O2, HNO3, HO2, N2O, O3, temperature and pressure						
Short description	5-bands millimetre-submillimetre heterodyne radiometer. One band around 118 GHz, four bands in the range 480-580 GHz. Spectral resolution 0.1 to 1.0 MHz							
Background	New development	New development						
Scanning Technique	Limb scanning							
Resolution	Vertical: 1.5-3 km, in the altitu resolution: ~ 300 km (limb geo	Vertical: 1.5-3 km, in the altitude range 5-100 km. Horizontal effective resolution: ~ 300 km (limb geometry)						
Coverage / Cycle	Global coverage every 3 d for cells of 300 km side							
Mass	Power	Data Rate						

(a)

Acronym	OSIRIS						
Full name	Optical Spectrograph and Infr	Optical Spectrograph and Infra-Red Imaging System					
Purpose	Atmospheric chemistry. Track aerosol	tmospheric chemistry. Tracked species: CIO, NO, NO2, O3, OCIO and erosol					
Short description	UV/VIS/NIR spectrometer, spectral range 280-800 nm, spectral resolution 1 nm. Supported by a NIR/SWIR radiometer with three channels (1.26 μ m, 1.27 μ m and 1.52 μ m) of 10 nm bandwidth						
Background	New development						
Scanning Technique	Limb scanning						
Resolution	Vertical: 1 km, in the altitude range 5-100 km; horizontal effective resolution: ~ 300 km (limb geometry)						
Coverage / Cycle	Global coverage in 3 days for cells of 300 km side						
Mass	Power	Data Rate					

Рисунок 4.1.6 — Характеристики прибора SMR (а); характеристики прибора OSIRIS (б)

Acronym	OMS-nadir						
Full name	Ozone Monitoring Suite - nadir scanning unit						
Purpose	Atmospheric chemistry - Ozone profile and total-column or gross profile of other species. Tracked species: BrO, HCHO, NO2, O3, OCIO, SO2 and aerosol						
Short description	Three bands - UV1 250-300, UV2 300-320, VIS 320-500 nm. See table below for more details.						
Background	Replacing TOU + SBUS flown on FY-3 A/B/C						
Scanning Technique	Total ozone mapper: swath 2900 km. Profiler: non-scanning						
Resolution	See table below for each band.						
Coverage / Cycle	Global coverage: mapper once/day, profiler in 40 days. Daylight only.						
Mass	Power		Data Rate				

(a)

Resolution	10 km s.s.p.					
Scanning Technique	Two views, nadir or pointing to sunglint					
Background	New development					
Short description	Fourier transform spectrometer operating in four NIR/SWIR bands [see detailed characteristics below]					
Purpose	Atmospheric chemistry - Measurement of CO2, CH4, CO, N2O					
Full name	Greenhouse-gases Absorption Spectrometer					
Acronym	GAS					

Рисунок 4.1.7 — Характеристики прибора OMS-nadir (а); характеристики прибора GAS (б)

15 июля 2004 г. NASA был запущен научно-исследовательский спутник AURA, предназначенный для изучения атмосферы Земли. Основной задачей спутника является контроль изменения климата на Земле, загрязнением воздуха, состоянием озонового слоя Земли. Приборы OMI и MLS, установленные на AURA измеряют стандартные загрязнители, такие как CO, H₂O, N₂O, O₃, NO₂, SO₂ и аэрозоли. На рисунке 4.1.4 представлены характеристики приборов MLS и OMI.

В январе 2009 г. Японским агентством аэрокосмических исследований JAXA на солнечно-синхронную орбиту был запущен спутник для наблюдения за парниковыми газами GOSAT. В рамках продолжения программы, в 2018 г. был запущен спутник GOSAT2. Спутники серии GOSAT оснащены Фурье-спектрометрами TANSO-FTS и TANSO-FTS-2 для измерения с высоким спектральным разрешением отражённого солнечного и теплового излучения. Спутники осуществляют глобальный мониторинг углекислого газа и метана в атмосфере. Данные GOSAT доступны в свободном доступе из центра распространения данных (prdct.gosat-2.nies.go.jp). На рисунке 4.1.5 представлены характеристики прибора TANSO-FTS/2.

С 2001 г. Европейским космическим агентством запущен и продолжает функционировать спутник ODIN, основная задача которого направлена на изучение состава атмосферы. На борту спутника имеется два прибора: оптический спектрограф OSIRIS и радиометр SMR. На рисунке 4.1.6, представлены характеристики приборов SMR и OSIRIS.

Инструмент	Носитель	Восста- новление	Тип прибора	Тип сканирования	Наличие данных	Доступность данных	Примеч.
ACDL (Aerosol and Carbon Detection Lidar)	DQ-1 also AEMS	CO ₂	лидар	В надир	—	*	
EMI-2 (Environment Monitoring Instrument-2)	Environment Monitoring Satellite) or Daqi-1	H ₂ O, O ₃	спектро- метр	Поперечное, полоса 2500 км			*
ACE-FTS (Atmospheric Chemistry Experiment - Fourier Transform Spectrometer)	Scientific Satellite-1 (SCISAT-1)	СО ₂ , СН ₄ , N ₂ O, SF ₆ , H ₂ O, CO, Фреон-11, Фреон-12, О ₃		Лимбовые наблюдения Солнца	+	https://databace.scisat.ca /level2/	**
MAESTRO (Measurements of Aerosol Extinction in the Stratosphere and Troposphere Retrieved by Occultation)		H ₂ O, O ₃					**
AIUS (Atmospheric Infrared Ultra- spectral spectrometer)	Gao Fen-5-02 (GF-5- 02)	СО ₂ , СН ₄ , N ₂ O, H ₂ O, CO, Фреон-11, Фреон-12, O ₃			_	*	
GMI (Greenhouse-gases Monitoring Instrument)		CO ₂ , CH ₄		Поперечное, полоса 800 км	_		*
EMI (Environment Monitoring Instrument)		H_2O, O_3		Поперечное, полоса 2500 км	_		
OMS-nadir (Ozone Monitoring Suite — nadir scanning unit)	Feng-Yun-3F (FY-3F)	H ₂ O		В надир	_	*	
GAS (Greenhouse-gases Absorption Spectrometer)	Feng-Yun-3D (FY-3D)	CO ₂ , CH ₄ , N ₂ O, CO		В надир и в области солнечного блика	_		*

