Новые спектроскопические базы и дистанционное зондирование Земли методами инфракрасной спектрометрии высокого разрешения

Г.Э. Колокутин, Б.А. Фомин

Центральная аэрологическая обсерватория, Долгопрудный 141700, Россия E-mail: greg.88@cao-rhms.ru, b.fomin@mail.ru

Процесс обработки данных надирных инфракрасных спектрометров-радиометров высокого спектрального разрешения, устанавливаемых на спутниках для ДЗЗ, основан на сопоставлении экспериментальных и расчётных спектров уходящего теплового излучения атмосферы. Однако, как показывают валидационные эксперименты, в настоящее время практически достижимое согласие обоих типов спектров не вполне удовлетворительное, что ощутимо влияет на эффективность ДЗЗ. Одной из наиболее важных причин рассогласования является недостаточное качество современных спектроскопических данных, используемых в «точных» (line-by-line) расчётах: моделей контуров спектральных линий (особенно «далёких» крыльев), моделей континуального поглощения водяного пара, кислорода и др., моделей интерференции линий углекислого газа, метана и др. Поэтому спектроскопические данные постоянно обновляются. В первую очередь обновлению подлежат наиболее распространённые спектроскопические базы: GEISA и HITRAN, в которых содержится информация о положении линий, их интенсивностях и ширинах.

В работе оцениваются неопределённости в типичных line-by-line расчётах спектров уходящей ИК радиации, возникающие при использовании различных спектроскопических баз: HITRAN-2008, GEISA-2011 и HITRAN-2012. На примере результатов валидации прибора IASI в ходе подспутникового эксперимента JAI-VEx показано, что новейшие базы GEISA-2011 и HITRAN-2012 не устраняет наблюдающиеся расхождение в экспериментальных и расчётных ИК спектрах, ранее выявленные при использовании HITRAN-2008.

Ключевые слова: уходящая радиация, инфракрасные спектры, line-by-line расчёты, спектроскопические базы данных.

Введение

В настоящее время интенсивно развиваются методы ДЗЗ, основанные на применении инфракрасных спектрометров-радиометров высокого разрешения. Так в разных странах были запущены приборы: AIRS, IASI, TANSO-FTS, MIPAS, TES и др. (Ward, 2012), с разрешением ~ 0,02-0,5 см⁻¹, показавшие свою эффективность в исследованиях температуры подстилающей поверхности, стратификации атмосферы, парниковых газов, химических процессов в тропосфере и стратосфере и др. А в России планируется к запуску серия Фурье-спектрометров типа ИКФС с разрешением ~0,5 см⁻¹ (Городецкий и др., 2013). Это связано с тем фактом, что в тропосфере и нижней стратосфере, т.е. в наиболее деятельном и важном слое атмосферы, полуширины спектральных линий атмосферных газов пропорциональны давлению и поэтому меняются от десятых до сотых долей обратного сантиметра (см⁻¹). Поэтому при зондировании этого слоя атмосферы методами ИКспектроскопии адекватное разрешение должно быть того же порядка, т.е. ~ 0,02-0,5 см⁻¹, а рабочий диапазон прибора составлять ~ 500-3000 см⁻¹ (область теплового излучения атмосферы, где расположены колебательно-вращательные полосы основных атмосферных газов). Это обуславливает количество измерительных каналов прибора, т.е. точек в экспе-

