

УДК 551.510.412; 551.501.86

МЕТОДИКА ОПРЕДЕЛЕНИЯ ТРОПОСФЕРНОГО СОДЕРЖАНИЯ ОЗОНА ИЗ СПЕКТРАЛЬНЫХ ИЗМЕРЕНИЙ УХОДЯЩЕГО ТЕПЛОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ СПУТНИКОВЫМ ПРИБОРОМ ИКФС-2

© 2024 г. А. В. Поляков^{a, *}, Я. А. Виролайнен^a, Г. М. Неробелов^{a, b, c}, С. В. Акишина^a

^aСанкт-Петербургский государственный университет,
Университетская наб., д. 7–9, Санкт-Петербург, 199034, Россия,

^bСПб ФИЦ РАН – Научно-исследовательский центр экологической безопасности РАН,
ул. Корпусная, 18, Санкт-Петербург, 187110, Россия

^cРоссийский государственный гидрометеорологический университет,
Малоохтинский пр-т, 98, Санкт-Петербург, 195196, Россия

*e-mail: a.v.polyakov@spbu.ru

Поступила в редакцию 19.03.2024 г.

После доработки 20.05.2024 г.

Принята к публикации 10.07.2024 г.

Предложена методика определения тропосферного содержания озона (ТСО) из спектров уходящего теплового инфракрасного (ИК) излучения, основанная на методе главных компонент и нейронно-сетевом подходе. Для обучения искусственных нейронных сетей используются данные о ТСО, рассчитанные на основе профилей вертикального содержания озона, полученных с помощью озонзондов. В качестве ТСО рассматривается содержание озона в слоях атмосферы от поверхности Земли до уровней с давлением в 400 и 300 гПа. Погрешность аппроксимации величин ТСО на учебных данных составляет 2.7 и 3.6 е.Д. для слоев ниже 400 и 300 гПа соответственно. Методика валидирована на основе сопоставления с данными наземных измерений ТСО на сети станций международной наблюдательной сети NDACC, использующих спектры солнечного ИК-излучения. Средние стандартные отклонения разностей между данными наземных ИК-измерений на 19 станциях и полученными величинами ТСО по данным ИКФС-2 составили около 3 е.Д. Средние разности зависят от высоты и географического расположения наземной станции, меняясь от +3 до –12 е.Д. Расхождения наземных измерений со спутниковыми данными соответствуют результатам зарубежных авторов, полученным для близкого по характеристикам спутникового прибора IASI. В работе приведены примеры глобального распределения среднемесячных величин ТСО для различных сезонов.

Ключевые слова: тропосферный озон, дистанционное зондирование атмосферы, ИКФС-2

DOI: 10.31857/S0002351524050054 **EDN:** HXXULY

1. ВВЕДЕНИЕ

Внимание к тропосферному содержанию озона (ТСО) в последнее время растет по ряду причин. Во-первых, озон участвует в химических и фотохимических процессах, определяя окислительную способность тропосферы. Попадая в организм через дыхательные пути, тропосферный озон негативно влияет на здоровье людей и животных [Stanek et al., 2011]. Согласно [Amann et al., 2008], причиной более чем 20 тысяч смертей в 25 странах Евросоюза ежегодно является превышение пре-

дельно допустимых величин приземной концентрации озона (ПКО). Озон оказывает негативное влияние и на растительность [Mills et al., 2018]. Во-вторых, тропосферный озон является одним из основных парниковых газов, влияющих на радиационный баланс и изменение климата Земли [Звягинцев, 2013]. Поглощая тепловое излучение Земли в ИК области спектра, озон вносит вклад в парниковый эффект. По данным отчета ИРСС за 2021 г. [Forster et al., 2021], вклад тропосферного озона в общее антропогенное влияние на радиа-

ционный баланс планеты составляет 4–20%, что согласуется и с более ранними данными [Кароль и др., 2012]. Модели оценивают величину радиационного воздействия ТСО как $+(0.40 \pm 0.20)$ Вт м^{-2} [IPCC, 2013]. Большой разброс оценки вклада ТСО в радиационное воздействие вызван, в частности, недостаточностью знаний о пространственном распределении ТСО [Wu et al., 2007].

Основные источники озона в тропосфере — поступление озона из стратосферы и образование в результате фотохимических реакций. Мощность второго источника на порядок превышает первый [Young et al., 2013], но при этом большая часть озона, образующегося в ходе фотохимических реакций, разрушается или осаждается на поверхности Земли, в результате чего среднеглобально оба источника вносят примерно одинаковый вклад. В различные сезоны и в разных регионах относительный вклад источников может значительно меняться в зависимости от эмиссий прекурсоров озона (NO_x , CO , CH_4 , OH , антропогенных и биогенных летучих соединений) и метеорологической обстановки [Кароль и др., 2012; Звягинцев, 2013], что ведет к значительной изменчивости ТСО.

Результаты регулярного мониторинга как ПКО, так и ТСО, уже около 10 лет собираются в рамках международного проекта TOAR (Tropospheric Ozone Assessment Report) (<https://toar-data.org>). Мониторинг включает комплексный подход, состоящий из наземных локальных и дистанционных измерений, самолетных, спутниковых наблюдений и др. Первые измерения ПКО начались в 1870-х гг., в 1930–40-е годы были начаты запуски озонозондов, которые дали представление о содержании озона во всей толще тропосферы [Tarasick et al., 2019]. В 1960–1970 гг. началось повсеместное исследование ПКО и вертикальных профилей озона. В базе данных WOUDC (<https://woudc.org/home.php>) представлены данные нескольких десятков наземных станций, проводящих запуски озонозондов, точность измерения которых в последнее время увеличивается, что позволяет использовать их данные для валидации спутниковых измерений [Tarasick et al., 2021]. На отдельных наземных станциях ТСО (вертикальные профили) периодически или в ходе измерительных кампаний измеряется с помощью лидарного метода и метода обращения Umkehr, использующего спектрофотометры

Брюера и Добсона [Gaudel et al., 2018]. Кроме того, ТСО в безоблачные дни получают на станциях международной измерительной сети IRWG-NDACC (InfraRed Working Group of Network for the Detection of Atmospheric Composition Change) (<https://www2.acom.ucar.edu/irwg>), оборудованных Фурье-спектрометрами (ФС) высокого спектрального разрешения — FTIR-измерения (Fourier Transform InfraRed) [Vigouroux et al., 2015]. Наземные измерения используются как для исследования локальных изменений ТСО, так и для валидации спутниковых измерений и настройки численных моделей атмосферы в региональном масштабе.

В России существует наземная сеть мониторинга ПКО в фоновых условиях, включающая в себя около 20 станций в 13 регионах страны, оборудованная современными газоанализаторами [Андреев и др., 2023]. Кроме того, в России периодически проводятся эксперименты по определению ТСО, охватывающие большие территории, например, самолетные измерения в Сибирском регионе [Antokhin et al., 2013] и над всеми морями российского сектора Арктики [Belan et al., 2022], а также трансконтинентальные измерения состава атмосферы на передвижной железнодорожной лаборатории TROICA [Еланский и др., 2021]. Вертикальные профили озона в верхней тропосфере эпизодически измеряют с помощью лидаров [Матвиенко и др., 2019] и озонозондов [Dorokhov et al., 2013]. На станции NDACC в Санкт-Петербурге, на базе кампуса СПбГУ в Петергофе, с 2009 г. проводятся регулярные измерения ТСО с помощью ФС Bruker IFS 125HR [Виролайнен и др., 2023a].

В настоящее время глобальную информацию о ТСО регулярно получают с помощью спутниковых приборов IASI [Dufour et al., 2012], TROPOMI [Hubert et al., 2021], а также совместных измерений приборами IASI и GOME-2 [Cuesta et al., 2013], OMI и MLS [Ziemke et al., 2006] и др. Следует отметить, что такие приборы как OMI, GOME-2, TROPOMI и др., использующие измерения солнечного излучения, имеют определенные пробелы в данных, например, полностью отсутствуют измерения ТСО в условиях полярной (и обычной) ночи. Наиболее полный глобальный охват измерений ТСО дают спутниковые приборы, использующие собственное тепловое излучение. В последние годы такие

измерения проводились только спутниковым прибором IASI.

