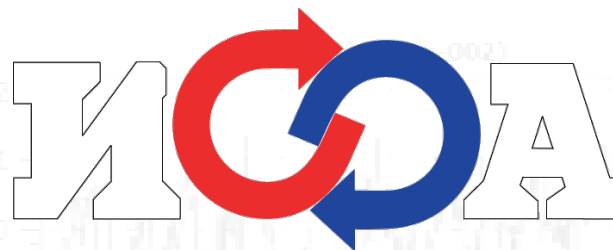


А.Н. Боровский, О.В. Постыляков, Д.Р. Шамсутдинов

Измерения вертикального распределения содержания NO_2 в г. Кисловодске методом 2D-MAX-DOAS



Мотивация

Мониторинг качества воздуха

измерения в фоновых условиях и при наличии загрязняющих веществ, мобильные измерения

Химико-транспортные модели

валидация, обеспечение данных

Эмиссии

локализация, оценка, уточнение

Необходимы технологии для измерения вертикального профиля примесей атмосферы в различных условиях

Целевые примеси: индикаторы интенсивности фотохимической активности в атмосфере

NO₂, HCHO, HONO...

Метод определения профиля целевых примесей: **MAX-DOAS**

Многоосевая дифференциальная спектроскопия поглощения

Высокоточный и стабилизированный прибор для измерения спектра рассеянного солнечного излучения

Цель: разработка технологии измерений вертикального профиля двуокиси азота и применение этой технологии в г. Кисловодске, проведение первичных сравнений данных измерений в городе с данными космических измерений и моделирования

MAX-DOAS technique

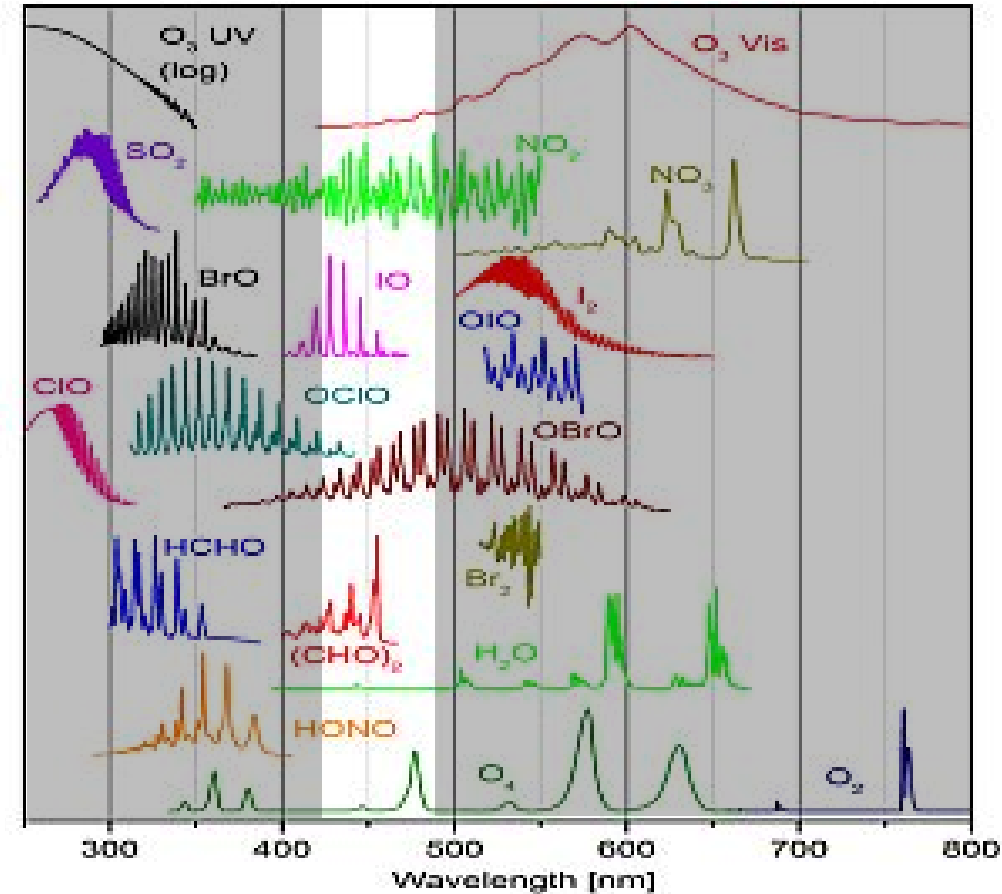
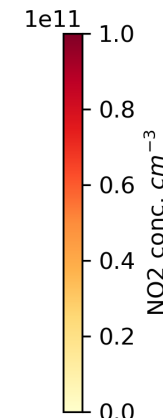
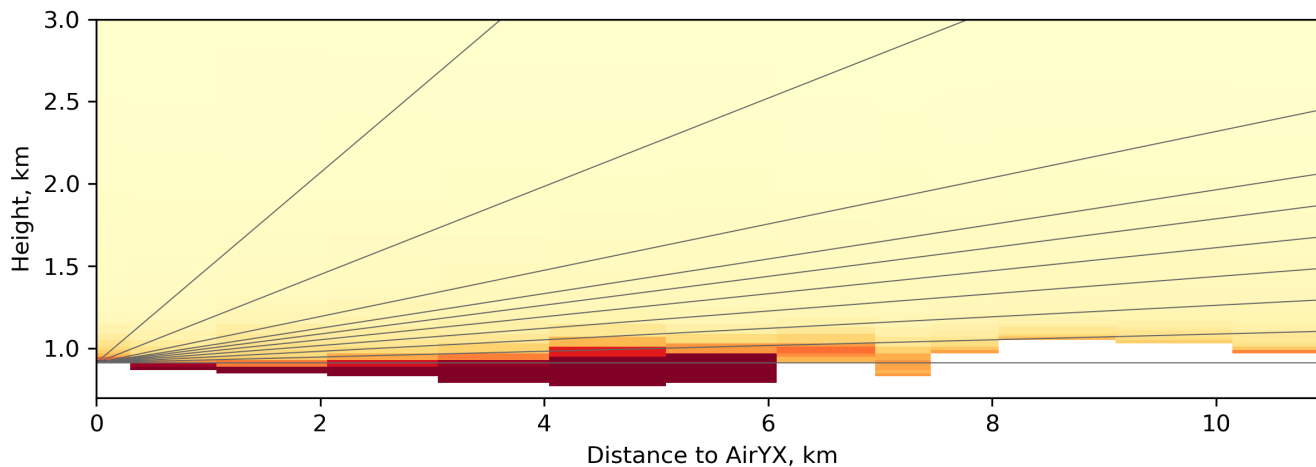
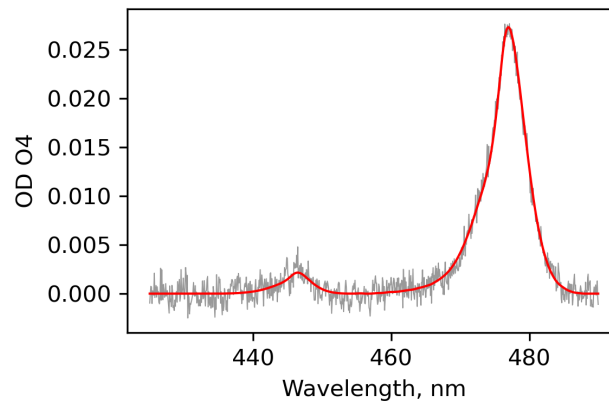
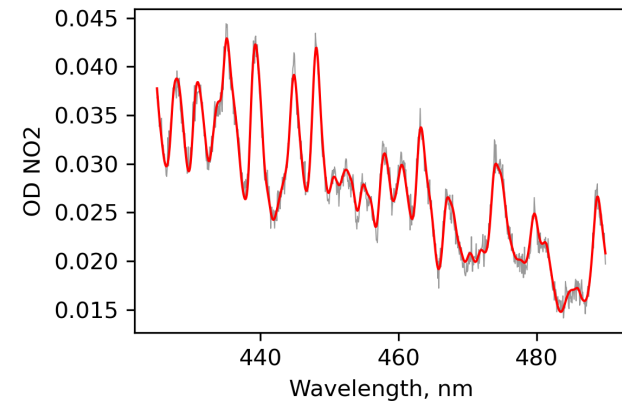
$$S_i: \sum_k \left(\ln \left(\frac{I_0(\lambda_k)}{I(\lambda_k)} \right) - \sum_i \sigma_i(\lambda_k) \cdot S_i \right)^2 \rightarrow \min$$

$I(\lambda_k)$ - measured spectrum;
 $I_0(\lambda_k)$ - reference spectrum;
 OD – optical density
 $\sigma_i(\lambda_k)$ - absorption cross-section
 SCD, S_i - slant column density

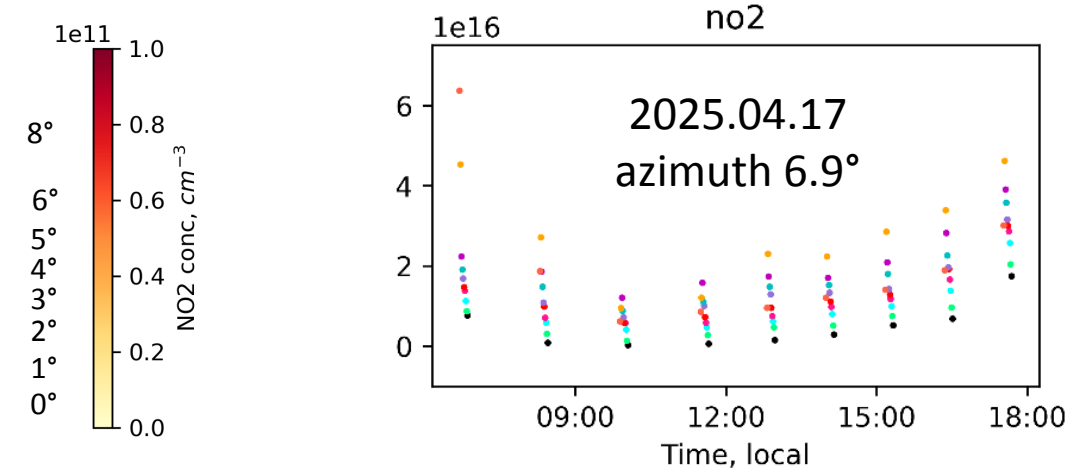
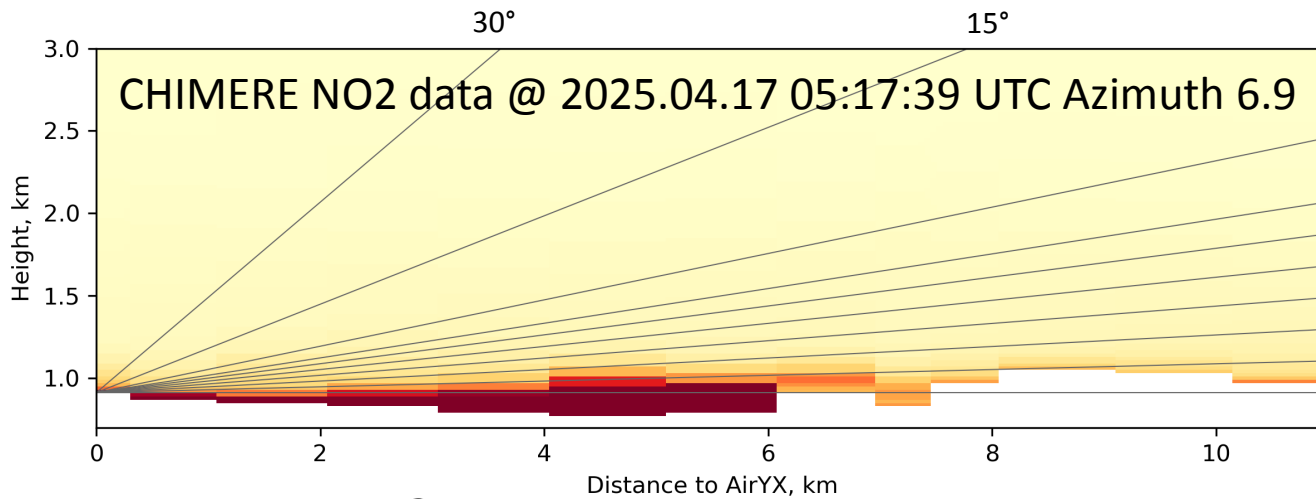
2025.04.17 03:41:51 Azimuth=6.9 Elevation=0°

NO2 SCD = 6.37e+16 molec cm2

O4 SCD = 4.20e+43 molec cm2



MAX-DOAS technique



$$S(e_i, z) = \int a(e_i, z, h) n(h) dh$$

$a(e_i, z, h)$ - layer air mass factor calculated using RTM

z - solar zenith angle

e_i – elevation angle of measurement, $i = 1 \dots m$

m – count of elevation angles

$n(h)$ – vertical profile

The task is to find algorithm $\hat{R}(\xi)$ which provide us the best estimation of $n(h)$ for measured ξ :

$$E \|\hat{R}(\xi) - n\|_2^2 = \inf \{ E \|R(\xi) - n\|_2^2 | R \in \mathcal{R} \}$$

problem of optimal statistic estimation.

