

СПЕКТРОСКОПИЯ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ

УДК 535.23; 535.34

Метод определения вертикального профиля отношения концентраций HDO/H₂O в атмосфере из спутниковых спектров, измеренных одновременно в двух спектральных диапазонах: тепловом и ближнем ИК

И.В. Задворных¹, К.Г. Грибанов¹, Н.Ю. Денисова^{1, 2},
В.И. Захаров^{1, 2}, R. Imasu^{3*}

¹ Институт естественных наук и математики УрФУ

620000, г. Екатеринбург, пр. Ленина, 51

² Институт математики и механики им. Н.Н. Красовского УрО РАН

620990, г. Екатеринбург, ул. Софьи Ковалевской, 16

³ Atmosphere and Ocean Research Institute, The University of Tokyo

General Research Building Room No. 315b, 5-1-5 Kashiwanoha, Kashiwa-shi, Chiba 277-8568, Japan

Поступила в редакцию 30.06.2020 г.

Предложен оригинальный метод решения обратной задачи гиперспектрального спутникового зондирования атмосферы для восстановления вертикального профиля отношения концентраций HDO/H₂O в атмосфере с одновременным обращением спектров теплового и ближнего ИК-диапазонов. Проведен вычислительный эксперимент по восстановлению вертикального профиля относительного содержания изотополога HDO в атмосферном водяном паре с использованием модельных спектров высокого разрешения с параметрами спутникового ИК-Фурье-спектрометра TANSO-FTS/GOSAT-2. Решение обратной задачи выполнено методом оптимального оценивания с учетом одновременного обращения спектров теплового и ближнего ИК-диапазонов. В качестве априорного статистического ансамбля вертикальных профилей концентрации изотополов водяного пара использовались выходные данные изотопической версии модели общей циркуляции атмосферы ECHAM6-wiso.

Ключевые слова: дистанционное зондирование, обратная задача, изотопологии водяного пара, GOSAT-2; remote sensing, inverse problem, water vapor isotopologues, GOSAT-2.

Введение

За последние несколько десятилетий все более актуальной становится проблема изменения климата Земли. Водяной пар в атмосфере является парниковым газом и ключевым компонентом гидрологического цикла, оказывающим большое влияние на энергетический баланс атмосферы и атмосферную циркуляцию. Один из способов получения информации об изменениях гидрологического цикла и процессах, происходящих в атмосфере Земли, — измерение относительного содержания стабильных изотополов водяного пара. Первые четыре наиболее распространенных изотополога воды: H₂¹⁶O (99,732%), H₂¹⁸O (0,2%), H₂¹⁷O (0,037%) и HD¹⁶O (0,031%). Изотопический состав водяного пара меняется при фазовых превращениях. Например, процессы кон-

денсации тяжелого изотополога воды HDO происходят быстрее, а процессы испарения — медленнее; в отличие от основного изотополога H₂¹⁶O каждый цикл испарения и конденсации приводит к уменьшению относительного содержания HDO в атмосферном водяном паре. Наличие информации об относительном содержании изотополов водяного пара в атмосфере может расширить представления о процессах, влияющих на гидрологический цикл, что позволит улучшить прогностические возможности климатических моделей.

Изотопический состав исследуемого образца принято представлять в виде δ-величин — изменения отношения содержания менее распространенного изотополога к наиболее распространенному, отнесенного к их стандартному отношению:

$$\delta A = \left[\frac{(N_x/N_a)}{(N_x/N_a)_{\text{std}}} - 1 \right] \cdot 1000\%, \quad (1)$$

где A — атомный символ; (N_x/N_a)_{std} различно для разных атомов. При определении относительного

* Илья Викторович Задворных (ilia.zadvornyh@urfu.ru); Константин Геннадьевич Грибанов (kgribanov@remotesensing.ru); Нина Юрьевна Денисова (n.denisova@wsibiso.ru); Вячеслав Иосифович Захаров (v.zakharov@remotesensing.ru); Imasu Ryoichi (imasu@aori.u-tokyo.ac.jp).