Таблица 4.1 — Приборы, действующие в настоящее время на орбите, для определения концентрации газов в атмосфере

Инструмент	Носитель	Восста- новление	Тип прибора	Тип сканирования	Наличие данных	Доступность данных	Примеч.
GHGSat-spectrometer (GHGSat Imaging Spectrometer)	Greenhouse Gas Satellite (GHGSat)	CO ₂ , CH ₄	интерферо метр	Электронное сканирование в фокальной плоскости	+	https://earth.esa.int/eogat eway/catalog/ghgsat- archive-and-tasking	***
OCO (Orbiting Carbon Observatory) OCO (Orbiting Carbon Observatory)	Orbiting Observatory-2 2)Carbon (OCO- 2)International Station (ISS)Space	CO ₂	спектро- метр	Поперечное, полоса 10 км (в надир, в области солнечного блика, наблюдение заданной области		https://disc.gsfc.nasa.gov /datasets?keywords=OC O-2&page=1	
SAGE-III (Stratospheric Aerosol and Gas Experiment-III)		H_2O, O_3		Лимбовые наблюдения Солнца и Луны		https://asdc.larc.nasa.gov /project/SAGE %20III- ISS	**
TANSO-FTS (Thermal And Near infrared Sensor for carbon Observations — Fourier Transform Spectrometer)	Green-house gas Observing Satellite (GOSAT)	CO ₂ , CH ₄ , H ₂ O, O ₃	интерферо метр	Поперечное, полоса 790 км	+	https://prdct.gosat- 2.nies.go.jp/aboutdata/di rectsftpaccess.html.en	
TANSO-FTS-2 (Thermal And Near infrared Sensor for carbon Observations — Fourier Transform Spectrometer-2)	Green-house gas Observing Satellite-2 (GOSAT-2)						
MOPITT (Measurement Of Pollution In The Troposphere	Earth Observation System-Terra (Terra)	CH ₄ , CO	спектро- метр	Поперечное, полоса 640 км		https://terra.nasa.gov/dat a/mopitt-data	**
TROPOMI (Tropospheric Monitoring Instrument)	Sentinel-5 precursor (Sentinel-5P)	CH ₄ , N ₂ O, H ₂ O, CO, O ₃		Поперечное, полоса 2600 км		https://s5phub.copernicu s.eu/dhus/#/home	** + ИКИ
SMR (Sub-Millimetre Radiometer)	Odin	N_2O, H_2O, O_3	радиометр	Лимбовое зондирование		http://odin.rss.chalmers.s e/dataaccess	**

Инструмент	Носитель	Восста- новление	Тип прибора	Тип сканирования	Наличие данных	Доступность данных	Примеч.
OSIRIS (Optical Spectrograph and Infra-Red Imaging System)	Odin	O ₃	спектро- метр, радиометр	Лимбовое зондирование	+	https://research- groups.usask.ca/osiris/da ta-products.php	
GEMS (Geostationary Environmental Monitoring Spectrometer)	Geostationary Korea Multi-Purpose Satellite-2B(GEO- KOMPSAT-2B)	H ₂ O, O ₃	спектро- метр	Электронное сканирование в фокальной плоскости	_	****	
GOME-2 (Global Ozone Monitoring Experiment-2)	Meteorological operational satellite-B (MetOp-B)			Поперечное с полосой 960 или 1920 км (в надир,	+	https://navigator.eumetsa t.int/search?query=gome -2	***
GOME-2 (Global Ozone Monitoring Experiment-2)	Meteorological operational satellite-C (MetOp-C)			каждые 6 с			
MLS (Microwave Limb Sounder)	Earth Observation System-Aura (EOS-	H_2O, O_3, N_2O		Лимбовое зондирование		disc.gsfc.nasa.gov	**
OMI (Ozone Monitoring Instrument)	Aura)	H ₂ O, O ₃		Поперечное с полосой 2600 или 725 км			** + ИКИ
OMPS-limb (Ozone Mapping and Profiler Suite)	Suomi National Polar- orbiting Partnership	O ₃	спектро- метр	Лимбовое зондирование	+	disc.gsfc.nasa.gov	**
OMPS-nadir (Ozone Mapping and Profiler Suite)	(SNPP)			В надир			**
OMPS-nadir (Ozone Mapping and Profiler Suite)	National Oceanic and Atmospheric Administration-20 (NOAA-20)						**

Инструмент	Носитель	Восста- новление	Тип прибора	Тип сканирования	Наличие данных	Доступность данных	Примеч.
SBUV/2 (Solar Backscatter Ultraviolet-2)	National Oceanic and Atmospheric Administration- 19(NOAA-19)		спектр- радиометр		+	https://disc.gsfc.nasa.gov /	*

Примечание:

* Данные в закрытом доступе/нет открытых центров распространения данных. ** Данные в свободном доступе. ** +ИКИ. Данные в свободном доступе. Суммарные значения концентраций в столбце доступны в архивах ЦКП «ИКИ-Мониторинг».

*** Данные доступны по лицензии / письменному запросу.

Спутник	Прибор	Название	Обозначение	Доступность
Sentinel-5P (TROPOMI	Оксид углерода	CO	2018 – наст. время
		Формальдегид	НСНО	
		Метан	CH ₄	
		Диоксид серы	SO ₂	
		Озон	O ₃	
		Диоксид азота	NO ₂	
		Аэрозольный индекс	AER_AI	
AURA (OMI, MLS	Диоксид серы	SO ₂	2004 – наст. время
		Озон	O ₃	
		Формальдегид	НСНО	
		Диоксид Хлора	OCIO	
		Оксид Брома	BrO	
		Диоксид Азота	NO ₂	
		Аэрозольный индекс	AI	
AURA	MLS	Метанол	CH ₃ OH	2004 – наст. время
		Водяной пар	H ₂ O	
Metop	IASI	Озон	O ₃	2017 – наст. время
-		Оксид углерода	CO	
		Метан	CH ₄	
		Диоксид серы	SO ₂	
		Аммиак	NH ₃	
SNPP,	CrIS, OMPS-	Метан	CH ₄	2021 – наст. время
NOAA	nadir	Диоксид углерода	CO ₂	
		Оксид азота	N ₂ O	
		Оксид углерода	CO	
		Пероксиацетилнитрат	CH ₃ CO–O ₂ –NO ₂	
		Водяной пар	H ₂ O	
		Аммиак	NH ₃	
		Озон	O ₃	
OCO-2	OCO	Кислород	O ₂	2014-2022
		Диоксид углерода	CO ₂	
GOSAT-2	TANSO-	Диоксид углерода	CO ₂	2009–2020
	FTS-2	Метан	CH ₄	
		Оксид углерода	CO	
ODIN	SMR	Озон	O ₃	2001 – наст. время
		Монооксид хлора	ClO	
		Водяной пар	H ₂ O	
		Оксид азота	NO	
		Окись углерода	СО	
ODIN	OSIRIS	Озон	03	2001 – наст. время
		Диоксид азота	NO ₂	1
		Оксид брома	BrO	

Таблица 4.2 — Список кон	нцентраций газовых составляющих
по приборам с отк	рытым доступом к данным.