Для валидации спутниковых измерений ТСО обычно используются как данные озонозондирования, так и данные различных наземных измерений. В работе [Dufour et al., 2012] проанализировано определение ТСО из спектроскопических измерений спутникового прибора IASI в 2008 году с помощью двух алгоритмов решения обратной задачи, IASI_LATMOS и IASI_LISA. В среднем по всем сопоставлениям в средних широтах (320 дней сопоставлений) средние разности (СР) между спутниковыми и озонозондовыми измерениями составили +0.6 е.Д. со стандартными отклонениями разностей (COP) в 5.5 е.Д. (IASI_LATMOS) и +1.0 е.Д. с COP в 6.1 е.Д. (IASI_LISA). В работе [Boynard et al., 2018] измерения ТСО IASI_LATMOS за период 2008–2017 гг. были сопоставлены с данными озонозондирования на 56 станциях и FTIR-измерениями на 6 станциях сети IRWG-NDACC. СР для станций NDACC-IRWG менялись от –4 е.Д. до +0.5 е.Д., COP составили 2.5–3.9 е.Д. В работе [Cuesta et al., 2013] из данных совместных измерений приборами IASI и GOME-2 была получена информация о содержании озона в том числе и в слоях тропосферы. Результаты были сопоставлены с озонозондовыми данными за лето 2009 года на 10 европейских станциях. СР (COP) составили 0.01 е.Д. (4.3 е.Д.) для содержания озона в слое 0–6 км и –0.73 е.Д. (6.2 е.Д.) для содержания озона в слое 0–12 км. В работе [Виролайнен и др., 2023б] данные спутниковых измерений IASI_LATMOS, IASI_LISA за 2009–2021 гг. и IASI-GOME2 за 2016–2021 гг. в слое тропосферы 0–8 км были сопоставлены с данными FTIR-измерений на станции IRWG-NDACC St.Petersburg, в работе [Virolainen et al., 2023] эти сопоставления были также распространены на 2 другие станции IRWG-NDACC — Kiruna и Izaña. Было показано, что СР между спутниковыми и наземными измерениями ТСО находятся в пределах суммарных погрешностей измерений сравниваемых данных для алгоритмов IASI_LATMOS (9–13%) и IASI_LISA (12–16%), в то время как СР со спутниковыми данными IASI-GOME2 превосходят погрешности индивидуальных измерений, составляя 16–22%. Кроме того, для станции Izaña был выявлен статистически значимый дрейф (около –12% за декаду) в спутниковых измерениях ТСО прибором IASI за период 2012–2021 гг.

Отметим, что в России в настоящий момент отсутствуют спутниковые методики измерения ТСО. Предлагаемая работа решает задачу создания методики для определения ТСО из спектров, измеряемых прибором ИКФС-2 [Golovin et al., 2014], который входит в состав аппаратуры на метеорологических космических аппаратах (КА) серии «Метеор-М» № 2 [Asmus et al., 2014]. Измеренные спектры включают 2701 спектральный канал с аподизированным спектральным разрешением 0.7 см^{-1} в спектральном интервале $660\text{--}1210\text{ см}^{-1}$ и 1.4 см^{-1} в области $1210\text{--}2000\text{ см}^{-1}$. Первый КА этой серии поставлял данные с начала 2015 г. по конец 2022 г., в настоящее время на орбите находится КА «Метеор М» № 2–4. Для того, чтобы исследовать содержание озона только в слое тропосферы, в настоящей работе мы в качестве ТСО рассматриваем содержание озона в слоях от поверхности до уровня с атмосферным давлением меньшим 300 и 400 гПа, что примерно соответствует слоям, ограниченным сверху высотами в 9 и 7 км, соответственно. Ниже мы используем все доступные за период 2015–2022 гг. спектральные данные ИКФС-2, как для обучения ИНС, так и при их валидации.

2. МЕТОДЫ

2.1. Подход и методика

Для решения обратной задачи определения ТСО мы использовали подход, ранее успешно примененный для определения общего содержания озона (ОСО) в атмосфере из спектров уходящего теплового ИК излучения, измеряемого прибором ИКФС-2 [Гаркуша и др. 2017, Polyakov et al. 2021, 2023, Timofeyev et al. 2019]. А именно, на основе независимых данных о ТСО, рассчитанных из вертикальных профилей озона, полученных озонозондами, и подобранных к ним по месту и времени измерений спектров ИКФС-2, была обучена искусственная нейронная сеть (ИНС) (построена аппроксимация зависимости ТСО от набора предикторов в форме ИНС), позволившая определять ТСО по спектрам ИКФС-2.

В качестве первого приближения мы повторили полностью ранее разработанную для ОСО методику, единственно заменив ОСО на ТСО. А именно была использована одна из простейших конфигураций ИНС — трехслойный перцептрон (рис. 1).

Математически данная ИНС представлена выражением (1)

$$y = f(b^2 + \sum_{i=1}^{N_h} \omega_i^2 f(b_i^1 + \sum_{j=1}^N \omega_{i,j}^1 x_j). \quad (1)$$

Здесь f — функция активации, $\vec{X} = \{x_j\}$ — вектор входных параметров, $b_i^1, \omega_{i,j}^1, \omega_i^2, b^2$ — коэффициенты.

Под обучением ИНС понимается минимизация среднеквадратичной погрешности $\sigma_{\text{анп}}$ аппроксимации данных обучающего набора по коэффициентам $b_i^1, \omega_{i,j}^1, \omega_i^2, b^2$

$$\sigma_{\text{анп}} = \sqrt{\frac{\sum_s (Y_s - y(\vec{X}_s))^2}{\sum_s 1}} \rightarrow \min, \quad (2)$$

где набор пар $\{\vec{X}, Y\}_s$ — обучающий набор данных. Минимальная погрешность обеспечивает наилучшую в среднеквадратичном смысле близость реальных значений ТСО $\{Y\}_s$ и полученных с использованием математического алгоритма ИНС (1), что позволяет подобрать оптимальные значения коэффициентов. Тестовый и валидационный наборы данных используются для контроля переобучения сети и для оптимизации структуры ИНС. Рост погрешности аппроксимации с использованием таких проверочных наборов данных является признаком адаптации сети только к обучающему набору

данных. Подчеркнем, что мы не использовали получившие распространение в последние годы библиотеки программ для работы с ИНС TensorFlow и Keras. Все расчеты выполнены с использованием оригинального программного обеспечения, разработанного ранее [Поляков и др., 2014а, 2014б] как для обучения ИНС, так и для расчетов по ней.

Следуя предшествующему опыту по решению обратной задачи относительно ОСО, в качестве предикторов мы использовали зенитный угол спутника (угол между нормалью к поверхности и направлением на спутник в центре пикселя наблюдения), широту пикселя измерения, день года и главные компоненты (ГК) двух участков спектра в области измерений ИКФС-2: 660–1210 см⁻¹ и 980–1080 см⁻¹. Первый из этих спектральных интервалов несет информацию об общем состоянии атмосферы и поверхности — профиле температуры, температуре и излучательной способности поверхности, профиле влажности и пр., в то время как второй, содержащий полосу поглощения озона, позволяет выделить информацию, относящуюся непосредственно к озону.

2.2. Обучение ИНС

Для обучения ИНС мы использовали рассчитанное на основании вертикальных профилей озона, измеренных озонозондами, интегральное содержание газа в слое ниже 300 гПа или ниже 400 гПа.