In a case of known distribution of v and n :

$$v \sim \mathcal{N}(0, \Sigma) \quad n \sim \mathcal{N}(n_0, F)$$

the solution is:

$$\hat{R}(\xi) = \hat{R}\xi + \hat{r} = FM^*(MFM^* + \Sigma)^{-1} (\xi - Mn_0) + n_0$$

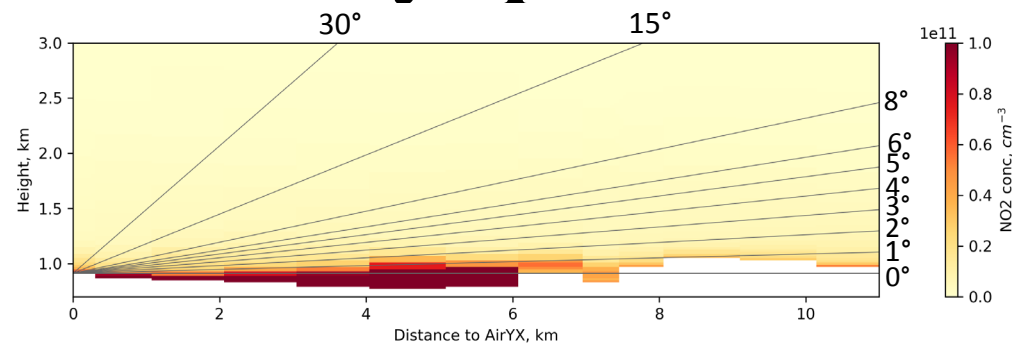
After discretization we obtain: $\xi = Mn + v$

ξ, Mn, v – vectors size of M

v – random noise of measurements

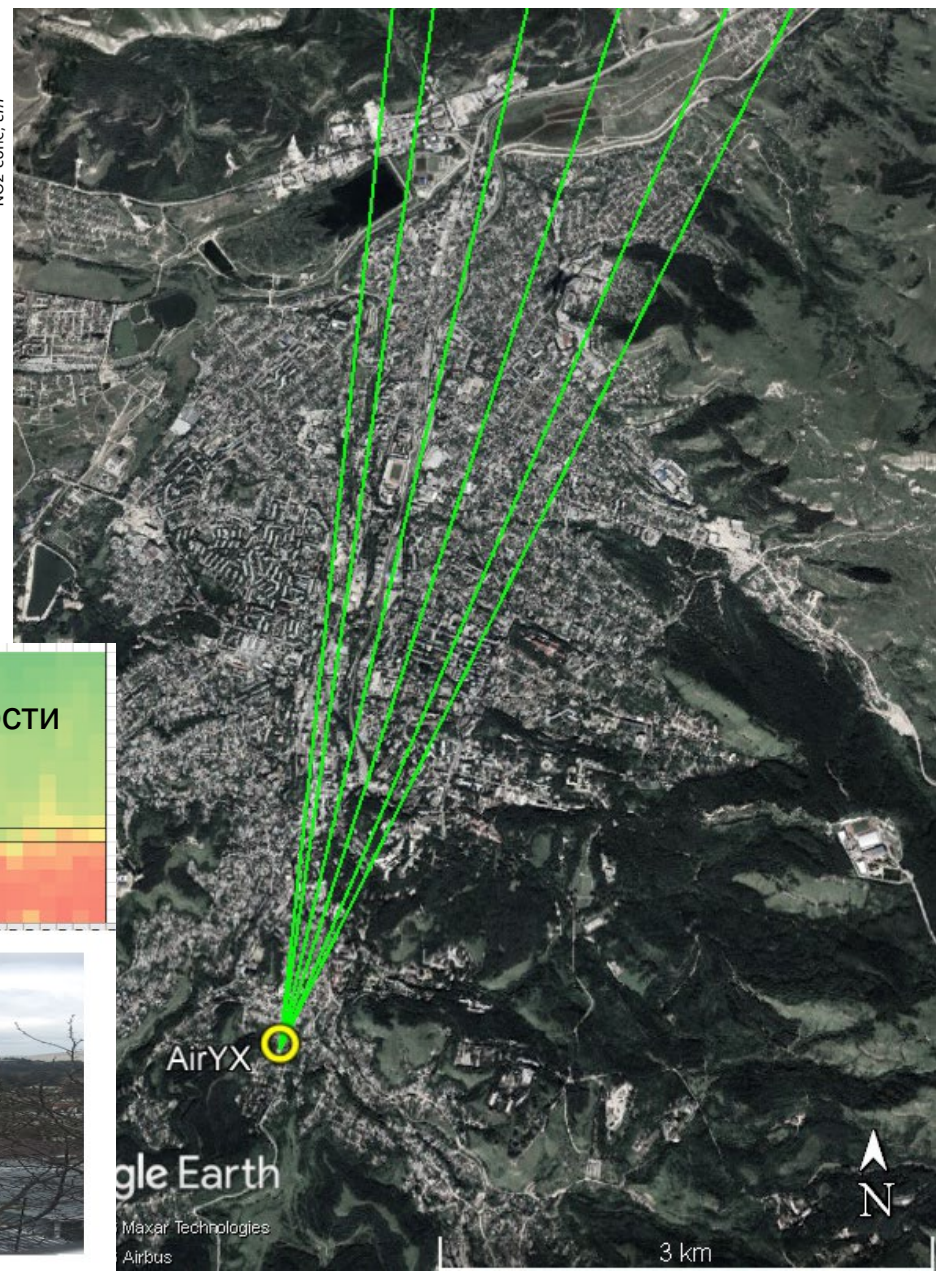
n – vector of concentration size of N

AirYX SkySpec MAX-DOAS at Kislovodsk

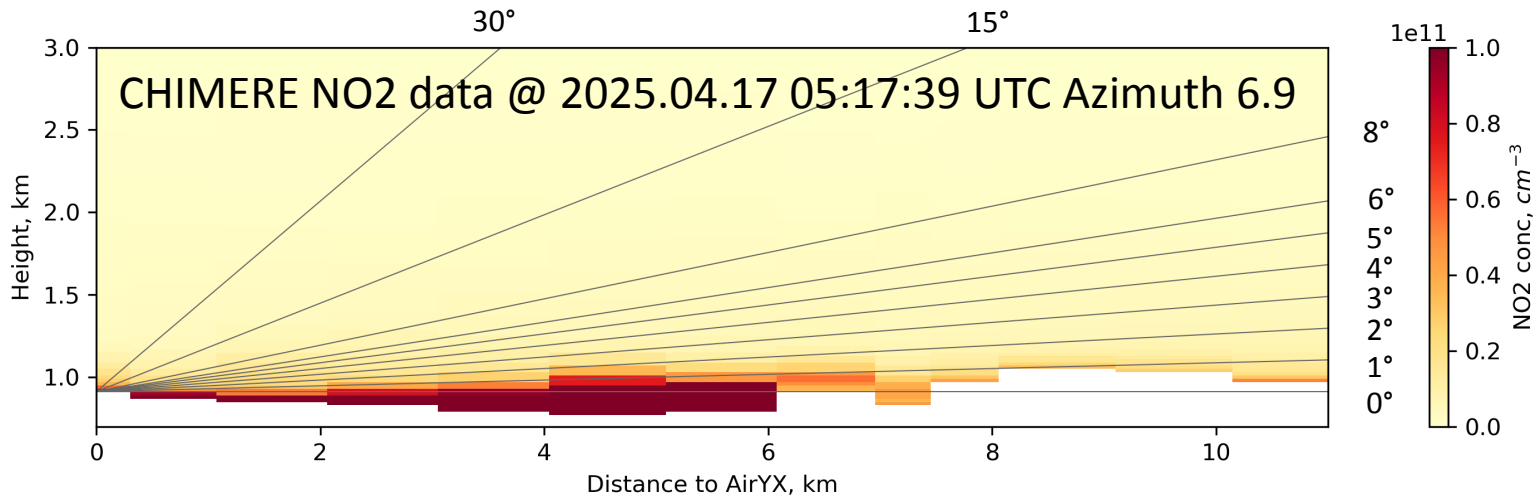


Измерения начаты в апреле 2022

Особенность прибора – наличие азимутального двигателя, который позволяет проводить измерения MAX-DOAS в произвольном направлении над городом.



AirYX SkySpec 2D MAX-DOAS measurements



Daily measurement routine starts before sunrise and ends after sunset

SAZ<80 – MAX-DOAS – vertical distribution and integral content in **troposphere**

80<SAZ<96 – zenith only - vertical distribution and integral content in **stratosphere**

Clear sky conditions – direct sun measurements – **total** column

11 elevation angles: 0°, 1°, 2°, 3°, 4°, 5°, 6°, 8°, 15°, 30°, 90°

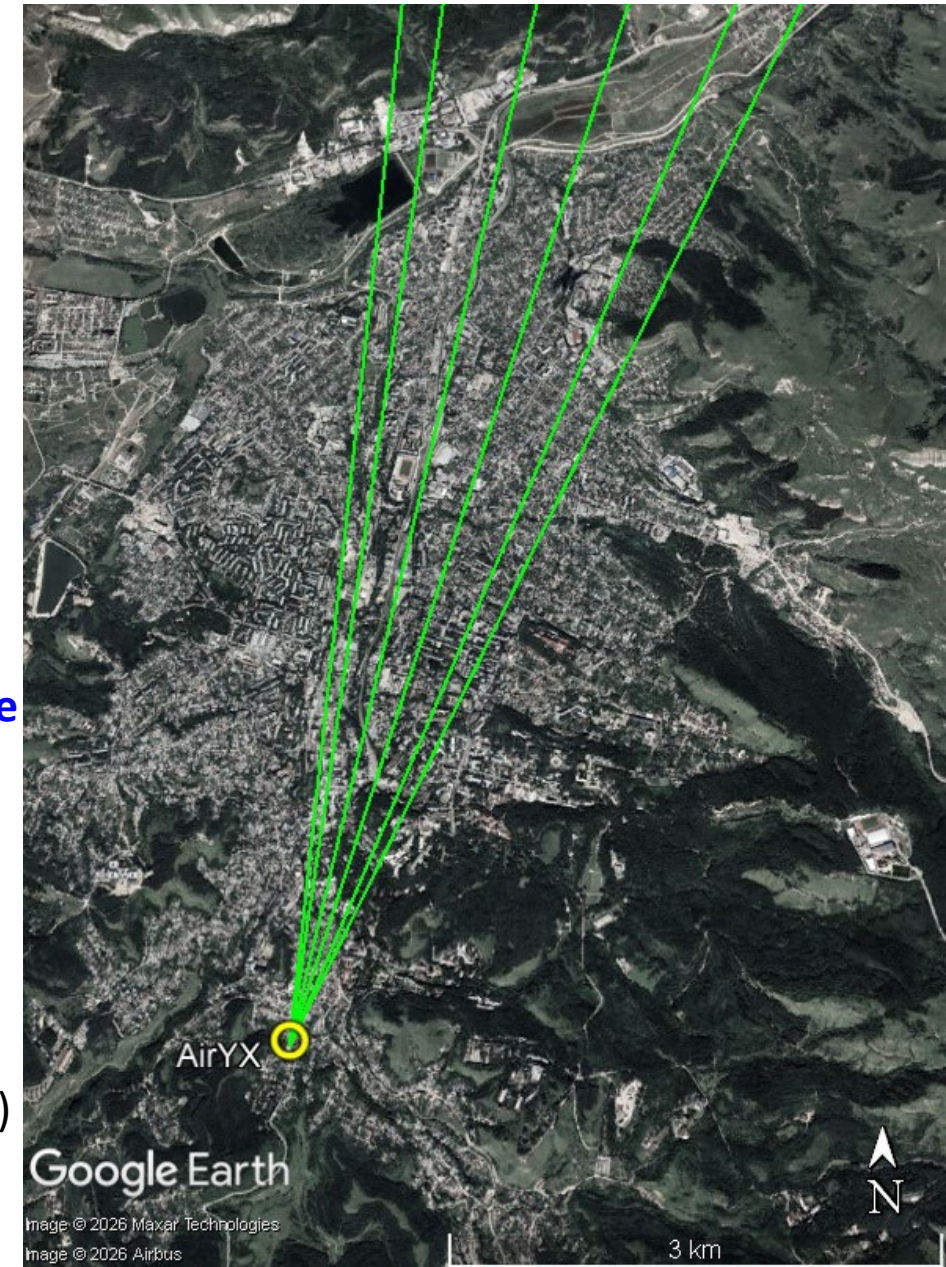
6 viewing direction: 4.4°, 6.9°, 12.3°, 17.4°, 23.1°, 26.3°

Single spectrum measurement time: 1 min

Single series time for each azimuth: 14 min (11 min MAX-DOAS + 3 min direct sun)