В Китайской народной республике существует несколько космических аппаратов, которые могут измерять концентрации газовых составляющих в атмосфере. Два КА серии FengYun 3, а именно F и D, на которых установлены приборы OMS и GAS соответственно, а также КА GaoFen-5, который оснащён приборами AIUS, GMI, EMI. На рисунке 4.1.7 представлены характеристики приборов OMS-nadir и GAS.

Список основных действующих приборов, ориентированных на измерение концентраций малых газовых составляющих в атмосфере, приведён в таблице 4.1.

Следует также отметить, что к данным значительного числа этих приборов в настоящее время имеется свободный доступ. Основными центрами распространения спутниковых данных с информацией о концентрациях газовых составляющих являются: американский и европейский сервисы распространения данных NASA (disc.gsfc.nasa.gov) и ESA (earth.esa.int), соответственно. В таблице 4.1 также приведена информация о том к данным каких приборов в настоящее время имеется свободный доступ. В таблице 4.2 также приведён список приборов и газовых составляющих, к данным по которым имеется свободный доступ.

4.2 Организация работы с информационными продуктами по малым газовым составляющим на базе ЦКП «ИКИ-Мониторинг»

В настоящее время в рамках Центра коллективного пользования ЦКП «ИКИ-Мониторинг» (ЦКП «ИКИ-Мониторинг», <u>http://ckp.geosmis.ru/</u>) организован сбор и обработка данных различных информационных продуктов концентраций малых газовых составляющих в атмосфере. Так, постоянно ведётся сбор и обработка информации, получаемой на основе данных приборов TROPOMI (Sentinel-5P) и OMI (AURA).

Получение и архивация этих данных реализована в полностью автоматическом режиме из американского и европейского центра распространения данных. Данные представляют собой информацию с одного оборота спутника вокруг Земли с временными точками начала и конца съёмки. Для удобства использования и анализа, на этапе обработки и подготовки к архивации данные нарезаются на сеансы по пять минут (примеры пространственных покрытий данных, имеющихся в центре, приведены на рисунке 4.2.1). Также используя мета-информацию, в том числе флаги качества данных, происходит фильтрация данных, после чего данные заносятся в архивы и каталоги ЦКП «ИКИ-Мониторинг». В центре сегодня ведутся архивы информации о концентрации в различных слоях атмосферы следующих малых газов и аэрозольного индекса:

- диоксида серы (SO₂);
- диоксида азота (NO₂);
- озона (О₃);
- метана (CH₄);
- угарного газа (СО);
- аэрозольного индекса.

По прибору TROPOMI эти данные доступны с апреля 2018 г., по прибору OMI — с 2004 г.



(a)

(б)

Рисунок 4.2.1 — Ежедневные покрытия сеансами по данным TROPOMI (а) и ОМІ (б)
Спутник	Прибор	Газ	Продукт	период
Sentinel 5P	TROPOMI	NO_2	1, 2, 3, 4, 5	2018 – наст. время
		SO_2	1, 2, 3, 4	
		O ₃		
		СО		
		CH ₄		
		UV Aerosol Index		
AURA	OMI	SO ₂	1	2004 – наст. время
AURA	OMI	NO_2		
AURA	OMI	UV Aerosol Index		2020 – наст. время

Таблица 4.2.1 — Состояние имеющихся в ЦКП «ИКИ-Мониторинг» архивов информационных продуктов по малым газовым составляющим и аэрозольному индексу

Примечание. По всем продуктам доступны максимальная, средняя и минимальная концентрации. Список продуктов:

- 1. Дневной композит.
- 2. Недельный композит.
- 3. Месячный композит.
- 4. Годовой композит.
- 5. Многолетний композит.



Рисунок 4.2.2 — Пример многолетнего композитного изображения со средней концентрацией NO₂ по данным прибора TROPOMI за 2018–2021 гг.

Для мониторинга и анализа динамики состояния атмосферы строятся статистические временные композиты по каждому информационному продукту по малым газовым составляющим. Пользователям информационных систем доступны ежедневные, еженедельные, ежемесячные, годовые и многолетние композиты, содержащие информацию о средней, максимальной и минимальной концентрации газа в полном столбце атмосферы. Такие продукты строятся по территории всего Земного шара. Пример многолетнего композитного изображения со средней концентрацией NO₂ по данным

прибора TROPOMI за 2018-2021 года приведён на рисунке 4.2.2. Текущее состояние архивов таких продуктов приедено в таблице 4.3.

Для работы с различными информационными продуктами по малым газовым составляющим в системе ВЕГА-Science (уникальная научная установка входящая в состав ЦКП «ИКИ-Мониторинг», <u>http://sci-vega.ru</u>) реализованы различные возможности для проведения их распределённой обработки и анализа. Так, например, с помощью разработанной в ИКИ РАН технологии «объектного» мониторинга, которая позволяет рассчитывать значения различных показателей (продуктов, каналов) внутри произвольных полигонов исследуемых объектов, был составлен рейтинг самых загрязнённых диоксидом азота городов России. На рисунке 4.2.3 приведён пример продукта цветосинтез, построенного средствами системы ВЕГА-Science на основе данных прибора TROPOMI за различные годы наблюдений. На таком продукте достаточно хорошо видны как устойчивые источники загрязнений, которые выделяются белым цветом, так и источники, появляющиеся в различные годы (они выделяются различными цветами), например, зоны интенсивных природных пожаров различных лет. В том числе, достаточно хорошо видно, что над зоной устойчивого торгового маршрута судов из Восточной Азии в Европу наблюдается зона фактически постоянного загрязнения атмосферы.