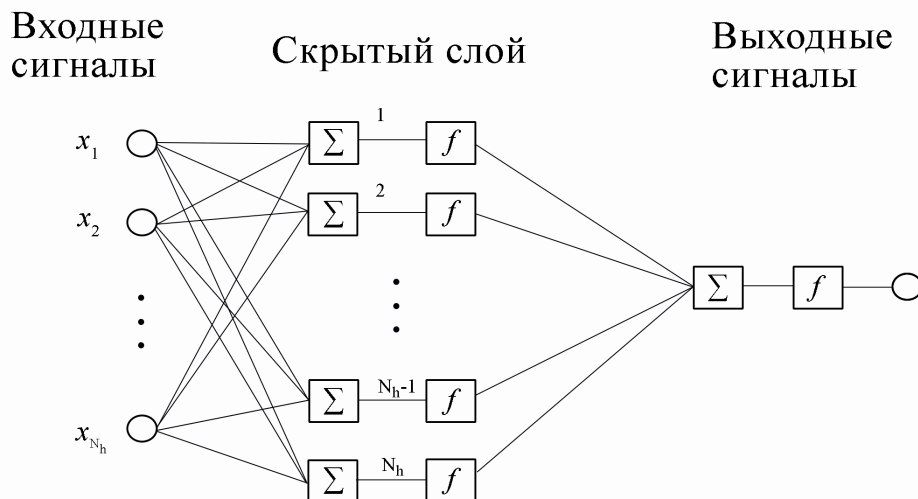


Рис. 1. Трехслойный перцептрон. Первым слоем считаются источники входных сигналов, затем следует т.н. скрытый слой, затем третий слой выходных сигналов.

Таблица 1. Погрешности аппроксимации для различных обучающих наборов

1	Учебник	Количество пар учебника	Количество пар валидационного набора	Погрешность аппроксимации учебника, е.Д.	Погрешность аппроксимации валидационного набора, е.Д.
верхняя граница ТСО 300 гПа					
2	Озонозонды, все спектры, 12 ч, 100 км	42821	14184	4.49	4.95
2a	Озонозонды, все спектры, 12 ч, 100 км, p_0	42821	14184	3.49	3.70
3	Озонозонды, безоблачные, 12 ч, 100 км	13126	4315	3.42	5.29
4	Озонозонды, все спектры, 24 ч, 200 км	341274	113418	5.19	5.30
5	Озонозонды, безоблачные, 24 ч, 200 км	102279	34263	4.77	5.09
верхняя граница ТСО 400 гПа					
6	Озонозонды, все спектры, 24 ч, 200 км	341537	113526	4.05	4.18
7	Озонозонды, все спектры, 24 ч, 200 км Нет широты и сезона	341537	113526	4.43	4.47

p_0 — приземное давление, используемое в наборе предикторов вместо широты точки наблюдения.

Следует отметить, что, хотя при наличии сплошной облачности полная информация о ТСО не содержится в спектрах из-за экранирования ИК излучения облаком, возможность оценки ТСО при частичной облачности может оказаться доступной, в зависимости от балльности облачности и высоты ее верхней границы. Поэтому при обучении ИНС мы рассматривали как безоблачные ситуации (алгоритм детектирования облачности см. в [Рублев и др., 2004, Асмус и др., 2017]), так и все измерения ИКФС-2. В состав предикторов, как говорилось выше, включены ГК спектра в двух спектральных интервалах, зенитный угол спутника, широта пикселя наблюдений и день года. Отметим, что весь полученный набор пар измерений разбивался на три набора: учебник (60%), тестовый и валидационный наборы (по 20%).

Обучение выполнялось до 100 эпох, на каждой эпохе функция цены (она же — погрешность аппроксимации), равная среднеквадратичной разности измеренных независимо и оцененных по ИНС величин ТСО, минимизировалась с использованием до 100 шагов метода Флетчера—Ривса и до 200 шагов метода Дэвидсона—Флетчера—Пау-

элла. Программы минимизации взяты из находящейся в открытом доступе библиотеки программ МГУ (http://num-anal.srcc.msu.ru/lib_na/cat/mn/mnb3r.htm, [mnb4d.htm](http://num-anal.srcc.msu.ru/lib_na/cat/mn/mnb4d.htm)). Мы рассмотрели несколько обучающих наборов данных и вариант ИНС, при котором в число предикторов не входят широта и день года измерений. Наборы варьировались в зависимости от значений временного и пространственного рассогласования данных в паре. Для отбора пар по времени рассмотрены значения рассогласования 12 и 24 часа, по пространственной точке измерения — 100 и 200 км. В табл. 1 приведены погрешности аппроксимации решающего оператора для рассмотренных наборов данных и ИНС. Запись «все спектры» означает спектры ИКФС-2, измеренные как в облачных, так и в безоблачных условиях.

Как видно из строк 2, 2a (с параметрами отбора 12 часов и 100 км) и в большей степени 3 (отбор безоблачных) табл. 1, в случае озонозондов наблюдается незначительное переобучение (погрешность аппроксимации для валидационного набора данных заметно больше погрешности для учебного набора). Хотя существуют методики, позволяющие обучать ИНС и в такой ситуации,

наилучшим способом избежать переобучения является увеличение объема учебника. Для этого рассмотрим вариант отбора для 24 часов и 200 км, показанный в строках 4, 5 табл. 1. Хотя мы и наблюдаем рост погрешности аппроксимации в этих случаях по сравнению со строками 2 и 3, следует ожидать от этих вариантов лучших результатов при валидации вследствие роста объема учебника.

Строка 2а показывает вариант набора предикторов, в котором вместо широты места используется приземное давление p_0 . При обучении это давление в месте запуска зонда, при решении обратной задачи — давление в пикселе прицеливания прибора по данным NCEP GFS. Как видно, влияние незначительно, хотя, что интересно, незначительно (на 0.13 е.Д.) уменьшилась погрешность аппроксимации на валидационном наборе. По нашему мнению, это может свидетельствовать о более физичном наборе предикторов в этом случае.

Строка 7 описывает набор данных, который не включает информацию о широте и дне года измерений. Сравнение строк 6 и 7 показывает,

что использование широты и доли года заметно уменьшает невязку. А именно, погрешность аппроксимации учебника при исключении этих параметров из числа предикторов ведет к росту погрешности аппроксимации примерно на 10% (4.43 вместо 4.05).

Таким образом, анализ табл. 1 позволил нам для дальнейших исследований остановиться на варианте обучения: (1) по всем ситуациям, включая облачные, (2) набор предикторов включает помимо ГК спектров зенитный угол спутника, широту и день года, (3) допустимы величины рассогласования в парах данных 200 км по пространству и 24 часа по времени. Далее мы оптимизировали структуру ИНС, выбрав на основе результатов серии расчетов оптимальное число ГК, входящих в набор предикторов, и число нейронов скрытого слоя (НСС) (см. табл. 2).

Взяв за основу вариант ИНС, использованный ранее в работах [Гаркуша и др. 2017, Поляков и др. 2021] при определении ОСО с 25 ГК всего спектра, 50 ГК полосы озона, 40 НСС в числе предикторов, мы попробовали уменьшать число ГК полосы озона. Результаты показаны в строках 1–5. Видно,

Таблица 2. Подбор оптимальной структуры ИНС. 200 эпох оптимизации, высота тропосферного слоя 400 гПа. Обозначение схемы ИНС указывает на состав вектора входных параметров ИНС. Первое число обозначает количество ГК всего спектра, второе — число ГК полосы озона, и третье — число НСС. Погрешности аппроксимации приведены в е.Д.

№	Схема ИНС	Число коэф. ИНС	Погрешность аппроксимации учебника	Погрешность аппроксимации тестового набора	Погрешность аппроксимации валидационного набора
1	25-50-40	3201	2.77	2.80	2.79
2	25-10-40	1601	2.78	2.80	2.79
3	25-0-40	1201	2.82	2.83	2.82
4	30-0-40	1401	2.80	2.80	2.80
5	35-0-40	1601	2.78	2.80	2.79
6	50-0-60	3301	2.72	2.74	2.74
7	50-0-50	2751	2.73	2.75	2.75
8	50-0-40	2201	2.75	2.76	2.77
9	40-0-60	2701	2.71	2.73	2.73
10	35-0-60	2401	2.71	2.73	2.72
11	40-0-50	2251	2.74	2.76	2.76
12	30-0-60	2101	2.72	2.74	2.74
13	40-0-70	3151	2.70	2.73	2.73
14	35-0-65	2601	2.70	2.72	2.72
15	35-0-55	2201	2.72	2.74	2.74

что при уменьшении числа ГК полосы озона до 10 погрешность аппроксимации σ_{ann} (ПА) практически не изменилась (строка 2), но при уменьшении этого количества до 0 наблюдается рост ПА на 0.03–0.04 е.Д. для всех трех подвыборок. Чтобы компенсировать этот рост, увеличим количество ГК всего спектра. Как видно, увеличение этого количества на 5 (строка 4) не дает полной компенсации, а увеличение на 10 — практически полностью компенсирует отмену использования ГК полосы озона (строка 5). Поэтому далее мы рассматриваем варианты без использования ГК полосы озона. По ряду очевидных причин желательно использовать возможно более простую структуру ИНС с минимальным количеством определяемых при обучении коэффициентов. Для этого рассмотрим несколько вариантов ИНС и выберем вариант, оптимальный с точки зрения сочетания малой погрешности аппроксимации и небольшого числа определяемых коэффициентов.

