

ОБРАБОТКА СПЕКТРАЛЬНЫХ ДАННЫХ СВЕРХВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ

Д. А. Козлов

Московский физико-технический институт (Государственный университет)

Состояние экологии атмосферы Земли, а в частности ускоряющийся парниковый эффект, является широко обсуждаемой проблемой правительствами разных стран. Наиболее вероятной причиной усиления парникового эффекта считается сжигание углеводородного топлива. Увеличение средней годовой температуры приповерхностного слоя атмосферы значительно влияет на процесс ее циркуляции. В частности, это приводит к увеличению частоты происшествий различных климатических катастроф. Современный темп поступления углекислого газа в атмосферу не позволяет точно прогнозировать поведение климата. Для построения точных климатических моделей, необходимо проводить измерения концентрации парниковых газов в атмосфере, а также измерять их вертикальный профиль. На сегодняшний день существует международная сеть Total column carbon observing network (TCCON), которая занимается мониторингом атмосферы, с помощью Фурье-спектрометров высокого разрешения.

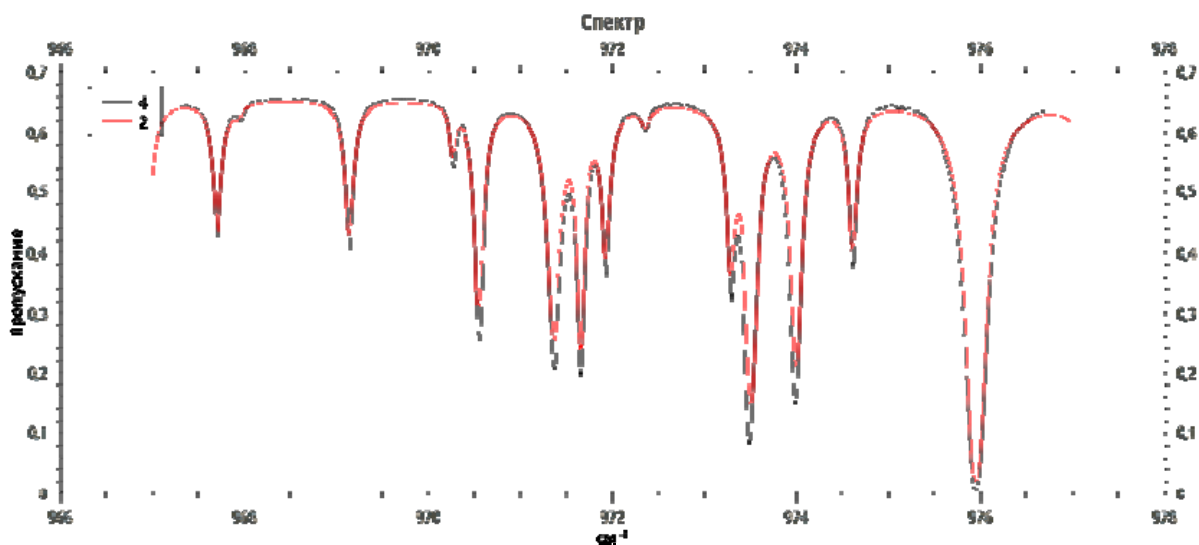
Мы предлагаем проводить мониторинг парниковых газов в атмосфере с помощью гетеродинного спектрометра собственной разработки, который в перспективе может заменить Фурье-спектрометры на станциях TCCON. Гетеродинный спектрометр состоит из следующих основных элементов: Система, которая отслеживает положение солнца и направляет прямое солнечное излучение в оптическое волокно; Блок электроники управления лазерами и обработки сигналов; Лазерная и оптоволоконная системы. Блок стабилизации частоты лазера. Солнечный трекер реализован на основе монтровки Sky-Watcher EQ6 PRO SynScan и гидирующей камеры QHY5-II с фокусным расстоянием 4 мм и серыми фильтрами 105 кратным уменьшением интенсивности.

