

УДК 551.510.42, 519.6

DOI: 10.46960/1816-210X_2022_4_20

АНАЛИЗ И АЛГОРИТМ ОЦЕНКИ СВОЙСТВ КОРИЧНЕВОГО УГЛЕРОДА ПО ДАННЫМ СПУТНИКОВЫХ И НАЗЕМНЫХ ИЗМЕРЕНИЙ С ПРИМЕНЕНИЕМ МЕТОДА МОНТЕ-КАРЛО

Н.А. ГоловушкинORCID: 0000-0002-2937-8213 e-mail: golovushkin@ipfran.ruНижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева
*Нижний Новгород, Россия***Л.Ю. Катаева**ORCID: 0000-0001-9217-9324 e-mail: Kataeval2010@mail.ruНижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева
Нижний Новгород, Россия

Исследовано влияние на окружающую среду дымового аэрозоля, являющегося важным звеном в процессах формирования радиационного форсинга атмосферы Земли и климатообразования, на примере Сибирского региона. Объектом исследования выступает органическая компонента дымового аэрозоля – коричневый углерод (BrC), поглощающий приходящую солнечную радиацию и оказывающий значимое воздействие на оптические и радиационные характеристики. На основе анализа данных спутниковых MODIS (сканирующий спектрометр среднего разрешения), MISR (многоугловой сканирующий спектрометр), OMI (инструмент мониторинга озона) сделана оценка вклада коричневого углерода (BrC) в поглощение солнечного излучения. Сопоставление данных измерений аэрозольной абсорбции и экстинкции с модельными расчетами, произведенными с использованием теории Ми, по методу Монте-Карло выявляет значительное уменьшение фракции BrC и мнимой части показателя преломления в первые 30 часов его атмосферной эволюции, оставаясь в то же время существенным до 70 часов. Обоснована целесообразность использования набора спутниковых измерений для получения информации об эволюции BrC.

Ключевые слова: окружающая среда, дымовой аэрозоль, органическая фракция аэрозоля, абсорбция, спутниковые измерения, наземные измерения, метод Монте-Карло.

ДЛЯ ЦИТИРОВАНИЯ: Головушкин, Н.А. Анализ и алгоритм оценки свойств коричневого углерода по данным спутниковых и наземных измерений с применением метода Монте-Карло / Н.А. Головушкин, Л.Ю. Катаева // Труды НГТУ им. Р.Е. Алексеева. 2022. № 4. С. 20-27. DOI: 10.46960/1816-210X_2022_4_20

MONTE-CARLO METHOD-BASED ANALYSIS AND ALGORITHM FOR BROWN CARBON PROPERTY EVALUATION USING SATELLITE AND GROUND MEASUREMENTS

N.A. GolovushkinORCID: 0000-0002-2937-8213 e-mail: golovushkin@ipfran.ruNizhny Novgorod State Technical University n.a. R.E. Alekseev
*Nizhny Novgorod, Russia***L.Yu. Kataeva**ORCID: 0000-0001-9217-9324 e-mail: Kataeval2010@mail.ruNizhny Novgorod State Technical University n.a. R.E. Alekseev
Nizhny Novgorod, Russia

Abstract. The study examines the environmental impact of smoke aerosol as a substantial contributor to the radiative forcing of the Earth's atmosphere and climate formation, by the example of Siberia. The study subject is the organic fraction of smoke aerosol: brown carbon (BrC) absorbing the incoming solar radiation and having a significant

impact on optical and radiative properties. The analysis of MODIS (Moderate-resolution Imaging Spectro-radiometer), MISR (Multi-angle Imaging Spectro-Radiometer), and OMI (Ozone Monitoring Instrument) satellite observations allows for the evaluation of brown carbon (BrC) contribution to the absorption of solar radiation. The comparison of the aerosol absorption and extinction observations against Mie theory model calculations using the Monte-Carlo method shows that the BrC fraction, as well as the imaginary part of the refractive index, decreased significantly during first 30 h of its atmospheric evolution, nevertheless remaining considerable until at least 70 h. The feasibility of obtaining information on BrC evolution using satellite observational datasets is well-established.