содержания HD¹⁶O (δD) или H₂¹⁸O ($\delta^{18}\text{O}$) используются стандарты океанической воды VSMOW (Vienna Standard Mean Ocean Water), равные $155,76 \cdot 10^{-6}$ и $2005,2 \cdot 10^{-6}$ соответственно [1].

Относительное содержание изотопологов в атмосфере определяется посредством дистанционных [2, 3] и *in situ* [4] измерений изотопического состава водяного пара у поверхности и воды в осадках. Совершенствование технологий спутникового дистанционного зондирования позволило получать дополнительную информацию об относительном распределении HD¹⁶O в атмосфере, однако спутниковые измерения пока не обладают достаточной точностью для определения относительного содержания H₂¹⁷O и H₂¹⁸O. Первые спутниковые измерения δD в нижней и средней тропосфере были проведены сенсором IMG/ADEOS в тепловом диапазоне [5, 6]. Последующие эксперименты по измерению вертикальных профилей и среднего содержания δD в атмосферном столбе были проведены сенсорами TES/AURA в тепловом диапазоне [7], SCIAMACHY/ENVISAT – в ближнем ИК- [8], IASI/MetOp [9] – в тепловом и TANSO-FTS/GOSAT – в ближнем ИК-диапазонах [10, 11].

Цель настоящей работы – предложить метод решения обратной задачи спутникового зондирования атмосферы для восстановления вертикального профиля отношения HDO/H₂O в атмосфере с одновременным обращением спектров теплового и ближнего ИК-диапазонов.

В 2018 г. в рамках продолжения проекта глобального мониторинга распределения парниковых газов в атмосфере был выведен на орбиту второй японский спутник GOSAT-2. На борту спутника размещен Фурье-спектрометр TANSO-FTS-2 со спектральным разрешением $0,2 \text{ см}^{-1}$ для наблюдения в надир в пяти спектральных интервалах: два в тепловом ИК- ($700\text{--}1188, 1188\text{--}1800 \text{ см}^{-1}$) и три в ближнем ИК-диапазонах ($4200\text{--}5200, 5900\text{--}6400, 12950\text{--}13250 \text{ см}^{-1}$) [12]. GOSAT и GOSAT-2 – единственные спутники, способные проводить измерения в тепловом и ближнем ИК-диапазонах одновременно. Спектры, измеренные GOSAT-2, находятся в открытом доступе с февраля 2019 г.

Обратная задача

Прямая задача атмосферной оптики, моделирующая спектр излучения по известным атмосферным параметрам, может быть записана в виде [13]:

$$\mathbf{y} = F(\mathbf{x}) + \varepsilon, \quad (2)$$

где \mathbf{y} – измеренный спектр; \mathbf{x} – вектор атмосферных параметров; $F(\mathbf{x})$ – прямая модель переноса излучения в атмосфере; ε – ошибка измерения.

Обратная задача сводится к нахождению вектора атмосферных параметров \mathbf{x} по измеренному спектру \mathbf{y} и является некорректной. Эта задача имеет решение, но его единственность и устойчивость тре-

буют доказательств. Для обеспечения единственности решения привлекается дополнительная информация о его возможном поведении, а для обеспечения устойчивости используются специальные методы решения на основе регуляризации Тихонова, одним из которых является метод оптимального оценивания.