Блок электроники состоит из драйвера тока накачки лазера, источника термоэлектрического элемента, гетеродинного канала обработки сигнала и канала стабилизации частоты. Электроника сконструирована на основе микроконтроллера STM32. В качестве опорного излучения полупроводниковый лазер с распределенной обратной связью. Стабилизация частоты лазера осуществляется по линии поглощения углекислого газа в кювете низкого давления, представленной техникой OA-ICOS (off axis – integrated cavity output spectroscopy). По результатам макетирования и функциональных испытаний прибора будут измерены спектры поглощения углекислого газа при различных зенитных углах Солнца. По полученным спектрам будет определена средняя концентрация углекислого газа в столбе атмосферы, а также определен его вертикальный профиль. Кроме того благодаря высокому спектральному разрешению гетеродинного приема, будут определены некоторые динамические характеристики атмосферы.

Для получения таких характеристик еще с 80-х годов используются специальные методы восстановления. Например метод Роджерса, который используется с 1980 года для восстановления профиля концентрации имеет приемлемую точность (около 1 %) вплоть до 25 километров. Также сегодня широко применяется метод, предложенный TCCON, схожий с методом Роджерса, но имеющий точность уже 0,5 %. Все вышеупомянутые методы используют априорные данные в том или ином виде. Метод, который мы хотим предложить, не использует никаких априорных данных, используется только модель атмосферы и спектр, полученный с помощью нашего гетеродинного спектрометра. Да, точность составляет около 2–4 %, но что важнее, не используются априорные данные, которых зачастую просто нет, если мы говорим об исследовании планет, ранее не изученных.

В качестве спектральной базы данных использовалась база HITRAN – периодически обновляемая база данных по параметрам молекулярных спектральных линий, необходимых для расчета возникновения и переноса излучения в атмосфере. Версия 1986 г. включает данные для 28 молекул, главным, образом двух- и трехатомных. Область спектра 0 – 17000 см⁻¹. Собираемые параметры:

волновые числа центров линий, интенсивности линий при $T = 296$ К, вероятности и квантовая идентификация переходов, энергии нижних уровней и т. д. Ниже приведен график, на котором изображены два спектра: черный – спектр, полученный на спектрометре, красный – спектр, смоделированный нами при помощи базы HITRAN.