Key words: environment, smoke aerosol, the organic fraction of smoke aerosol, absorption, satellite measurements, ground measurements, Monte-Carlo method.

FOR CITATION: N.A. Golovushkin, L.Yu. Kataeva. Monte-Carlo method-based analysis and algorithm for brown carbon property evaluation using satellite and ground measurements. Transactions of NNSTU n.a. R.E. Alekseev. 2022. № 4. Pp. 20-27. DOI: 10.46960/1816-210X_2022_4_20

Введение

Природные лесные пожары по всему миру приводят к уничтожению лесных массивов и сопутствующих материальных ценностей. Причины их возникновения аналогичны для всех стран, обладающих обширным лесным фондом, но наиболее сложные и крупные пожары возникают в гористой местности, характерной для России, США и Австралии. В нашей стране самым пожароопасным регионом является Сибирь, где каждый год возникает от 4,5 до 27 тыс. лесных пожаров, охватывающих площади от 3,5 до 18 млн га [1-3]. Их число постоянно растет (рис. 1), что может объясняться как ограниченным финансированием лесного хозяйства и охраны окружающей среды, так и недостаточной изученностью механизмов пожаротушения.

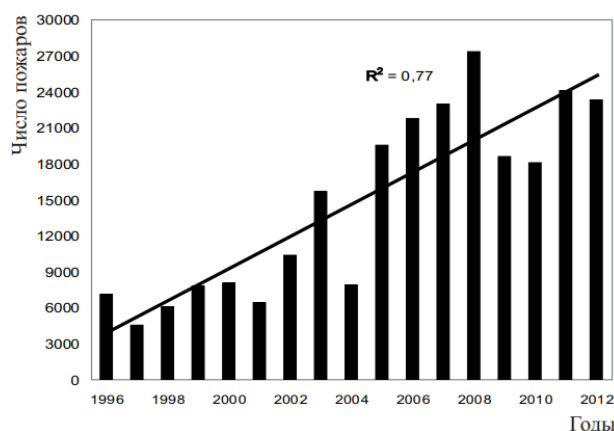


Рис. 1. Годовое число пожаров в Сибири [3]

Fig. 1. Annual number of Siberian wildfires [3]

Крупномасштабные лесные пожары порождают огромные дымовые шлейфы, влияющие на окружающую среду. Дымовой аэрозоль, состоящий из органических веществ и черного углерода (сажи), оказывает сильное воздействие как на формирование радиационного форсинга атмосферы, так и на климатообразующие процессы [4], в связи с чем может считаться одним из факторов нарушения равновесия в экологии. Известно, что в химическом составе аэрозоля от лесных пожаров преобладают первичные органические вещества, слабо поглощающие приходящее солнечное излучение, но вместе с ними в составе содержатся и сильно поглощающие соединения – хромофоры первичного и вторичного происхождения, вносящие вклад в поглощение солнечного излучения наряду с черным углеродом (BC). Одним из таких соединений является «коричневый углерод» [5] (BrC), который, в отличие от BC, характеризуется более интенсивной зависимостью удельного коэффициента абсорбции

от длины волны, принимающего максимальные значения в ближнем ультрафиолетовом (УФ) диапазоне. Результаты различных исследований, основанные на модельных расчетах [6-8], показывают, что BrC вносит заметный вклад в радиационный форсинг, как на региональном, так и глобальном уровне. В то же время оценки вклада BrC в абсорбцию дымового аэрозоля характеризуются большой неопределенностью ввиду недостаточно изученных комплексных процессов с участием BrC, сказывающихся на адекватном учете климатическими моделями связанных с ним эффектов.

Целью настоящей работы является оценка относительного вклада BrC в поглощение дымовым аэрозолем солнечного излучения и его анализ на основе обработки данных многоволновых спутниковых измерений на примере Сибирского региона. Задачи включают обработку и валидацию спутниковых данных и их дальнейшее применение для получения оценки среднего содержания BrC в сибирском дымовом аэрозоле в зависимости от фотохимического возраста аэрозоля.