В настоящей работе для решения обратной задачи был использован статистический метод оптимального оценивания, основанный на байесовских оценках состояния атмосферы. В указанном методе минимизируется целевая функция

$$J(\mathbf{x}) = [\mathbf{y} - F(\mathbf{x})]^T \mathbf{S}_y^{-1} [\mathbf{y} - F(\mathbf{x})] + [\mathbf{x} - \mathbf{x}_a]^T \mathbf{S}_a^{-1} [\mathbf{x} - \mathbf{x}_a], \quad (3)$$

где \mathbf{S}_y – ковариационная матрица ошибок измерения; \mathbf{S}_a – априорная ковариационная матрица атмосферных параметров; \mathbf{x}_a – априорный профиль атмосферных параметров. Минимизация целевой функции обычно осуществляется методом Гаусса–Ньютона или Левенберга–Марквардта, который представляет собой сочетание метода Гаусса–Ньютона и метода градиентного спуска. В этой работе использован метод Левенберга–Марквардта, описываемый итерационной формулой

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_{i+1} = & \mathbf{x}_i + \left(\mathbf{K}_i^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K}_i + \mathbf{S}_a^{-1} + \lambda_i \mathbf{D}_i \right)^{-1} \times \\ & \times \left[\mathbf{K}_i^T \mathbf{S}_y^{-1} (\mathbf{y} - F(\mathbf{x}_i)) - \mathbf{S}_a^{-1} (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_a) \right], \end{aligned} \quad (4)$$

где $\mathbf{K}_i = \mathbf{K}(\mathbf{x}_i)$ – матрица первых производных прямой модели по восстанавливаемым атмосферным параметрам; \mathbf{x}_i – восстанавливаемый профиль атмосферных параметров; \mathbf{D}_i – диагональная матрица с диагональю как у матрицы $\mathbf{K}_i^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K}_i$; λ_i – неотрицательный параметр, итеративно определяемый выражением [14, 15]:

$$\lambda_i = \theta \|F(\mathbf{x}_i) - \mathbf{y}\| + (1 - \theta) \|\mathbf{K}_i^T \mathbf{S}_y^{-1} (F(\mathbf{x}_i) - \mathbf{y})\|, \quad 0 < \theta \leq 1, \quad (5)$$

Параметр θ выполняет роль параметра регуляризации, который не позволяет искомому решению слишком сильно отдаляться от начального приближения, тем самым ограничивая класс возможных решений. Значения θ в достаточно большой окрестности 0,5 приводят к одним и тем же устойчивым решениям поставленной обратной задачи, поэтому в настоящей работе θ полагалось равным 0,5 для всех вычислительных экспериментов.

Методика вычислительного эксперимента по восстановлению вертикального профиля δD

В нашей работе для вычислительного эксперимента по восстановлению вертикального профиля δD использованы спектры теплового и ближнего ИК-диа-

пазонов, смоделированные с параметрами сенсора TANSO-FTS/GOSAT-2. Используемые для восстановления HD¹⁶O спектральные микроокна представлены на рис. 1.

При использовании двух разных спектральных интервалов с различными прямыми моделями перевода излучения в тепловом и ближнем ИК-диапазонах целевая функция (3) может быть представлена в виде

$$J(\mathbf{x}) = [\mathbf{y}_T - F_T(\mathbf{x})]^T \mathbf{S}_{y_T}^{-1} [\mathbf{y}_T - F_T(\mathbf{x})] + [\mathbf{y}_N - F_N(\mathbf{x})]^T \times \\ \times \mathbf{S}_{y_N}^{-1} [\mathbf{y}_N - F_N(\mathbf{x})] + [\mathbf{x} - \mathbf{x}_a]^T \mathbf{S}_a^{-1} [\mathbf{x} - \mathbf{x}_a], \quad (6)$$