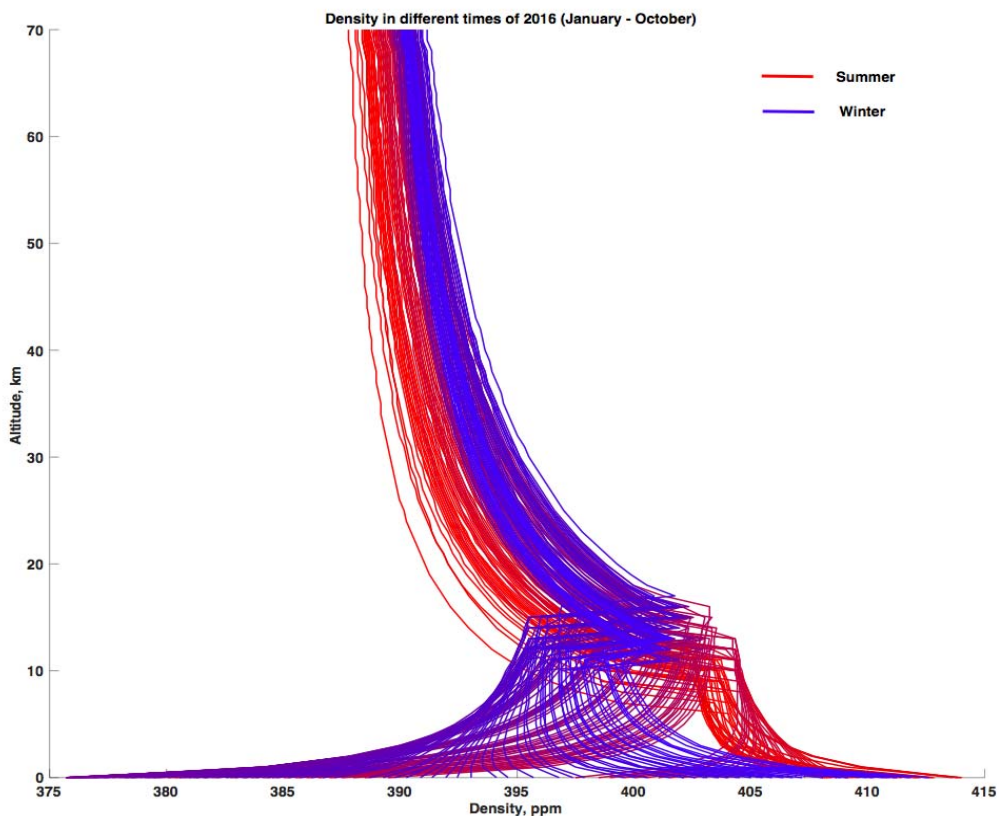


Также для решения обратной задачи, как упоминалось выше, для некоторых методов требуются априорные данные. В качестве базы данных мы использовали базу данных TCCON. Она включает в себя профили температуры, давления, концентрации различных газов (CO_2 , CH_4 , N_2O , HF , CO , H_2O) для крупнейших городов всего мира, например Бремен (Германия), Париж (Франция), Пасадена (Калифорния) и множество других. Ниже приведена карта, на которой обозначены города, состоящие в TCCON.

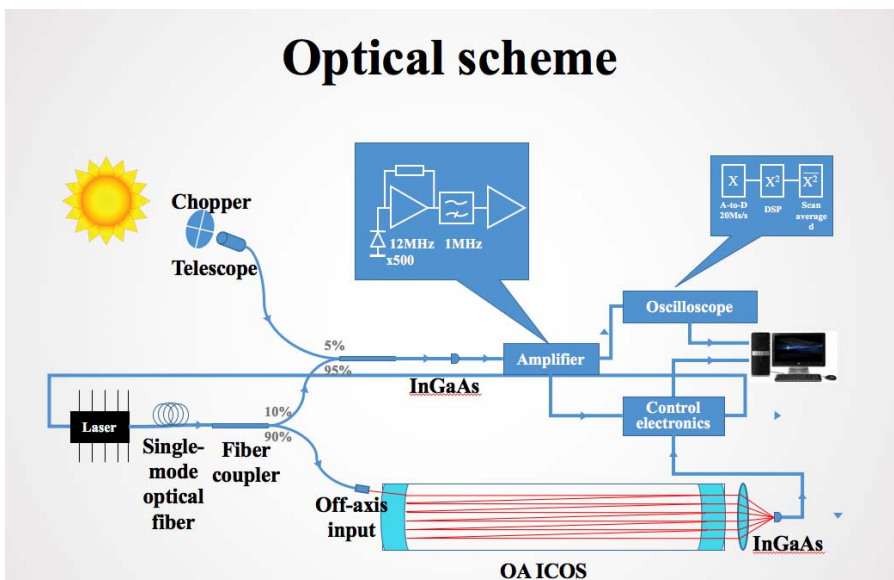


Для наглядности априорных данных далее приведен пример профиля концентрации углекислого газа для Бремена за 2016 год. Январь показан синим цветом и далее, приближаясь к лету, цвет линии становится красным, и, продолжая логику, к декабрю опять возвращается к синему. Приведенные данные имеют довольно малую погрешность, так как усреднены по времени (одно измере-

ние занимает несколько часов). Эта база данных находится в свободном доступе, так что любой желающий может использовать эти данные для своих исследований.