Спутниковые данные

Для расчета оценки вклада BrC использовались следующие данные многоволновых спутниковых измерений оптических характеристик аэрозоля:

- измерения абсорбционной аэрозольной оптической толщины (AAOT) на длине волны 388 нм, полученные спутниковым инструментом OMI продукта OMAERUV;
- измерения AAOT на 867 нм по данным спутникового инструмента MISR;
- измерения аэрозольной оптической толщины (AOT) на 550 нм по данным MODIS.

Инструмент для мониторинга озона (OMI) – спектрометр, установленный на борту спутника NASA's Earth Observing System (EOS), работающий для ближнего УФ диапазона, и вращающийся вокруг Земли по полярно-солнечно-синхронной схеме. Он предназначен для измерения общего содержания и профиля озона, а также содержания таких газов, как NO₂, SO₂, HCHO, BrO и OClO. Многоугловой сканирующий спектрорадиометр (MISR) – первая съемочная система в космосе, позволяющая определять отражательные характеристики объектов в девяти разных направлениях. Большинство съемочных инструментов, устанавливаемых на спутниках, ведут наблюдения вертикально. Для изучения аэрозолей, облачного покрова, водных поверхностей, растительности, горных пород необходимо знать количество солнечного света, рассеиваемого или отражаемого в естественных условиях по разным направлениям, для чего MISR имеет необходимые возможности. Спектрорадиометр с визуализацией среднего разрешения (MODIS) является одним из ключевых инструментов на борту американских спутников Terra и Aqua серии EOS. MODIS имеет 36 спектральных каналов с 12-битным радиометрическим разрешением в видимом, ближнем, среднем и тепловом инфракрасном диапазонах. 36 спектральных зон MODIS охватывают диапазон с длинами волн от 0,4 до 14,4 мкм. Съемка в двух зонах (620-670 и 841-876 нм) ведется с разрешением 250 м, в пяти зонах видимого и ближнего инфракрасного диапазона с разрешением 500 м, а в остальных (диапазон от 0,4 до 14,4 мкм) – 1000 м. Рассматриваемый домен имел границы 22-136° в. д. и 38-76° с. ш., период включал в себя данные за июль 2016 г. (рис. 2).

Валидация спутниковых измерений проводилась путем сопоставления их с данными наземных измерений AERONET (AErosol RObotic NETwork), представляющего собой сеть наземных солнечных фотометров, измеряющих свойства атмосферного аэрозоля. Использовались данные за 2012 и 2016 гг., AAOT на длинах волн 440-, 675-, 870- нм, являющихся продуктами инверсии второго уровня версии 3, а также AOT на 500- и 675- нм второго уровня версии 3, продуктов алгоритма «Direct Sun». Чтобы обеспечить соответствие возраста дымового аэрозоля между спутниковыми и наземными наблюдениями, данные согласованно отбирались по фотохимическому возрасту аэрозоля так, чтобы относительная разница между значениями фотохимического возраста дымового аэрозоля по данным спутников и данным AERONET не превышала 10 %.