риментальных спектрах, до ~10⁴-10⁵. Таким образом, высокое спектральное разрешение позволяет получать информацию об атмосфере, зашифрованную в таких спектрах, в меньшей степени искажённых из-за конечного разрешения прибора. А большое количество каналов позволяет эффективно уменьшить статистические погрешности измерений. Однако в силу известной математической 'некорректности' задач обработки дистанционных измерений, в данном случае спектров уходящей радиации, при обработке должны применяться весьма высокоточные методы расчёта таких спектров. Как правило, эти методы разрабатываются с помощью 'эталонных' Line-by-Line моделей переноса ИК радиации в атмосфере, в принципе позволяющих детально учесть каждую спектральную линию поглощения молекулами воздуха. Отсюда ясно, что реальная точность Line-by-Line моделей, в свою очередь ограниченная точностью используемых спектроскопических данных, является одним из факторов могущим определять эффективность ДЗЗ из космоса. Так желательная точность Line-by-Line моделей в задачах определения источников и стоков атмосферного углекислого газа должна быть порядка ~0,2 К в единицах яркостной температуры, что, как показывает имеющийся опыт, является непростой задачей (частное сообщение проф. Р. Имасу (Япония) на основе опыта эксплуатации TANSO-FTS (проект GO-SAT). Поэтому Line-by-Line модели непрерывно улучшаются. В частности постоянно обновляются спектроскопические базы для Line-by-Line моделей. Для задач ДЗЗ со спутников в Line-by-Line моделях наиболее часто используются спектроскопические базы данных HITRAN и GEISA, непрерывно разрабатываемые с 70-х годов прошлого века. Это фактически международные проекты, в настоящее время осуществляемые под руководством Л. Ротмана (США) и Ж. Хюссон (Франция), соответственно. В статье кратко описываются их новые версии GEISA-11 (Husson et al., /ether:GEISA-11-Description and Access/) и HITRAN-12 (Rothman et al., 2013). Также анализируется практическая польза замены этими базами предыдущей версии HITRAN-2008 (Rothman et al., 2009) применительно к спектрометрам с разрешением ~0.5 см⁻¹ на примере Фурье-спектрометра IASI, что связано с запуском аналогичных отечественных приборов ИКФС-2.

Сравнение спектроскопических баз HITRAN-2008, GEISA-11 и HITRAN-2012

Таблица 1 показывает отличия в вышеуказанных базах в количестве представленных газов, числе линий для каждого газа и границах их спектральных областей. Как видно изменения довольно существенны, что отражает большую работу, проделанную спектроскопистами в последние годы по усовершенствованию спектроскопической информации для Line-by-Line моделей.

Таблица 1. Газы, числа линий для каждого газа и границы их спектральных областей в базах HITRAN-2008, GEISA-11 и HITRAN-2012

No॒	Молекула	База	Интервал см ⁻¹	Сумма линий по всем изотопам
1	H ₂ O	HITRAN-08	0 - 25233	69201
		GEISA-11	0,007 - 25232	67504
		HITRAN-12	0 – 25711	224515
2	CO ₂	HITRAN-08	0 - 12785	314919
		GEISA-11	5,89 - 12784	413524
		HITRAN-12	0 - 12785	471847
3	O ₃	HITRAN-08	0 - 5787	409686
		GEISA-11	0,026 - 6395	389378
		HITRAN-12	0 – 6997	422116
4	N ₂ O	HITRAN-08	0 – 7797	47843
		GEISA-11	0,83 - 7796	50633
		HITRAN-12	0 – 7797	47843
5	CO	HITRAN-08	3 – 8465	4477
		GEISA-11	3,41 - 8464	13515
		HITRAN-12	3 – 8465	4606
6	CH ₄	HITRAN-08	0 – 9200	290091
		GEISA-11	0,001 - 9199	240858
		HITRAN-12	0 – 11502	468013
7	O ₂	HITRAN-08	0 – 15928	6428
		GEISA-11	0 - 15927	6428
		HITRAN-12	0 – 15928	13975
8	NO	HITRAN-08	0 – 9274	105079
		GEISA-11	0 - 9273	105079
		HITRAN-12	0 – 9274	105079
9	SO ₂	HITRAN-08	0 – 4093	58250
		GEISA-11	0,017 - 4092	68728
		HITRAN-12	0 – 4093	95121
10	NO_2	HITRAN-08	0 - 3075	104223
		GEISA-11	0,49 - 3074	104223
		HITRAN-12	0 – 3075	104223
11	NH ₃	HITRAN-08	0 – 5295	29084
		GEISA-11	0,058 - 5294	29082
		HITRAN-12	0 - 7000	46392
12	HNO ₃	HITRAN-08	0 – 1770	487254
		GEISA-11	0,011 - 1769	669988
		HITRAN-12	0 – 1770	961962
13	ОН	HITRAN-08	0 – 19268	31976
		GEISA-11	0,004 - 35877	42866
		HITRAN-12	0 – 19268	31979
14	HF	HITRAN-08	41 – 11536	107
		GEISA-11	41,11 - 11535	107
		HITRAN-12	13 – 47365	34376
15	HCl	HITRAN-08	20 – 13459	613
		GEISA-11	20,24 - 13457	533
		HITRAN-12	5 – 34250	83691