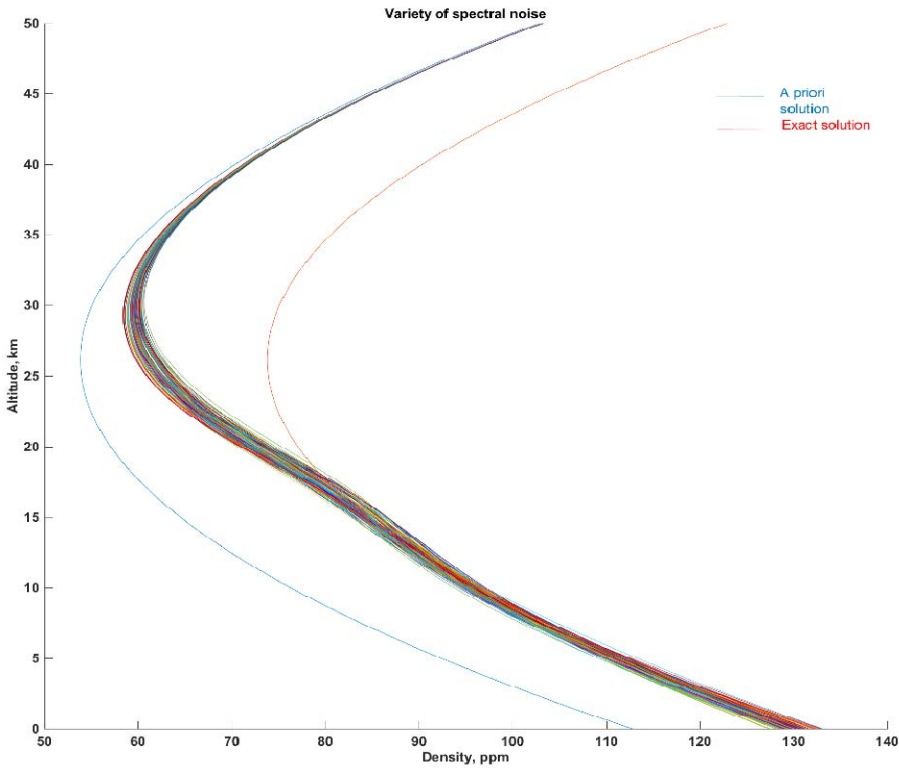
Далее показана оптическая схема гетеродинного спектрометра, разработанного в нашей лаборатории и уже прошедшим первые успешные испытания. Разрешающая способность такого прибора рекордная и составляет $10^7 \div 10^8$, что более чем на порядок выше, чем аналоги, использующиеся сегодня. Столь высокое значение может использоваться для определения профиля ветра, на данный момент наша лаборатория уже может восстановить ветер до высоты около 20 км с точностью порядка 7 %.



Итак, первый метод, использованный в данной работе был метод TCCON. Это итерационный метод, довольно быстро сходящийся к устойчивому решению:

$$\left(\mathbf{J}^T \mathbf{S}_e^{-1} \mathbf{J} + \mathbf{S}_a^{-1}\right) \Delta x = \mathbf{J}^T \mathbf{S}_e^{-1} r + \mathbf{S}_a^{-1} (x - x_a),$$

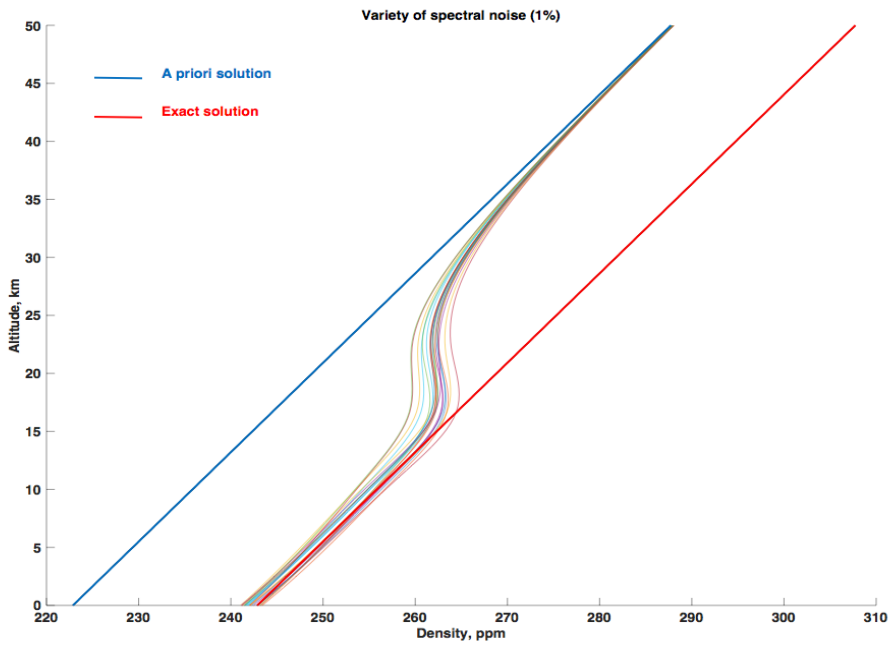
Здесь \mathbf{J} – матрица весов, включающая в себя значение функции Фойгта, высоту, интенсивность линии и ее смещение по частоте, r – спектральный остаток – разница между спектром в текущем лучшем приближении и измеренным. Матрицы \mathbf{S}_e и \mathbf{S}_a – матрицы ошибок. И, наконец, Δx – добавка к текущему лучшему приближению. Каждую итерацию рассчитывается добавка, затем тоже самое проделывается с новым лучшим приближением. Так осуществляется процесс последовательных приближений. Ниже приведен график вариации начальных ошибок спектра (1 %) и восстановленного решения.



