

**Отчет за первый этап  
по проекту CAMS27 (за ускоренное предоставление качественных данных измерений для  
NDACC ЗЕСМWF CAMS27/450100)**

Для газов (окись углерода и метан), являющихся предметом исследований настоящего проекта, в процессе модификации измерительных методик были использованы научные публикации за последние десять лет, посвященные спектроскопическим исследованиям CO и CH<sub>4</sub>, а также унифицированные методики международной измерительной сети NDACC (часто называемые стратегиями восстановления). Основная цель проекта - предоставление качественных данных измерений CO и CH<sub>4</sub> за 2019г. для международной сети NDACC. Достижение цели проекта основывалось на тестировании и разработке оптимальных методик восстановления CO и CH<sub>4</sub> по высокоразрешенным спектрам, зарегистрированным Фурье-спектрометром высокого разрешения в ИК диапазоне, а также обработке спектров высокого разрешения, накопленных за 2019г. При обработке спектров использовалось специализированное программное обеспечение SFIT4 V.9.4.4.

При тестировании и совершенствовании методик восстановления CO и CH<sub>4</sub> в качестве априорной информации о содержании водяного пара использовались результаты предварительного восстановления H<sub>2</sub>O с использованием четырех микроокон (фильтр F2): 2732.05-2732.8750 см<sup>-1</sup>, 2818.80-2820.1250 см<sup>-1</sup>, 2878.70-2880.70 см<sup>-1</sup> и 2892.45-2893.45 см<sup>-1</sup>.

В случае использования регуляризации Тихонова-Филлипса степень регуляризации подбиралась таким образом, чтобы достичь минимума суммы квадратов случайной погрешности и погрешности сглаживания.

При выборе наиболее перспективной методики определения CO и CH<sub>4</sub> использовались следующие целевые критерии (целевые функции):

- а. RMS – СКО рассчитанного спектра от измеренного (предполагается, что оптимальная методика обеспечивает минимум этой величины);
- б. DOFS – количество степеней свободы для исследуемого газа. DOFS примерно соответствует количеству восстанавливаемых независимых слоев газа (предполагается, что оптимальная методика обеспечивает максимум этой величины);
- в. Случайная и систематическая погрешности, погрешность сглаживания (предполагается, что оптимальная методика обеспечивает минимум всех этих величин);
- г. Полученные результаты должны иметь физический смысл: например, стратегия восстановления, оптимальная с точки зрения критериев, перечисленных в пунктах а, б и в (обеспечивающая минимумы и максимумы соответствующих величин), но дающая в результате решения обратной задачи неадекватные значения физических параметров (содержание газа, и т.д.), не может быть признана оптимальной.

#### *Монооксид углерода, CO*

Для CO тестировались три стратегии восстановления: унифицированная NDACC (#1), Dils et al. (2011) (#2) и Viatte et al. (2014) (#3). Стратегии #2 и #3 можно рассматривать как модификации стратегии #1, поскольку #2 и #3 имеют только небольшие отличия в микроокнах по сравнению с #1. Результаты анализа наших тестов показали, что все три методики дают очень близкие значения всех перечисленных выше критериев (RMS, DOFS, и т.д.), однако использование унифицированной методики NDACC позволило уменьшить значения среднедневной изменчивости содержания CO и RMS на ~0.1% и на ~0.002 ед., соответственно.

Использование регуляризации Тихонова-Филлипса вместо статистической регуляризации для восстановления профиля CO из FTIR-измерений представляется нецелесообразным.

Для методики #1 была проведена работа по исследованию влияния различной используемой спектроскопической информации о линиях CO на результаты определения содержания CO. Были рассмотрены следующие спектроскопические базы данных: HITRAN2008, HITRAN2012, HITRAN2016, atm12, atm16. На массиве FTIR-измерений 2015 г. показано, что по ряду критериев – значение случайной погрешности определения ОС CO, качество подгонки расчетного спектра к измеренному (RMS), значения средневзвешенной изменчивости ОС CO – информация о линиях CO из базы данных HITRAN2016 обеспечивает наилучшие результаты решения обратной задачи по определению содержания CO по сравнению со спектроскопическими базами данных HITRAN2008, HITRAN2012, atm12 и atm16.

Основная информация об оптимальной методике определения содержания CO, усовершенствованной в рамках настоящего проекта:

Спектральные интервалы: 2057.70-2058.00 см<sup>-1</sup>, 2069.56-2069.76 см<sup>-1</sup>, 2157.50-2159.15 см<sup>-1</sup> (фильтр F2), см. Рис.1;

Одновременно определяемые газы: CO, O3, CO2, OCS, N2O, H2O;

Спектроскопическая информация: HITRAN2016 (для CO), для остальных газов - atm12;

Тип регуляризации: статистическая регуляризация;

Значение SNR: SNR=300 и SNR=10.0 для 2157.775-2157.905 см<sup>-1</sup>.

Спектральное разрешение: 0.005см<sup>-1</sup>;

Среднее значение DOFS (по 2019г.): 2.6;

Среднее значение RMS (по 2019г.): 0.33;

Средние значения погрешностей определения содержания CO (случайная, сглаживания, систематическая), % : 2.2, 0.1, 2.9.