Total scan time: 84 min

SAZ – solar zenith angle

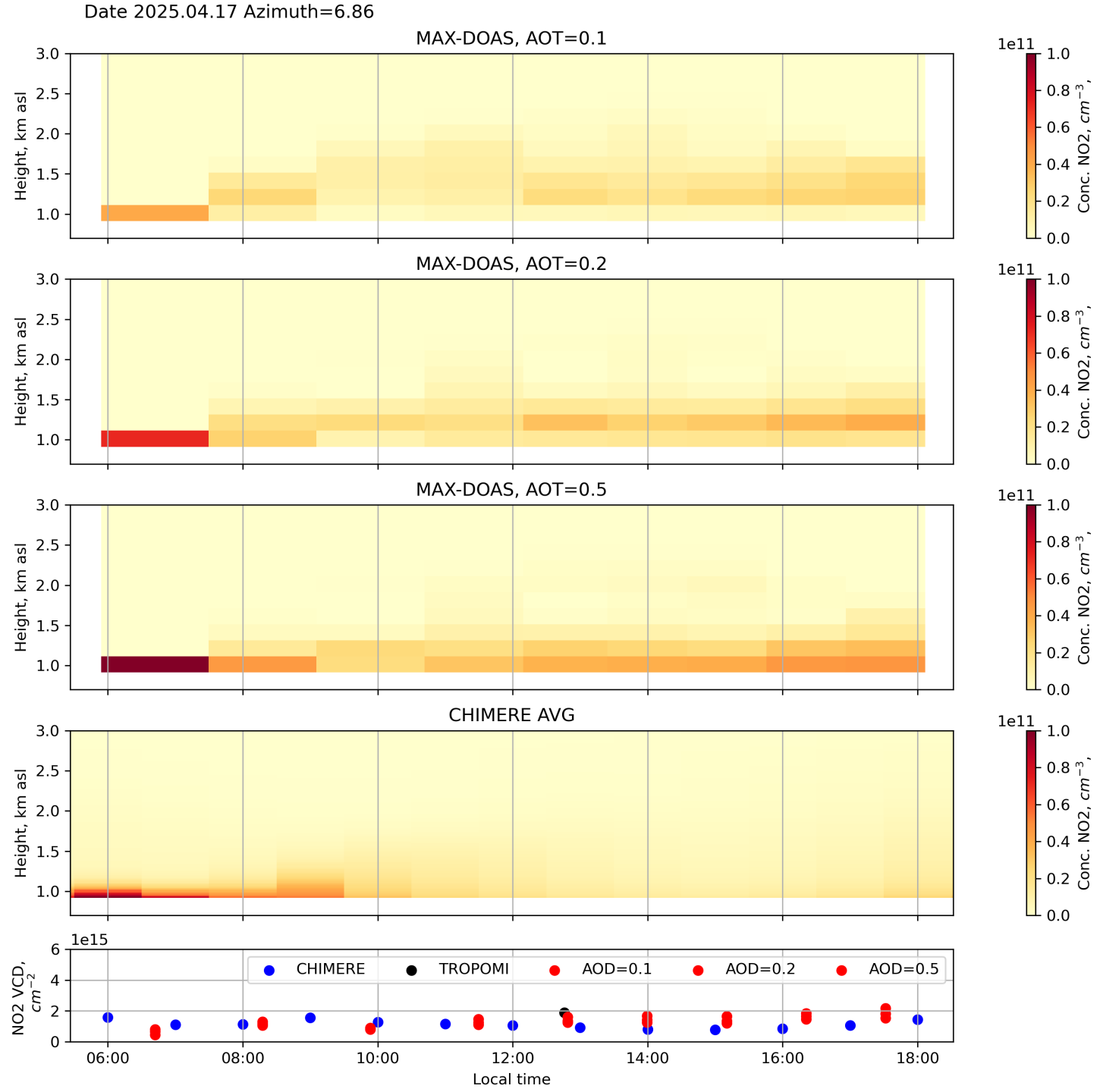
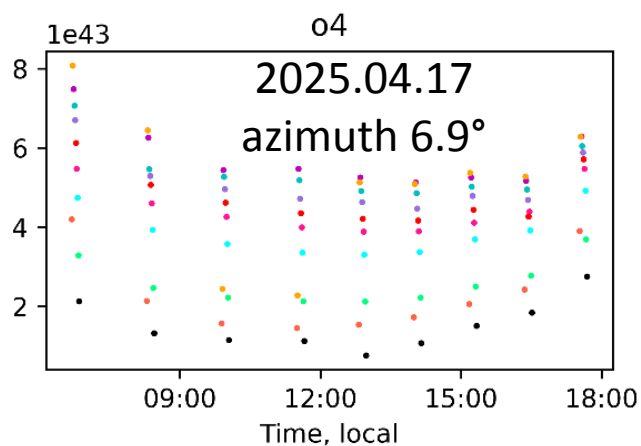


MAX-DOAS technique

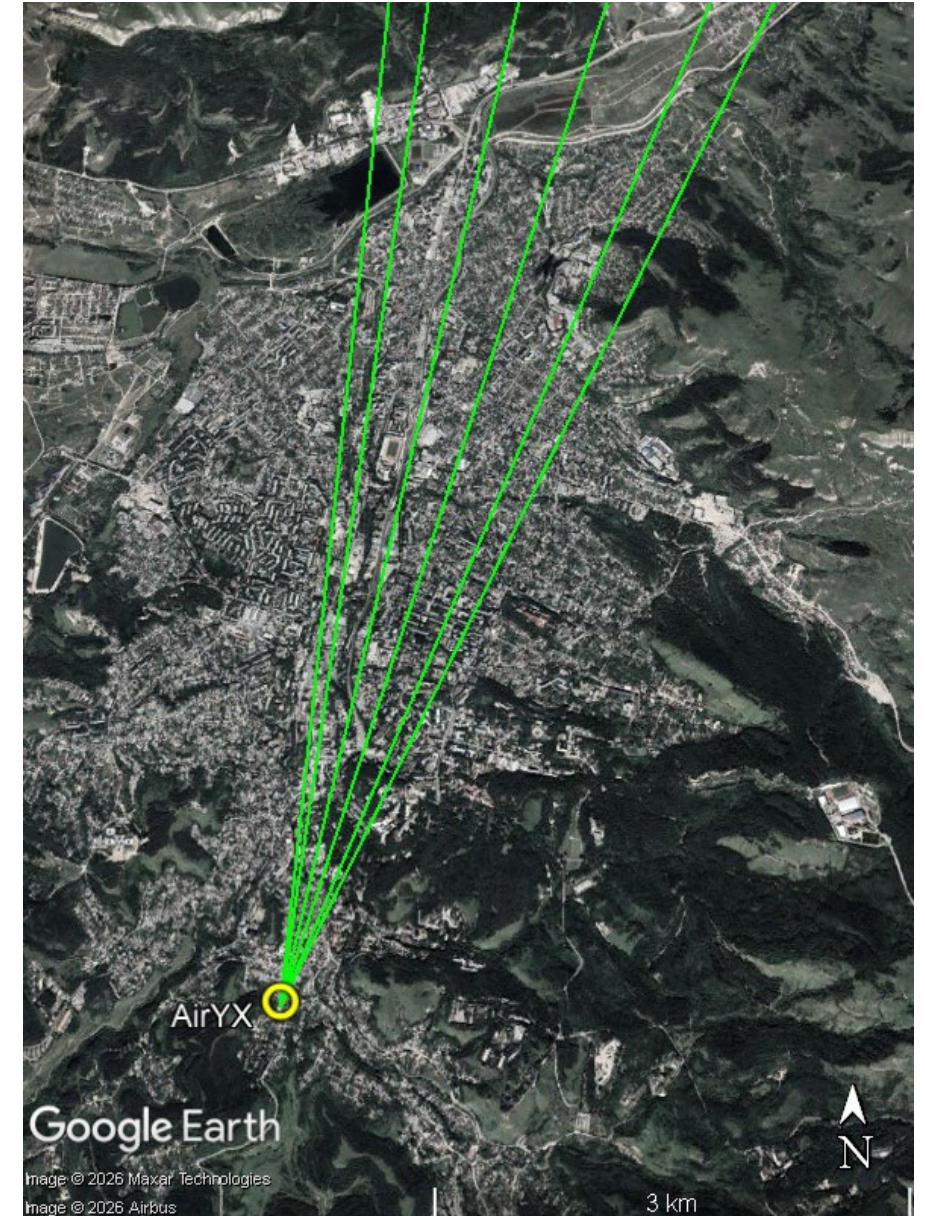
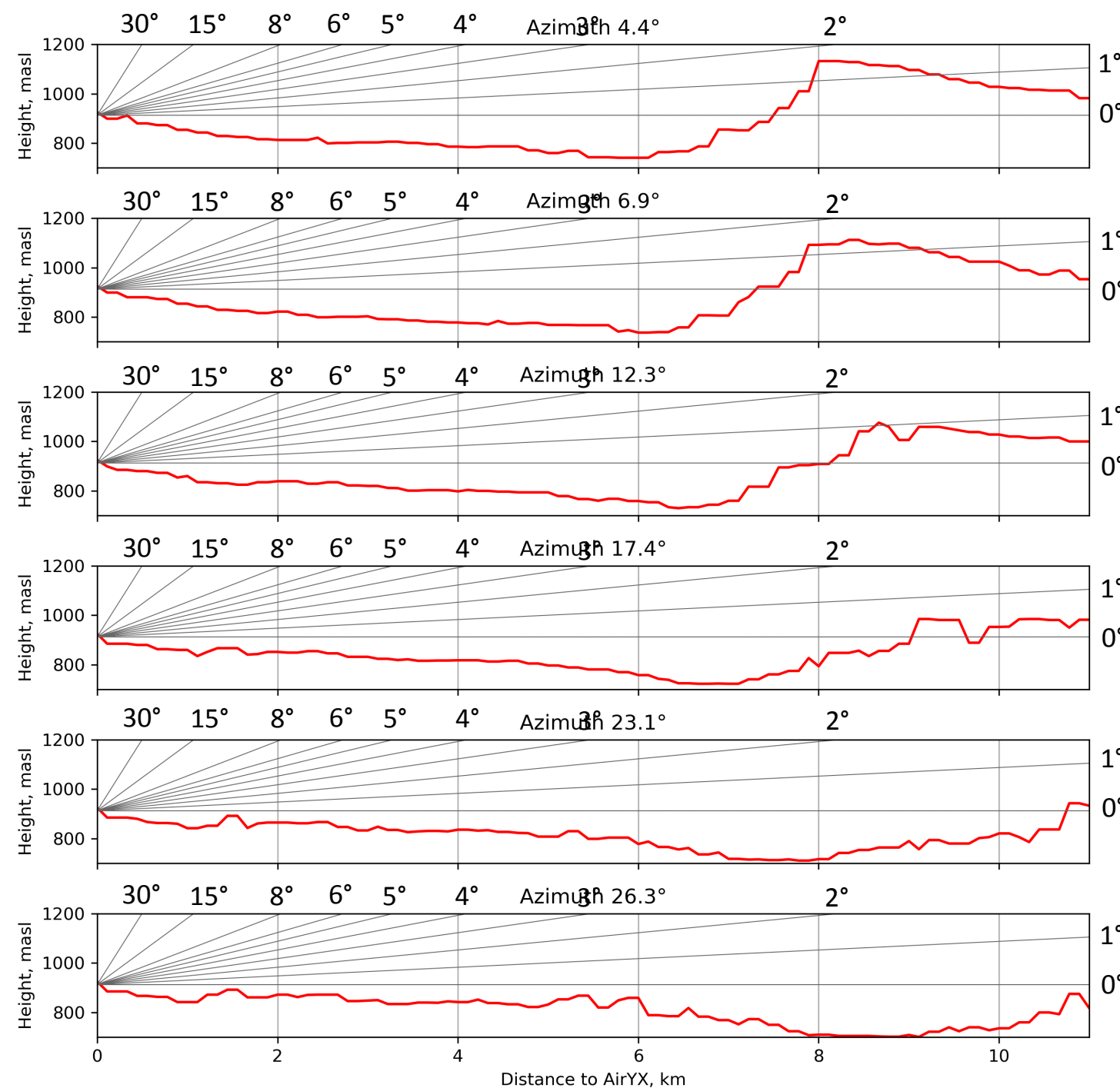
$$S_{NO2i} = \int \mathbf{a}_{i,AER}(h) n_{NO2}(h) dh$$

Layer air-mass factor $\mathbf{a}_{i,AER}(h)$ depends on albedo, geometry of observations, clouds, aerosols *etc.*

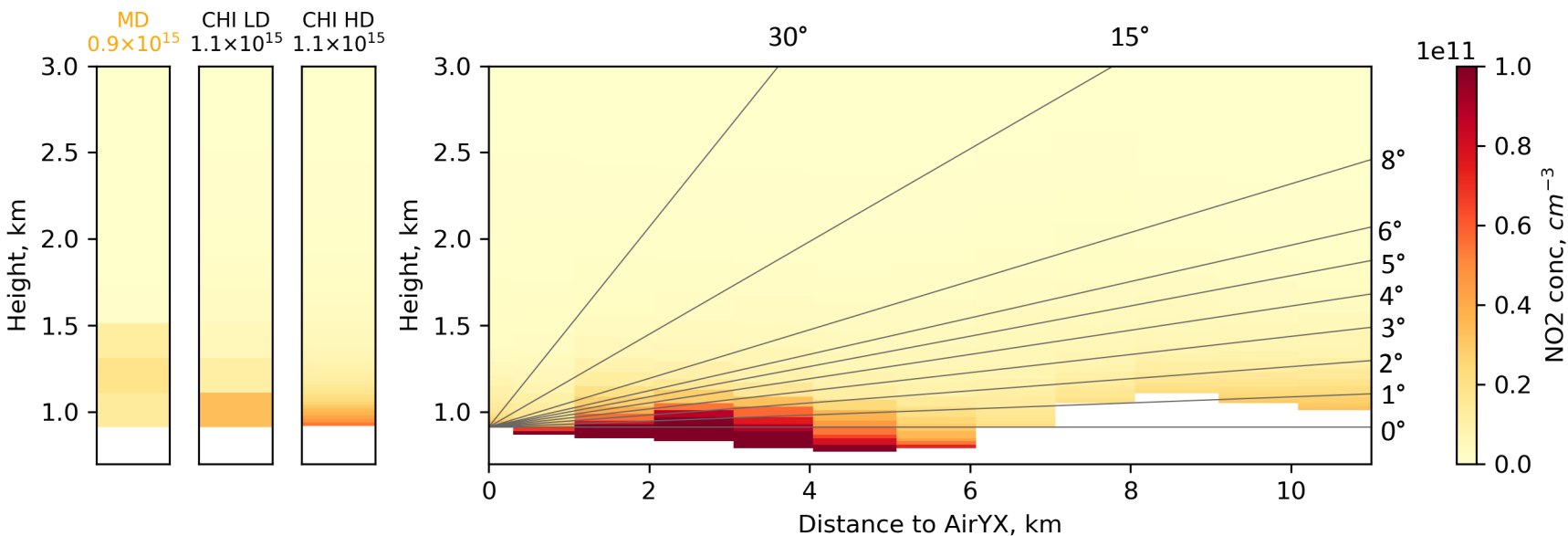
$$S_{O4i} = \int \mathbf{a}_{i,AER}(h) n_{O4}(h) dh$$