Рисунок 4.2.3 — Цветосинтез средней концентрации NO₂ за 2018 (Red), 2019 (Green) и 2020 (Blue) годы на основе данных прибора TROPOMI. Красными стрелками отмечен маршрут судов Восточная Азия — Европа

Особо следует отметить, что все архивы ЦКП «ИКИ-Мониторинг» в настоящее время могут быть доступны для проведения программной обработки имеющихся в них данных и поэтому могут быть хорошей информационной основой для решения задач настоящего проекта, обеспечивая работу со спутниковыми данными по всей зоне интереса проекта.

Также отметим, что на основе уже реализованных и отлаженных в центре технологий и методов, а также имеющейся вычислительной инфраструктуры может быть организована работа с данными других, в том числе российских спутниковых систем, ориентированных на изучение и мониторинг малых газовых составляющих в атмосфере.

Заключение

Представленные в настоящей главе материалы показывают, что в рамках решения основной задачи проекта — создания технологии и системы дистанционного (спутникового) научного мониторинга концентраций и потоков малых газовых составляющих атмосферы, в том числе — парниковых газов — в соответствии с планом работ на начальный этап (2022 г.) были получены следующие основные результаты:

- 1. Выполнен обзор основных систем мониторинга газовых составляющих и доступности их информационных продуктов.
- 1. Описана организация работы с информационными продуктами по малым газовым составляющим на базе ЦКП «ИКИ-Мониторинг».

Представленные материалы позволяют сделать вывод о том, что запланированные работы начального этапа (2022) в рамках основной задачи проекта — создания технологии и системы дистанционного (спутникового) научного мониторинга концентраций и потоков малых газовых составляющих атмосферы, в том числе — парниковых газов — выполнены в полном объёме. Анализ результатов позволяет констатировать, что проект имеет необходимую инфраструктурную обеспеченность для достижения основной цели НИР.

ГЛАВА 5 ОБЕСПЕЧЕНИЕ ВОЗМОЖНОСТИ ОПЕРАТИВНОЙ ОЦЕНКИ, НА ОСНОВЕ СУЩЕСТВУЮЩИХ И ПЕРСПЕКТИВНЫХ СРЕДСТВ ПОСТОЯННОГО СПУТНИКОВОГО МОНИТОРИНГА, ПРОСТРАНСТВЕННЫХ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ КОНЦЕНТРАЦИЙ И ПОТОКОВ ПАРНИКОВЫХ ГАЗОВ НА ТЕРРИТОРИИ РОССИИ

Введение

В настоящей главе представлены материалы работ в рамках решения основной задачи проекта – обеспечения возможности оперативной оценки, на основе существующих и перспективных средств постоянного спутникового мониторинга, пространственных распределений концентраций и потоков парниковых газов на территории России, в том числе:

- Оценка возможности построения различных информационных продуктов для анализа пространственных распределений концентраций парниковых газов на территории России на основе данных существующих спутниковых систем.
- Пример анализа динамики выбросов CO₂ крупными акваториями бореальной, субарктической и арктической зоны в период разрушения ледяного покрова.

По материалам главы также опубликована работа [2].

5.1 Оценка возможности построения различных информационных продуктов для анализа пространственных распределений концентраций парниковых газов на территории России на основе данных существующих спутниковых систем

В настоящем разделе будут приведены некоторые примеры информационных продуктов для оценки пространственных распределений концентраций и потоков парниковых газов на территории России. Данные продукты были сформированы на основе данных прибора TROPOMI установленного на спутнике Sentinel-5P. Основой для формирования продуктов стали данные, автоматически получаемые в ЦКП «ИКИ_Мониторинг» с данного аппарата (см. главу 4 настоящего отчёта). Следует отметить, что для получения представленных в разделе продуктов организована полностью автоматическая цепочка сбора и обработки данных.

5.1.1 Примеры годовых информационных продуктов

Ниже представлено пространственное распределение среднегодовой концентрации различных газов над территорией России за разные годы (диоксида азота — рисунок 5.1.1.1; угарного газа — рисунок 5.1.1.2; метана – рисунок 5.1.1.3.

Данные продукты могут использоваться, в частности, для выявления устойчивых крупномасштабных источников парниковых газов на территории страны и оценок мощности этих источников.





(б)

IR



Рисунок 5.1.1.1 — Средние значения концентрации диоксида азота (NO₂) над территорией России за различные годы: (а) 2018; (б) 2019; (в) 2020; (г) 2021





Рисунок 5.1.1.2 — Средние значения концентрации угарного газа (СО) над территорией России за различные годы: (а) 2018; (б) 2019; (в) 2020; (г) 2021





Рисунок 5.1.1.3 — Средние значения концентрации метана (CH₄) над территорией России за различные годы: а) 2018; б) 2019; в) 2020; г) 2021

5.1.2 Примеры «ежемесячных» информационных продуктов

Ниже представлены пространственные распределения среднемесячных концентраций различных газов над территорией России за разные месяцы 2021 г.

Данные продукты могут использоваться, в частности, для оценки особенностей пространственных распределений парниковых газов на территории страны связанных с переменными источниками (например, крупными природными пожарами), а также анализировать временную динамику крупных постоянных источников/стоков парниковых газов.



Рисунок 5.1.2.1 — Средняя концентрация NO₂ за период с $01{-}31.05.2021$



Рисунок 5.1.2.2 — Средняя концентрация NO $_2$ за период с 01–30.06.2021



Рисунок 5.1.2.3 — Средняя концентрация NO $_2$ за период с 01–31.07.2021



Рисунок 5.1.2.4 — Средняя концентрация NO₂ за период с 01–31.08.2021



Рисунок 5.1.2.5 — Средняя концентрация NO₂ за период с 01–30.09.2021



Рисунок 5.1.2.6 — Средняя концентрация СО за период с 01–31.05.2021



Рисунок 5.1.2.7 — Средние концентрации СО за период с 01–30.06.2021



Рисунок 5.1.2.8 — Средняя концентрация СО за период с 01.07–31.07.2021



Рисунок 5.1.2.9 — Средняя концентрация СО за период с 01–31.08.2021



Рисунок 5.1.2.10 – Средняя концентрация СО за период 01–30.09.2021

5.1.3 Примеры «еженедельных» информационных продуктов

Ниже представлены пространственные распределения средненедельной концентрации различных газов над территорией России в интервале 28.06.202120.09.2021.

