

А.Ю. Топтыгин¹, К.Г. Грибанов¹, Р. Имасу², Г. Шмидт³, В.И. Захаров¹

Широтные вариации вертикальных профилей и полного содержания HDO / H₂O в атмосфере над океаном, полученные из данных IMG / ADEOS

¹Уральский государственный университет, г. Екатеринбург, Россия

²Центр исследования климатической системы, Университет Токио, Япония

³НАСА, Институт космических исследований им. Годдарда, г. Нью-Йорк, США

Поступила в редакцию 12.05.2006 г.

Предложен метод определения высотных профилей относительного содержания HDO к H₂O в атмосфере, основанный на разложении искомого профиля по собственным векторам ковариационной матрицы профилей, полученных с помощью модели общей циркуляции атмосферы. Априорная информация, содержащаяся в ковариационной матрице модельных профилей, позволяет частично компенсировать недостаток информации, содержащейся в весовых функциях HDO для нижнего атмосферного слоя 0–1 км и выше 10 км. В качестве входных данных в методе используются спектры уходящего теплового излучения атмосферы с высоким спектральным разрешением, наблюдаемые в надир интерферометрами спутникового базирования.

Для апробации метода были использованы спектры IMG/ADEOS, измеренные в условиях чистого неба над океаном. В результате получены широтное распределение вертикального профиля HDO/H₂O и относительное содержание HDO/H₂O во всем атмосферном столбе над Тихим океаном в период зима 1996 – лето 1997 гг. Оценка ошибки метода получена в замкнутых модельных экспериментах, ее среднее значение по профилю составляет не более 25% и для полного содержания 20%. Вертикальные профили HDO и характер широтного распределения согласуются с известными в литературе и модельными данными об изотопном составе водяного пара в атмосфере.

Введение

Вариации дейтерия в атмосфере вызваны фракционированием изотопов в процессах испарения и конденсации [1]. Фракционирование изотопов при переходе водяного пара в жидкую фазу и обратно приводит к уменьшению относительного содержания тяжелых изотопов в газовой фазе и увеличению их в жидкой фазе воды. Поскольку атмосферная часть гидрологического цикла представляет собой перенос воды из океана на континенты, то локальное содержание HDO в атмосферном водяном паре отражает, до некоторой степени, предысторию выпадения осадков для воздушных масс по пути их движения от океана к континентам. Таким образом, HDO является удобным трассером при изучении глобальной циркуляции атмосферы. Изучение связей между изотопным составом водяного пара в воздухе и климатическими условиями необходимо для развития таких областей, как физика облаков, климатология, гидрология и палеоклиматология [1–3].

Основным методом определения содержания дейтерия в атмосфере до недавнего времени являлся изотопный анализ осадков [4]. Всемирной метеорологической организацией (ВМО) и Международным агентством по атомной энергии (МАГАТЭ) с 1961 г. организована сеть отбора проб и наблюдения изотопного состава атмосферных осадков [5], однако большинство пунктов наблюдения расположены в Европе,

поэтому такая сеть не позволяет получать данные в глобальном масштабе. Непростой проблемой является определение HDO/H₂O в атмосферном водяном паре. Для этого используются метод отбора проб, позволяющий изучать вертикальное распределение HDO в атмосфере [6], и аппаратура, установленная на борту самолетов. Возможности спутниковых методов термического зондирования атмосферы позволяют осуществлять измерения содержания изотопомеров водяного пара в реальном масштабе времени, с глобальным покрытием и с одновременным измерением сопутствующих параметров, таких как высотные профили температуры, влажности и концентрации парниковых газов.

Количественно содержание дейтерия в атмосферном слое или во всей толще атмосферы выражается через отношение

$$\delta D = \left(\frac{R}{R_{\text{SMOW}}} - 1 \right) \cdot 1000 \text{ ‰}, \quad (1)$$

где R – отношение числа атомов дейтерия к числу атомов водорода в образце, а $R_{\text{SMOW}} = 1,5576 \cdot 10^{-4}$ – среднее значение этого отношения в океанической воде. С учетом процессов фракционирования при испарении и конденсации воды величина δD в атмосфере для водяного пара получается в пределах $-1000-0\text{‰}$.