Terrain in viewing direction



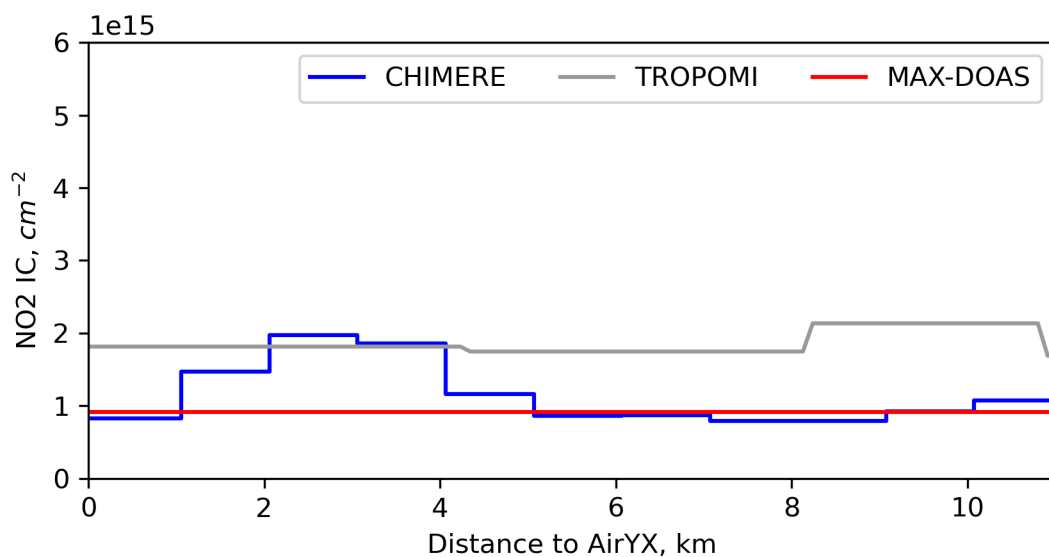
MAX-DOAS vs CHIMERE comparison approach



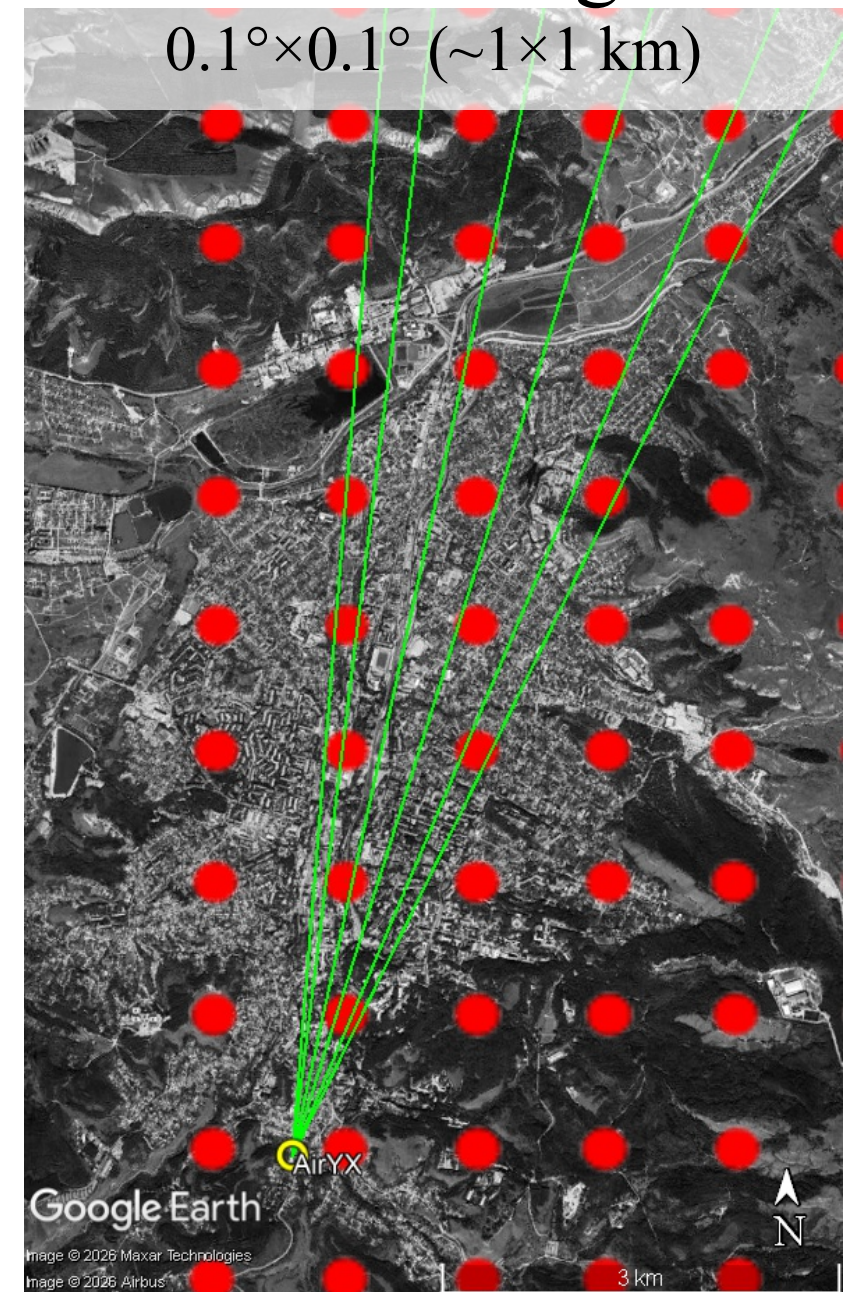
17.04.2025
Thursday 08:01:45

Azimuth 04.4

TROPOMI
mean tropo NO2
 1.9×10^{15} molec/cm²
at 12:45:49
SZA=62.449028

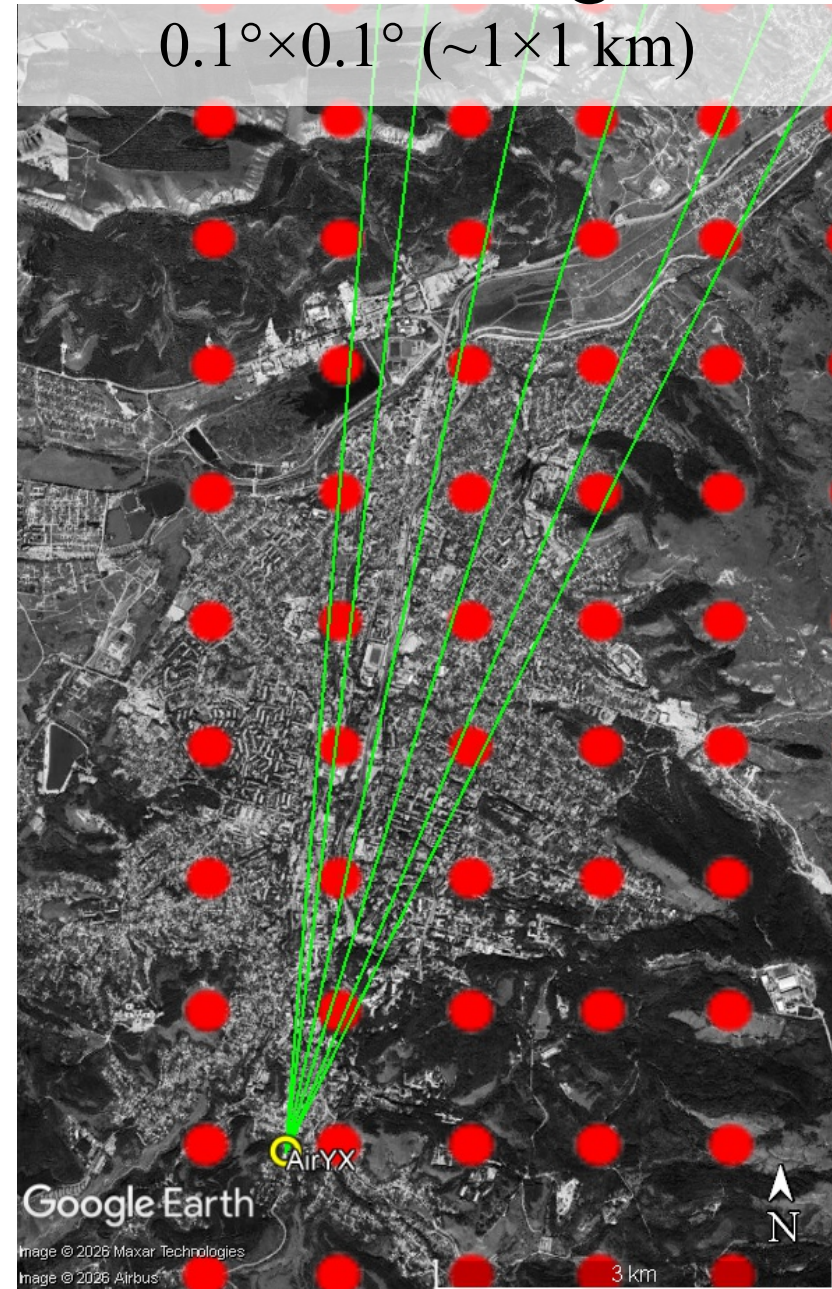


CHIMERE grid $0.1^\circ \times 0.1^\circ$ ($\sim 1 \times 1$ km)



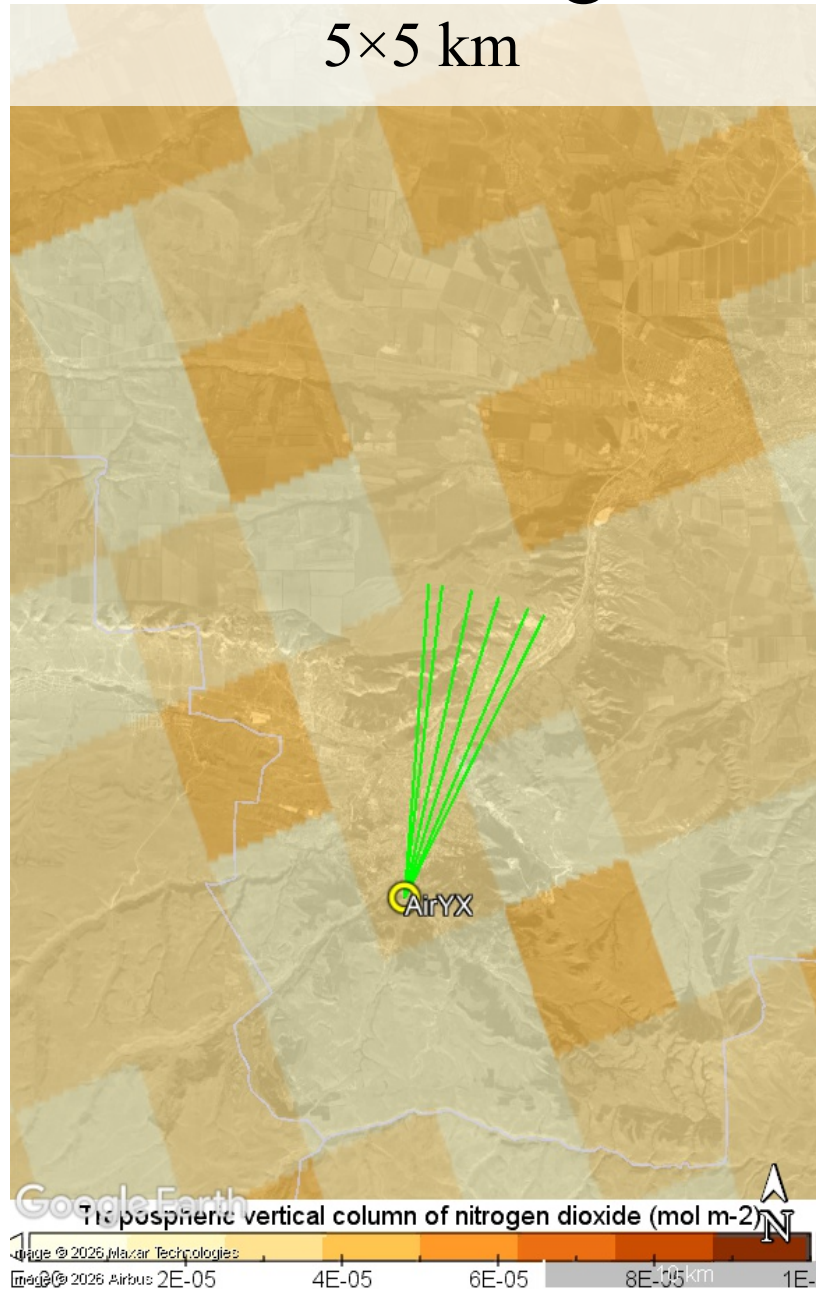
CHIMERE grid

$0.1^{\circ} \times 0.1^{\circ}$ ($\sim 1 \times 1$ km)