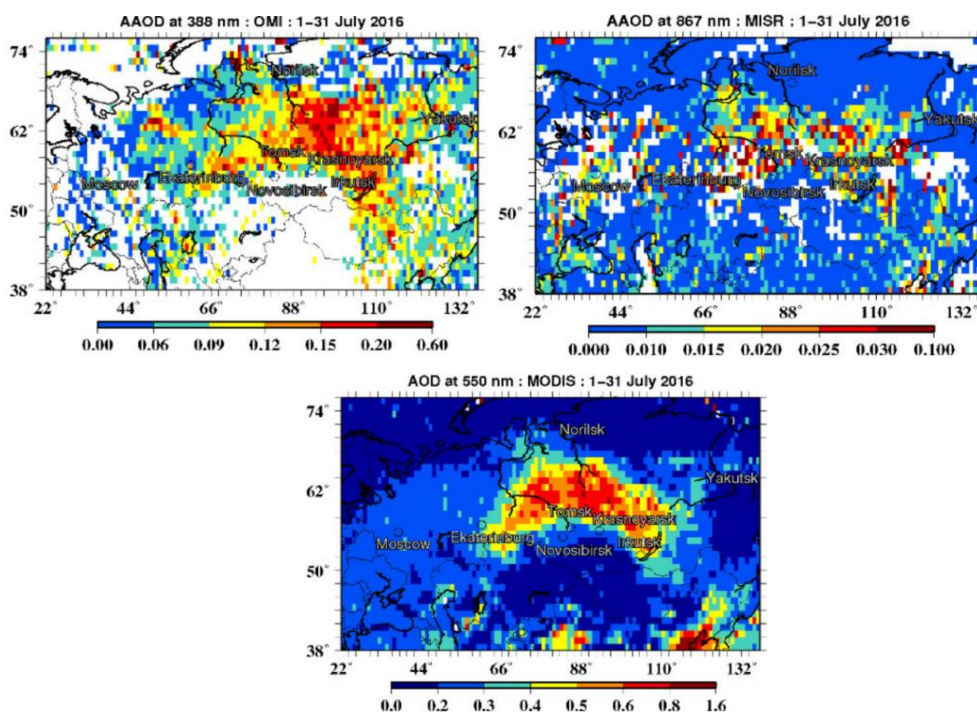


Рис. 2. Пространственное распределение $AAOT_{388}$ по данным OMI, $AAOT_{867}$ по данным MISR и AOT_{550} по данным MODIS соответственно [9]

Fig. 2. Spatial distribution of $AAOT_{388}$ based on OMI observations, $AAOT_{867}$ based on MISR observations, and AOT_{550} based on MODIS observations respectively [9]

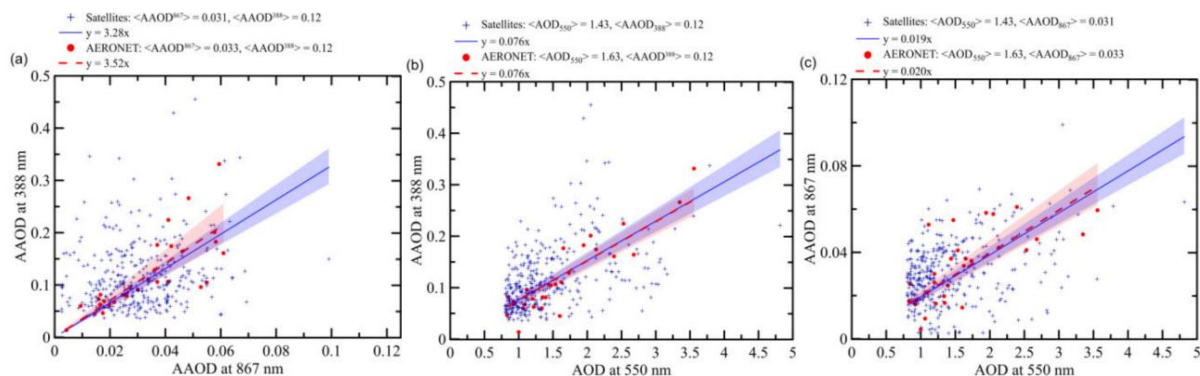


Рис. 3. Сравнение зависимостей (a) $AAOT_{867}$ и $AAOT_{388}$, (b) AOT_{550} и $AAOT_{388}$, (c) AOT_{550} и $AAOT_{867}$ по данным спутников измерений (синие точки и линии) и данным AERONET (красные точки и штрихованные линии) [9]

Fig. 3. Comparison of the relationships between (a) $AAOT_{867}$ and $AAOT_{388}$, (b) AOT_{550} and $AAOT_{388}$, (c) AOT_{550} and $AAOT_{867}$ based on satellite measurements (blue points and lines) and AERONET observations (red points and dashed lines) [9]

Объединенный набор данных, удовлетворяющих этому условию, включал 347 спутниковых наблюдений и 29 точек данных наблюдений AERONET. На рис. 3 представлено сравнение двух наборов данных.

В целом сравнение не выявило каких-либо свидетельств серьезной систематической ошибки в спутниковых данных, использованных в анализе данной работы, хотя следует иметь в виду, что проверка способности спутниковых данных адекватно отражать атмосферную эволюцию дымового аэрозоля была затруднена из-за нехватки данных AERONET, особенно тех, которые представляют свежий дымовой аэрозоль.