где $F_T(\mathbf{x})$, $F_N(\mathbf{x})$, \mathbf{y}_T , \mathbf{y}_N , \mathbf{S}_{y_T} , \mathbf{S}_{y_N} — прямые модели, измеренные спектры и ковариационная матрица ошибок измерения теплового (TIR) и ближнего ИК-диапазонов (NIR). Целевая функция (6) минимизируется по формуле (4) с учетом выражений

$$\mathbf{y} = \begin{pmatrix} \mathbf{y}_T \\ \mathbf{y}_N \end{pmatrix}, F(\mathbf{x}_i) = \begin{pmatrix} F_T(\mathbf{x}_i) \\ F_N(\mathbf{x}_i) \end{pmatrix}, \mathbf{K}_i = \begin{pmatrix} \mathbf{K}_T(\mathbf{x}_i) \\ \mathbf{K}_N(\mathbf{x}_i) \end{pmatrix}, \\ \mathbf{S}_y = \begin{pmatrix} \mathbf{S}_{y_T} & 0 \\ 0 & \mathbf{S}_{y_N} \end{pmatrix}.$$

В подходе к решению обратной задачи осуществляется вариация вектора атмосферных параметров, состоящего из вертикального профиля натурального логарифма концентрации основного изотополига водяного пара и вертикального профиля δD , то есть $\mathbf{x} = (\ln(N_{H_2O})_1, \dots, \ln(N_{H_2O})_N, \delta D_1, \dots, \delta D_N)$. Логарифм концентрации введен, потому что распределение концентрации водяного пара в атмосфере логнормальное [16], однако применение формулы (3) предполагает использование для вектора \mathbf{x} многомерного нормального (гауссова) распределения, для которого она и получена.

Вычисление априорной ковариационной матрицы выполнено по наборам векторов \mathbf{x} , рассчитанных