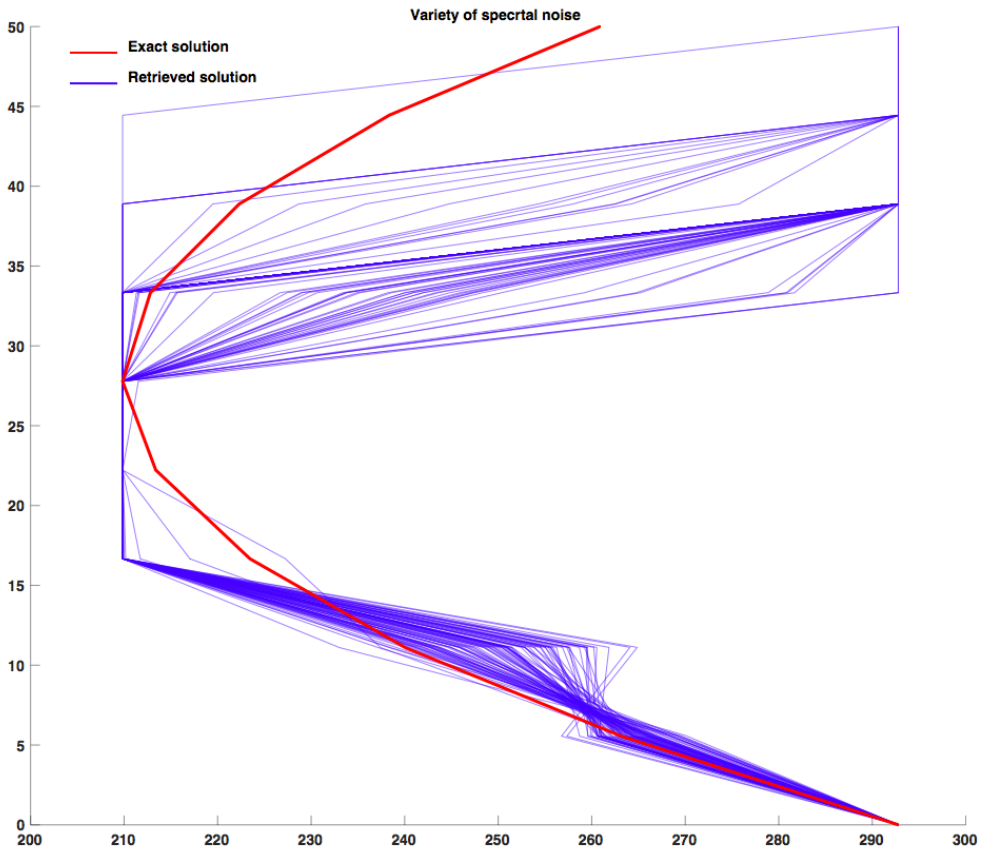
Следующий метод – метод Роджерса (1980). Данный метод очень похож на метод TCCON, но в данном случае не используется спектральный остаток:

$$\hat{x} = x_0 + \mathbf{S}_a \mathbf{J}^T \left(\mathbf{J} \mathbf{S}_a \mathbf{J}^T + \mathbf{S}_e \right)^{-1} (y - \mathbf{J} x_a)$$

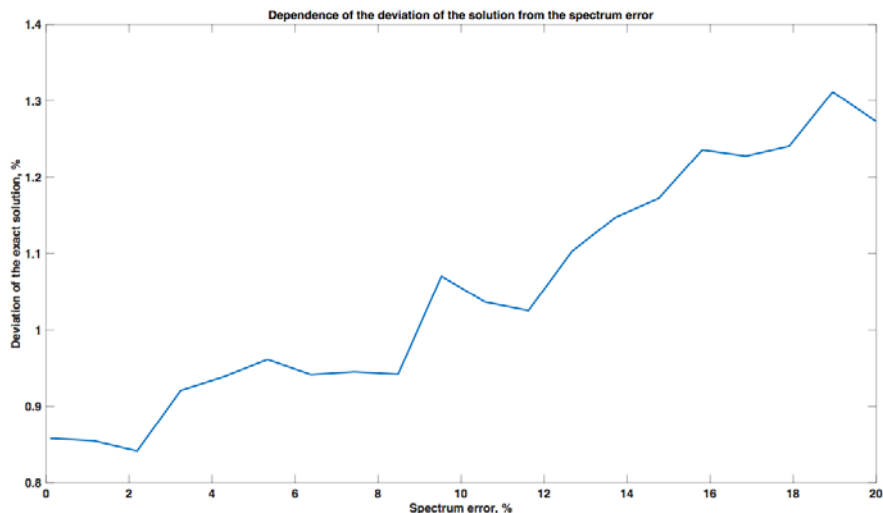
Далее приведен пример вариации начальной ошибки спектра (1 %) и восстановленного решения. На данном графике хорошо видно как решение перескакивает на априорное на высоте около 20 км:



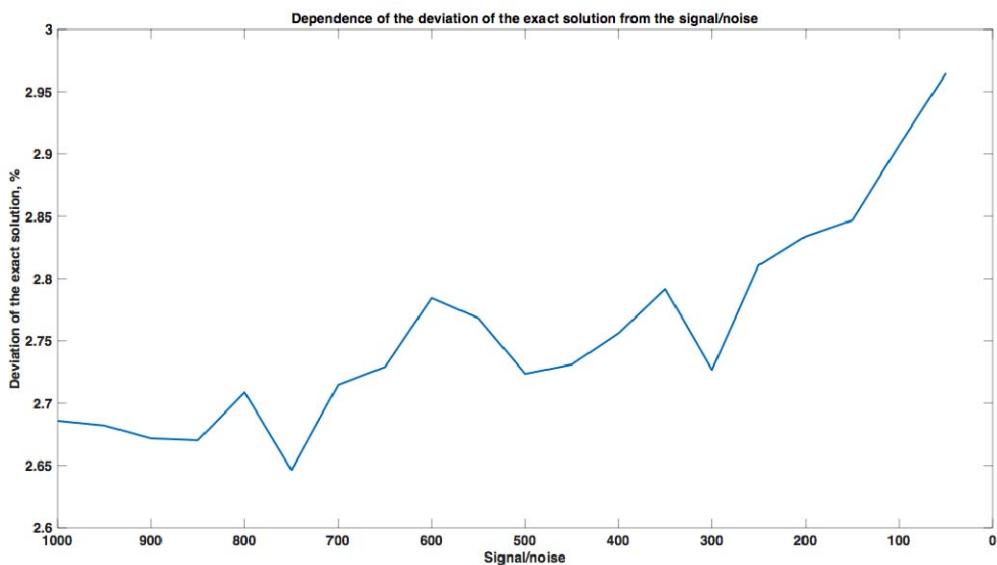
Следующий метод – разработка нашей лаборатории, находящаяся на стадии доработки, однако уже полностью работающий. Он основан на регуляризации Тихонова. Отмечу, что данный метод не использует никаких априорных данных и служит пока что для грубого оценивания профиля концентрации атмосферы а также для определения средней концентрации по высоте, ниже также приведена вариация начальных условий (шума спектра 1 %):



Для оценки качества метода использовалась стандартная схема оценивания, строилась зависимость ошибки восстановления от величины шума спектра. Например, метод TCCON ведет себя очень уверенно:

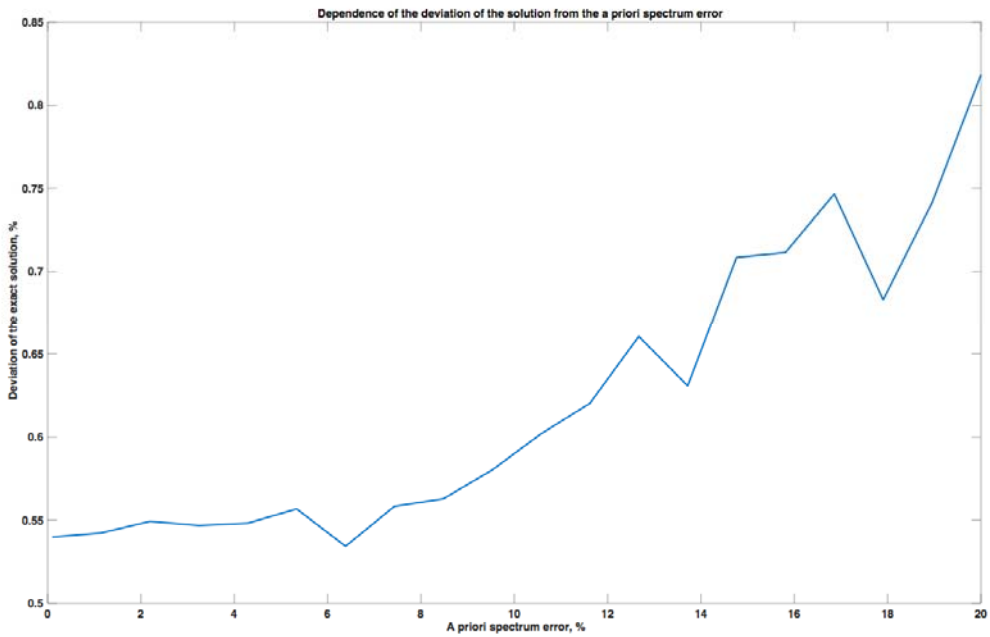


Так же как и метод Роджерса, это объясняется тем, что у этих методов одна природа:

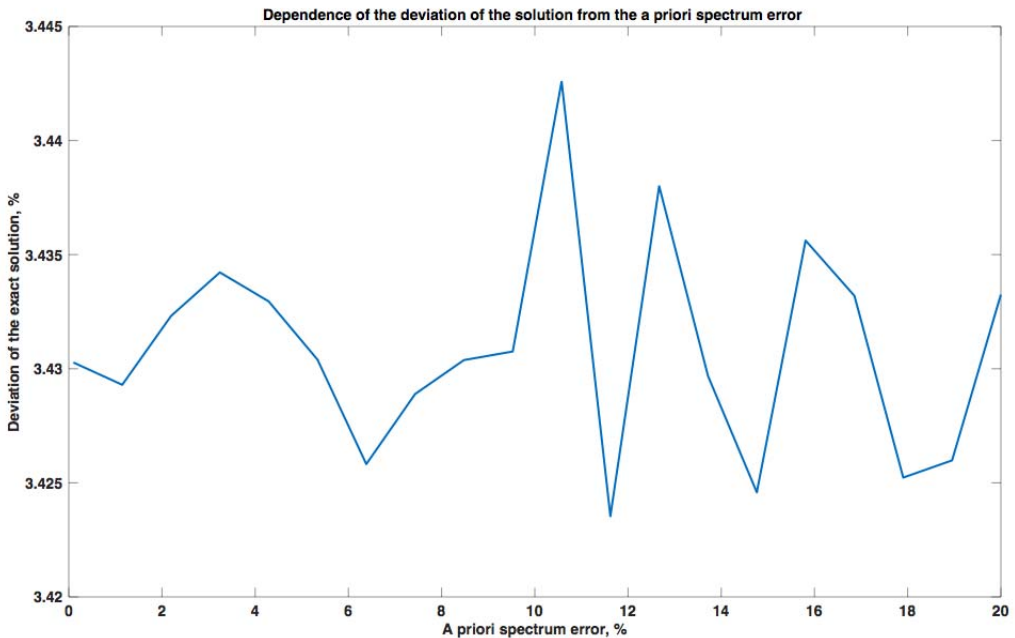


Также ввиду того, что эти методы имеют зависимость от априорных данных, исследовалась зависимость от ошибки априорных данных, далее приведены графики зависимости отклонения восстановленного профиля от точного решения в зависимости от внесенной ошибки в априорные данные.

TCCON:



Роджерс:



Как видно из графика, метод Роджерса не зависит от априорных данных, однако сам метод использует в себе таковые.

В будущем все эти методы будут существенно улучшаться, предельная высота, до которой возможно восстановление будет увеличиваться, ошибка будет уменьшена. Также планируется существенное улучшение без априорного метода, разработанного в нашей лаборатории, называемого FMINCON.

Список литературы

1. Тимофеев Ю. М., Васильев А. В. Теоретические основы атмосферной оптики. СПб.: Наука, 2003.
2. Леонов А. С. Решение некорректно поставленных обратных задач. Очерки теории, практические алгоритмы и демонстрации в МАТЛАБ. М.: УРСС, 2009.
3. Rodgers C. D. Inverse methods for atmospheric sounding, theory and practice. World Scientific, 2000.