

## Зондирование HDO/H<sub>2</sub>O в атмосфере Урала методом наземных измерений ИК-спектров солнечного излучения с высоким спектральным разрешением

К.Г. Грибанов<sup>1</sup>, В.И. Захаров<sup>1</sup>, С.А. Береснев<sup>2</sup>, Н.В. Рокотян<sup>1</sup>,  
В.А. Поддубный<sup>3</sup>, R. Imasu<sup>4</sup>, П.А. Чистяков<sup>5</sup>, Г.Г. Скорик<sup>4</sup>, В.В. Васин<sup>5\*</sup>

<sup>1</sup>Уральский государственный университет им. А.М.Горького,  
лаборатория глобальной экологии и спутникового мониторинга  
620083, г. Екатеринбург, пр. Ленина, 51, Россия

<sup>2</sup>Уральский государственный университет им. А.М.Горького, лаборатория физики аэрозолей  
620083, г. Екатеринбург, пр. Ленина, 51, Россия

<sup>3</sup>Институт промышленной экологии УрО РАН  
620019, г. Екатеринбург, ГСП-594, ул. Софьи Ковалевской, 20А, Россия

<sup>4</sup>Center for Climate System Research, University of Tokyo,  
5-1-5, Kashiwanoha, Kashiwa-shi, Chiba, 277-8568, Japan

<sup>5</sup>Институт математики и механики УрО РАН  
620219, г. Екатеринбург, ГСП-384, ул. Софьи Ковалевской, 16, Россия

Поступила в редакцию 28.08.2010 г.

Описывается Уральская атмосферная Фурье-станция, работающая на базе современного Фурье-спектрометра Bruker IFS-125M, сопряженного с автоматизированным солнечным трекером A547N. Станция расположена в лесной зоне с координатами 57,038° с.ш., 59,545° в.д. и предназначена для мониторинга следовых газов в фоновой атмосфере и валидации спутниковых данных. Приведены образцы измеренных спектров пропускания безоблачной атмосферой солнечного излучения в ближней ИК-области с высоким спектральным разрешением и первые результаты определения из них относительного содержания молекул тяжелой воды в атмосфере Урала.

*Ключевые слова:* зондирование атмосферы, Фурье-спектрометрия, парниковые газы, гидрологический цикл, HDO, обратные задачи, высотные профили; remote sensing, Fourier-spectrometry, greenhouse gases, hydrological cycle, HDO, inverse tasks, altitude profiles.

В июле 2009 г. на территории Коуровской астрономической обсерватории Уральского государственного университета введена в строй Уральская атмосферная Фурье-станция (УАФС). Станция расположена в фоновом лесном районе (57,038° с.ш., 59,545° в.д., высота около 300 м над уровнем моря), в 80 км на северо-западе от г. Екатеринбурга. УАФС оборудована современным Фурье-спектрометром высокого разрешения Bruker IFS125M, его рабочий спектральный диапазон — от дальнего ИК до видимого. Фурье-спектрометр сопряжен с автоматизированным солнечным трекером A547N, рас-

положенным на крыше рабочего павильона и через систему зеркал направляющим солнечное излучение на вход спектрометра.

Спектрометр расположен внутри павильона в теплоизолированной комнате, в которой кондиционер поддерживает заданную рабочую температуру. В качестве вспомогательного оборудования имеется также современный автоматизированный ультразвуковой метеорологический комплект МТЕО-2, разработанный в Институте оптики атмосферы СО РАН [1], для измерения атмосферного давления, температуры, влажности и компонент скоростей ветра в процессе регистрации спектров.