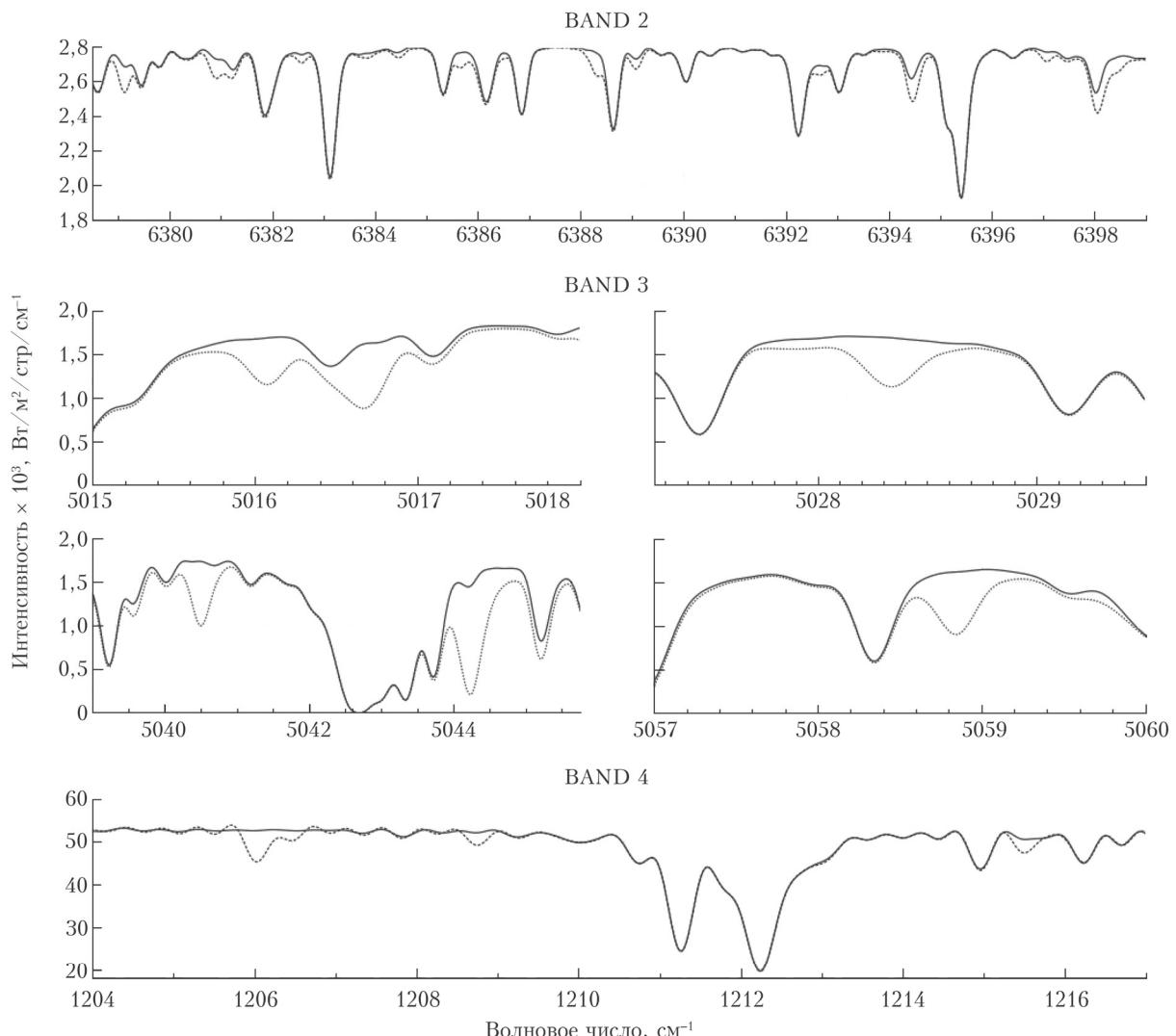


Рис. 1. Модельные спектры в диапазонах 2–4 (BAND 2–4) спектрометра TANSO-FTS/GOSAT-2: точки — модельный спектр с учетом спектральных линий HD¹⁶O; сплошная линия — без учета линий HD¹⁶O

из вертикальных профилей концентрации изотополов H_2^{16}O и HDO , извлеченных из выходных данных модели общей циркуляции атмосферы ECHAM6-wiso [17] для территории Западной Сибири ($50\text{--}70^\circ$ с.ш.; $50\text{--}80^\circ$ в.д.).

Результаты восстановления

Оценка ошибки восстановления вертикального профиля δD по предложенной методике выполнена по схеме замкнутых модельных экспериментов. Построен модельный набор из 200 вертикальных профилей концентрации H_2^{16}O и δD (рис. 2) в атмосфере, для каждого из которых был рассчитан модельный спектр с параметрами GOSAT-2 и отношением сигнал-шум на уровне ~ 380 . Генерация профилей выполнена путем добавления случайной линейной комбинации трех собственных векторов априорной ковариационной матрицы, соответствующих трем наибольшим собственным числам. Обрезание разложения по собственным векторам привело к генерации сглаженных вертикальных профилей. Вертикальные профили других газов загружены из стандартной атмосферной модели лета средних широт.

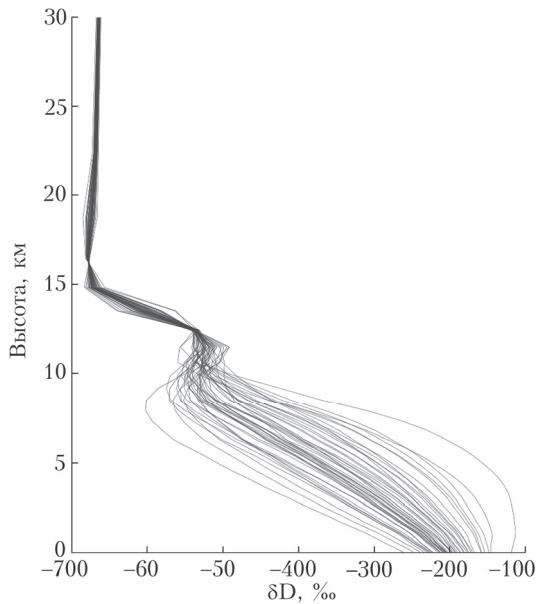


Рис. 2. Пример выборки модельных профилей δD

Вычисление модельных спектров и восстановление искомых вертикальных профилей осуществлялись с использованием программного обеспечения FIRE-ARMS/VLIDORT [18–20]. На рис. 3 приведены несколько весовых функций δD для микролиний теплового и ближнего ИК-диапазонов. Весовые функции нормированы на абсолютный максимум для каждого из интервалов, представленных на рис. 1. Из рис. 3 видно, что дополнение спектров ближнего ИК-диапазона спектрами теплового ИК-диапазона должно улучшить точность восстановления вертикального профиля δD .