Данные продукты могут использоваться, в частности, для детальной оперативной оценки особенностей пространственных распределений парниковых газов на территории страны связанных с переменными источниками (например, крупными природными пожарами), а также анализировать временную динамику крупных постоянных источников/стоков парниковых газов (например, крупных сезонно водоемов, см. п. 5.2) на синоптических масштабах.



Рисунок 5.1.3.1 — Средняя концентрация NO₂ за период 28.06–05.07.2021



Рисунок 5.1.3.2 — Средняя концентрация NO_2 за период 05–12.07.2021



Рисунок 5.1.3.3 — Средняя концентрациия NO₂ за период 12–19.07.2021



Рисунок 5.1.3.4 — Средняя концентрация NO₂ за период 19–26.07.2021



Рисунок 5.1.3.5 — Средняя концентрация NO₂ за период 26.07–02.08.2021



Рисунок 5.1.3.6 — Средняя концентрация NO₂ за период 02–09.2021



Рисунок 5.1.3.6 — Средняя концентрация NO₂ за период 09–16.08.2021



Рисунок 5.1.3.7 — Средняя концентрация NO₂ за период 16–23.08.2021



Рисунок 5.1.3.8 — Средняя концентрация NO₂ за период 23–30.08.2021



Рисунок 5.1.3.9 — Средняя концентрация NO₂ за период 30.08–06.09.2021



Рисунок 5.1.3.10 — Средняя концентрация NO₂ за период 06–13.09.2021



Рисунок 5.1.3.11 — Средняя концентрация NO₂ за период 13–20.09.2021



Рисунок 5.1.3.12 — Средняя концентрация СО за период 28.06–05.07.2021



Рисунок 5.1.3.13 — Средняя концентрация СО за период 05–12.07.2021



Рисунок 5.1.3.14 — Средняя концентрация СО за период 12–19.07.2021



Рисунок 5.1.3.15 — Средняя концентрация СО за период 19–26.07.2021



Рисунок 5.1.3.16 — Средняя концентрация СО за период 26.07–02.08.2021



Рисунок 5.1.3.17 — Средняя концентрация СО за период 02–09.08.2021



Рисунок 5.1.3.18 — Средняя концентрация СО за период 09–16.08.2021



Рисунок 5.1.3.18 — Средняя концентрация СО за период 16–23.08.2021



Рисунок 5.1.319. — Средняя концентрация СО за период 23–30.08.2021



Рисунок 5.1.3.20 — Средняя концентрация СО за период 30.08–06.09.2021



Рисунок 5.1.3.21 — Средняя концентрация СО за период 06–13.09.2021



Рисунок 5.1.3.22 — Средняя концентрация СО за период 13–20.09.2021

5.1.4 Примеры временной динамики концентраций парниковых газов в районах крупных источников загрязнений (на примере крупных городов)

На основе доступных продуктов могут быть составлены рейтинги загрязнённости городов России, в частности диоксидом азота. В таблице 5.1.4.1 приведены средние годовые концентрации диоксида азота в 15 крупных городах нашей страны. На основе анализа этих данных имеется возможность выявлять различные временные тренды. Так, например, в 2021 г. в ИКИ РАН были выявлены тренды, связанные с введением ограничительных мер на передвижение и антропогенную деятельность во время распространения Covid-19. В нескольких крупных городах нашей страны наблюдался значительный спад концентрации диоксида азота в апреле – мае 2020 г., связанный с ограничительными

мерами во время карантина (рисунки 5.1.4.1 и 5.1.4.2). Также данные продукты могут использоваться, в частности, для детальной оперативной оценки особенностей пространственных распределений парниковых газов в районах расположений их крупных источников на территории страны (в том числе крупных городов). На рисунке 5.1.4.3 представлено распределение многолетней средней концентрации диоксида азота внутри секторов (районов) Москвы, на котором видно, что наиболее загрязнённым диоксидом азота направлением является Восточное и центральное направление Москвы соответственно.

Место	Город	2018	2019	2020
1	Москва	139,31	136,34	125,82
2	Новокузнецк	87,29	103,52	100,47
3	Санкт-Петербург	95,04	92,57	70,47
4	Иркутск	72,33	81,83	82,83
5	Красноярск	65,29	66,82	72,23
6	Кемерово	59,37	72,25	68,50
7	Челябинск	60,20	68,40	67,59
8	Новосибирск	57,84	64,84	70,69
9	Нижний Новгород	58,92	52,15	48,00
10	Екатеринбург	52,66	54,22	61,77
11	Казань	45,29	46,23	42,00
12	Самара	51,60	47,90	45,00
13	Ростов-на-Дону	48,00	57,45	50,90
14	Воронеж	46,53	45,33	48,66
15	Омск	39,04	41,65	45,39

Таблица 5.14.1 — Рейтинг загрязнённости городов по средней годовой концентрации NO₂ по данным прибора TROPOMI.



Рисунок 5.1.4.1 — Ежемесячная концентрация диоксида азота за 2019–2920 гг. над территорией Москвы

Таким образом, мы видим, что уже сегодня на основе действующих спутниковых систем можно формировать ряд информационных продуктов, которые могут быть использованы для оценки пространственных распределений концентраций парниковых газов на территории России, в том числе оценку их изменчивости в различные временные периоды. Особо следует отметить, что реализованные на базе ЦКП «ИКИ-Мониторинг» схемы сбора и автоматизированной обработки данных могут использоваться для получения оперативных оценок не только с использованием прибора TROPOMI

представленного в настоящем разделе, но и данных других спутниковых приборов (например, прибора OMI установленного на спутнике AURA). При этом уже сегодня для анализа могут использоваться имеющиеся долговременные ряды данных спутниковых наблюдений (см. главу 4 настоящего отчёта).



Рисунок 5.1.4.2 — Ежемесячная концентрация диоксида азота за 2019–2920 гг. над территорией Санкт-Петербурга



Рисунок 5.1.4.3 — Распределение многолетней средней концентрации диоксида азота внутри секторов (после «перенормировки») вокруг Москвы (100 км) за 2018–2021 гг.