В качестве заведомо избыточного варианта ИНС рассмотрим вариант с 50 ГК и 60 НСС (строка 6). Как видно, ПА относительно основного варианта уменьшилась на 0.05–0.06 е.Д. для всех трех подвыборок. Ниже в строках 7–15 мы варьировали количество ГК и НСС, анализируя ПА. На основе этого анализа мы выбрали для дальнейшей работы вариант строки 15: 35 ГК спектра и 55 НСС.

Выбор структуры ИНС был выполнен для слоя атмосферы ниже 400 гПа. Чтобы убедиться в пригодности того же выбора и для слоя ниже 300 гПа, сравним в табл. 3 ПА для выбранной и избыточной схем ИНС. Поскольку выбор верхней границы рассматриваемого слоя связан с широтной зо-

ной, выполним эти сравнения как для всех широт, так и исключив полярные и близкие к ним широты для пояса 60° ю.ш. — 60° с.ш.

Табл. 3 показывает, что рост ПА при переходе от избыточной к выбранной схеме не превосходит 0.07 е.Д. на учебном наборе данных и 0.03–0.04 е.Д. на тестовом и валидационном наборах, что позволяет сделать вывод о пригодности использования выбранной конфигурации ИНС и для слоя атмосферы ниже 300 гПа.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

3.1. Сопоставление с данными наземных FTIR-измерений

Полученные ИНС мы применили, чтобы обработать измерения ИКФС-2 вблизи наземных станций сети IRWG-NDACC, оснащенных ФС высокого спектрального разрешения Bruker IFS 125HR, измеряющими спектры прямого солнечного ИК-излучения в безоблачной атмосфере или в больших разрывах облаков. Это позволило нам сравнить величины ТСО, полученные с помощью нашей методики, с данными независимых FTIR-измерений (<https://www-air.larc.nasa.gov/missions/ndacc/data.html>). Географические координаты и высоты станций над уровнем моря показаны в табл. 4. В последнем столбце табл. 4 приведены также некоторые особенности расположения станций, которые могут влиять на результаты сопоставления с данными спутниковых измерений. Так, например, для сопоставления с наземными измерениями брались в расчет осредненные за день спутниковые измерения в радиусе 200 км от наземных станций, т.е. при расположении станции в горной местности, часть

Таблица 3. Погрешности аппроксимации приведены в е.Д. для двух структур ИНС для всех широт и средних, и тропических широт. Верхняя граница расчета ТСО 300 гПа

№	Схема ИНС	Число коэфф-в ИНС	Погрешность аппроксимации учебника	Погрешность аппроксимации естового набора	Погрешность аппроксимации валидационного набора
200 эпох, все широты					
1	50-0-60	3301	3.66	3.73	3.72
2	35-0-55	2201	3.69	3.76	3.75
200 эпох, пояс широт 60° ю.ш. — 60° с.ш.					
4	35-0-55	2201	3.56	3.62	3.64
5	50-0-60	3301	3.50	3.60	3.60

спутниковых данных может захватывать как горы, так и низменности, а при расположении станции на островах, большая часть спутниковых измерений может относиться к водной поверхности, а не к самой станции.

Как видно из табл. 4, все станции, за исключением трех, расположены в Северном полушарии. Среди них 7 станций находятся в Европе, 5 — в Северной Америке, 2 — в Японии, 2 — на островах. В высоких широтах находятся 5 станций, в средних — 10, в тропических — 4 станции. Таким образом, рассматриваемые FTIR-измерения охватывают все широтные зоны от средних широт Южного полушария до высоких широт Северного полушария.

Чтобы подтвердить обоснованность выбора количества ГК и НСС, мы выполнили сравнения спутниковых измерений ТСО, полученных при разных вариантах структуры ИНС, с данными FTIR-измерения. Эти сопоставления с независимыми данными позволяют сделать более обоснованный выбор структуры сети, чем анализ ПА. Результаты сравнений спутниковых и на-

земных измерений ТСО в слое тропосферы ниже 400 гПа для каждой станции приведены в табл. 5. Отметим, что для спутниковых измерений осреднялись все данные за день, попадающие в круг радиусом 200 км от станции, а для наземных измерений — брались средние значения для каждого дня сопоставлений.

СОР для разных станций значительно отличаются друг от друга, что можно объяснить как особенностями расположения станций (стабильность воздушных масс, высота, окрестности и т.д.), так и различными методиками интерпретации ИК-спектроскопических данных на разных станциях. Несмотря на то, что все станции принадлежат одной сети и они оборудованы идентичными приборами, на каждой станции исследователи используют свои методики интерпретации спектроскопических данных, адаптированные к особенностям приборов, измерений и условий на станциях. В настоящее время в рамках проекта TOAR-II вводится единая методика интерпретации, результаты которой пока еще не получены на всех станциях. СР между наземными измере-

Таблица 4. Географические координаты и высоты над уровнем моря станция IRWG-NDACC

	Станция	Широта	Долгота	Высота	Примечания
1	Eureka, Канада	80.05° N	86.42° W	610 м	ледник
2	Ny Ålesund, Норвегия	78.92° N	11.93° E	15 м	остров
3	Thule (Гренландия), Дания	76.53° N	68.74° W	220 м	ледник
4	Kiruna, Швеция	67.84° N	20.41° E	419 м	
5	Harestua, Норвегия	60.2° N	10.8° E	596 м	
6	St. Petersburg, Россия	59.9° N	29.8° E	20 м	
7	Bremen, Германия	53.1° N	8.8° E	27 м	
8	Zugspitze, Германия	47.42° N	10.98° E	2964 м	горы
9	Jungfraujoch, Швейцария	46.55° N	7.98° E	3580 м	горы
10	Toronto - ТАО, Канада	43.66° N	79.40° W	174 м	
11	Rikubetsu, Япония	43.46° N	143.77° E	380 м	остров
12	Boulder (Колорадо), США	39.99° N	105.26° W	1634 м	горы
13	Tsukuba, Япония	36.05° N	140.13° E	31 м	остров
14	Izaña (Тенерифе), Испания	28.30° N	16.48° W	2367 м	малый остров
15	Mauna Loa (Гавайи), США	19.54° N	155.58° W	3397 м	малый остров
16	Altzomoni, Мексика	19.12° N	98.66° W	3985 м	горы
17	Maido (Ре-Юнион), Франция	21.1° S	55.4° E	2155 м	малый остров
18	Wollongong, Австралия	34.41° S	150.88° E	30 м	
19	Lauder, Новая Зеландия	45.04° S	169.68° E	370 м	остров

Таблица 5. Сопоставление ТСО в слое ниже 400 гПа по данным FTIR-измерений и ИКФС-2 (N – число сопоставлений, Δ – средняя разность в е.Д. (FTIR минус ИКФС-2), σ – стандартное отклонение разностей в е.Д.