16	HBr	HITRAN-08	16 – 9759	1293
		GEISA-11	16,23 - 9758	1293
		HITRAN-12	7 – 16034	8980
17	HI	HITRAN-08	12 – 8488	806
		GEISA-11	12,51 - 8487	806
		HITRAN-12	5 – 13908	4751
18	ClO	HITRAN-08	0 – 1208	11501
		GEISA-11	0,01 - 1207	7230
		HITRAN-12	0 – 1208	11501
19	OCS	HITRAN-08	0 - 4200	29242
		GEISA-11	0,38 - 4199	33809
		HITRAN-12	0 - 4200	29361
20	H ₂ CO	HITRAN-08	0 – 3100	37050
	2	GEISA-11	0 - 3099	37050
		HITRAN-12	0-3100	44601
21	HOC1	HITRAN-08	1 – 3800	16276
		GEISA-11	0.02 - 3799	17862
		HITRAN-12	1 – 3800	16276
22	N ₂	HITRAN-08	1992 – 2626	120
	12	GEISA-11	1992- 2625	120
		HITRAN-12	11 – 9355	1268
23	HCN	HITRAN-08	0 - 3424	4253
		GEISA-11	0,006 - 17581	81889
		HITRAN-12	0 – 3424	4253
24	CH ₃ Cl	HITRAN-08	0 – 3173	196171
	- 5 -	GEISA-11	674 - 3172	18344
		HITRAN-12	0-3198	212496
25	H_2O_2	HITRAN-08	0 – 1731	126983
	2 2	GEISA-11	0,04 - 1730	126983
		HITRAN-12	0 – 1731	126983
26	C_2H_2	HITRAN-08	604 – 9890	11340
		GEISA-11	604,77 – 9889	11340
		HITRAN-12	1 – 9890	20410
27	C_2H_6	HITRAN-08	706 – 3001	22402
		GEISA-11	706,60 - 3000	28439
		HITRAN-12	706 – 3001	49629
28	PH_3	HITRAN-08	770 – 3602	20099
		GEISA-11	17,80 - 3601	20421
		HITRAN-12	0 - 3602	22189
29	COF ₂	HITRAN-08	725 – 2002	70601
		GEISA-11	725 - 2001	70904
		HITRAN-12	686 - 2002	184104
30	SF ₆	HITRAN-08	580 – 996	2889065
		GEISA-11	588 - 975	92398
		HITRAN-12	580 – 996	2889065
31	H ₂ S	HITRAN-08	2 – 4257	20788
31		GEISA-11	2,98 - 4256	20788
		HITRAN-12	2 – 11330	54235
32	НСООН	HITRAN-08	10 – 1890	62684
32	30011	GEISA-11	10,01 - 1889	62684
		HITRAN-12	10 – 1890	62684
	L	1111111111111	10 1070	02001