5.2 Пример анализа динамики выбросов CO₂ крупными акваториями бореальной, субарктической и арктической зоны в период разрушения ледяного покрова

Важным средством тестирования, оценки точности валидации/кросс-валидации развиваемых методик расчетов концентраций и потоков парниковых газов над заданной территорией является анализ временных рядов этих параметров для определенного класса

источников/стоков, демонстрирующих выраженную ярко динамику эмиссионных/поглощательных свойств. В качестве объектов исследования co «стохастической динамикой» можно рассмотреть, в частности, мощные лестные пожары природного или антропогенного происхождения. Исследование таких объектов связано с анализом интенсивных и иногда достаточно продолжительных (недельные – месячные интервалы), но однократных выбросов. Другой возможностью является рассмотрение объектов с закономерной сезонной динамикой. Зачастую речь идет о мелкомасштабных, но закономерных, периодически повторяющихся и прогнозируемых выбросах. Выбор объектов исследования должен осуществляться на основе комплексного анализа рядов дистанционных данных и результатов моделирования. В настоящем разделе приведен пример такого предварительного исследования по отношению к сезонно замерзающим пресноводным водоемам бореальной, субарктической и арктической природных зон.

Внутренние акватории (озера, пруды, водохранилища) являются важнейшим компонентом бореальных, субарктических и арктических ландшафтов. Они выступают в качестве основных индикаторов климатических и экологических изменений в северных регионах. Более того, эти акватории представляют собой неотъемлемый элемент регионального ландшафтного баланса углерода. Они функционируют как переносчики и преобразователи большого количества углерода, полученного естественным и антропогенным путём. Внутренние воды служат пассивными каналами переноса углерода от почвы к морю, а также отводят углерод из наземной среды в атмосферу и осаждают его в донные отложения.

Происходящее на Земле потепление климата наиболее выражено в высоких широтах. Оно оказывает огромное влияние на функционирование чувствительных водных экосистем. Ключевой переменной в этой динамике является органический углерод (ОУ), который связан с несколькими жизненно важными функциями экосистемы через влияние на биологическую продукцию и физико-химические свойства акваторий. Анализ процессов, связанных с органическим и неорганическим углеродом во внутренних водах (включая биологическую деятельность, физическое перемешивание, термодинамический процесс и газообмен между воздухом и водой), является ключом к пониманию роли внутренних вод в глобальном углеродном цикле, а также климатических изменений, происходящих на нашей планете.

Экосистемы высоких широт в ближайшее время подвергнутся серьезным трансформациям в условиях изменения климата, однако механизмы, а также положительные и отрицательные обратные связи этих процессов практически не изучены. Для глобального углеродного баланса особенно важна судьба огромных запасов углерода в северных водно-болотных угодьях. Предполагается, что вынос органического углерода из наземной среды будет увеличиваться в северных регионах с ростом температуры и осадков. Благодаря тесной связи водосбор – озеро, изменение климата может привести к возникновению положительной обратной связи, которая ускорит перемещение наземного углерода в атмосферу через водную поверхность и увеличение гетеротрофии озёр. На рисунке 5.2.1 представлен цикл органического углерода пресноводных акваторий высоких широт, в который вносят вклад различные внешние факторы. Органическое вещество наземных растений, хранящееся в почве, переносится в озера со стоком. Экспорт углерода обычно невелик из-за низкой продуктивности суши в этих широтах. Наличие районов с вечной мерзлотой может принести дополнительный вклад в экспорт углерода при оттаивании. Потепление климата, приводящее к озеленению Арктики (т.е. увеличению продуктивности суши и изменению видов растительности) и оттаиванию вечной увеличивает вынос углерода из суши в озера. Внутренние мерзлоты, волы рассматриваются, в настоящее время, значительными источниками СО₂ в атмосферу. Цветение водорослей акватории может снизить выбросы углерода в атмосферу, но при разложении водорослей может высвобождаться большое количество CO₂. Высокая продуктивность водорослей может превратить озеро из чистого источника СО2 в чистый

102

поглотитель углекислого газа из атмосферы. Исследования показали тесную связь между ежедневными изменениями pCO_2 (парциальное давление углекислого газа) в водоёме и солнечной радиацией, температурой воды и трофическим статусом озера. Во внутренних водах pCO_2 часто демонстрирует значительную изменчивость в сезонном масштабе. По сравнению с другими сезонами, поверхностный pCO_2 летом обычно низкий из-за интенсивного фотосинтеза и наличия фитопланктона в озерах и водохранилищах, который поглощает углекислый газ в толще воды для первичного производства. Период ледостава характеризуется медленным (из-за низкой температуры) накоплением углекислого газа во льду и в подледной воде. Период таяния льда может привести к резкому выбросу CO_2 в атмосферу из бореальных и арктических озёр, накопленного за длительный зимний период.



Рисунок 5.2.1. — Типичный цикл органического углерода (OC) пресноводных акваторий бореальной, субарктической и арктической зоны: Terrestrial — наземный перенос OC, Permafrost — перенос OC за счёт таяния вечной мерзлоты, Algae pelagic — переработка OC пелагическими водорослями (обитающими в толще или на поверхности воды), Algae benthic — переработка OC бентоносными водорослями (обитающими на грунте и в грунте дна водоёмов), Microbial decomposition — переработка OC за счёт микробного разложения, Sedimentation — осаждение OC, Burial — захоронение (депонирование) OC. Источник: https://www.arcticcirc.net/research-interests/gudasz-lake-carbon-cycles

На основании перечисленных проблем, а также обозначенных неопределенностей, нами был выполнен анализ содержания углекислого газа в атмосфере над пресноводными акваториями, расположенными в бореальной, субарктической и арктической зоне, в период разрушения ледяного покрова за 2012–2020 гг. Для этого были выбраны крупные пресноводные акватории северного полушария, находящиеся в различных географических зонах (бореальной, субарктической и арктической): оз. Байкал, Ладожское озеро, оз. Гурон, Большое Медвежье озеро, Большое Невольничье озеро и южная (пресноводная) часть Обской губы (рисунок 5.2.2 и табл. 5.2.1). В исследовании были использованы данные реанализа CAMS (EGG4) и данные продукта L1C SMOS микроволнового радиометра MIRAS.