Станция	Примечания	N	35-0-60		50-0-60		35-0-65		35-0-55		25-0-40	
			Δ	σ	Δ	σ	Δ	σ	Δ	σ	Δ	σ
Eureka	ледник	282	+3.7	4.2	+3.6	4.2	+3.7	4.2	+3.6	4.2	+3.7	4.2
Ny Ålesund	остров	120	-0.22	4.4	-0.08	4.4	-0.23	4.4	-0.13	4.4	0.02	4.4
Thule	ледник	553	+2.1	3.4	+2.2	3.4	+2.1	3.4	+2.0	3.4	+2.3	3.3
Kiruna		491	+1.3	3.9	+1.2	3.8	+1.3	3.9	+1.3	3.8	+1.1	3.9
Harestua		153	-0.55	2.6	-0.47	2.6	-0.6	2.6	-0.41	2.5	-0.65	2.6
St. Petersburg		247	+0.42	3.7	+0.68	3.5	+0.42	3.7	+0.84	3.6	+0.47	3.7
Bremen		129	+0.68	2.5	+0.66	2.6	+0.68	2.5	+0.64	2.7	+0.62	2.7
Zugspitze	горы	559	-10.5	3.1	-10.5	3.1	-10.5	3.1	-10.4	3.1	-10.2	2.9
Jungfrauoch	горы	441	-12.6	2.1	-12.6	2.1	-12.6	2.1	-12.5	2.0	-12.2	2.0
Toronto – TAO		679	+2.2	4.0	+1.9	4.0	+2.2	4.0	+1.9	4.1	+2.3	4.0
Rikubetsu	остров	100	-1.0	3.4	-1.3	3.5	-1.0	3.4	-1.2	3.5	-0.7	3.3
Boulder	горы	367	-1.9	2.2	-1.8	2.2	-1.9	2.2	-1.9	2.2	-2.3	2.3
Tsukuba	остров	184	+2.8	4.0	+2.6	3.8	+2.8	4.0	+2.6	4.1	+3.6	3.9
Izaña	малый остров	395	-8.7	2.0	-8.2	1.9	-8.7	2.0	-8.2	2.0	-8.8	2.0
Mauna Loa	малый остров	659	-8.3	2.5	-8.5	2.3	-8.3	2.5	-8.5	2.1	-8.3	2.3
Altzomoni	горы	216	-12.0	2.5	-10.1	2.1	-12.0	2.5	-11.1	2.2	-11.1	2.5
Maido	малый остров	342	-5.6	2.2	-5.7	2.3	-5.8	2.2	-5.8	2.1	-5.7	2.4
Wollongong		212	+2.1	2.6	+3.5	2.7	+2.1	2.6	+2.7	2.8	+3.0	2.7
Lauder	остров	940	+1.1	2.0	+1.2	2.1	+1.1	2.0	+1.2	2.1	+1.3	2.0
Все		7069		3.02		2.98		3.02		2.99		2.99

ниями хорошо отражают высоту расположения станции, чем выше станция (особенно это касается станций, расположенных в единичных горах, окруженных плоскогорьем), тем сильнее завышают спутниковые данные наземные измерения вследствие того, что в радиус вокруг станции попадает много измерений с центрами пикселей на более низких высотах.

Как видно из табл. 5, все варианты ИНС дают незначимо различающиеся результаты при сравнении спутниковых измерений ТСО с независимыми измерениями. Поэтому мы ниже будем опираться на сделанный выше выбор и рекомендуем для определения ТСО с помощью спектральных измерений ИКФС-2 использовать сеть ИНС 35-0-55. Для этой сети мы также сопоставили данные по всем станциям, но уже для слоя тропосферы от поверхности до 300 гПа. В табл. 6 приведены средние по всем станциям СР для двух слоев тропосферы

для случаев, когда для сопоставления мы осредняли спутниковые данные в радиусе 100 км и 200 км.

При уменьшении радиуса осреднения спутниковых измерений СОР в среднем заметно не изменяются, хотя, конечно, на разных станциях ситуации различаются. В целом можно говорить о согласии около 3 е.Д. для всех рассмотренных вариантов сопоставления, что составляет ~15% от ТСО по данным FTIR-измерений.

Таблица 6. Средние по 19 станциям стандартные отклонения разностей в величинах ТСО по данным FTIR-измерений и ИКФС-2

Слой тропосферы до уровня	Радиус осреднения ИКФС-2	
	100 км	200 км
300 гПа	2.91 е.Д.	2.95 е.Д.
400 гПа	3.00 е.Д.	2.99 е.Д.

3.2. Сопоставление с данными спутниковых измерений прибором IASI

Мы также сопоставили поля распределения ТСО, полученные из данных ИКФС-2 для слоя тропосферы до 300 гПа, с данными аналогичных измерений спутниковым прибором IASI, сходным по характеристикам с данными прибора ИКФС-2. Приборы IASI находятся на борту полярных спутников серии MetOp (-А, -В, -С), расположенных, как и КА серии «Метеор-М» № 2, на солнечно-синхронных орбитах. Используемые для сопоставления данные IASI (IASI_LATMOS) основаны на интерпретации измеренных спектров с помощью алгоритма FORLI лаборатории LATMOS [Boynard et al., 2018], принятого в качестве алгоритма оперативной обработки спектральных данных IASI (Daily IASI/Metop-A ULB-LATMOS ozone (O3) L2 product, доступен на сайте <https://iasi.aeris-data.fr/catalog/>). Предварительно как данные IASI, так и данные ИКФС-2 были приведены на единую сетку в 1 градус по долготе и широте для всего земного шара.

На рис. 2 приведены примеры среднемесячных величин ТСО на основе измерений ИКФС-2 и IASI_LATMOS за май и ноябрь 2019 г. Основ-

ные особенности распределения ТСО повторяются по двум наборам данных. Для мая 2019 г. (рис. 2а) это максимум в северном полушарии со значениями ~30–40 е.Д. и минимум в южном, с минимумом над территорией Тихого океана в области тропиков (15–20 е.Д.). Для ноября 2019 г. (рис. 2б) ситуация более сложная с максимумом в северном полушарии, а также в южном, но в области тропиков.

В табл. 7 приведены СР и СОР между измерениями ИКФС-2 и IASI для 6 широтных зон. Наибольшие разности наблюдаются в полярной области южного полушария. Причем если максимальная СР приходится на ноябрь (9.8 е.Д.), то максимальная СОР — на май (5.5 е.Д.). Лучшее согласие между данными в оба месяца приходится на область тропиков южного полушария (0–30 ю.ш.), где СР и СОР составляют 2.1–2.2 е.Д. и 2.7–2.9 е.Д., соответственно. Наблюдаемые величины СР и СОР меньше в мае, чем в ноябре. Минимум приходится на полярную область северного полушария (60–90 с.ш.) и средние широты южного (30–60 ю.ш.) (СР и СОР менее 1 е.Д.).

При сопоставлении наших результатов с различными независимыми данными следует иметь