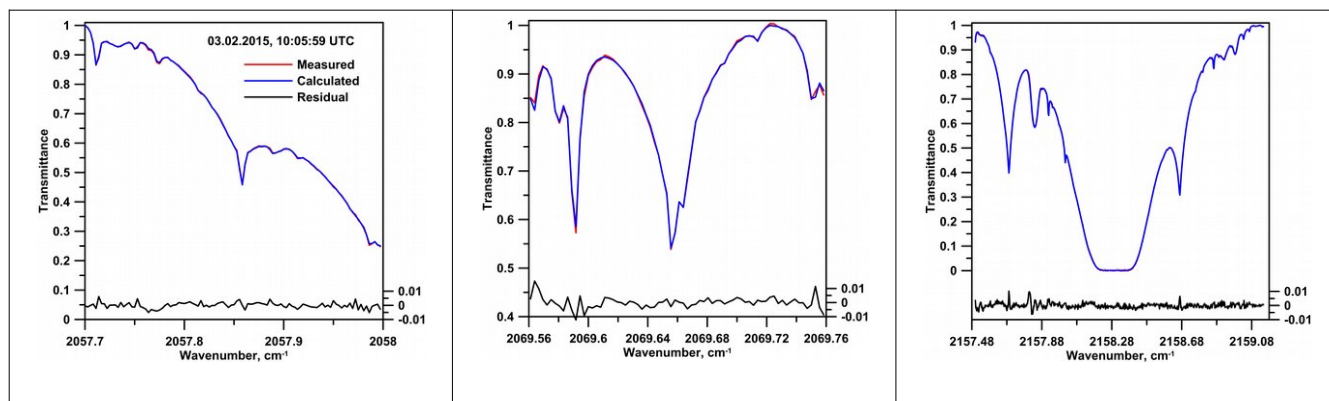


Рис. 1 Пример спектральных микроокон, используемых для определения содержания CO (измеренный, рассчитанный спектры, а также разница между ними).

### Метан, CH<sub>4</sub>

Для метана в качестве базовой была использована унифицированная методика NDACC Sussmann et al. (2011).

Основная информация об оптимальной методике определения содержания CH<sub>4</sub>, усовершенствованной в рамках настоящего проекта:

Спектральные интервалы: 2613.70–2615.40 см<sup>-1</sup>, 2835.50–2835.80 см<sup>-1</sup>, 2921.00–2921.60 см<sup>-1</sup> (фильтр F2), см. Рис.2;

Одновременно определяемые газы: CH<sub>4</sub>, CO<sub>2</sub>, NO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, HDO;

Спектроскопическая информация: HITRAN2001 для CH<sub>4</sub>; HITRAN2008 с дополнениями 2009г. для H<sub>2</sub>O и HDO, для остальных газов - HITRAN2008;

Тип регуляризации: статистическая регуляризация;

Значение SNR: SNR=300.

Спектральное разрешение: 0.005см<sup>-1</sup>;

Среднее значение DOFS (по 2019г.): 2.1;

Среднее значение RMS (по 2019г.): 0.16;

Средние значения погрешностей определения содержания CH<sub>4</sub> (случайная, сглаживания, систематическая), % : 2.7, 0.03, 3.7.

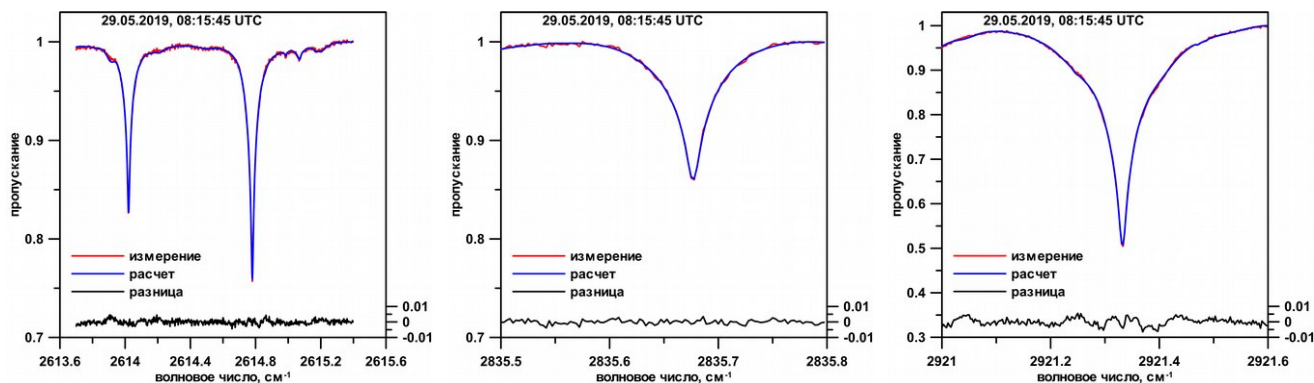


Рис. 2 Пример спектральных микроокон, используемых для определения содержания CH<sub>4</sub> (измеренный, рассчитанный спектры, а также разница между ними).

## Литература

Dils, B., Cui, J., Henne, S., Mahieu, E., Steinbacher, M., and De Mazière, M.: 1997–2007 CO trend at the high Alpine site Jungfraujoch: a comparison between NDIR surface in situ and FTIR remote sensing observations, *Atmos. Chem. Phys.*, 11, 6735-6748, <https://doi.org/10.5194/acp-11-6735-2011>, 2011.

Viatte, C., Strong, K., Walker, K. A., and Drummond, J. R.: Five years of CO, HCN, C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>, CH<sub>3</sub>OH, HCOOH and H<sub>2</sub>CO total columns measured in the Canadian high Arctic, *Atmos. Meas. Tech.*, 7, 1547-1570, <https://doi.org/10.5194/amt-7-1547-2014>, 2014.

Sussmann R., Forster F., Rettinger M., and Jones N.: Strategy for high-accuracy-and-precision retrieval of atmospheric methane from the mid-infrared FTIR network, // *Atmos. Meas. Tech.*, 2011.V.4. P.1943-1964, <https://doi.org/10.5194/amt-4-1943-2011>.

15.12.2019

с.н.с. кафедры физики атмосферы  
М.В. Макарова