Рисунок 5.2.2 — Исследуемые акватории: (а) оз. Байкал; (б) Ладожское озеро; (в) Большое Медвежье озеро и Большое Невольничье озеро; (г) оз. Гурон; (д) Обская губа. Зелёные и красные области — ячейки геодезической сетки DGG ISEA 4H9 продукта спутниковых данных L1C SMOS

(д)

Название акватории	Регион	Широта, ° с.ш.	Долгота
Байкал	Восточная Сибирь, бореальная зона	54,17	108,91° в.д.
Ладожское	Северо-запад России, бореальная зона	60,88	31,37° в.д.
Гурон	Великие американские озёра, бореальная зона	44,56	82,41° з.д.
Большое Медвежье	Северо-запад Канады, бореальная	65,97	120,57° з.д.
	и субарктическая зона		
Большое Невольничье	Северо-запад Канады, бореальная	61,28	114,80° з.д.
	и субарктическая зона		
Пресноводная область	Залив Карского моря, арктическая зона	67,98	73,82° в.д.
Обской губы			

Таблица 5.2. Исследуемые акватории и координаты центра ячеек продукта L1C SMOS

CAMS global greenhouse gas reanalysis (EGG4) является крупнейшим набором данных реанализа о составе атмосферы. Они предоставлены Европейским Центром среднесрочных прогнозов (ECMWF). Этот набор данных состоит из трёхмерных полей об аэрозолях и химических составляющих атмосферы с полным покрытием Земного шара. В настоящий момент доступны данные за период с 2003 по 2020 г. Реанализ CAMS EGG4 является продуктом 4d-var системы ассимиляции, в основе которой лежит модель прогноза ECMWF IFS CY42R1 (https://www.ecmwf.int/en/forecasts/documentation-andsupport/changes-ecmwf-model/ifs-documentation). Реанализ ассимилирует ланные спутникового дистанционного зондирования земли в 12-часовом временном окне с 09:00 до 21:00 UTC и с 21:00 до 09:00 UTC и обеспечивает глобальные поля атмосферных параметров на регулярной сетке координат 0,75×0,75° с временной периодичностью 3 ч. В работе использовались данные CAMS EGG4 о среднем содержании CO₂ в столбе воздуха в ppm. Ошибки данных реанализа CAMS EGG4 по CO₂ по данным наземных экспериментов в среднем находятся в пределах 1 % в нижних слоях тропосферы (https://atmosphere.copernicus.eu/sites/default/files/2021-04/CAMS84_2018SC3_D5.1.2-2020.pdf). Данные реанализа CAMS EGG4 были скачаны с сервера (https://atmosphere.copernicus.eu/) и совмещены по пространству и времени с данными яркостных температур, полученных из продукта L1C SMOS за период 2012-2020 гг.

Данные продукта L1C SMOS использовались для определения фенологических фаз (водная поверхность, ледяной покров, разрушение ледяного покрова) крупных пресноводных акваторий. Яркостная температура на горизонтальной и вертикальной поляризации продукта L1C SMOS измеряется в диапазоне углов зондирования $0-60^{\circ}$ микроволновым радиометром MIRAS (*англ.* Microwave Imaging Radiometer using Aperture Synthesis). MIRAS принимает восходящее излучение на частоте 1,41 ГГц. Максимальный пространственный охват достигается при угле визирования 42,5°, при этом пространственное разрешение составляет величину 35×65 км. Данные L1C привязаны к дискретной геодезической сетке DGG ISEA 4H9, линейный размер ячейки которой составляет величину порядка 16 км, а площадь около 195 км². Непрерывный архив данных L1C SMOS за период с 2012 г. по настоящее время хранится на серверах Европейского космического агентства (*англ*. European Space Agency — ESA).



Рисунок 5.2.3 — Характерные фенологические фазы Большого Невольничьего озера по данным радиометра MIRAS спутника SMOS. Символы — данные продукта L1C SMOS, толстые линии — модельный расчёт, красный цвет — вертикальная поляризация, синий — горизонтальная поляризация

Выполненные ранее исследования показали, что данные продукта L1C SMOS могут быть использованы для определения фенологических фаз крупных замерзающих пресноводных акваторий. На рисунке 5.2.3 представлена сезонная зависимость яркостной температуры для Большого Невольничьего озера, полученная по данным радиометра MIRAS (продукт L1C SMOS). На графиках хорошо видны три характерные области, соответствующие периоду открытой водной поверхности, установившемуся ледяному покрову и кратковременному периоду разрушения ледяного покрова.



Рисунок 5.2.4 — Сравнение данных реанализа и фенологических фаз пресноводных акваторий: (а) оз. Байкал; (б) Ладожское озеро; (в) Большое Медвежье озеро; (г) Большое Невольничье озеро; (д) оз. Гурон; (е) пресноводная область Обской губы. Овалом и стрелкой показаны выбросы CO₂, соответствующие периоду разрушения ледяного покрова акватории

Сравнение данных реанализа и продукта L1C SMOS показало, что в период разрушения ледяного покрова в некоторые годы у ряда акваторий происходит кратковременный сильный (по сравнению с фоном) выброс углекислого газа (рисунок 5.2.4). Такие характерные выбросы наблюдаются у озера Байкал (2012, 2014, 2015, 2017), у оз. Большое Невольничье (2012, 2014, 2015, 2019) и у оз. Большое Медвежье (2019 г.). Как было отмечено, выбросы СО₂ в период разрушения ледяного покрова, могут быть связаны с накоплением углекислого газа во льду и в подлёдном слое воды за длительный зимний период.

Центральная область Ладожского озера и озера Гурон достаточно редко замерзает в зимний период в последнее время, а если и замерзает, то на незначительный срок. Это хорошо подтверждается спутниковыми данными (рисунок 5.2.46, д). Таким образом, выбросы CO₂, характерные для периода разрушения ледяного покрова, не должны наблюдаться на этих озерах из-за отсутствия льда или очень короткого периода его существования, что и подтверждается рисунком 5.2.46, д.

Обская губа является устьевой областью реки Обь, поэтому здесь происходит постоянная смена вод. Вероятно, это препятствует накоплению углекислого газа подо льдом в зимний период и обуславливает отсутствие выбросов CO₂ на графиках в период разрушения ледяного покрова (рисунок 5.2.4е).