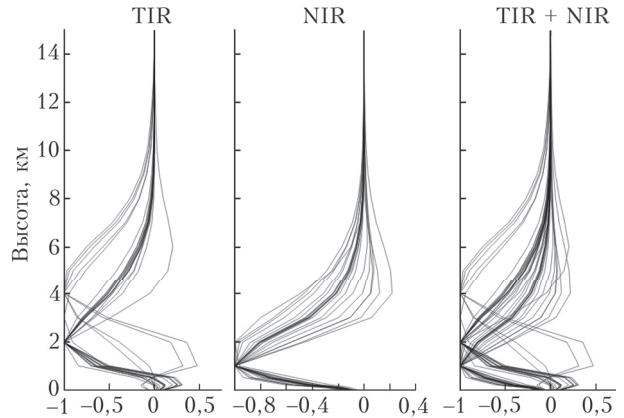


Рис. 3. Нормированные весовые функции δD в тепловом (TIR), ближнем (NIR) и обоих ИК-диапазонах

Для оценки погрешности метода восстановления были вычислены среднеквадратические отклонения восстановленных и «истинных» профилей, результаты приведены на рис. 4.

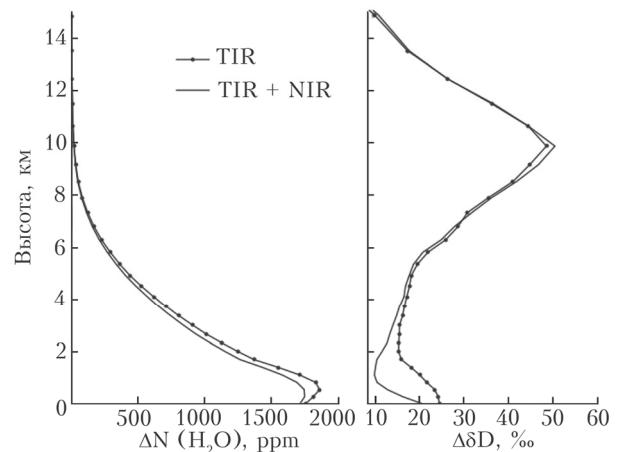


Рис. 4. Среднеквадратичные ошибки методики определения вертикальных профилей концентрации основного изотополига водяного пара (слева) и δD (справа) для теплового и ближнего ИК-диапазонов

Заключение

Предложен метод решения обратной задачи спутникового зондирования атмосферы для восстановления вертикального профиля относительного содержания HDO в атмосфере с одновременным обращением спектров теплового и ближнего ИК-диапазонов. Предлагаемый метод с одновременным использованием двух диапазонов спектра позволяет улучшить вертикальное разрешение и точность восстановления отношения $\text{HDO}/\text{H}_2\text{O}$ в атмосфере и может быть применен для обработки данных ИК-Фурье-спектрометра TANSO-FTS японского спутника GOSAT-2.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант № 18-11-00024).