Метод оценки BrC

Метод оценки вклада BrC (рис. 4) в абсорбцию соответствовал работе [9]. На первом этапе по алгоритму Монте-Карло был сформирован входной набор модельных данных, представляющий всевозможные вариации оптических свойств дымового аэрозоля, где каждой реализации соответствовал вектор x_a , включающий в себя следующие аэрозольные параметры: мнимую часть показателя преломления k_{OA} на 550 нм, отношение черного и органического аэрозоля BC/OA , медиану и стандартное отклонение ядра и оболочки, параметр гигроскопичности k , массовую долю неорганического материала (представленного сульфатом аммония) и относительную влажность RH . Диапазоны варьируемых параметров указаны в нашем предыдущем исследовании [9].

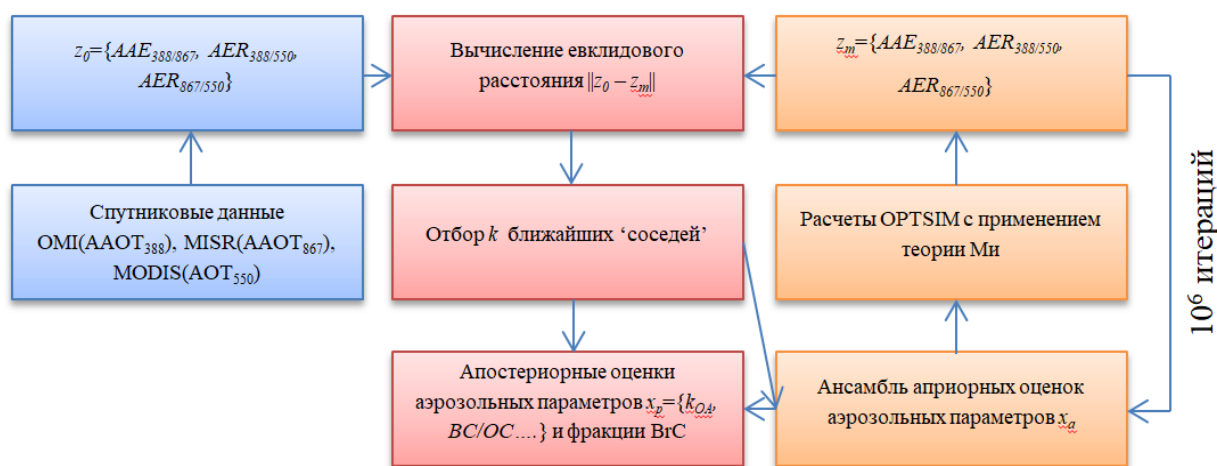


Рис. 4. Схема алгоритма Монте-Карло для расчета абсорбционных характеристик BrC

Fig. 4. Flow chart of the Monte-Carlo algorithm for the estimation of BrC absorption parameters

Основываясь на теории Ми, было сделано предположение, что частицы дымового аэрозоля состоят из сильно поглощающего ядра и слабо поглощающей оболочки: ядро состоит из BC, а оболочка состоит в основном из органического вещества и в меньшей степени из неорганических солей и воды. Расчеты проводились с помощью программы OPTSIM, позволяющей моделировать поглощающие и рассеивающие свойства ансамбля мультидисперсных сферических частиц, имеющих однородную структуру или структуру ядро-оболочка, которая применялась в данной работе. Доля воды была рассчитана на основе теории Кохлера как функция от влажности. Было сделано 10^6 итераций со случайно подобранными значениями параметров, расчет в OPTSIM производился независимо для каждой реализации. Оценка фотохимического возраста наблюдаемого аэрозоля и относительной влажности в дымовых шлейфах произведена с применением модели CHIMERE в комплексе с моделью WRF. Модель CHIMERE – химико-транспортная модель (XTM) с открытым кодом. XTM CHIMERE специализируется на расчетах концентраций малых газовых и аэрозольных составляющих в нижней атмосфере. В архитектуре программного комплекса CHIMERE принимаются во внимание наиболее важные процессы, определяющие пространственно-временные распределения концентраций малых примесей атмосферы, среди которых – процессы химического взаимодействия, процессы адвективного и турбулентного переноса, вымывание химических веществ, сухое осаждение и фотолиз. Кроме этого, в модели учтены основные процессы эволюцию аэрозолей: абсорбция, нуклеация, коагуляция и осаждение, причем рассматриваются как первичные, так и вторичные органические и неорганические аэрозоли, возникающие вследствие образования конденсируемых веществ в реакциях газообразных примесей.