Наша задача заключалась в разработке метода определения высотных профилей относительного содержания HDO к H₂O в атмосфере, основанного на разложении по собственным векторам ковариационной матрицы профилей, полученных с помощью модели общей циркуляции атмосферы и его апробации на данных IMG/ADEOS. Спутниковый сенсор IMG (Interferometric Monitor for Greenhouse Gases) представляет собой Фурье-спектрометр на основе интерферометра Майкельсона, работающий в диапазоне длин волн 3,3–16,6 мкм с шумовым эквивалентом спектральной яркости в пределах 0,020–0,035 мкВт/(см² · см⁻¹ · ср) [7]. Несмотря на относительно короткое время его функционирования – с ноября 1996 по июль 1997 г., данные, полученные прибором IMG со спутника ADEOS, и в настоящее время имеют большую практическую ценность и научный потенциал. Геометрия наблюдения атмосферы сенсором IMG/ADEOS – в надир.

Объектом исследования был район Тихого океана с координатами: 65° ю.ш. – 65° с.ш., 130–170° з.д. Из всех спектров IMG были отобраны спектры, измеренные над этим районом в условиях чистого (безоблачного) неба. Методика определения «безоблачных» спектров над водной поверхностью была основана на анализе спектральной зависимости яркостной температуры в окнах прозрачности атмосферы в интервале 830–1200 см⁻¹. Для отобранных таким образом дневных спектров IMG проводился дополнительный скрининг облачности по данным сенсора изображения в видимой области OCTS (Ocean Color Temperature Scanner) с борта ADEOS [8]. Такая процедура позволяет выбрать спектры, полученные в условиях безоблачной слабоаэрозольной атмосферы [9]. Всего в выборку попали 1022 спектра. Для анализа из спектра выбирались интервалы, содержащие линии поглощения CO₂ (интервал 1: 680–830 см⁻¹, для восстановления профиля температуры) и линии воды основного изотомера и HDO (интервал 2: 1192–1217 см⁻¹, для восстановления профилей δD) (рис. 1).

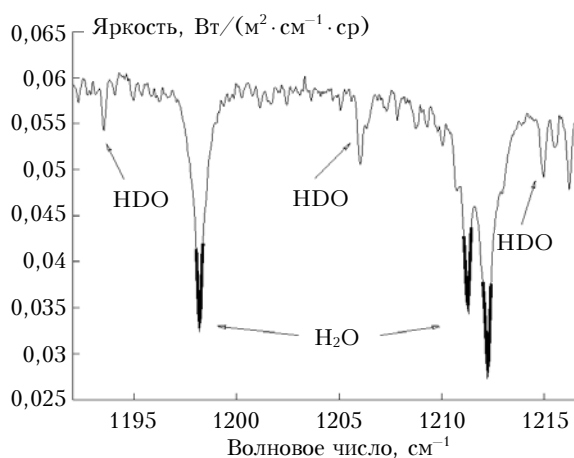


Рис. 1. Спектральный интервал (интервал 2) для восстановления профиля водяного пара и профиля δD. Показаны интервалы для начальной оценки профиля водяного пара (этап б)

Априорная информация

В качестве априорной информации использовались данные, полученные с помощью модели общей циркуляции атмосферы, учитывающей изотопное разделение воды [10]. Атмосферные наборы состояний, покрывающие всю поверхность земного шара, смоделированы для двух полных лет.

Пространственное покрытие земного шара выполнено с шагом 4° по широте и 5° по долготе, т.е. одномоментное метеорологическое состояние планеты описывается набором из ~3300 точек на географической сетке. Временное покрытие выполнено с шагом 3 ч, и годовой набор глобальных покрытий насчитывает ~2800 состояний. Атмосферное состояние в каждой точке включает в себя: давление на поверхности (P_s), профили давления, температуры, влажности и профиль изотопного отношения δD. Каждый профиль состоит из 20 атмосферных уровней (от P_s до ~0,1 мбар). Для высотной привязки профилей была использована барометрическая формула, учитывающая температурный профиль [11].

Из полного набора данных производилась выборка атмосферных состояний (около 420 000), смоделированных для периода декабрь – июль и территориально покрывающих заданную область над Тихим океаном.

Метод

Восстановление атмосферных параметров проводилось путем подгонки расчетного спектра к измеренному спектру при вариациях соответствующих атмосферных параметров. Минимизировалась целевая функция вида

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

где W_i^{obs} – наблюдаемый, W_i^{calc} – расчетный спектры; M – число спектральных каналов.