1. Craig H. Standard for reporting concentrations of deuterium and oxygen-18 in natural waters // *Science*. 1961. V. 133. P. 1833–1834.
2. Rokotyan N.V., Zakharov V.I., Gribanov K.G., Schneider M., Bréon F.-M., Jouzel J., Imasu R., Werner M., Butzin M., Petri C., Warneke T., Notholt J. A posteriori calculation of $\delta^{18}\text{O}$ and δD in atmospheric water vapour from ground-based near-infrared FTIR retrievals of H_2^{16}O , H_2^{18}O , and HD^{16}O // *Atmos. Meas. Tech.* 2014. V. 7. P. 2567–2580.
3. Грибанов К.Г., Захаров В.И., Береснев С.А., Рокотян Н.В., Поддубный В.А., Имасу Р., Чистяков П.А., Скорик Г.Г., Васин В.В. Зондирование $\text{HDO}/\text{H}_2\text{O}$ в атмосфере Урала методом наземных измерений ИК-спектров солнечного излучения с высоким спектральным разрешением // Оптика атмосф. и океана. 2011. Т. 24, № 2. С. 124–127; Gribanov K.G., Zakharov V.I., Beresnev S.A., Rokotyan N.V., Poddubnyi V.A., Imasu R., Chistyakov P.A., Skorik G.G., Vasin V.V. Sensing $\text{HDO}/\text{H}_2\text{O}$ in the Ural's atmosphere using ground-based measurements of IR solar radiation with a high spectral resolution // *Atmos. Ocean. Opt.* 2011. V. 24, N 4. P. 369–372.
4. Lee X., Sargent S., Smith R., Tanner B. In situ measurement of the water vapor $\text{O}^{18}/\text{O}^{16}$ isotope ratio for atmospheric and ecological applications // *J. Atmos. Ocean. Tech.* 2005. V. 22. P. 1305–1305.
5. Zakharov V.I., Imasu R., Gribanov K.G., Hoffmann G., Jouzel J. Latitudinal distribution of the deuterium to hydrogen ratio in the atmospheric water vapor retrieved from IMG/ADEOS data // *Geophys. Res. Lett.* 2004. V. 31, N 12. P. 723–726.
6. Грибанов К.Г., Захаров В.И. О возможности мониторинга соотношения содержаний $\text{HDO}/\text{H}_2\text{O}$ в атмосфере используя наблюдения из космоса уходящего теплового излучения // Оптика атмосф. и океана. 1999. Т. 12, № 9. С. 858–860.
7. Worden J., Bowman K., Noone D., Beer R., Clough S., Eldering A., Fisher B., Goldman A., Gunson M., Herman R., Kulawik S.S., Lampel M., Luo M., Osterman G., Rinsland C., Rodgers C., Sander S., Sheppard M., Worden H. Tropospheric emission spectrometer observations of the tropospheric $\text{HDO}/\text{H}_2\text{O}$ ratio: Estimation approach and characterization // *J. Geophys. Res.* 2006. V. 111. N D006606. 10 p.
8. Frankenberg C., Yoshimura K., Warneke T., Aben I., Butz A., Deutscher N., Griffith D., Hase F., Notholt J., Schneider M., Schrijver H., Röckmann T. Dynamic processes governing lower-tropospheric $\text{HDO}/\text{H}_2\text{O}$ ratios as observed from space and ground // *Science*. 2009. V. 325. P. 1374–1377.
9. Pommier M., Lacour J.-L., Risi C., Bréon F.-M., Clerbaux C., Coheur P.-F., Gribanov K., Hurtmans D., Jouzel J., Zakharov V. Observation of tropospheric δD by IASI over western Siberia: Comparison with a general circulation model // *Atmos. Meas. Tech.* 2014. V. 7. P. 1581–1595.
10. Frankenberg C., Wunch D., Toon G., Risi C., Scheepmaker R., Lee J.-E., Wennberg P., Worden J. Water vapor isotopologue retrievals from high-resolution GO-SAT shortwave infrared spectra // *Atmos. Meas. Tech.* 2013. V. 6. P. 263–274.
11. Boesch H., Deutscher N.M., Warneke T., Byckling K., Cogan A.J., Griffith D.W.T., Notholt J., Parker R.J., Wang Z. $\text{HDO}/\text{H}_2\text{O}$ ratio retrievals from GOSAT // *Atmos. Meas. Tech.* 2013. V. 6. P. 599–612.