УАФС предназначена для мониторинга следовых газов в атмосфере, накопления временных рядов данных, а также для задач валидации данных спутникового зондирования, таких как GOSAT, OCO-2 и др. Основные характеристики Фурье-спектрометра таковы: полный спектральный диапазон (с использованием трех детекторов) 420–25000 см<sup>-1</sup> (0,4–24 мкм); разрешение сканера — не менее 0,0035 см<sup>-1</sup>; интерфейс к управляющему компьютеру Ethernet с прото-

\* Костантин Геннадьевич Грибанов (kgribanov@remotesensing.ru); Вячеслав Иосифович Захаров (v.zakharov@remotesensing.ru); Сергей Анатольевич Береснев (sergey.beresnev@usu.ru); Никита Валерьевич Рокотян (Rokotyay@live.com); Василий Алексеевич Поддубный (Basil@ecko.uran.ru); Ryoichi Imasu (imasu@ccsr.u-tokyo.ac.jp); Павел Александрович Чистяков (p\_a\_v\_e\_l@isnet.ru); Георгий Григорьевич Скорик (skorik@imm.uran.ru); Владимир Васильевич Васин (vasin@imm.uran.ru).

колом ТСП/ІР; точность позиционирования солнечного трекера – 2 угл. мин.

Измерения спектров пропускания атмосферой солнечного излучения проводятся в ясные безоблачные дни. При решении обратных задач по определению концентрации искомым газам в атмосфере из ее спектров пропускания используются образцы спектров, соответствующие относительно безветренным (скорость ветра менее 2 м/с) состояниям атмосферы со слабым аэрозольным замутнением. Для селекции спектров атмосферы со слабым аэрозольным замутнением используются независимые измерения аэрозольной оптической толщи, сделанные с помощью солнечного фотометра CIMEL CE-318. Данный фотометр является локальным сегментом международной сети Aerosol Robotics Network (AERONET) [2] и размещен рядом с солнечным трекером. Благодаря высокому спектральному разрешению Фурье-спектрометра Bruker IFS125M и высокому отношению сигнал-шум (~ 1000) в инфракрасных спектрах пропускания атмосферы, удается выделить достаточно изолированные линии колебательно-вращательных переходов значительного количества атмосферных газов. Подобные спектрометрические комплексы являются перспективным инструментом зондирования атмосферы и позволяют осуществлять мониторинг различных следовых газов в атмосфере, таких как CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, CO, O<sub>3</sub>, N<sub>x</sub>O<sub>y</sub>, H<sub>2</sub>O, HNO<sub>3</sub>, HCl, HF и др. [3].

В данной статье для анализа отобраны и обработаны 12 спектров пропускания безоблачной слабоаэрозольной атмосферы в ближней ИК-области в диапазоне 4000–9000 см<sup>-1</sup>, зарегистрированных 8 сентября 2009 г. с максимальным разрешением 0,0035 см<sup>-1</sup>. Все спектры измерялись с использованием InGaAs-детектора, работающего при комнатной температуре. По данным солнечного фотометра CIMEL CE-318 от 08.09.2009 г. аэрозольная оптическая толщина атмосферы  $\tau_a$  на длине волны 1,02 мкм в Коуровке варьировалась в интервале  $0,05 < \tau_a < 0,1$ . На рис. 1 приведен характерный образец регистрируемых спектров, более детально показан спектральный интервал, используемый в данной работе для определения вертикального профиля концентрации HDO в атмосфере.

В диапазоне 4112–4120 см<sup>-1</sup> в спектре пропускания атмосферы выбрана группа спектральных линий HDO, подходящая для определения вертикального профиля концентрации и полного содержания в атмосферном столбе данного изотомера.

Экспериментальные данные о соотношении концентрации изотопов HDO и H<sub>2</sub>O в атмосфере важны для описания качественных и количественных характеристик процессов испарения и конденсации в атмосфере. Величина отношения HDO/H<sub>2</sub>O для определенной воздушной массы изменяется в процессах фазовых превращений и является трассером «силы гидрологического цикла» [4]. Распределение величины отношения HDO/H<sub>2</sub>O в атмосфере отражает предысторию формирования воздушных масс и характеризует перенос скрытого тепла из тропического пояса к средним и высоким широтам [5, 6].