Для выбора каналов из рассматриваемых спектральных интервалов проводился анализ весовых функций прямой модели:

$$K_{ij} = \frac{\partial W_i^{calc}}{\partial X_j}, \quad K_{ij}^* = \frac{\partial W_i^{calc}}{\partial (\ln X_j)} = \frac{\partial W_i^{calc}}{\partial X_j} X_j, \quad (3)$$

где X_j – искомый атмосферный параметр в j -м узле высотной сетки. Для профиля влажности в методе используются логарифм концентрации водяного пара и «логарифмические» весовые функции вида K_{ij}^* , что позволяет получить более однородное высотное распределение набора «логарифмических» весовых функций, чем при непосредственном использовании единиц концентрации (ppm).

Для моделирования спектров, подобных спектрам, измеренным прибором IMG, применялась последняя версия ПО FIRE-ARMS [12], в которой используется спектроскопическая база данных HITRAN-2004 [13], новая модель континуума MT_CKD для не-

скольких атмосферных газов (<http://rtweb.aer.com>). Расчеты основаны на решении уравнения переноса для уходящего теплового излучения, с вычислением коэффициентов поглощения методом «line-by-line».

Для восстановления профилей атмосферных параметров используется система координат собственных векторов соответствующих ковариационных матриц. Собственно метод восстановления вертикальных профилей температуры и водяного пара из эмиссионных спектров атмосферы высокого разрешения с использованием сингулярного разложения был предложен и апробировался ранее на единичных спектрах IMG/ADEOS и описан в статье [14]. Данная работа является продолжением предыдущей: в ней используется набор взаимосвязанной априорной информации для профилей T , H_2O и HDO, а метод главных компонент применяется для получения профилей δD . Апробация метода происходит на большой выборке измеренных спектров IMG/ADEOS над регионом 65° ю.ш. – 65° с.ш. и 130 – 170° з.д.

Оценку качества априорного набора профилей параметров можно сделать по числу обусловленности ковариационной матрицы (отношение минимального и максимального собственного числа). Для набора атмосферных состояний в исследуемом регионе числа обусловленности ковариационных матриц температуры, логарифма концентрации водяного пара и δD были одного порядка $\sim 10^{-4}$.

Процедура восстановления вертикального профиля δD из спектров IMG состоит из следующих этапов:

а) Формирование начального состояния атмосферы: из подготовленного набора атмосферных состояний выбираются ближайшие по координатам и времени к обрабатываемому спектру и проводится их аппроксимация. Результатом являются профиль давления, температуры, водяного пара и профиль δD . Остальные параметры атмосферы (профили других газов) берутся из моделей стандартной атмосферы [15].

б) Грубая оценка профиля водяного пара: из интервала 2 выбраны узкие спектральные интервалы в окрестностях центров линий водяного пара основного изотопа (см. рис. 1) и восстанавливается профиль воды путем его варьирования из начального состояния как целого. В этих интервалах спектр, практически, нечувствителен к изменению температуры поверхности или излучательной способности Земли, а также к вариациям других газов.

в) «Подгонка» спектров по температуре поверхности и выбор начального приближения: проводится восстановление температуры поверхности (T_s) с использованием спектра в интервале 2. При этом для излучательной способности Земли выбрана спектральная зависимость, характерная для поверхности океана. Оценка профиля водяного пара (этап б) позволяет наиболее точно учесть вклад линий воды и континуума в данном участке спектра. Затем производится повторное формирование начального состояния – из набора атмосферных состояний выбираются ближайшие по температуре (на нулевой высоте) к T_s и проводится их усреднение.

г) Уточнение профиля температуры. С использованием спектра из интервала 1 производится восстановление профиля температуры одновременно с вариацией профиля концентрации CO_2 как целого. При этом из диапазона выбраны такие участки, в которых спектр нечувствителен к вариациям температуры поверхности или излучательной способности Земли, профилям водяного пара и других газов.

д) Восстановление профиля воды основного изотопа и HDO, расчет профиля δD . В интервале 2 в выбранных спектральных каналах с линиями H_2O и HDO восстанавливаются профили этих газов. Ввиду малости содержания неосновных изотопов ($HO^{16}D$, $HO^{17}D$, $HO^{18}D$, ...) по сравнению с основным ($HO^{16}H$) для оценки δD используется величина

$$\delta HDO = \left(\frac{N_{HDO}/N_{H_2O}}{R_{SMOW}} - 1 \right) \cdot 1000 \%, \quad (4)$$

где N_{HDO} , N_{H_2O} – концентрации HDO и H_2O , полученные при восстановлении.