12. National Institute for Environmental Studies (NIES). GOSAT-2 Project. About GOSAT-2: Spacecraft & Instruments [Electron resource]. URL: http://www.gosat-2.nies.go.jp/about/spacecraft_and_instruments/ (last access: 20.02.2020).
13. Rogers C.D. Inverse methods for atmospheric sounding. Theory and practice. Singapore: World Scientific, 2000. 206 p.
14. Ma C., Jiang L. Some research on Levenberg–Marquardt method for the nonlinear equations // *Appl. Math. Comput.* 2007. V. 184, N 2. P. 1032–1040.
15. Хаматнурова М.Ю., Грибанов К.Г., Захаров В.И. Разработка алгоритмов определения распределения метана в атмосфере из спектров спутникового радиометра IASI/METOP // Оптика атмосф. и океана. 2017. Т. 30, № 9. С. 794–798; Khamatnurova M.Yu., Gribanov K.G., Zakharov V.I. Development of algorithms for atmospheric methane distribution retrieval from METOP/IASI spectra // *Atmos. Ocean. Opt.* 2018. V. 31, N 1. P. 86–90.
16. Schneider M., Hase F., Blumenstock T. Water vapour profiles by ground-based FTIR spectroscopy: Study for an optimized retrieval and its validation // *Atmos. Chem. Phys.* V. 6. P. 811–830.
17. Denisova N.Y., Gribanov K.G., Werner M., Stukova O.P. Modeling of water isotopes with model ECHAM6-wiso in nudging mode with reanalysis ERA5 // *Proc. SPIE*. 2018. V. 1083387.
18. Задворных И.В., Грибанов К.Г., Захаров В.И., Imasu R. Программное обеспечение для моделирования переноса излучения теплового и ближнего ИК-диапазонов в атмосфере с учетом многократного рассеяния // Оптика атмосф. и океана. 2017. Т. 30, № 2. С. 128–133; Zadvornikh I.V., Gribanov K.G., Zakharov V.I., Imasu R. Radiative transfer code for the thermal and near-infrared regions with multiple scattering // *Atmos. Ocean. Opt.* 2017. V. 30, N 4. P. 305–310.
19. Gribanov K.G., Zakharov V.I., Tashkun S.A., Tyuterev V.L.G. A New software tool for radiative transfer calculations and its application to IMG/ADEOS data // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*. 2001. V. 68, N 4. P. 435–451.
20. Spurr R.J. VLIDORT: A linearized pseudo-spherical vector discrete ordinate radiative transfer code for forward model and retrieval studies in multilayer multiple scattering media // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*. 2006. V. 102, N 2. P. 316–342.

I.V. Zadvornikh, K.G. Gribanov, N.Yu. Denisova, V.I. Zakharov, R. Imasu. Method for retrieval of $\text{HDO}/\text{H}_2\text{O}$ ratio vertical profile in the atmosphere from satellite spectra simultaneously measured in two spectral ranges: thermal and near-IR.

In this paper, we suggest an original method for solving the inverse problem of hyperspectral satellite sensing of the atmosphere to retrieve $\text{HDO}/\text{H}_2\text{O}$ ratio vertical profile in the atmosphere with simultaneous inversion of thermal and near-IR spectra. A computational experiment was performed to retrieve the vertical profile of relative abundance of HDO isotopologue in atmospheric water vapor using high-resolution simulated spectra with parameters of TANSO-FTS spectrometer onboard GOSAT-2 satellite. The inverse problem was solved by the optimal estimation method with simultaneous inversion of thermal and near-IR spectra. The output data of the isotopic version of the atmospheric general circulation model ECHAM6-wiso were used as *a priori* statistical data on water vapor isotopologue vertical profiles.