Следующим шагом был расчет вектора аэрозольных характеристик по данным спутниковых измерений (z_0) и модельных расчетов (z_m). Вектор включал в себя три компоненты:

абсорбционную экспоненту Ангстрема $AAE_{388/867}$, соотношение $AAOT_{388}/AOT_{550}$ ($AER_{388/550}$) и соотношение $AAOT_{867}/AOT_{550}$ ($AER_{867/550}$). $AAE_{388/867}$ рассчитывалась на основе данных $AAOT_{388}$ и $AAOT_{867}$ по данным измерений ОМІ и MISR по формуле:

$$AAE_{388/867} = -\log\left(\frac{AAOT_{388}}{AAOT_{867}}\right) / \log\left(\frac{388}{867}\right) \quad (1)$$

Как показало наше предыдущее исследование [10], значения $AAE_{388/867}$ для Сибирского дымового аэрозоля значительно зависят от вклада BrC (δBrC) в абсорбцию, в среднем имея тенденцию к увеличению при увеличении значений δBrC . Значения $AER_{388/550}$ и $AER_{867/550}$ были использованы как дополнительные данные для анализа, что, как будет показано ниже, позволило получить качественные ограничительные оценки δBrC и k_{OA} .

На последнем шаге алгоритма производился подбор векторов апостериорных оценок аэрозольных характеристик x_p и оценка вклада δBrC . Вектор x_p был рассчитан как линейная суперпозиция фиксированного числа k отобранных векторов x_a (именуемого как $\{x_{ai}^n\}_{i=1}^k$) по формуле (2):

$$x_p^n = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k x_{ai}^n, \quad (2)$$

где n – порядковый номер спутниковых измерений.

Алгоритм включал в себя поиск k ближайших соседей, $\{z_{mi}^n\}_{i=1}^k$, для каждого вектора наблюдаемых характеристик z_0 среди всех модельных наборов z_m путем вычисления евклидова расстояния между z_0 и z_{mi}^n :

$$d^i = \left\{ (z_0^n - z_{mi}^n)^T (z_0^n - z_{mi}^n) \right\}^{1/2}, \quad (3)$$

где d^i – евклидово расстояние, T – транспонирование.

При помощи найденных k ближайших соседей z_0 становится возможным получить апостериорную оценку любой скалярной функции $F(x)$:

$$F_p^n = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k F(x_{ai}^n). \quad (4)$$

В конечном счете на основе подобранных апостериорных оценок и формулы (4), δBrC рассчитывался через массовый коэффициент поглощения [9]:

$$\delta BrC = 1 - \frac{\alpha_a | k_{OA} = 0}{\alpha_a}, \quad (5)$$

где α_a – эффективность поглощения, $\alpha_a | k_{OA} = 0$ – эффективность поглощения в гипотетическом случае, когда органический аэрозоль является непоглощающим ($k_{OA} = 0$). Оценки, определяемые уравнениями (2) и (4), зависят от количества ближайших соседей k . Выбор слишком маленького значения k может привести к большим неопределенностям апостериорных оценок x_p , что будет отражать возможность того, что одни и те же значения вектора z будут соответствовать нескольким различным комбинациям компонентов вектора x . С другой стороны, когда k приближается к общему числу выборок, оценки x_p будут приближаться к среднему значению всего ансамбля выборок x и станут почти независимыми от наблюдений. Оптимальное число соседей было подобрано итерационным путем, увеличивая значение k на каждой итерации. На рис. 5 изображено сопоставление тестовых значений (t values), заранее подобранных алгоритмом после его применения к набору синтетических данных AERONET, и предсказанных значений (predicted values) – результата работы алгоритма. Число k увеличивалось до тех пор, пока среднеквадратичная ошибка (RMSE) не станет минимальной.