33	HO_2	HITRAN-08	0 - 3676	38804
		GEISA-11	0,17 - 3675	38804
		HITRAN-12	0 - 3676	38804
34	O	HITRAN-08	68 – 159	2
		GEISA-11		
		HITRAN-12	68 – 159	2
35	ClONO ₂	HITRAN-08	763 - 798	32199
		GEISA-11	0,635 - 797	356899
		HITRAN-12	763 - 798	32199
36	NO ⁺	HITRAN-08	1634 - 2531	1206
		GEISA-11	1634- 2530	1206
		HITRAN-12	1634 - 2531	1206
37	HOBr	HITRAN-08	0 - 316	4358
		GEISA-11		
		HITRAN-12	0 - 316	4358
38	C_2H_4	HITRAN-08	701 - 3243	18378
		GEISA-11	701 - 3242	18378
		HITRAN-12	701 - 3243	18378
39	CH ₃ OH	HITRAN-08	0 - 1408	19897
		GEISA-11	0,019 - 1407	19897
		HITRAN-12	0 - 1408	19897
40	CH ₃ Br	HITRAN-08	794 – 1706	36911
		GEISA-11	794 - 1705	36911
		HITRAN-12	794 – 1706	36911
41	CH ₃ CN	HITRAN-08	890 – 946	3572
		GEISA-11	890,05 - 1650	17172
		HITRAN-12	890 – 946	3572
42	CF ₄	HITRAN-08	594 – 1313	60033
		GEISA-11	594 - 1312	60033
		HITRAN-12	594 – 1313	60033

Следует отметить, что не только добавлены новые «слабые» линии в предыдущие версии, но уточнены параметры даже некоторых «сильных» линий. Например, для линии водяного пара с центром 1343,678340 см⁻¹ (основной изотоп), параметры интенсивности равны 2,705E-23/2,689E-23 в HITRAN-2008/2012, соответственно. Также подправлены положения и параметры полуширин у многих других линий.

Базы HITRAN-2008, GEISA-11 и HITRAN-2012 в моделировании измерений прибором IASI

Усовершенствование баз данных безусловно полезно для моделирования/обработки измерений со спектральным разрешением в сотые доли обратного сантиметра, когда разрешается контур каждой спектральной линии (за исключением Q-ветвей CO_2 и т. п.). Но возникает вопрос: следует ли переделывать ранее разработанные программы обработки измерений и пересматривать ранее полученные результаты ДЗЗ полу-

ченные на основе HITRAN-2008 для спектрометров с разрешением порядка 0,5 см⁻¹, когда контур линии прописывается не очень детально и в канале спектрометра происходит частичное интегрирование спектра. Второй, более важный вопрос: решает ли появление новых баз (а GEISA-11 специально разрабатывалась для прибора IASI) проблему точности моделирования экспериментов (т. е. проблему «прямых» моделей в обработке). Этот вопрос приобретает особую остроту в связи с запуском отечественных приборов типа ИКФС. Для ответа на эти вопросы мы использовали данные тестирования сенсора IASI (МЕТОР-А, Европейское Космическое Агентство), аналога ИКФС-2, полученные в ходе подспутникового эксперимента JAIVEx (The Joint Airborne IASI Validation Experiment, 2007). Конкретно был взят "Case 504" (тогда спутник пролетал над океаном, зенитный угол спутника 20° , температура поверхности 298° K, а в момент измерения спектра был измерен (в \sim 200 точках по вертикали) профиль газов H_2O , CO_2 , O_3 , CO, CH_4 и N_2O , и т. п.). Для этого случая на рис. 1 показан экспериментальный спектр яркостной температуры, а на рис. 2 показана разность между экспериментальным и расчётным спектрами. Последний получен с помощью базы HITRAN-2008, но расчёты с GEISA-2011 и HITRAN-2012 показали похожие отклонения от экспериментального спектра (поэтому не представлены на рисунках).