Результаты

По описанной методике была обработана серия спектров IMG/ADEOS с целью получения распределения вертикального профиля изотопного отношения δD и относительного содержания δD во всем атмосферном столбе над Тихим океаном в период зима 1996 – лето 1997 гг.

На рис. 2 представлена широтная контурная проекция вертикальных профилей δD после усреднения их по долготе. Восстановленные профили из спектров IMG показаны сплошными линиями, модельные профили – пунктирными.

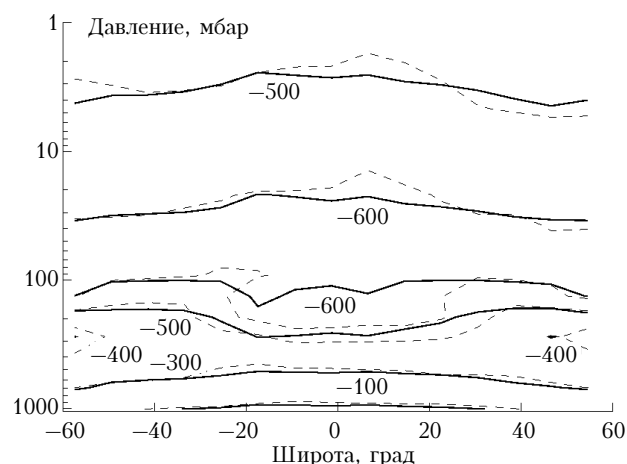


Рис. 2. Широтное распределение вертикального профиля δHDO в атмосфере, полученное в результате обработки спектров IMG/ADEOS и усреднения данных по долготе. Пунктиром показаны контуры широтного распределения профиля δHDO в атмосфере по модели общей циркуляции атмосферы для этого региона и рассматриваемых сезонов, усредненные по долготе

Относительное содержание δD во всем атмосферном столбе выражается как

$$\delta\text{HDO}^* = \frac{\int_0^H N_{\text{H}_2\text{O}}(h) \delta\text{HDO}(h) dh}{\int_0^H N_{\text{H}_2\text{O}}(h) dh} \text{‰}, \quad (5)$$

где H – верхняя граница атмосферы. Эта величина достаточно информативна и удобна для представления горизонтального распределения относительного содержания дейтерия в атмосфере. На рис. 3 показано широтное распределение δHDO^* , рассчитанной из восстановленных профилей δD .

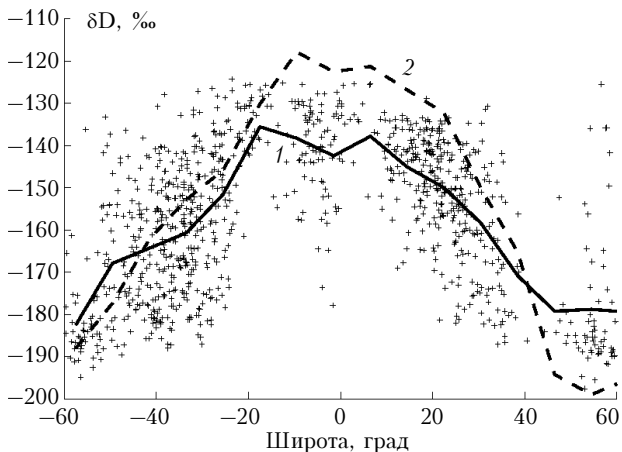


Рис. 3. Широтное распределение δHDO^* для полного атмосферного столба, полученное из спектров IMG/ADEOS, – значки; 1 – зональное среднее этих данных по 5°-м интервалам широты; 2 – зональное среднее от модельных данных для δHDO^*

Анализ ошибок

Оценка точности предложенного метода для восстановления содержания дейтерия была сделана исходя из серии модельных экспериментов ввиду отсутствия натуральных данных о содержании дейтерия в атмосфере над исследуемой областью. Для этого были выполнены следующие шаги.

1) Из набора модельных атмосферных состояний была сделана выборка, в которой величина δHDO^* для профилей δD пробегает ряд значений в пределах от -300 до -50 ‰. В выборку вошли около 400 атмосферных состояний.