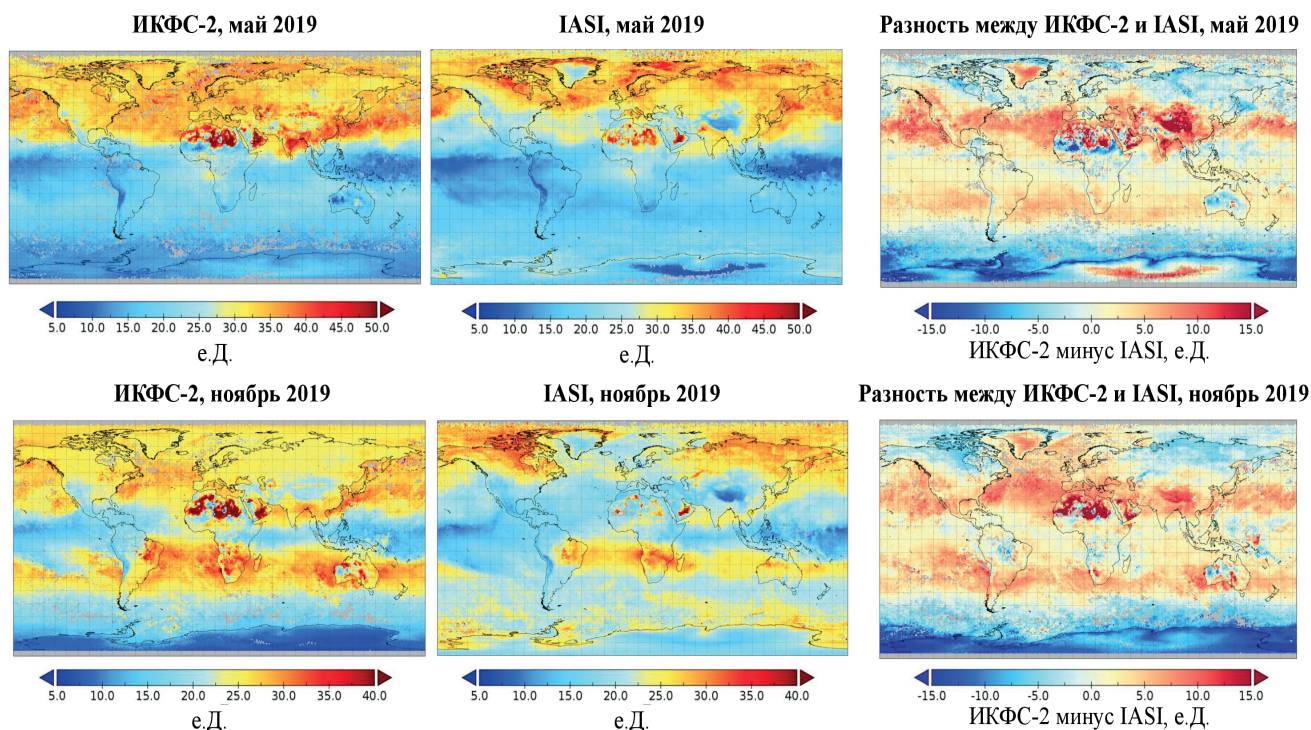


Рис. 2. Пространственное распределение среднемесячных величин ТСО по данным дневных и ночных измерений ИКФС-2 (слева), IASI_LATMOS (посередине) и разность между ними (справа) — в мае и ноябре 2019 г.

Таблица 7. Характеристики разности среднемесячного TCO по данным измерений ИКФС-2 и IASI_LATMOS за май и ноябрь 2019 г.

Широтная зона	СР (май/ноябрь 2019 г.), е.Д.	СОР (май/ноябрь 2019 г.), е.Д.
60–90 с.ш.	-0.7/-0.7	3.2/3.4
30–60 с.ш.	3.5/3.7	4.6/3.6
0–30 с.ш.	2.6/3.5	4.6/4.5
0–30 ю.ш.	2.2/2.7	2.1/2.9
30–60 ю.ш.	-0.5/0.6	3.7/4.1
60–90 ю.ш.	-6.6/-9.8	5.5/3.9

в виду, что решение обратной задачи методами аппроксимации учебного набора пар (в частности, с помощью ИНС) способно дать хорошие результаты лишь при условии статистического соответствия обучающей выборки и состояний атмосферы при измерениях. Поскольку подавляющее большинство станций озонзондирования расположены на суше в умеренных и высоких широтах, то именно для суши умеренных и высоких широт и следует ожидать наилучшего согласия с данными независимых измерений. Так, например, над территорией России различия данных ИКФС-2 и IASI невелики. Вместе с тем в пустынях станции озонзондирования отсутствуют. Вследствие этого на рис. 2 можно заметить большие разности данных над пустынной зоной африканского континента.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложен алгоритм определения TCO на основе спектров уходящего теплового излучения. Алгоритм реализован для российского прибора ИКФС-2 на борту КА «Метеор-М» № 2. Методика основана на использовании метода ИНС и метода главных компонент. Оценка погрешности аппроксимации на учебном и тестовых наборах данных не превосходит 2.8 е.Д. для слоя ниже 400 гПа и 3.8 е.Д. для слоя атмосферы ниже 300 гПа.

Проведена валидация полученных спутниковых измерений TCO в окрестностях 19 станций международной наблюдательной сети IRWG-NDACC, расположенных в различных регионах земного шара. Стандартные отклонения разностей с данными FTIR измерений состави-

ли от 2 до 4 е.Д., что согласуется с результатами других авторов для аналогичных алгоритмов. На основе проведенного сопоставления выбраны параметры оптимальной ИНС для решения обратной задачи интерпретации спектров, измеренных ИКФС-2. Для обучения оптимально использовать набор пар, включающий все спектры ИКФС-2, в том числе облачные, с допустимым рассогласованием с измерениями на станциях озонзондирования в 200 км по пространству и 24 часа по времени. Помимо ГК спектров в набор предикторов ИНС необходимо включить зенитный угол спутника, широту и день года измерения. Оптимальная структура ИНС: 35 ГК всего спектра, 0 ГК полосы озона и 55 НСС.

Приведены примеры полученных полей распределения TCO по всему земному шару.

БЛАГОДАРНОСТИ

Благодарим НИЦ «Планета» за предоставление доступа к результатам спектральных измерений ИКФС-2. Благодарим авторов программ из библиотеки программ МГУ за предоставление свободного доступа к исходным текстам программ.

Данные наземных измерений FTIR-измерений предоставлены исследователями со станций наблюдательной сети IRWG-NDACC, данные доступны на сайте <https://www-air.larc.nasa.gov/missions/ndacc/data.html#>. Гомогенизированные данные озонзондирования предоставлены рабочей группой HEGIFTOM в рамках проекта TOAR-II, данные доступны на сайте <https://hegiftom.meteo.be/>.

Авторы благодарят AERIS за обеспечение доступа к данным IASI; ULB-ATMOS за разработку методик измерения озона; Eumetsat/AC SAF за создание готового продукта. Данные измерений IASI доступны на сайте <https://iasi.aeris-data.fr/catalog/>, данные FTIR-измерений — на сайте <https://www-air.larc.nasa.gov/missions/ndacc/data.html#>.

Наземные спектроскопические измерения на станции NDACC St.Petersburg были выполнены на научном оборудовании ресурсного центра СПбГУ «Геомодель».