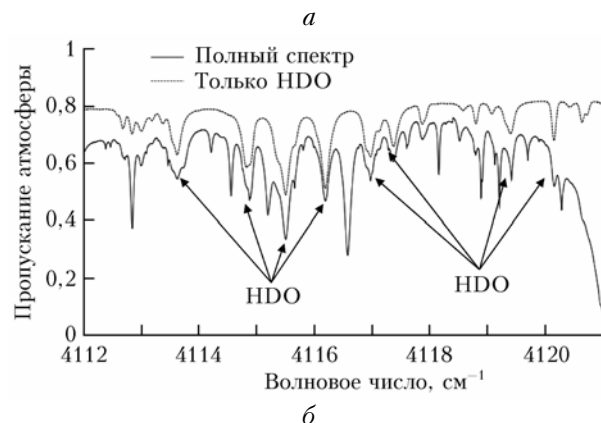
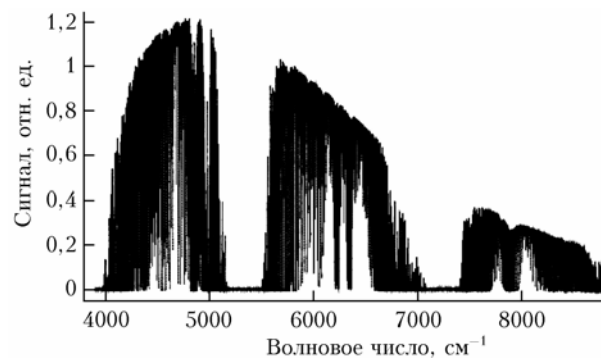


Рис. 1. Образец измеренного спектра на УАФС (а) и спектральный интервал, используемый для определения вертикального профиля концентрации HDO в атмосфере (б). Стрелками указаны достаточно сильные линии HDO, наблюдаемые в атмосферных спектрах

Мониторинг изотопного состава атмосферного водяного пара может улучшить понимание процессов фазовых превращений воды в ходе гидрологического цикла и уточнить параметры моделей общей циркуляции атмосферы, учитывающих разделение изотопов воды. Для изучения вертикальных профилей отношения HDO/H<sub>2</sub>O в атмосферном водяном паре крайне редко, ввиду сложности экспериментов, используются самолетные измерения [7].

Достаточно новым и перспективным для данной задачи в настоящее время является метод дистанционного зондирования с использованием данных измерений уходящего теплового излучения Земли спутниковыми ИК-Фурье-спектрометрами высокого разрешения. Метод был предложен в [8] и впервые реализован в [9, 10]. Идея использования линий HDO и H<sub>2</sub>O тепловой ИК-области спектра атмосферы для определения отношения HDO/H<sub>2</sub>O по данным Фурье-спектрометров наземного базирования была представлена в работе [11] и реализована в [12, 13].

В настоящей статье впервые используются линии HDO из ближней ИК-области спектра пропускания атмосферы для определения вертикального профиля отношения концентраций HDO/H<sub>2</sub>O в атмосфере и отношения HDO/H<sub>2</sub>O в атмосферном столбе.

В геофизике принято оперировать величиной  $\delta$ HDO, определяемой как

$$\delta\text{HDO} = (R/R_0 - 1) \cdot 1000 \text{ ‰}, \quad (1)$$

где  $R = \text{HDO}/\text{H}_2\text{O}$  – текущее отношение относительного содержания тяжелой воды в атмосфере;  $R_0 = R_{\text{SMOW}} = 3,1069 \cdot 10^{-4}$  (Standard Mean Ocean Water) – стандартное отношение для океанической воды.