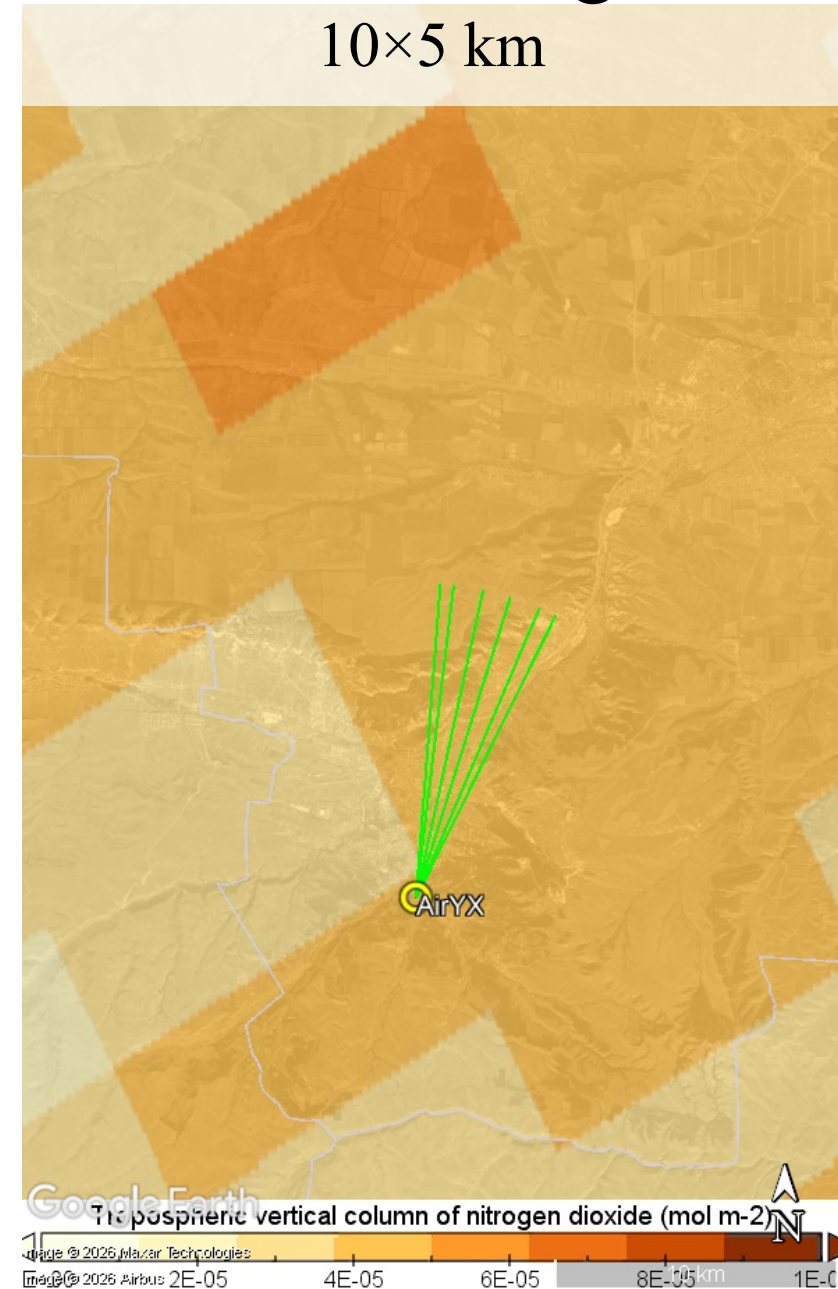
TROPOMI grid

5×5 km

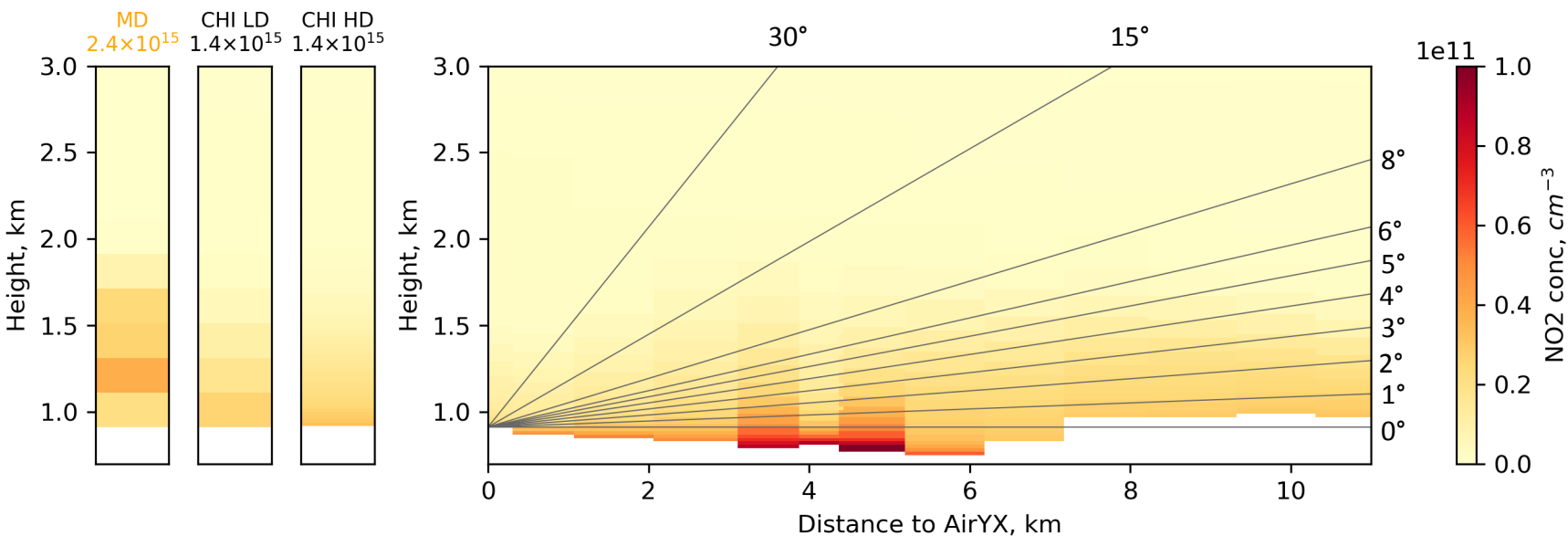


TROPOMI grid

10×5 km



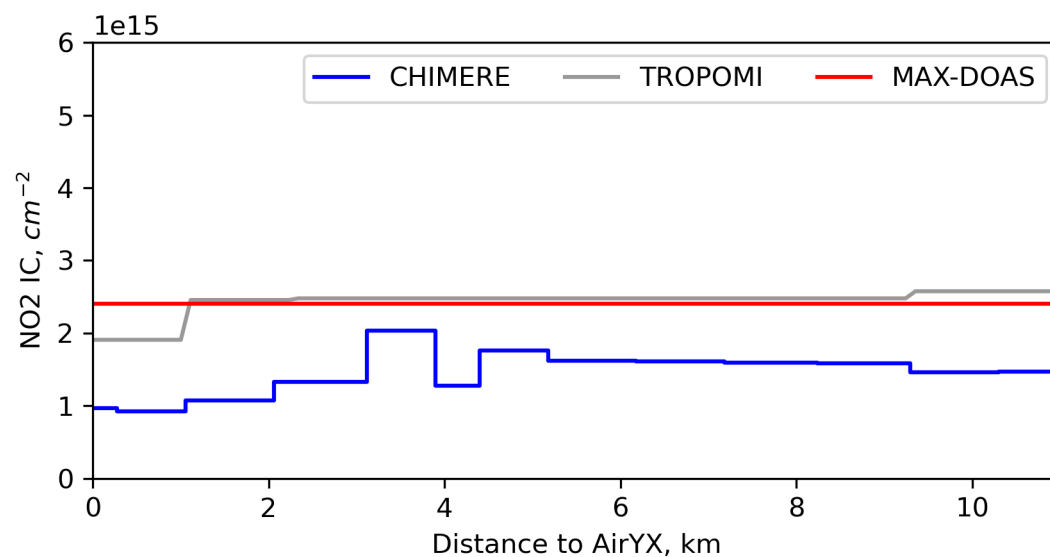
MAX-DOAS vs CHIMERE comparison approach



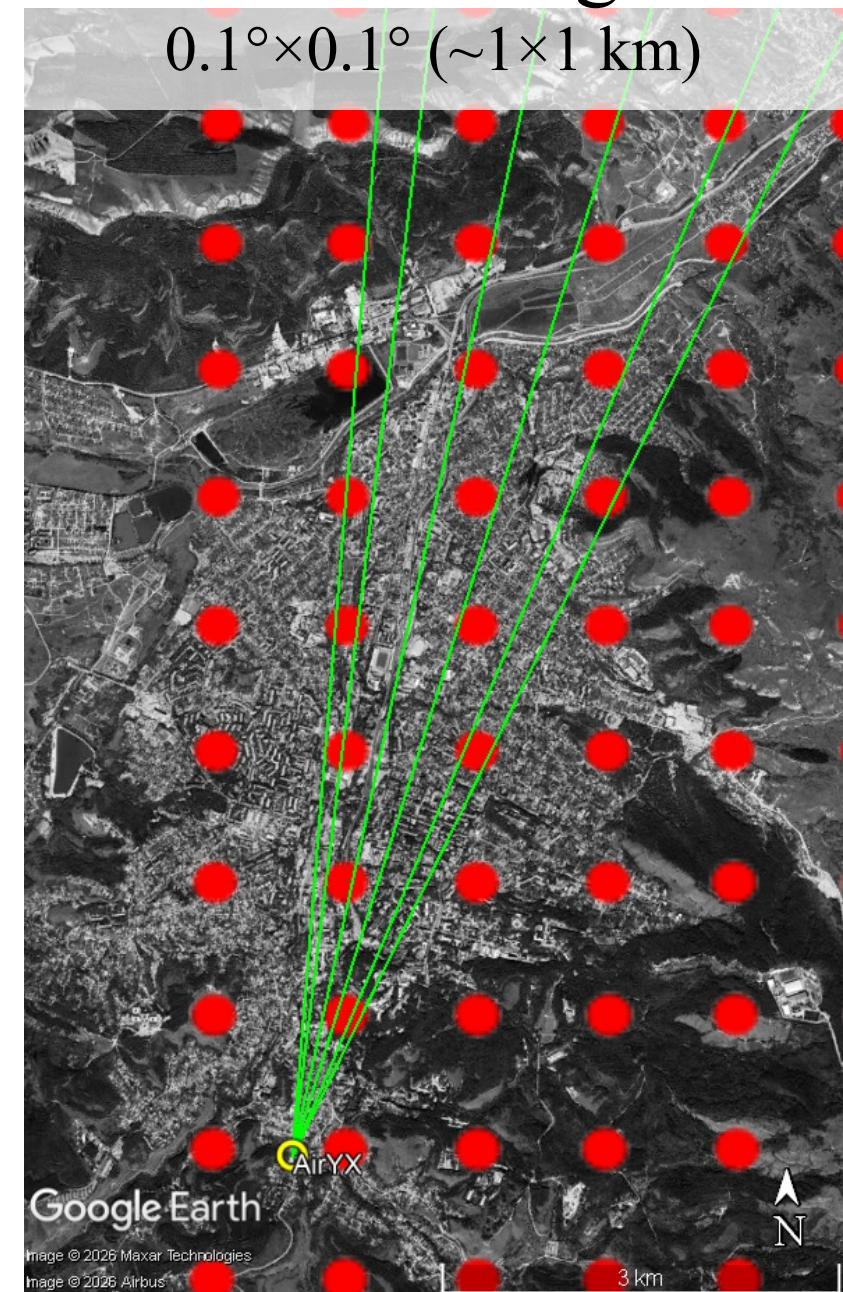
19.04.2025
Saturday 10:06:06

Azimuth 12.3

TROPOMI