Исследование профинансировано грантом Российского научного фонда № 23-27-00166, <https://rscf.ru/project/23-27-00166/>.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Андреев В.В., Аршинов М.Ю., Белан Б.Д., Белан С.Б., Давыдов Д.К., Демин В.И., Дудорова Н.В., Еланский Н. Ф., Жамсуева Г. С., Заяханов А. С., Иванов Р. В., Ивлев Г. А., Козлов А. В., Коновальцева Л.В., Коренский М.Ю., Котельников С.Н., Кузнецова И.Н., Лапченко В.А., Лезина Е.А., Оболкин В.А., Постыляков О.В., Потемкин В.Л., Савкин Д.Е., Семутникова Е.Г., Сенник И.А., Степанов Е.В., Толмачев Г.Н., Фофанов А.В., Ходжер Т.В., Челибанов И.В., Челибанов В.П., Широков В.В., Шукуров К.А. Концентрация тропосферного озона на территории России в 2022 г. // Оптика атмосферы и океана. 2023. Т. 36. № 08. С. 642–655. DOI: 10.15372/AOO20230804
- Виролайнен Я.А., Ионов Д.В., Поляков А.В. Анализ результатов многолетних измерений содержания озона в тропосфере на станции СПбГУ в Петергофе // Изв. РАН. Физика атмосферы и океана. 2023а. Т. 59. № 3. С. 336–345. DOI: 10.31857/S0002351523030094
- Виролайнен Я.А., Неробелов Г.М., Поляков А.В. Сопоставление спутниковых и наземных измерений содержания озона в слое тропосферы в окрестностях Санкт-Петербурга // Изв. РАН. Физика атмосферы и океана. 2023б. Т.59. №4. С. 474–484. DOI: 10.31857/S0002351523040144
- Гаркуша, А.С., Поляков, А.В., Тимофеев, Ю.М., Виролайнен, Я.А. Определение общего содержания озона по данным измерений спутникового ИК Фурье-спектрометра // Изв. РАН. Физика атмосферы и океана. 2017. Т. 53. № 4. С. 493–501. DOI: 10.7868/S0003351517040079
- Еланский Н.Ф., Голицын Г.С., Крутцен П.Й., Беликов И.Б., Бреннинкмайер К.А.М., Скороход А.И. Наблюдения состава атмосферы над Россией: Эксперименты TROICA // Изв. РАН. Физика атмосферы и океана. 2021. Т. 57. № 1. С. 79–98.
- Звягинцев А.М. Пространственно-временная изменчивость озона в тропосфере. Дис. на соиск. учен. степ. докт. физ.-мат. наук. М., 2013. 179 с.
- Кароль И.Л., Киселев А.А., Генихович Е.Л., Чичерин С.С. Короткоживущие радиационно-активные примеси в атмосфере и их роль в современных изменениях климата // Труды ГГО. 2012. № 567. С. 5–82.
- Матвиенко Г.Г., Бабушкин П.А., Бобровников С.М., Боровой А.Г., Бочковский Д.А., Галилейский В.П., Гришин А.И., Долгий С.И., Елизаров А.И., Кокарев Д.В., Коношонкин А.В., Крючков А.В., Кустова Н.В., Невзоров А.В., Маричев В.Н., Морозов А.М., Ошляков В.К., Романовский О.А., Суханов А.Я., Трифонов Д.А., Яковлев С.В., Садовников С.А., Невзоров А.А., Харченко О.В. Лазерное и оптическое зондирование атмосферы // Оптика атмосферы и океана. 2019. Т. 32. № 9. С. 726–740.
- Поляков А.В. Использование метода искусственных нейронных сетей при восстановлении вертикальных профилей атмосферных параметров. // Оптика атмосферы и океана. 2014а. Т. 27. № 1. С. 34–39.
- Поляков А.В., Тимофеев Ю.М., Виролайнен Я.А. Применение искусственных нейронных сетей в температурно-влажностном зондировании атмосферы // Изв. РАН. Физика атмосферы и океана. 2014б. Т. 50, № 3. С. 373–380.
- Рублев А.Н., Успенский А.Б., Троценко А.Н., Удалова Т.А., Волкова Е.В. Детектирование и оценка балла облачности по данным атмосферных иззондировщиков высокого спектрального разрешения // Исследование Земли из космоса. 2004. № 3. С. 43–51.
- Amann, M., Derwent, D., Forsberg, B., Hänninen, O., Hurley, F. Et al. (2008) . Health risks of ozone from long-range transboundary air pollution. World Health Organization. Regional Office for Europe. <https://apps.who.int/iris/handle/10665/326496>
- Antokhin P.N., Arshinov M.Yu., Belan B.D., Davydov D.K., Zhidovkin E.V., Ivlev G.A., Kozlov A.V., Kozlov V.S., Panchenko M.V., Penner I.E., Pestunov D.A., Simonenkov D.V., Tolmachev G.N., Fofonov A.V., Shamanaev V.S., Shmargunov V.P. Optik AN30 aircraft laboratory: 20 years of environmental research // J. Atmos. and Oceanic Technology. 2012. V. 29. № 1. P. 64–75.
- Asmus, V.V., Timofeyev, Y.M., Polyakov, A.V. et al. Atmospheric temperature sounding with the Fourier spectrometer. // Izv. Atmos. Ocean. Phys. 2017. V. 53. P. 428–432. <https://doi.org/10.1134/S0001433817040028>
- Asmus A.A., Zagrebaev V.A., Makridenko L.A., Milekhin O.E., Solovyev V.I., Uspenskii A.B., Frolov A.V., Khailov M.N. Meteorological satellites based on Meteor-M polar orbiting platform // Russ Meteorol Hydrol. 2014. V. 39. № 12. P. 787–794 .
- Belan B.D., Ancellet G., Andreeva I.S., Antokhin P.N., Arshinova V.G., Arshinov M.Y., Balin Y.S., Barsuk V.E., Belan S.B., Chernov D.G., Davydov D.K., Fofonov A.V., Ivlev G.A., Kotelnikov S.N., Kozlov A.S., Kozlov A.V., Law K., Mikhail'chishin A.V., Moseikin I.A., Nasonov S.V., Nedelec P., Okhlopko O.V., Ol'kin S.E., Panchenko M.V., Paris J.-D., Penner I.E., Ptashnik I.V., Rasskazchikova T.M., Reznikova I.K., Romanovskii O.A., Safatov A.S., Savkin D.E., Simonenkov D.V., Sklyadnaya T.K., Tolmachev G.N., Yakovlev S.V., Zenkova P.N. Integrated airborne investigation of the air composition over the Russian sector of the Arctic // Atmos. Meas. Tech. 2022. V. 15. № 13. P. 3941–3967.

- Boynard A., Hurtmans D., Garane K., Goutai, F., Hadji-Lazaro J., Koukouli M.E., Wespes C., Vigouroux C., Keppens A., Pommereau J.-P., Pazmino A., Balis D., Loyola D., Valks P., Sussmann R., Smale D., Coheur P.-F., Clerbaux C. Validation of the IASI FORLI/EUMETSAT ozone products using satellite (GOME-2), ground-based (Brewer–Dobson, SAOZ, FTIR) and ozonesonde measurements // *Atmos. Meas. Tech.* 2018. V. 11. № 9. P. 5125–5152.
- Cuesta J., Eremenko M., Liu X., Dufour G., Cai Z., Höpfner M., von Clarmann T., Sellitto P., Foret G., Gaubert B., Beekmann M., Orphal J., Chance K., Spurr R., Flaud J.-M. Satellite observation of lowermost tropospheric ozone by multispectral synergism of IASI thermal infrared and GOME-2 ultraviolet measurements over Europe // *Atmos. Chem. Phys.* 2013. V. 13: № 19. P. 9675–9693.
- Dorokhov V., Yushkov V., Makshtas A., Ivlev G., Tereb N., Savinykh V., Shepelev D., Nakajima H., McElroy C.T., Tarasick D., Goutail F., Pommereau J.-P., Pazmino A. Brewer, SAOZ and Ozonesonde Observations in Siberia // *Atmosphere-Ocean*. 2013. V. 51. № 3, P. 14–18.
- Dufour G., Eremenko M., Griesfeller A., Barret B., LeFlochmoën E., Clerbaux C., Hadji-Lazaro J., Coheur P.-F., Hurtmans D. Validation of three different scientific ozone products retrieved from IASI spectra using ozonesondes // *Atmos. Mes. Tech.* 2012. V. 5. № 3. P. 611–630.
- Forster, P., T. Storelvmo, K. Armour, W. Collins, J.-L. Dufresne, D. Frame, D.J. Lunt, T. Mauritsen, M.D. Palmer, M. Watanabe, M. Wild, and H. Zhang, 2021: 7. The Earth's Energy Budget, Climate Feedbacks, and Climate Sensitivity. In *Climate Change 2021: The Physical Science Basis. Contribution of Working Group I to the Sixth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change*. https://www.ipcc.ch/report/ar6/wg1/downloads/report/IPCC_AR6_WGI_Chapter07.pdf
- Gaudel A., Cooper O.R., Ancellet G., Barret B., Boynard A., Burrows, J.P. Clerbaux C., Coheur P.-F., Cuesta J., Cuevas E., Doniki S., Dufour G., Ebojie F., Foret G., Garcia O., Granados-Muñoz M.J., Hannigan J.W., Hase F., Hassler B., Huang G., Hurtmans D., Jaffe D., Jones N., Kalabokas P., Kerridge B., Kulawik S., Latter B., Leblanc T., Le Flochmoën E., Lin W., Liu J., Liu X., Mahieu E., McClure-Begley A., Neu J.L., Osman M., Palm M., Petetin H., Petropavlovskikh I., Querel R., Rahpoe N., Rozanov A., Schultz M.G., Schwab J., Siddans R., Smale D., Steinbacher M., Tanimoto H., Tarasick D.W., Thouret V., Thompson A.M., Trickl T., Weatherhead E., Wespes C., Worden H.M., Vigouroux C., Xu X., Zeng G., Ziemke J. Tropospheric Ozone Assessment Report: Present-day distribution and trends of tropospheric ozone relevant to climate and global atmospheric chemistry model evaluation // *Elementa: Science of the Anthropocene*. 2018. V. 39. № 6.
- Golovin Y.M., Zavelevich F.S., Nikulin A.G., Kozlov D.A., Monakhov D.O., Kozlov I.A., Arkhipov S.A., Tselikov V.A., Romanovskii A.S. Spaceborne infrared Fourier-transform spectrometers for temperature and humidity sounding of the Earth's atmosphere // *Izv Atm Ocean Phys* 2014. V50. № 9. P. 1004–1015 .
- Hubert D., Heue K.-P., Lambert J.-C., Verhoelst T., Allart M., Compernelle S., Cullis P.D., Dehn A., Félix C., Johnson B.J., Keppens A., Kollonige D.E., Lerot C., Loyola D., Maata M., Mitro S., Mohamad M., PETERS A., Romahn F., Selkirk H.B., da Silva F.R., Stauffer R.M., Thompson A.M., Veefkind J.P., Vömel H., Witte J.C., Zehner C. TROPOMI tropospheric ozone column data: geophysical assessment and comparison to ozonesondes, GOME-2B and OMI // *Atmos. Meas. Tech.* 2021. V. 14. № 12. P. 7405–7433.
- Polyakov, A.; Virolainen, Y.; Nerobelov, G.; Kozlov, D.; Timofeyev, Y. Six Years of IKFS-2 Global Ozone Total Column Measurements. // *Remote Sens.* 2023. V. 15. P. 2481. <https://doi.org/10.3390/rs15092481>
- Polyakov, A., Virolainen, Y., Nerobelov, G., Timofeyev, Y. & Solomatnikova, A. Total ozone measurements using IKFS-2 spectrometer aboard MeteorM N2 satellite in 2019–2020. // *International Journal of Remote Sensing*. 2021. V. 42. № 22. P. 8709–8733.
- Stanek L.W., Brown J.S., Stanek J., Gift J., Costa D.L. Air pollution toxicology — a brief review of the role of the science in shaping the current understanding of air pollution health risks // *Toxicol Sci.* 2011. V. 120. № 1. P. S8–S27. doi: 10.1093/toxsci/kfq367.
- IPCC: Climate Change 2013: The Physical Science Basis. Contribution of Working Group I to the Fifth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change / Eds. Stocker T.F., Qin D., Plattner G.-K., Tignor M., Allen S.K., Boschung J., Nauels A., Xia Y., Bex V., Midgley P.M. NY (USA): Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom and New York, 2013. 1535 pp.
- Tarasick D., Galbally I.E., Cooper O.R., Schultz M.G., Ancellet G., Leblanc T., Wallington T.J., Ziemke J., Liu X., Steinbacher M., Staehelin J., Vigouroux C., Hannigan J.W., García O., Foret G., Zanis P., Weatherhead E., Petropavlovskikh I., Worden H., Osman M., Liu J., Chang K.-L., Gaudel A., Lin M., Granados-Muñoz M., Thompson A.M., Oltmans S.J., Cuesta J., Dufour G., Thouret V., Hassler B., Trickl T., Neu J.L. Tropospheric Ozone Assessment Report: Tropospheric ozone from 1877 to 2016, observed levels, trends and uncertainties // *Elementa: Science of the Anthropocene*. 2019. V. 39 № 7. doi:10.1525/elementa.376/
- Tarasick D.W., Smit H.G.J., Thompson A.M., Morris G.A., Witte J.C., Davies J., et al. Improving ECC ozonesonde data quality: Assessment of current methods