2) Для выбранных атмосфер с помощью ПО FIRE-ARMS рассчитаны фрагменты IMG – подобных ИК-спектров (с соответствующим типом и шириной функции свертки), включающих требуемые для метода восстановления спектральные интервалы. К этим спектрам добавлен шум с уровнем, характерным для измеренных спектров IMG ($3,5 \cdot 10^{-4}$ Вт/(м²·см⁻¹·ср)).

3) Восстановление профилей δD из смоделированных спектров по вышеописанной методике и сравнение результатов с исходными (известными) профилями. Вычисление среднеквадратического отклонения.

На рис. 4 показана полученная среднеквадратическая ошибка восстановления высотного профиля δD данным методом. Средняя по профилю ошибка

составила не более 25%, а средняя ошибка для относительного содержания HDO во всем атмосферном столбе – не более 20%.

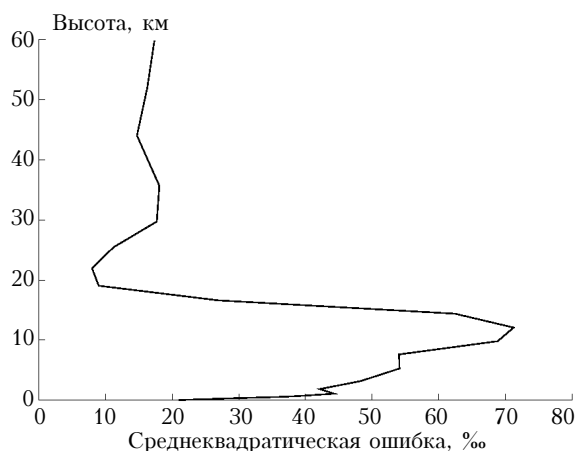


Рис. 4. Среднеквадратическая ошибка метода восстановления высотного профиля δD , полученная из модельных экспериментов с синтетическими спектрами IMG

Заключение

Нами разработан и апробирован метод восстановления высотных профилей изотопного отношения δD в атмосфере с использованием априорной информации в виде данных расчета по модели общей циркуляции атмосферы. В результате обработки спектров IMG/ADEOS получено распределение высотных профилей и полного содержания дейтерия в атмосфере для исследуемого региона над Тихим океаном (65° ю.ш. – 65° с.ш., 130 – 170° з.д.). Анализ ошибок в замкнутых экспериментах с синтетическими спектрами IMG показал достаточную точность метода для подобного рода приложений.

Результаты для восстановленных профилей δD согласуются с известными в литературе данными о вертикальном распределении дейтерия в атмосфере и расчетными данными, полученными с помощью модели общей циркуляции атмосферы для данного региона Тихого океана. Характер полученного широтного распределения для полного содержания HDO совпадает с результатами более ранней работы по обработке спектров IMG/ADEOS [9] и недавними результатами по обработке спектров TES [16]. Полученные данные о широтном распределении дейтерия из спектров IMG можно рассматривать лишь как оценку общего среднесезонного содержания HDO в атмосфере для указанного района Тихого океана. Сенсор IMG/ADEOS не обеспечивал достаточно плотного ежедневного покрытия земного шара, поэтому обработке подверглась совокупность разрозненных данных, выбранных для условий чистого неба за период зима 1996 – лето 1997 гг. Предложенная технология в принципе позволяет обрабатывать ИК-спектры атмосферы в реальном масштабе времени и при наличии периодических данных для какой-нибудь области может быть использована для оперативного отслеживания перемещения воздушных масс или иных задач метеорологии и геофизики.