Привлекает внимание отсутствие выбросов СО2 на графиках для Большого Медвежьего озера (за исключением 2019 г.) по сравнению с Большим Невольничьем озером и оз. Байкал (рисунок 5.2.4а, в, г). Дальнейший анализ показал, что низкая слабая обеспеченность биогенными элементами, отсутствие температура воды, источников загрязнения обусловливают низкую биологическую пролуктивность Большого Медвежьего озера. Озеро является ультраолиготрофным с высоким качеством воды, все биологические сообщества представлены здесь бедным видовым составом с низкими количественными показателями. Высшая водная растительность в озере практически отсутствует из-за длительного периода ледостава. Озеро практически не имеет рыбохозяйственного коммерческого значения — в нём довольно низкая рыбная продукция.

Озеро Большое Невольничье, хоть и находится в том же регионе, что и Большое Медвежье, обладает значительно большей биопродуктивностью. Летом ежедневно река Невольничья вносит в озеро 54 тыс т растворенных минеральных соединений и 36 тыс т взвешенных веществ. Рыбное население озера довольно разнообразное, коммерческое значение имеют лосось, форель, сиг. По сравнению с Большим Медвежьем озером, биопродуктивность Большого Невольничьего озера значительно больше, что и отражается на графиках (см. рисунок 5.2.4г).

Растительный и животный мир озера Байкал чрезвычайно богат. В настоящее время в Байкале известно 1550 видов и разновидностей животных и 1085 видов растительных организмов. Таким образом, биопродуктивность озера очень высокая, что должно приводить к выбросам CO₂ в период разрушения ледяного покрова. Это хорошо подтверждается представленными на рисунке 5.2.4 а графиками (2012, 2014, 2015, 2017).

Представленные результаты требуют дальнейшего серьёзного анализа, так как остаётся непонятным отсутствие выбросов CO_2 в период разрушения льда в некоторые годы у озёр Байкал и Большое Невольничье (см. рисунок 5.2.4а, г). Кроме того, непонятно появление выброса CO_2 в 2019 г. у озера Большое Медвежье. Для ясного понимания процессов, связанных с углеродным циклом северных (замерзающих) пресноводных акваторий, необходимо комплексное изучение и анализ большого числа факторов: климатических характеристик региона, особенностей местной атмосферной циркуляции, биопродуктивности акваторий, характеристик их водосбора, а также антропогенного и техногенного воздействия на окружающую среду.

Заключение

Представленные в главе материалы работ показывают, что в рамках решения основной задачи проекта — обеспечения возможности оперативной оценки, на основе существующих и перспективных средств постоянного спутникового мониторинга, пространственных распределений концентраций и потоков парниковых газов на территории России — получены следующие основные результаты:

- подтверждена возможность построения различных информационных продуктов для анализа пространственных распределений концентраций парниковых газов на территории России на основе данных существующих спутниковых систем с использованием инфраструктурных средств ЦКП «ИКИ-Мониторинг»;
- на примере анализа динамики выбросов CO₂ крупными акваториями бореальной, субарктической и арктической зоны в период разрушения ледяного покрова показана принципиальная возможность тестирования, оценки точности, валидации/кроссвалидации развиваемых методик расчета концентраций и потоков малых газовых компонент атмосферы Земли.

Представленные материалы позволяют сделать вывод о том, что запланированные работы начального этапа (2022) в рамках основной задачи обеспечения возможности оперативной оценки, на основе существующих и перспективных средств постоянного спутникового мониторинга, пространственных распределений концентраций и потоков парниковых газов на территории России выполнены в полном объёме.
ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представленный отчёт по теме «Дистанционный мониторинг распределения концентраций и потоков малых газовых составляющих в атмосфере Земли» (№ FFWG-2022-0013) показывает, что в соответствии с планом ИКИ РАН на 2022 год они велись по следующим основным направлениям:

- Физические принципы, реализованные и перспективные методы и средства спутникового мониторинга концентраций малых газовых составляющих атмосферы;
- Анализ доступности, характеристик и принципов организации данных дистанционных измерений концентраций малых газовых составляющих атмосферы Земли средствами спутникового мониторинга;
- Исследование возможностей ассимиляции (усвоения) данных ДЗЗ в моделях атмосферной циркуляции с целью восстановления полной картины состояния и динамики полей малых газовых составляющих и балансовой оценки их бюджетов над различными территориями и за разные интервалы времени.
- Анализ возможностей проверки, валидации (кросс-валидации) балансовых оценок бюджетов малых газовых составляющих на основе независимых данных контактного и дистанционного мониторинга, а также модельных расчётов.

В рамках данной тематики опубликовано в 2022 г. 2 работы, из них 1 в рецензируемых изданиях, входящих в Scopus и WoS (плановый показатель 1), а также сделан 1 доклад на Международной конференции «Современные проблемы дистанционного зондирования Земли из космоса», ИКИ РАН, Москва, 14–18 ноября 2022 г. (плановый показатель 1).

Таким образом, поставленные в плане задачи на 2022 г. в рамках данной темы решены в полном объёме.

ПУБЛИКАЦИИ

Опубликовано 2 работы, из них:

- в зарубежных изданиях 0
- книг 0
- статьи в отечественных научных рецензируемых журналах 1
- статьи в сборниках материалов конференций 0
- материалы конференции 1
- доклады, тезисы 0
- публикаций по грантам РНФ 0
- в соавторстве с зарубежными авторами 0
- статьи в WOS и Scopus 1
- статьи в WOS и Scopus (Q1, Q2) 0
- статьи в WOS и Scopus (Q3, Q4) 1

Публикации в отечественных научных рецензируемых изданиях

1. Трохимовский А.Ю., Кораблев О.И., Иванов Ю.С., Патракеев А.С., Фёдорова А.А., Дзюбан И.А., Дружин В.В., Полуаршинов М.А., Смирнов Ю.В. Инфракрасный канал научной аппаратуры «Дриада» для измерения содержания парниковых газов из космоса // Современные проблемы дистанционного зондирования Земли из космоса. 2022. Т. 6. (в печати). (Scopus, РИНЦ)

Материалы конференции

 Тихонов В.В., Пашинов Е.В., Ермаков Д.М., Хвостов И.В., Романов А.Н. Выбросы СО₂ крупными акваториями бореальной, субарктической и арктической зоны в период разрушения ледяного покрова: сравнение данных реанализа и спутниковой микроволновой радиометрии // Материалы 20-й Международной конф. «Современные проблемы дистанционного зондирования Земли из космоса». 14–18 нояб. 2022, ИКИ РАН. 2022. С. 496. DOI: 10.21046/20DZZconf-2022a. (РИНЦ)