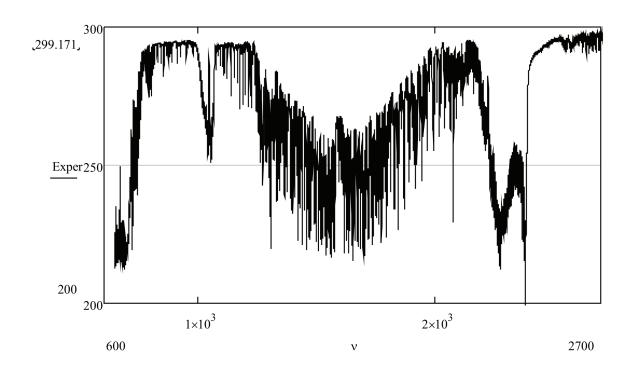


Рис. 1. Экспериментальный спектр яркостной температуры

В расчётах, полученных с помощью оригинальной Line-by-Line модели (Fomin et al., 2005), учитывалась обычная аппаратная функция Фурье-спектрометра для разности хода 1,5 см (Быков и др., 1999). Как видно из этого *рисунка*, разность в расчётах и измере-

ниях достигает 4-х и более градусов (в единицах яркостной температуры), хотя в основном составляет 1-2⁰. Следует подчеркнуть, что в данных методических расчётах специально использовался только простейший Лоренц-Фойгтовский контур линий с обрывом в 25 см⁻¹ от центра, без эмпирических поправок в крыльях и учёта эффекта «интерференции» линий. Поэтому согласие между расчётами и измерениями может быть улучшено с применением современных моделей «интерференции линий», более сложных контуров линий, моделей континуального поглощения и т. п. Однако это выходит за рамки данного исследования, цель которого лишь прояснить влияние улучшений спектроскопических баз на точность Line-by-Line моделей в практических приложениях.

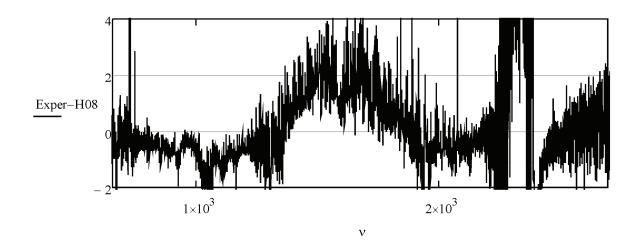


Рис. 2. Разность между экспериментальным спектром и расчётным, полученным с помощью базы HITRAN-2008

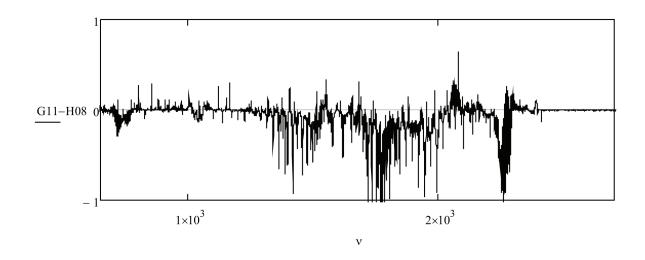


Рис. 3. Разности между расчётными спектрами, полученными с помощью баз GEISA-2011 и HITRAN-2008

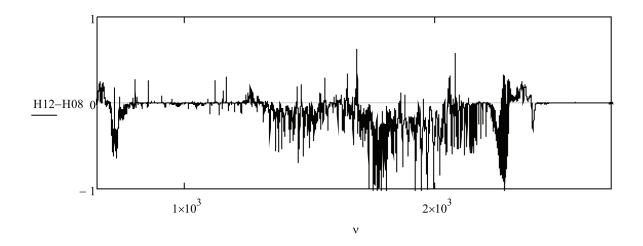


Рис. 4. Разности между расчётными спектрами, полученными с помощью баз HITRAN-2012 и HITRAN-2008

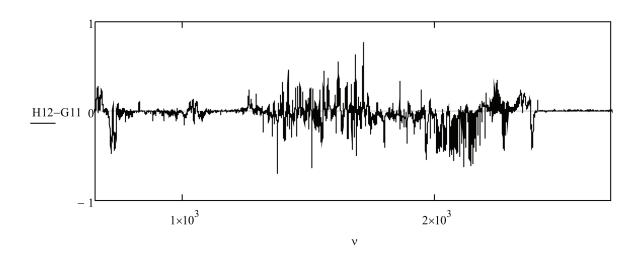


Рис. 5. Разности между расчётными спектрами, полученными с помощью баз HITRAN-2012 и GEISA-2011

Для этого на *puc. 3*, *4* и *5* представлены разности в расчётах с базами GEISA-2011 и HITRAN-2008, HITRAN-2012 и HITRAN-2008, а также HITRAN-2012 и GEISA-2011.