- and outstanding issues // *Earth and Space Science*. 2021. 8, e2019EA000914. <https://doi.org/10.1029/2019EA000914>
- Timofeyev Y.M., A.B. Uspensky, F.S. Zavelevich, A.V. Polyakov, Y.A. Virolainen, A.N. Rublev, A.V. Kukharsky, J.V. Kiseleva, D.A. Kozlov, I.A. Kozlov, A.G. Nikulin, V.P. Pyatkin, E.V. Rusin* Hyperspectral infrared atmospheric sounder IKFS-2 on “Meteor-M” No. 2 – Four years in orbit // *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*. V. 238, 2019. №106579. <https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2019.106579>
- Vigouroux C., Blumenstock T., Coffey M., Errera Q., García O., Jones N.B., Hannigan J.W., Hase F., Liley B., Mahieu E., Mellqvist J., Notholt J., Palm M., Persson G., Schneider M., Servais C., Smale D., Thölix L., De Mazière M.* Trends of ozone total columns and vertical distribution from FTIR observations at eight NDACC stations around the globe // *Atmos. Chem. Phys.* 2015. V. 15. № 6. P. 2915–2933.
- Virolainen Y., Nerobelov G., Polyakov A., Akishina S.* Comparison of satellite and ground-based measurements of tropospheric ozone // *Proceedings of SPIE, 29th International Symposium on Atmospheric and Ocean Optics: Atmospheric Physics*. 2023. V. 12780. P. 127804X. doi: 10.1117/12.2688764.short
- Wu S., Mickley L.J., Jacob D.J., Logan J.A., Yantosca R.M., Rind D.* Why are there large differences between models in global budgets of tropospheric ozone? // *J. Geophys. Res.* 2007. V. 112. № D05302.
- Young P.J., Archibald A.T., Bowman K.W., Lamarque J.-F., Naik V., Stevenson D.S., Tilmes S., Voulgarakis A., Wild O., Bergmann D., Cameron-Smith P., Cionni I., Collins W.J., Dalsøren S.B., Doherty R.M., Eyring V., Faluvegi G., Horowitz L.W., Josse B., Lee Y.H., MacKenzie I.A., Nagashima T., Plummer D.A., Righi M., Rumbold S.T., Skeie R.B., Shindell D.T., Strode S.A., Sudo K., Szopa S., Zeng G.* Pre-industrial to end 21st century projections of tropospheric ozone from the Atmospheric Chemistry and Climate Model Intercomparison Project (ACCMIP) // *Atmos. Chem. Phys.* 2013. V. 13, № 4. P. 2063–2090.
- Ziemke J.R., Chandra S., Duncan B.N., Froidevaux L., Bhartia P.K., Levelt P.F. and Waters J.W.* Tropospheric ozone determined from Aura OMI and MLS: Evaluation of measurements and comparison with the Global Modeling Initiative’s Chemical Transport Model // *J. Geophys. Res.*, 2006. V. 111, № D19303. doi:10.1029/2006JD007089.

TECHNIQUE FOR DETERMINATION OF TROPOSPHERIC OZONE CONTENT FROM SPECTRAL MEASUREMENTS OF OUTGOING THERMAL RADIATION BY SATELLITE INSTRUMENT IKFS-2.

A. V. Polyakov^{1,*}, Ya. A. Virolainen², G. M. Nerobelov^{1,2,3}, S. V. Akishina³

¹*St. Petersburg University, 7–9 Universitetskaya Embankment, St Petersburg, 199034, Russia*

²*SPC RAS — Scientific Research Centre for Ecological Safety of the Russian Academy of Sciences, Korpusnaya 18, St. Petersburg, 187110, Russia*

³*Russian State Hydrometeorological University, Maloohtinskii prospect 98, Saint-Petersburg, 195196, Russia,*

**e-mail: a.v.polyakov@spbu.ru*

A technique for determining the tropospheric ozone content (TO) from the spectra of outgoing thermal infrared (IR) radiation based on the principal component method and neural network approach is proposed. To train the artificial neural networks, TO data calculated from ozone profiles of vertical ozone content derived from ozonesondes are used. The ozone content in the atmospheric layers from the Earth's surface to levels with pressures of 400 and 300 hPa is considered as TO. The error of approximation of TO values on training data is 2.7 and 3.6 DU for layers below 400 and 300 hPa, respectively. The methodology is validated on the basis of comparison with ground-based TO measurements at the NDACC international observing network of stations using solar infrared spectra. The mean standard deviations of the differences between the ground-based infrared measurements at 19 stations and the derived TO values from the IKFS-2 data were about 3 DU. The mean differences depend on the altitude and geographical location of the ground station, varying from +3 to -12 DU. The discrepancies between the ground-based measurements and satellite data correspond to the results of other authors obtained for the IASI satellite instrument, which is close in characteristics. The paper presents examples of the global distribution of mean monthly TO values for different seasons.

Keywords: tropospheric ozone, remote sensing of the atmosphere, IKFS-2