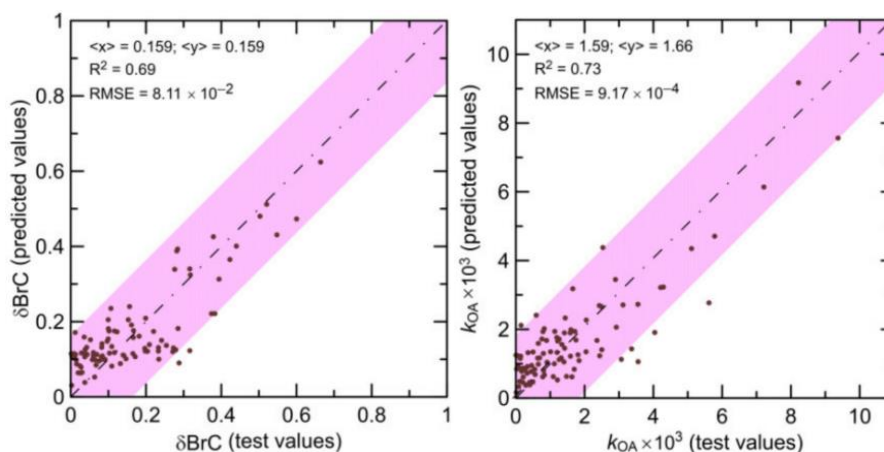


Рис. 5. Валидация алгоритма Монте-Карло на основе синтетических данных, полученных на основе данных AERONET в Сибири: слева – δBrC , справа – k_{OA} [9]

Fig. 5. Monte-Carlo algorithm validation based on synthetic data obtained from AERONET observations in Siberia: δBrC on the left, and k_{OA} on the right [9]

Результаты и выводы

Представлены результаты применения метода оценки коричневого углерода к спутниковым данным. На рис. 6 изображены полученные оценки относительного вклада δBrC в поглощение солнечного излучения дымовым аэрозолем на длине волны 388 нм и оценки мнимой части показателя преломления органической фракции аэрозоля k_{OA} соответственно.

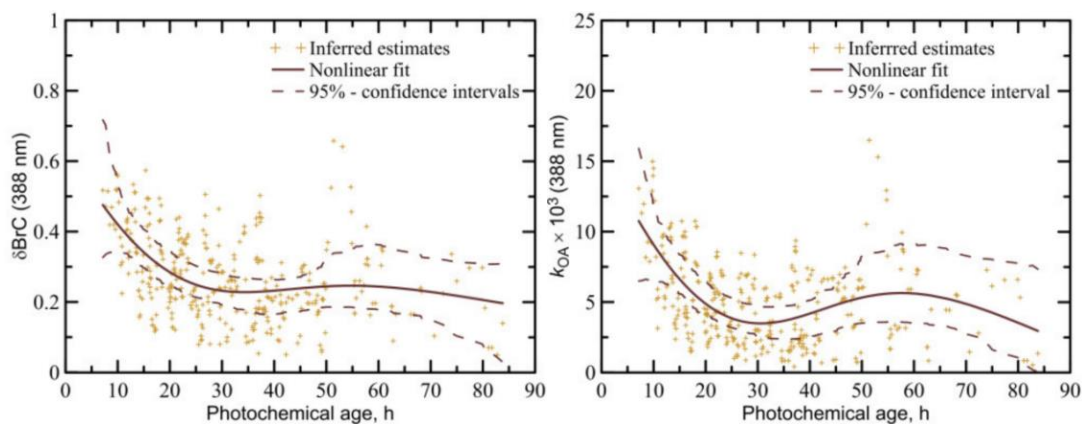


Рис. 6. Оценки вклада BrC в абсорбцию солнечного излучения дымовым аэрозолем (слева) и мнимого показателя преломления органической фракции дымового аэрозоля (справа) на длине волны 388 нм [9]

Fig. 6. Estimates of the BrC contribution to the solar radiation absorption by smoke aerosol (on the left) and the imaginary refractive index of the organic fraction of smoke aerosol (on the right) at the wavelength of 388 nm [9]