Эти рисунки демонстрируют следующие факты.

- А) С практической точки зрения (для приборов типа IASI, ИКФС и др.) переход от предыдущей базы HITRAN-2008 к базам GEISA-2011 и HITRAN-2012 приводит примерно к одинаковым изменениям в Line-be-Line расчётах спектров яркостной температуры в основном в пределах \sim 1 K.
- Б) Разница в расчётах с новыми базами GEISA-2011 и HITRAN-2012 приводит к заметно меньшим имениям в Line-be-Line расчётах спектров яркостной температуры в основном в пределах \sim 0,5 K.

В) Вышеуказанные изменения существенно меньше разностей между экспериментальным и любым из трёх рассмотренных расчётных спектров.

Следует отметить, что рассмотрение других данных (cases) JAIVEх качественно дало те же результаты.

Заключение

В отношении задач Д33, основанных на применении ИК спектрометроврадиометров с разрешением $\sim 0.5~{\rm cm}^{-1}$, полученные результаты позволяют сделать следующие выводы.

- 1. Неопределённости в спектроскопической информации (конкретно базах GEISA и HITRAN) с годами реально уменьшаются, что приводит к заметному улучшению согласия в Line-be-Line расчётах выполненных с помощью различных спектральных баз.
- 2. На данный момент неопределенности в существующей спектроскопической информации (конкретно в новейших базах GEISA-2011 и HITRAN-2012) приводят к различиям в Line-be-Line расчётах спектров яркостной температуры порядка десятых долей градуса (в разных спектральных областях различия разные, см. рис. 5). Это косвенно указывает на то, что в настоящий момент реальная достижимая точность моделирования ИК спектров уходящего излучения того же порядка десятые доли градуса (в единицах яркостной температуры).
- 3. Применение новейших баз не снимает «автоматически» проблему точности «прямых» моделей, применяемых в обработке экспериментальных спектров различия в расчётах при применении различных баз в разы меньше наблюдающегося несогласия с экспериментальными данными и поэтому не могут его компенсировать.

Таким образом, для повышения точности обработки результатов ДЗЗ уточнение моделей контуров линий, интерференции линий и т.п. в настоящее время представляется более актуальным чем переход на новые спектральные базы.

Работа поддержана грантами РФФИ (11-01-00021 и 09-01-00071).

Литература

- 1. *Быков А.Д., Синица Л.Н., Стариков В.И.* Экспериментальные и теоретические методы в спектроскопии молекул водяного пара. Изд. СО РАН, Новосибирск, 1999.
- 2. *Городецкий А.К., Головин Ю.М., Завелевич Ф.С., Козлов Д.А., Козлов И.А.* К задаче валидации спектрорадиометрических измерений излучения атмосферы в ИК-диапазоне спектра. // Современные проблемы дистанционного зондирования Земли из космоса. Сб. тезисов, Москва, 2013.
- 3. Fomin B.A., Correa M.P., Ceballos J.C., Souza R.A., Machado L.A. FLISS: A user-friendly satellite signal simulator using Monte-Carlo and line-by-line techniques for multiple scattering layered atmospheres, *The 2005 EUMETSAT Meteorol. Satellite Conf.*, Proc., EUM P. 46, Dubrovnik, Croatia, 2005. 490-493.