Для решения обратной задачи по определению вертикального профиля  $\delta\text{HDO}(h)$  в атмосфере ( $h$  – высота) из измеренных спектров пропускания использован оригинально модифицированный метод регуляризации Тихонова. Экстрагированную из спектров пропускания оптическую толщину атмосферы в линиях искомым газом можно записать в виде

$$\tau_{\text{HDO}}(\nu) = \int_0^H N_{\text{HDO}}(h) \left( \sum_j S_j(T(h)) \times \Phi_j(\nu - \nu_j, T(h), p(h)) \right) \sec(\theta(h)) dh, \quad (2)$$

где  $p$ ,  $T$ ,  $N_{\text{HDO}}$  – вертикальные профили давления, температуры и концентрация молекул HDO соответственно;  $\theta$  – зенитный угол Солнца;  $S_j$ ,  $\Phi_j$  – интенсивность и контур спектральной линии. Суммирование в (2) ведется по всем спектральным линиям, которые вносят свой вклад в поглощение в канале с волновым числом  $\nu$ . Ширина спектральной линии является функцией температуры и давления атмосферы на высоте  $h$ . Оптическая толщина в виде (2) использовалась в качестве входного вектора данных для решения обратной задачи, где выходным вектором являлся искомым профиль отношения концентраций HDO/H<sub>2</sub>O. В дискретном виде в обозначениях  $\tau \rightarrow y$  и  $\delta\text{HDO} \rightarrow x$  задача нахождения искомого профиля путем минимизации целевой функции может быть записана следующим образом:

$$\begin{aligned} \mathbf{Ax} &= \mathbf{y}; \\ J(\mathbf{x}) &= \|\mathbf{Ax} - \mathbf{y}\|^2 + \alpha \Omega(\mathbf{x}) \rightarrow \min; \\ \Omega(\mathbf{x}) &= \langle (\mathbf{x} - \mathbf{x}^*), \mathbf{N}_{\text{H}_2\text{O}}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*) \rangle. \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь  $\mathbf{y}$  – спектр оптической толщины атмосферы, полученный из измеренного спектра;  $\mathbf{x}$  – искомым профиль  $\delta\text{HDO}(h)$  в атмосфере;  $\mathbf{A}$  – оператор прямой модели;  $J(\mathbf{x})$  – целевая функция;  $\Omega(\mathbf{x})$  – регуляризатор, используемый в данной работе. Угловыми скобками обозначено скалярное произведение векторов;  $\mathbf{x}^*$  – начальное приближение для профиля  $\delta\text{HDO}$ , рекомендованное в работе [12];  $\mathbf{N}_{\text{H}_2\text{O}}$  – профиль водяного пара в атмосфере;  $\alpha$  – параметр регуляризации. Произведение векторов  $\mathbf{N}_{\text{H}_2\text{O}}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*)$  – покомпонентное. Начальные приближения для профилей H<sub>2</sub>O и профиль температуры брались из базы данных ретроспективного анализа NCEP/NCAR [14].

Полученный для профиля  $\delta\text{HDO}$  методом (3) результат показан на рис. 2, а.

Все выбранные спектры были обработаны с помощью программного пакета GFIT, принятого в ка-