mean tropo NO₂
2.4 × 10¹⁵ molec/cm²
at 12:08:44
SZA=41.888489

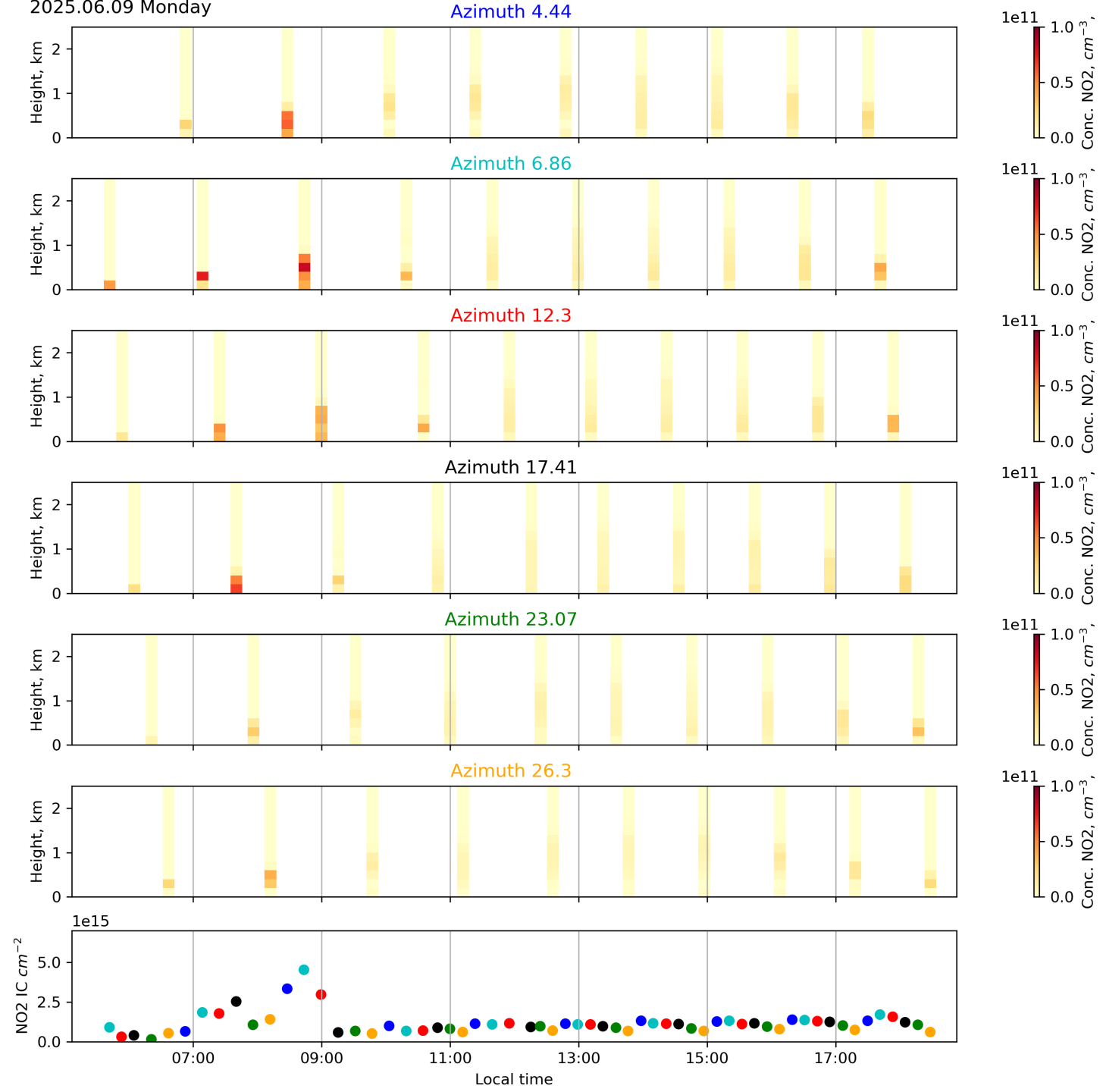
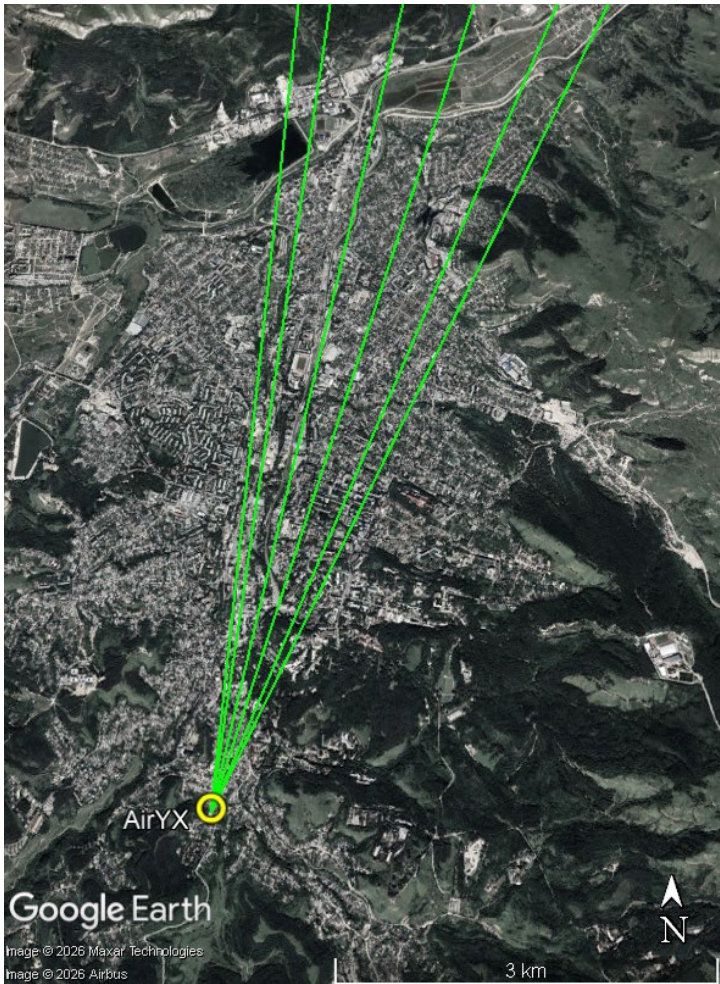


CHIMERE grid 0.1° × 0.1° (~1 × 1 km)



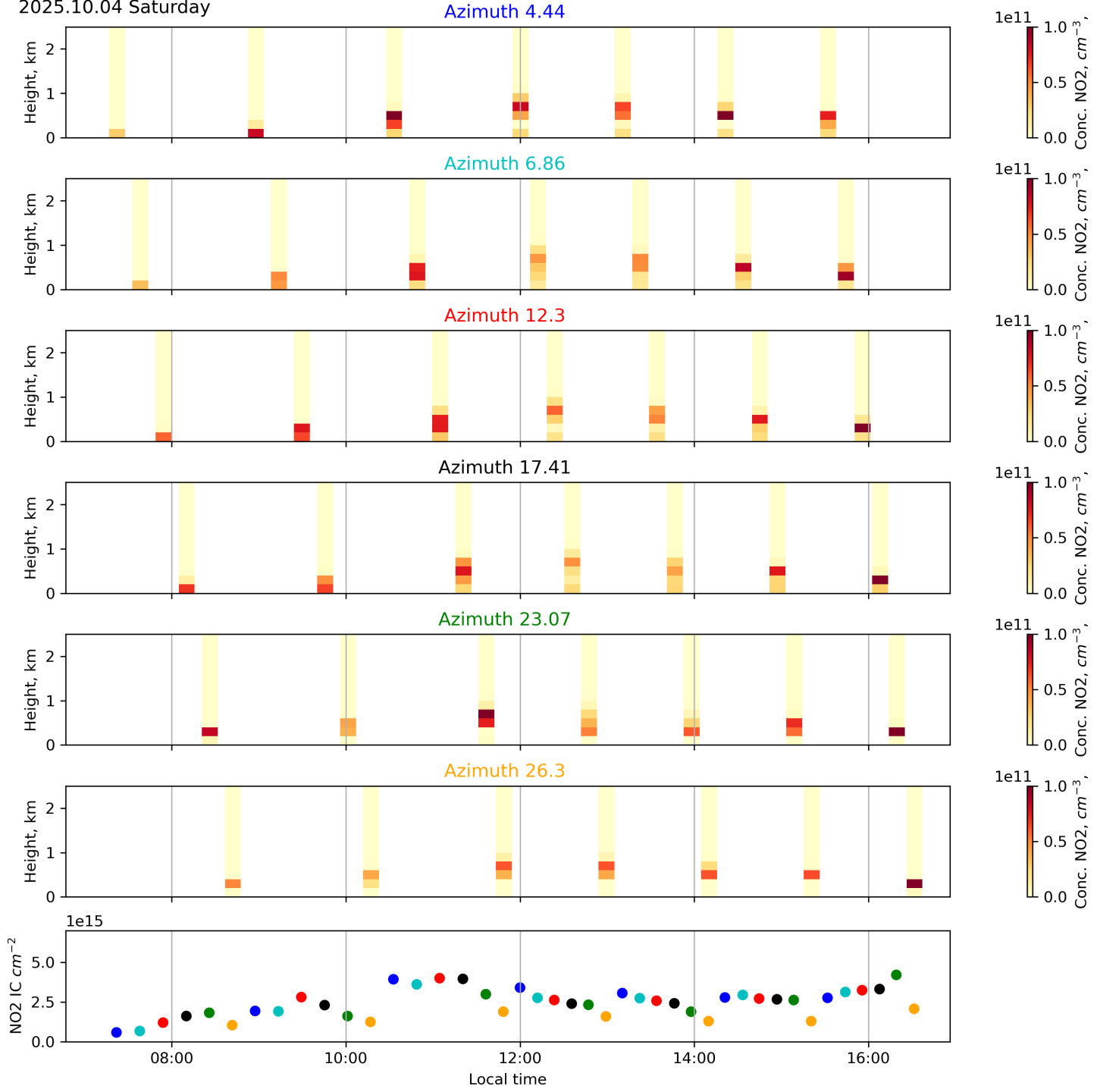
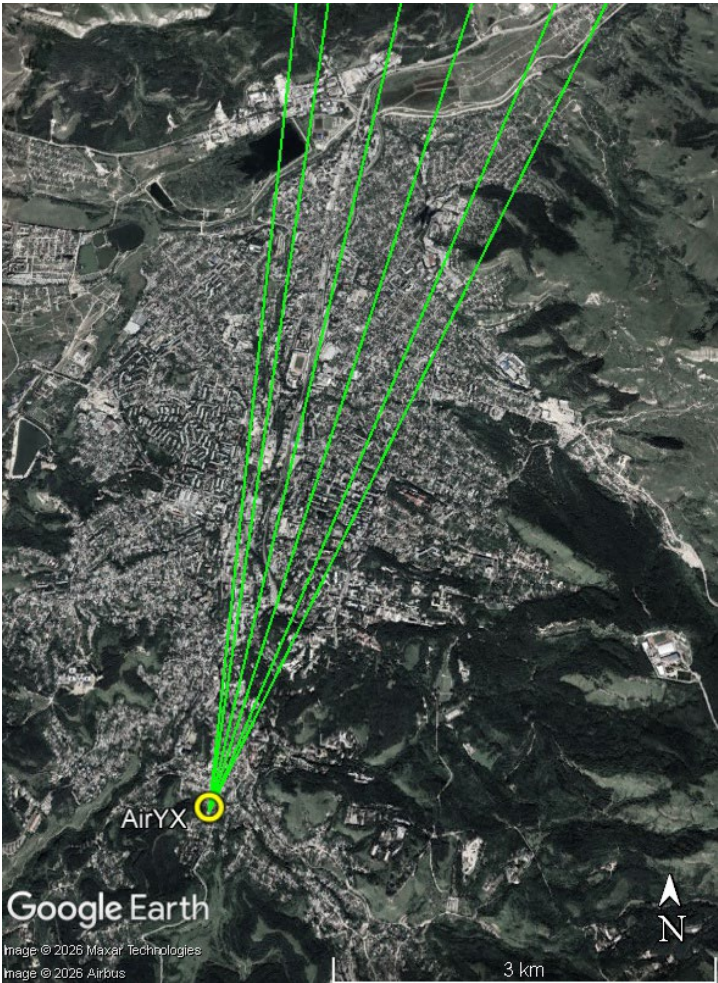
Daily variation of NO₂ vertical distribution