- 4. Rothman L.S., Gordon I.E., Barbe A., Chris Benner D., Bernath P.F., Birk M. The HITRAN 2008 molecular spectroscopic database. 2009. JQSRT, 110, 533-572.
- 5. Rothman L.S., Gordon I.E., Babikov Y., Barbe A., Chris Benner D., Bernath P.F. The HITRAN 2012 molecular spectroscopic database. In press, 2013. JQSRT, DOI: 10.1016/j.jqsrt.2013.07.02
- 6. *Ward S.* The Earth observation handbook 2012: special edition for Rio+20, [ESA SP-1325, July 2012]. ESA Communications, Ed. Wilson A., 2012, pp.212.

New versions of spectroscopic databases and remote sensing of the Earth using high-resolution IR spectroscopy

G.E. Kolokutin, B.A. Fomin

Central Aerological Observatory, Dolgoprudny 141700, Russia E-mail: b.fomin@mail.ru, greg.88@cao-rhms.ru

Nadir high-resolution IR sensors' data processing is based on comparison of the experimental and simulated spectra of outgoing thermal radiation. But, as validation experiments demonstrate, at present the agreement between these spectra are not good, that can considerably decrease efficiency of remote sensing. A reason may be the set of uncertainties in the contemporary spectroscopic data being used in the line-by-line spectral calculations: the line shape models (especially the far wings), continua (by water vapor, oxygen etc.), line mixing models (for carbon dioxide, methane, etc.). That is why the spectroscopic databases are regularly upgraded, especially the most popular GEISA and HITRAN, where one can find information about the spectral lines positions, strengths and half-widths.

The typical uncertainties in the line-by-line simulations of the IR spectra of outgoing radiations when using different spectroscopic databases HITRAN-2008, GEISA-2011 and HITRAN-2012 are evaluated. By using the JAIVEx data for the IASI sensor it is shown that the newest databases GEISA-2011 and HITRAN-2012 do not remove discrepancies between experimental and simulated spectra found earlier when the HITRAN-2008 database was used in calculations.

Keywords: outgoing radiation, IR spectra, line-by-line calculations, spectroscopic databases.

References

- 1. Bykov A.D., Sinitsa L.N., Starikov V.I. Eksperimental'nye i teoreticheskie metody v spektroskopii molekul vodyanogo para (Experimental and theoretical methods in the spectroscopy of molecules of water vapor). *Izd. SO RAN*, Novosibirsk, 1999.
- 2. Gorodetskii A.K., Golovin Yu.M., Zavelevich F.S., Kozlov D.A., Kozlov I.A. K zadache validatsii spektrora-diometricheskikh izmerenii izlucheniya atmosfery v IK-diapazone spektra (On the problem of validation spectrometer radiometric measurements of atmospheric radiation in the infrared range of the spectrum), *Sovremennye problemy distantsionnogo zondirovaniya Zemli iz kosmosa*, Book of abstracts, Moscow, 2013.
- 3. Fomin B.A., Correa M.P., Ceballos J.C., Souza R.A., Machado L.A. FLISS: A user-friendly satellite signal simulator using Monte-Carlo and line-by-line techniques for multiple scattering layered atmospheres, *The 2005 EUMETSAT Meteorol. Satellite Conf.*, Proc., EUM P. 46, Dubrovnik, Croatia, 2005. 490-493.
- 4. Rothman L.S., Gordon I.E., Barbe A., Chris Benner D., Bernath P.F., Birk M. The HITRAN 2008 molecular spectroscopic database. 2009. *JOSRT*, 110, 533-572.
- 5. Rothman L.S., Gordon I.E., Babikov Y., Barbe A., Chris Benner D., Bernath P.F. The HITRAN 2012 molecular spectroscopic database. In press, 2013. *JOSRT*, DOI: 10.1016/j.jqsrt.2013.07.02
- 6. Ward S. The Earth observation handbook 2012: special edition for Rio+20, [ESA SP-1325, July 2012]. *ESA Communications*, Ed. Wilson A., 2012, pp.212.