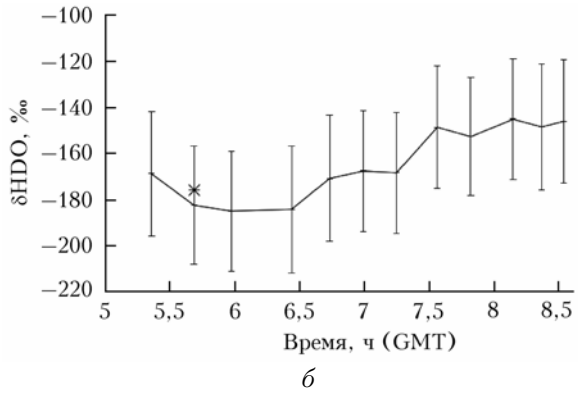
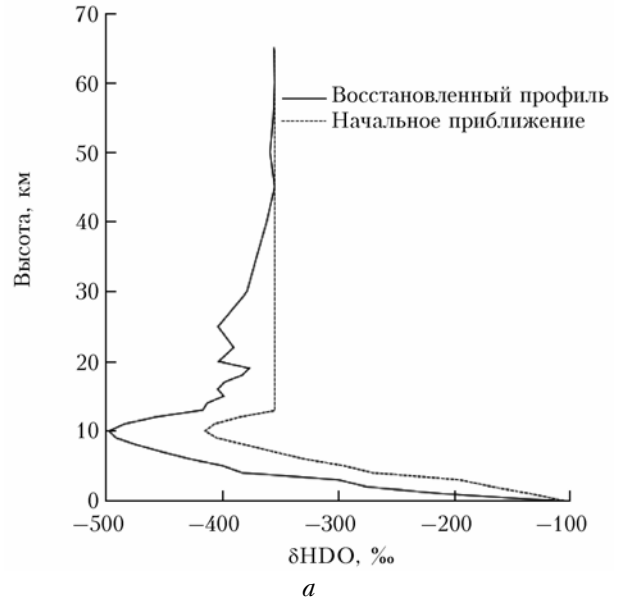


Рис. 2. Восстановленный вертикальный профиль  $\delta\text{HDO}(h)$  по спектрам 08.09.2009 г. (а) соответствует величине  $\delta\text{HDO}^* = -176 \text{ ‰}$  (звездочка на рис. 2, б); б – результат обработки спектров программным пакетом GFIT для определения  $\delta\text{HDO}^*$  в атмосферном столбе

честве стандарта в системе Total Carbon Observing Network (TCCON) [15]. При этом использовались все микроюкна ближнего ИК-диапазона, рекомендуемые TCCON для определения содержания в атмосфере HDO и H<sub>2</sub>O. Результаты обработки с использованием GFIT, полученные по HDO/H<sub>2</sub>O для всего атмосферного столба  $\delta\text{HDO}^*$ , показаны на рис. 2, б. Значения, полученные для  $\delta\text{HDO}^*$  обоими методами, находятся в хорошем согласии между собой. Дисперсия значений  $\delta\text{HDO}^*$ , полученных разными методами, в данном случае дает оценку ошибки определения относительного содержания тяжелой воды в атмосферном столбе ~ 12%. Следует отметить, что положения максимумов весовых функций (строк матрицы  $\mathbf{A}$ ) по абсолютной величине представлены только двумя узлами в использованной высотной сетке на высотах 1 и 2 км, поэтому вид восстановленного высотного профиля величины  $\delta\text{HDO}$  может зависеть от вида профиля начального приближения.

Особенности восстановленного профиля на высотах в окрестности 10 км отражают вклад априор-

ной информации в виде профиля начального приближения, подкорректированного информацией, содержащейся в спектре. Что касается особенностей восстановленного профиля на 18–21 км, они, вероятно, отражают, главным образом, совокупный вклад измерительного шума и неопределенности в остальных, фиксированных для данной задачи, параметрах атмосферы, поскольку вариации в спектре, обусловленные вариациями в концентрации HDO, на этих высотах меньше этого совокупного вклада.

В заключение отметим, что создание УАФС в Коуровке является важным шагом в расширении международной сети TCCON на регион Урала и Западной Сибири. Данный атмосферно-спектрометрический комплекс позволит решать задачи мониторинга парниковых и загрязняющих атмосферу газов в этом регионе, а также проводить валидацию спутниковых данных, таких как данные GOSAT и др.

Данные исследования частично были поддержаны грантами РФФИ № 09-01-00474-а, 09-01-00649-а, госконтрактами Р1151 и Р1571 Министерства образования и науки РФ и грантом Отделения математики РАН.