09.06.2025
Monday



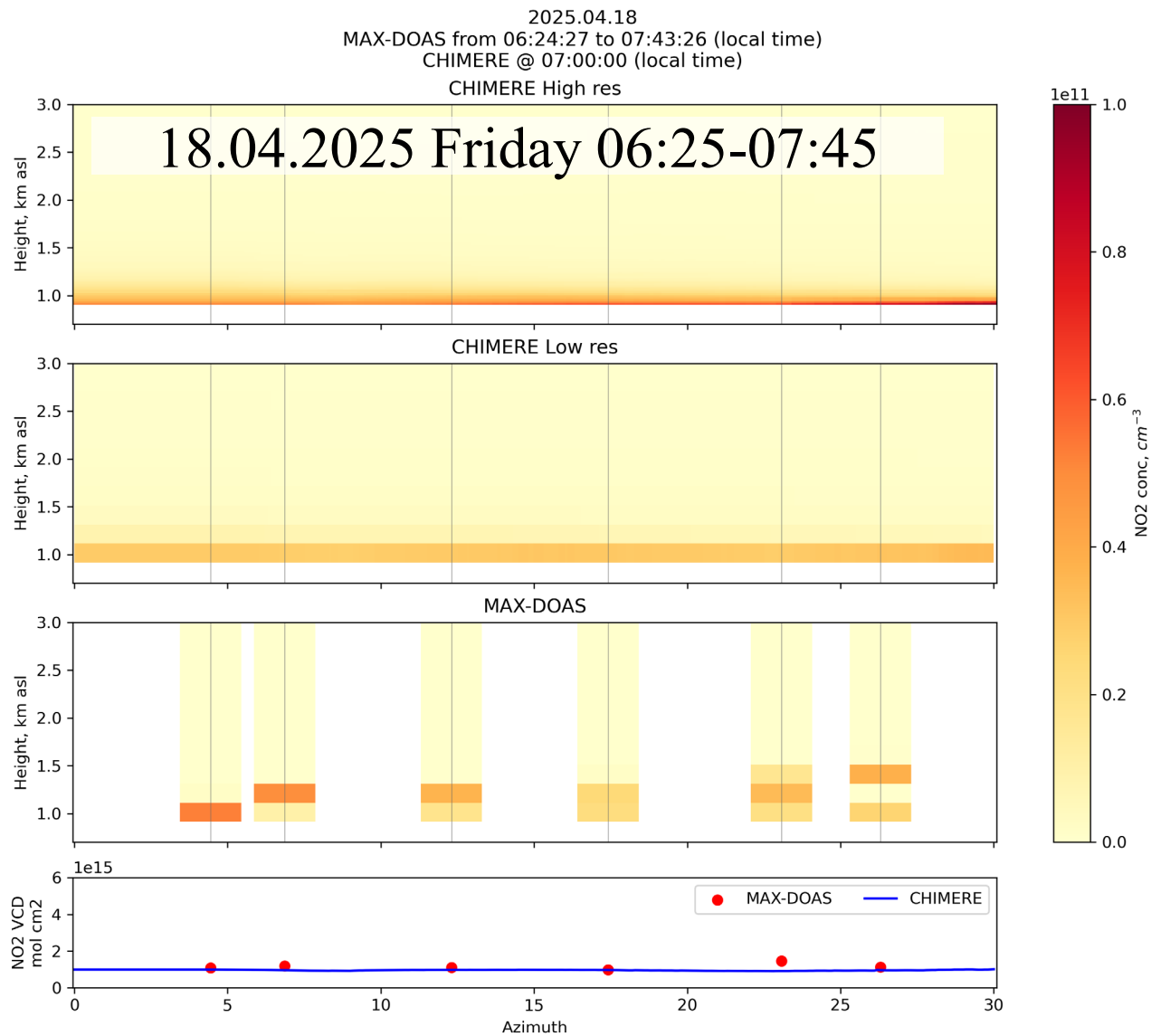
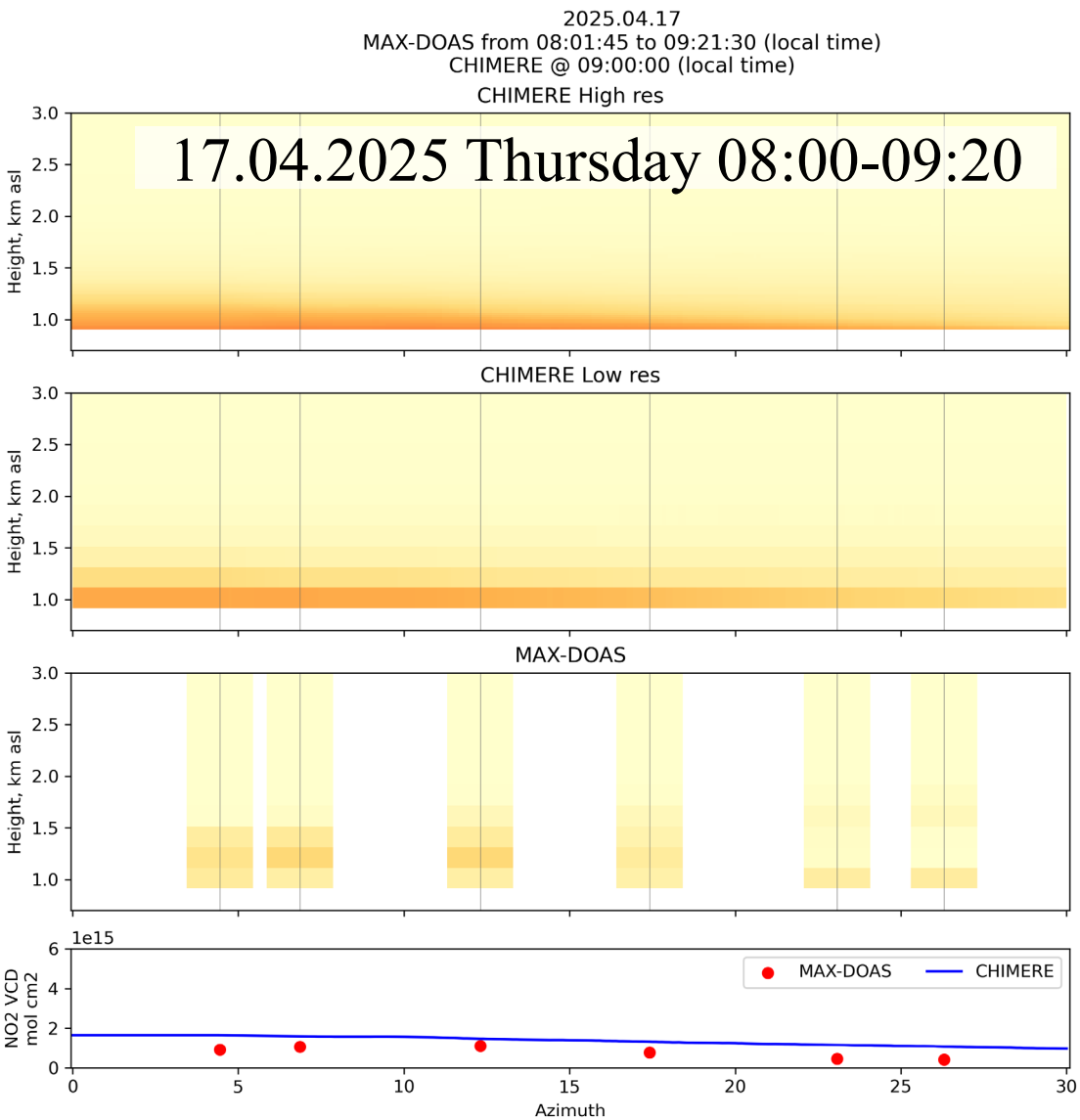
Daily variation of NO₂ vertical distribution

04.10.2025
Saturday



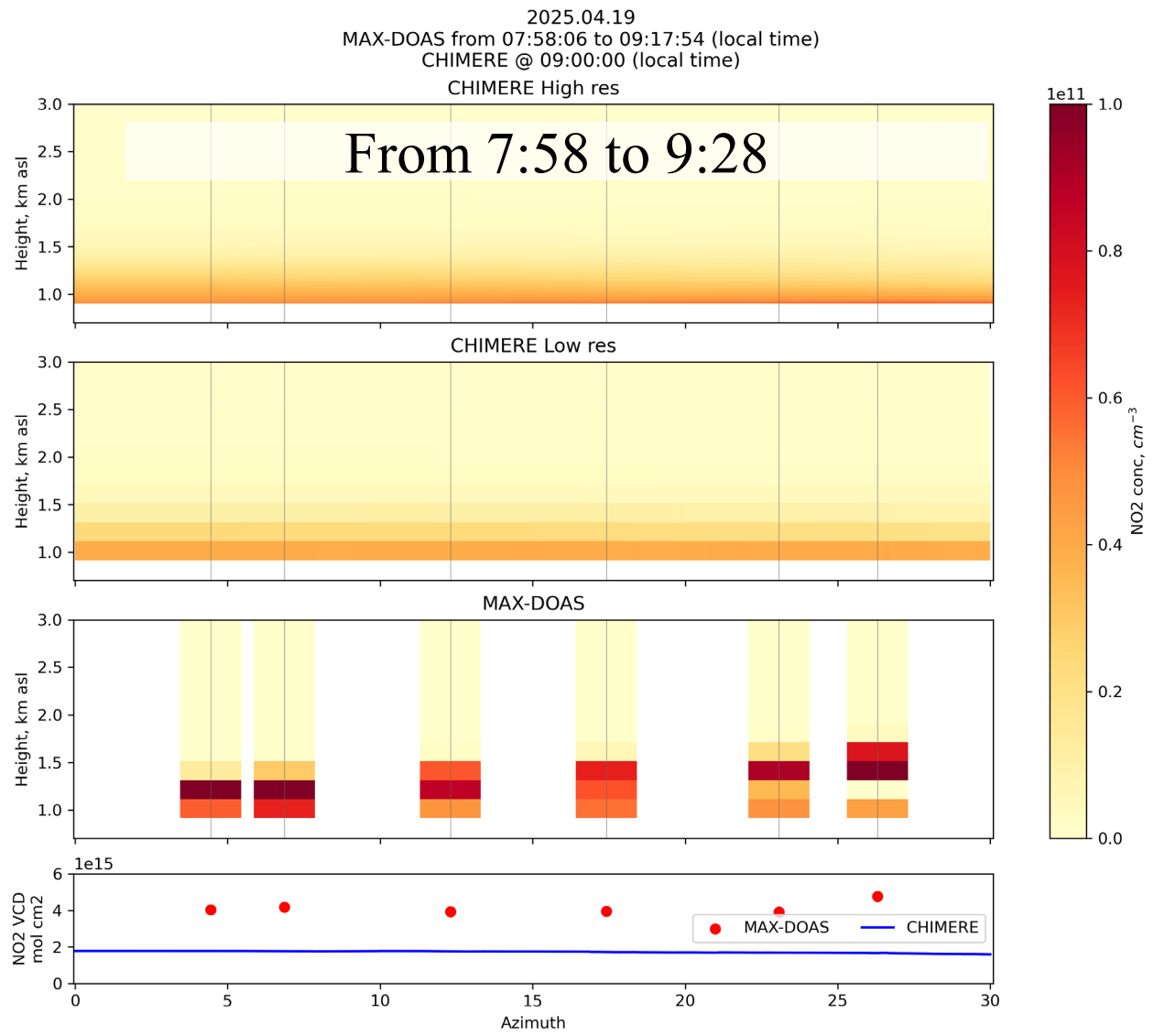
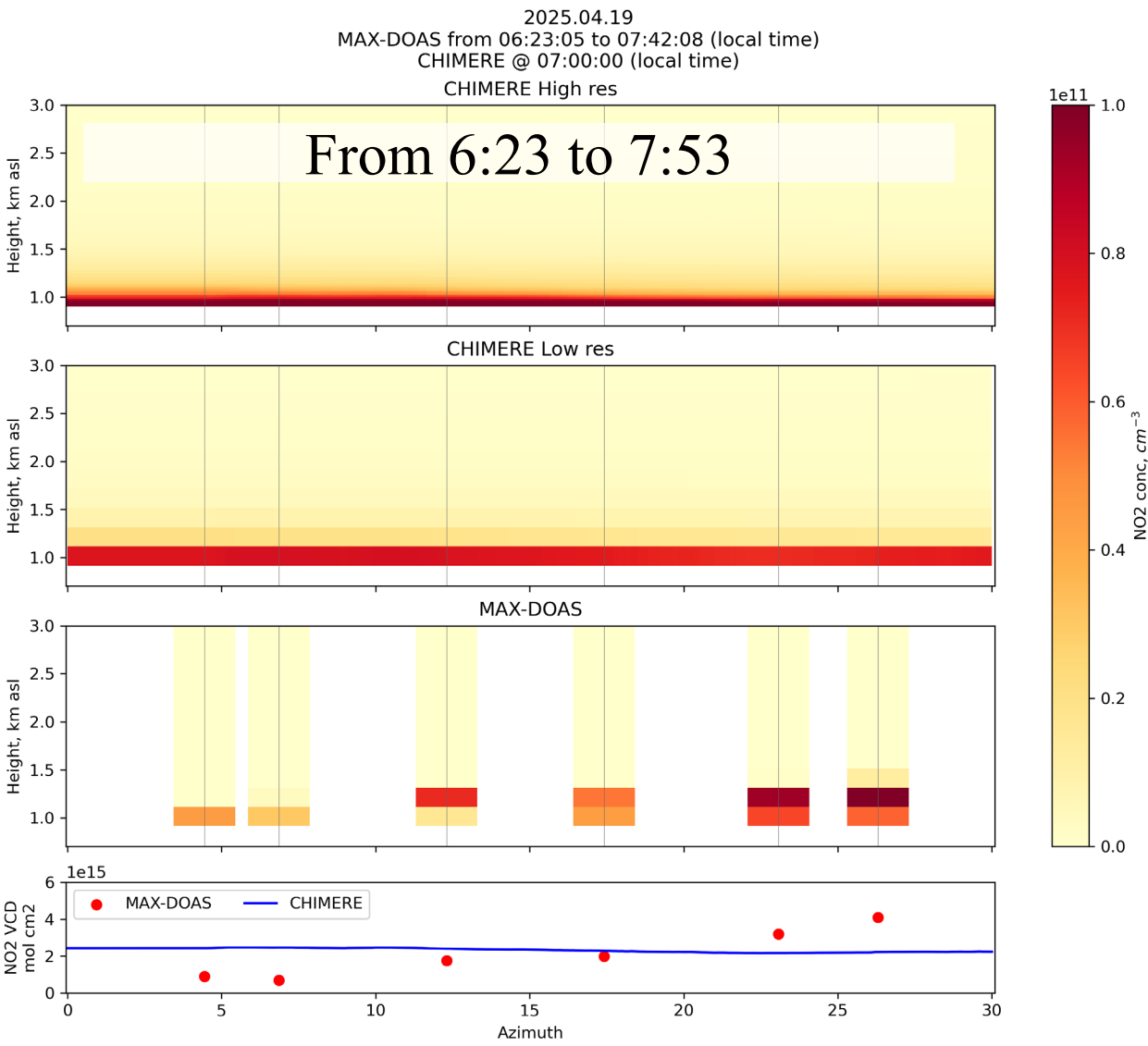
2D distribution of NO₂