1. Dansgaard W. Stable isotopes in precipitations // *Tellus*. 1964. V. XVI. N 4. P. 436–468.
2. Jouzel J., Alley R.B., Cuffey K.M., Dansgaard W., Grootes P., Hoffmann G., Jonsen S.J., Koster R.D., Peel D., Shuman C.A., Stievenard M., Stuiver M., White J.W.C. Validity of the temperature reconstruction from water isotopes in ice cores // *J. Geophys. Res.* 1997. V. 102. P. 26471–26487.
3. Ферронский В.И., Поляков В.А. Изотопия гидросферы. М.: Наука, 1983. 280 с.
4. Jacob H., Sonntag Ch. An 8-year record of the seasonal variation of D and ^{18}O in atmospheric water vapour and precipitation at Heidelberg, Germany // *Tellus*. B. 1991. N 43. P. 291–300.
5. Jouzel J., Hoffmann G., Koster R.D., Masson V. Water isotopes in precipitation: data/model comparison for present-day and past climates // *Quatern. Sci. Rev.* 2000. N 19. P. 363–379.
6. Levin I., Cias P., Langenfelds R., Schmidt M., Ramonet M., Sidorov K., Tchebakova N., Gloor M., Heimann M., Schulze E.D., Vygodskaya N.N., Shibistova O., Lloyd J. Three years of trace gas observations over the EuroSiberian domain derived from aircraft sampling – a converted action // *Tellus*. B. 2002. N 54(5). P. 696–712.
7. Nakajima N. Interferometric Monitor for Green house Gases (IMG): Procs. The first ADEOS Symposium / Workshop. Kyoto, Japan, 1994. P. 91–94.
8. Suzuki S. OCTS Mission operation and standard products: Procs. The first ADEOS Symposium / Workshop. Kyoto, Japan, 1994. P. 77–83.
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 // *GRL*. 2004. V. 31. N 12. P. 723–726.
10. Schmidt G.A., Hoffmann G., Shindell D.T., Hu Y. Modelling atmospheric stable water isotopes and the potential for constraining cloud processes and stratosphere-troposphere water exchange // *J. Geophys. Res.* 2005. N 110. D21314, doi:10.1029/2005JD005790.
11. Тимофеев Ю.М., Васильев А.В. Теоретические основы атмосферной оптики. СПб.: Наука, 2003. 474 с.
12. Gribanov K.G., Zakharov V.I., Tashkun S.A., Tyuterev V.I.G. A New Software Tool for Radiative Transfer Calculations and its application to IMG/ADEOS data // *J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer*. 2001. V. 68. N 4. P. 435–451.
13. Rothman L.S., Jacquemart D., Barbe A., Benner D.C., Birk M., Brown L.R., Carleer M.R., Chackerian Jr.C., Chance K., Coudert L.H., Dana V., Devi V.M., Flaud J.-M., Gamache R.R., Goldman A., Hartmann J.-M., Jucks K.W., Maki A.G., Mandin J.-Y., Massie S.T., Orphal J., Perrin A., Rinsland C.P., Smith M.A.H., Tennyson J., Tolchenov R.H., Toth R.A., Auwers J.V., Varanasi P., Wagner G. The HITRAN 2004 molecular spectroscopic database // *J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer*. 2005. V. 96. P. 139–204.
14. Грибанов К.Г., Захаров В.И., Топтыгин А.Ю. Восстановление профилей температуры и влажности по ИК-спектрам Земли на основе сингулярного разложения ковариационных матриц // *Оптика атмосф. и океана*. 2003. Т. 16. № 7. С. 576–581.
15. Anderson G.P., Clough S.A., Kneizys F.X., Chetwynd J.H., Shettle E.P. AFGL atmospheric constituent profiles (0–120 km) // AFGL-TR-0110, Environ. Res. Paper 954. Air Force Geophysics Laboratory. 1986. P. 43.
16. Worden J.R., Bowman K., Noone D., et al. TES observations of the tropospheric HDO/H₂O ratio: retrieval approach and characterization // *J. Geophys. Res.* 2005. V. 111 (D16). D16309, doi:10.1029/2005JD006606.

A.Yu. Toptygin, K.G. Gribanov, R. Imasu, G.A. Schmidt, V.I. Zakharov. Latitudinal distribution of vertical profiles and total column amount of HDO/H₂O ratio in the atmosphere over ocean retrieved from IMG/ADEOS observations.

Retrieval method for HDO/H₂O ratio profile and total column amount is presented. The method is based on the expansion of retrieved profile on eigenvectors of covariance matrix of model profiles extracted from the atmospheric general circulation model. A priori information in covariance matrix compensates partially the lack of information containing in weighting functions for HDO in lower atmospheric layer (0–1 km) and layers above 10 km. Infrared radiance spectra observed by satellite with high spectral resolution in nadir direction were used as input data for the retrieval.

The method was tested using IMG/ADEOS spectra measured over the ocean in clear sky conditions. Latitudinal distributions of HDO/H₂O vertical profile and columnar HDO/H₂O ratio are retrieved over Pacific Ocean for the time interval from winter of 1996 to summer of 1997. Error estimation was made using closed model calculations and its value is not greater than 25% for vertical profile and not greater than 20% for columnar value of HDO/H₂O ratio. Vertical and latitudinal distributions obtained in this paper are in good agreement with literature data on isotopic composition of water vapor in the atmosphere.