1. <http://www.iao.ru/en/resources/equip/dev/meteo2/>
2. <http://aeronet.gsfc.nasa.gov/>
3. *Notholt J., Schrems O.* Ground-based FTIR measurements of vertical column densities of several trace gases above Spitzbergen // *Geophys. Res. Lett.* 1994. V. 21, N 13. P. 1355–1358.
4. *Noone D.* Evaluation of hydrologic cycles and processes with water isotopes // *Proc. First Pan-GEWEX science meeting.* Frascati, Italy, October 2006.
5. *Joussaume S., Sadourny R., Jouzel J.* A general circulation model of water isotope cycles in the atmosphere // *Nature (Gr. Brit.).* 1984. V. 311, N 5981. P. 24–29.

6. *Jouzel J., Russell G.L., Suozzo R.J., Koster R.D., White J.W.C., Broecker W.S.* Simulation of the HDO and H<sub>2</sub><sup>18</sup>O atmospheric cycles using the NASA GISS general circulation model: the seasonal cycle for present-day conditions // *J. Geophys. Res. D.* 1987. V. 92, N 12. P. 14739–14760.
7. *Ehhalt D.H., Rohrer F., Fried A.* Vertical profiles of HDO/H<sub>2</sub>O in the troposphere // *J. Geophys. Res. D.* 2005. V. 110. D13301, doi: 10.1029/2004JD005569.
8. *Грибанов К.Г., Захаров В.И.* О возможности мониторинга содержания HDO/H<sub>2</sub>O в атмосфере, используя наблюдения из космоса уходящего теплового излучения // *Оптика атмосфер. и океана.* 1999. Т. 12, № 9. С. 33–37.
9. *Zakharov V.I., Imasu R., Gribanov K.G., Hoffmann G., Jouzel J.* Latitudinal distribution of 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.
10. *Worden J.R., Boxman K., Noone D., and TES team members.* TES observations of the tropospheric HDO/H<sub>2</sub>O ratio: retrieval approach and characterization // *J. Geophys. Res. D.* 2006. V. 111, N 16. D16309, doi: 10.1029/2005JD006606.
11. *Грибанов К.Г., Захаров В.И., Кобаяши Н., Шимота А.* Определение HDO/H<sub>2</sub>O в атмосфере из данных наземного сенсора TIS // *Оптика атмосфер. и океана.* 2000. Т. 13, № 10. С. 910–913.
12. *Schneider M., Hase F., Blumenstock T.* Ground-based remote sensing of HDO/H<sub>2</sub>O ratio profiles: introduction and validation of an innovative retrieval approach // *Atmos. Chem. Phys.* 2006. V. 6, N 12. P. 4705–4722.
13. *Топтыгин А.Ю., Грибанов К.Г., Захаров В.И., Касай Я., Кагава А., Мураяма Я., Имасу Р., Шмидт Г.А., Хоффманн Г., Жузель Ж.* Определение вертикального профиля HDO/H<sub>2</sub>O из спектров пропускания атмосферы высокого разрешения // *Оптика атмосфер. и океана.* 2007. Т. 20, № 3. С. 247–252.
14. <http://www.esrl.noaa.gov/psd/data/gridded/data.ncp.reanalysis.html>
15. <http://tccon.caltech.edu/>

*K.G. Gribanov, V.I. Zakharov, S.A. Beresnev, N.V. Rokotyan, V.A. Poddubny, R. Imasu, P.A. Chistyakov, G.G. Skorik, V.V. Vasin.* **The sounding of HDO/H<sub>2</sub>O in Ural's atmosphere using ground-based measurements of IR-solar radiation with high spectral resolution.**

Ural Atmospheric Fourier Station (UAFS) on the base of Bruker IFS-125M interferometer conjugated with automated solar tracker A547N is described. UAFS is located in forest area (57.038N; 59.545E) in order to monitoring trace gases in the background atmosphere. The examples of measured atmospheric transmittance of solar radiation in near IR with high spectral resolution and first results of retrieval of HDO/H<sub>2</sub>O in Ural atmosphere are presented.