Согласно полученным оценкам, в свежем дымовом аэрозоле коричневый углерод является доминирующей поглощающей примесью на 388 нм. При этом доля коричневого углерода, содержащаяся в дымах, резко уменьшается – примерно в три раза в течение ~30 часов эволюции в освещенных условиях, но все еще остается значительной и в процессе дальнейшей эволюции. Важно отметить, что анализ выявил то, что BrC полностью не исчезает в сибирском дымовом аэрозоле даже после 70 часов воздействия атмосферного дневного света (~ 4 полных дня в летнее время в Сибири). В то же время поведение k_{OA} очень похоже на

δBrC . Первоначально видно его уменьшение на временном масштабе около 19 часов, но «период уменьшения» не выходит за пределы 30 час атмосферной эволюции. Кроме того, как и для δBrC , k_{OA} оставался отличным от нуля даже после 70 час эволюции, что еще раз свидетельствует о том, что органическая фракция дымового аэрозоля от лесных пожаров сохраняла некоторые абсорбционные свойства в течение почти всего времени жизни дымового аэрозоля в Сибири.

Проведена оценка вклада BrC в абсорбцию солнечного излучения дымового аэрозоля в Сибири. Поглощение приходящей солнечной радиации коричневым углеродом δBrC является значительным в первые ~30 часов атмосферной эволюции, при этом, не опуская до нуля даже спустя 70 часов. Выявлено, что в среднем спутниковые данные OMI, MODIS и MISR способны предоставить качественную информацию о дымовом аэрозоле, пригодном для анализа дальних переносов дымовых шлейфов.

Библиографический список

1. **Сороковой, С.И.** Из истории борьбы с лесными пожарами в Сибири / Климат, экология, сельское хозяйство Евразии. Материалы межд. науч.-практ. конф., Иркутск, 09-10 июня 2016 г. – Иркутск, 2016. С. 48-53.
2. **Самсонов, Ю.Н.** Дымовая аэрозольная эмиссия при лесных пожарах в Центральной Сибири / Ю.Н. Самсонов, О.А. Беленко, В.А. Иванов // Гео-Сибирь. 2010. С. 114-118.
3. **Цветков, П.А.** О последствиях лесных пожаров в Сибири // Хвойные бореальной зоны. 2013. Том. 31. № 5-6. С. 10-14.
4. **Bondur, V.G.** Spacetime Distributions of Wildfire Areas and Emissions of Carbon-Containing Gases and Aerosols in Northern Eurasia according to Satellite-Monitoring Data / V.G. Bondur, K.A. Gordo, V.L. Kladov // Izvestiya, Atmos. Ocean. Phys., 2018, vol. 53, n. 9. Pp. 859-874.
5. **Andreae, M.O.** A. Black carbon or brown carbon? The nature of light-absorbing carbonaceous aerosols / M.O. Andreae, A. Gelencsér // Atmos. Chem. Phys., 2006. vol. 6, n. 10, p. 3131.
6. **Bond, T.C.** Bounding the role of black carbon in the climate system: A scientific assessment / T.C. Bond, S.J. Doherty, D.W. Fahey et al. // J. Geophys. Res. Atmos, 2013, vol. 118, n. 11, p. 5380-5552.
7. **Sand, M.** Response of Arctic temperature to changes in emissions of short-lived climate forcers / M. Sand, T. Berntsen, K. Salzen, von, et al. // Nat. Clim. Change. 2016, n. 6, Pp. 286-289.
8. **Zhang, A.** Modeling the global radiative effect of brown carbon: a potentially larger heating source in the tropical free troposphere than black carbon / Zhang A., Wang Y., Zhang Y. et al. // Atmos. Chem. Phys. 2020. vol. 20. Pp. 1901-1920.
9. **Konovalov, I.B.** Using Multi-Platform Satellite Observations to Study the Atmospheric Evolution of Brown Carbon in Siberian Biomass Burning Plumes / I.B. Konovalov, N.A. Golovushkin, M. Beekmann, S. Turquety // Remote Sens, 2022. n. 14. p. 2625.
10. **Konovalov, I.B.** Inferring the absorption properties of organic aerosol in Siberian biomass burning plumes from remote optical observations / I.B. Konovalov, N.A. Golovushkin, M. Beekmann et al. // Atmos. Meas. Tech. 2021. Vol. 14. Pp. 6647-6673.

*Дата поступления
в редакцию: 10.07.2022*

*Дата принятия
к публикации: 18.10.2022*