MAX-DOAS vs CHIMERE



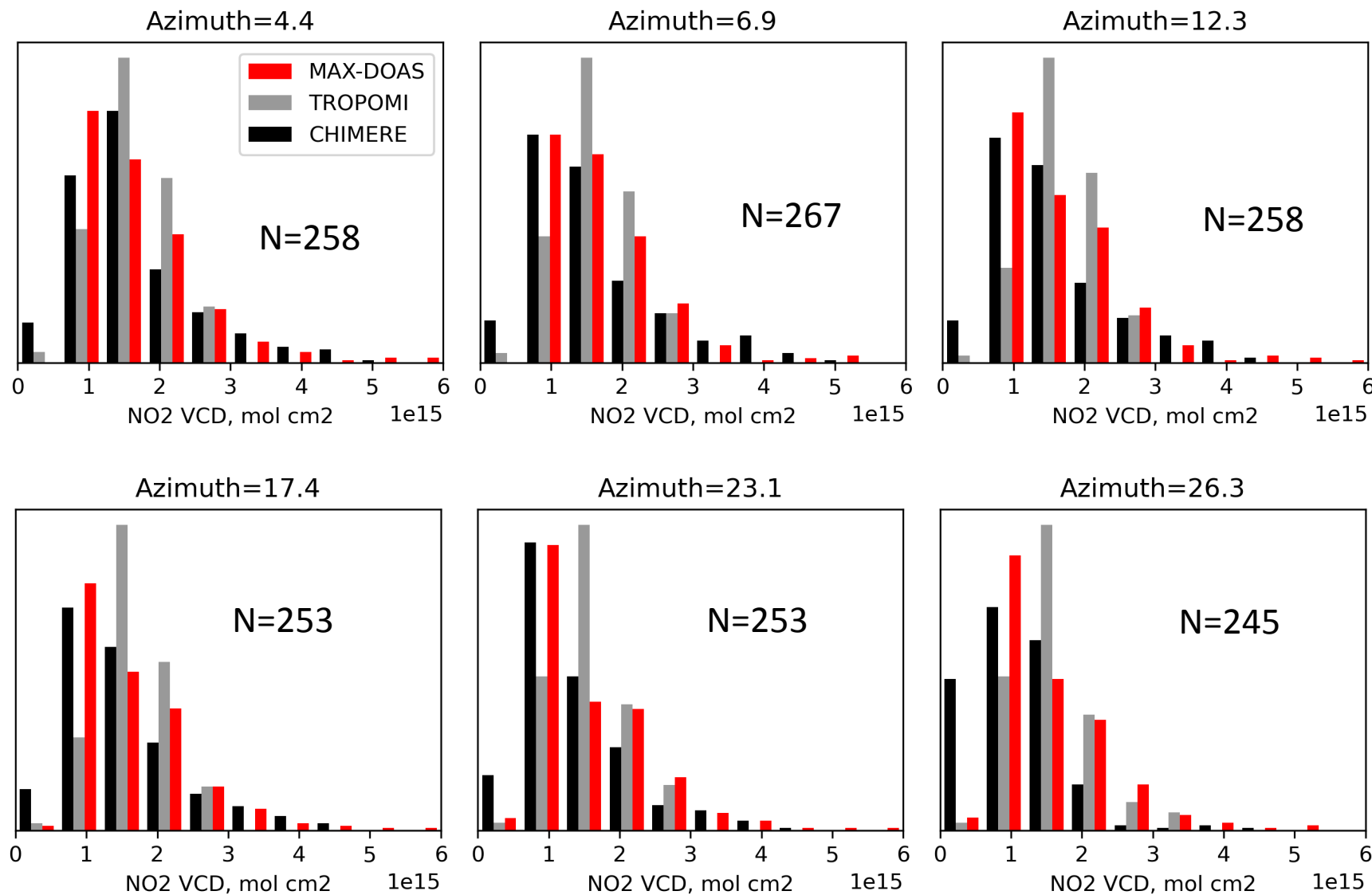
2D distribution of NO₂ : MAX-DOAS vs CHIMERE

19.04.2025
Saturday



Tropospheric NO₂ integral content

MAX-DOAS vs CHIMERE vs TROPOMI

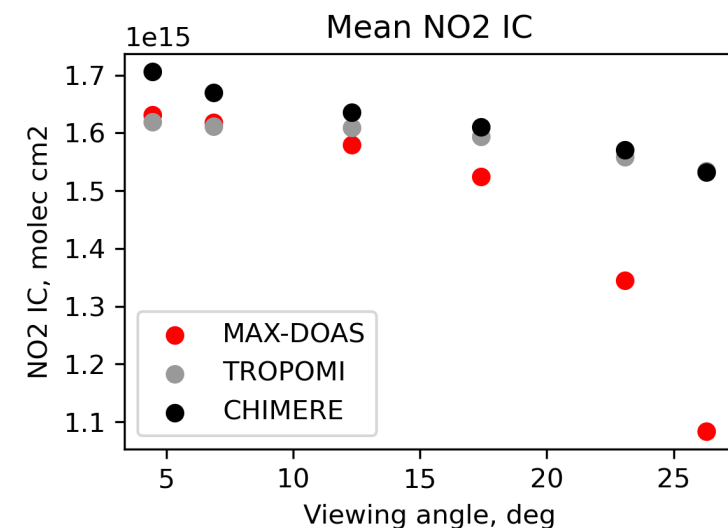


$$\text{var}_M = \text{var}_T > \text{var}_C$$

$$M = C < T$$

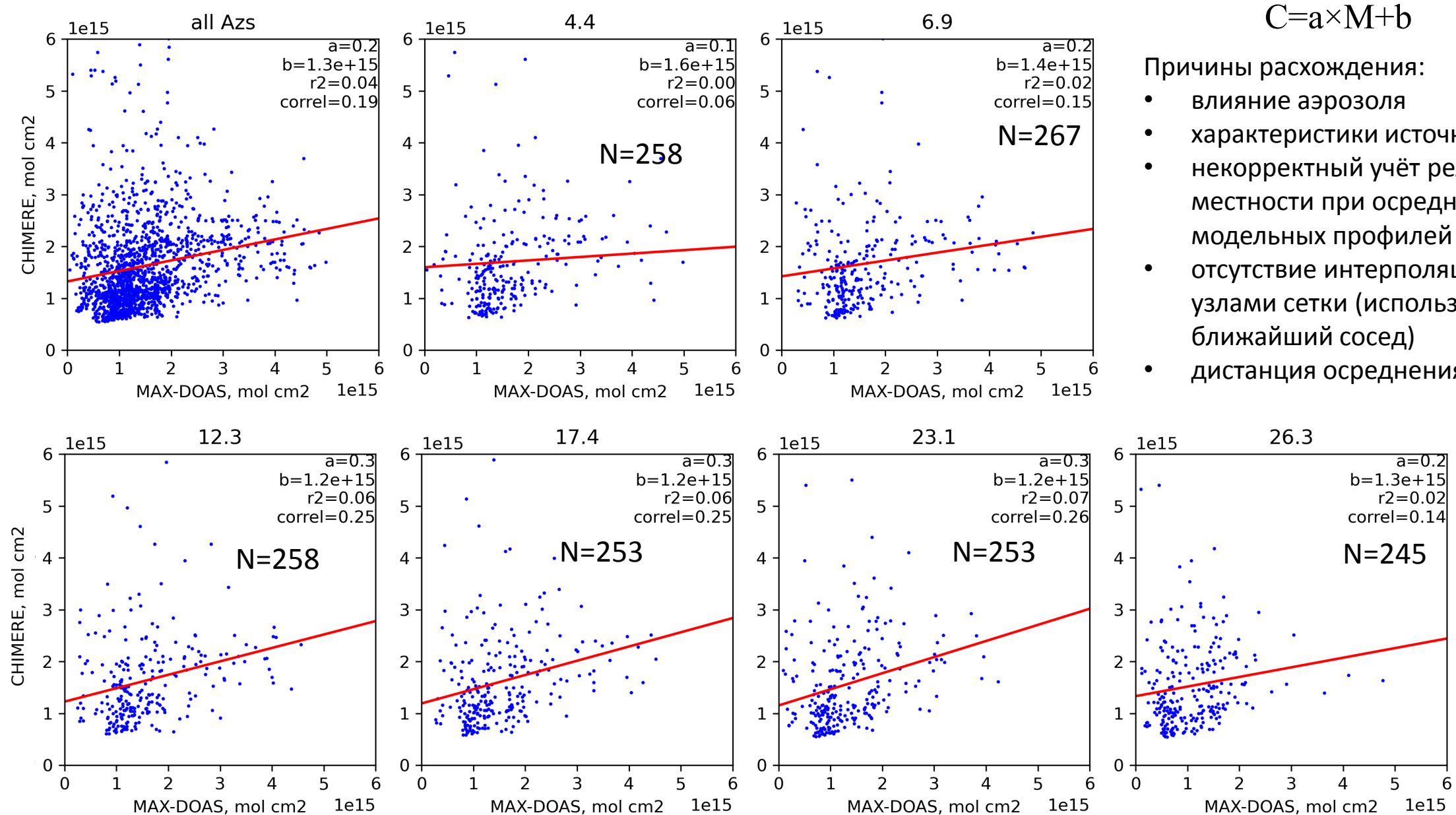
M, C, T – most likely values of MAX-DOAS, CHIMERE and TROPOMI NO₂ tropospheric integral content

var - variation



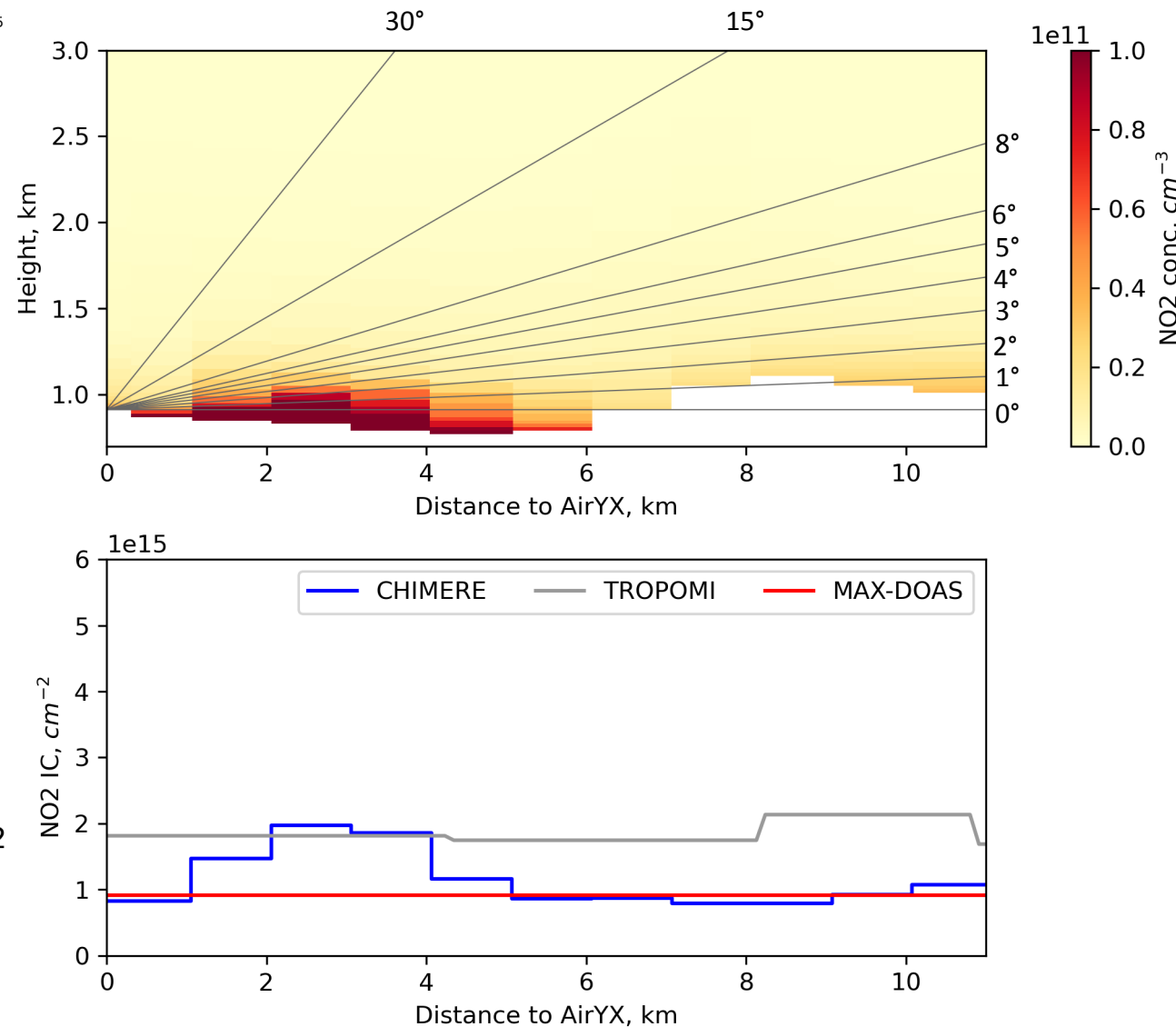
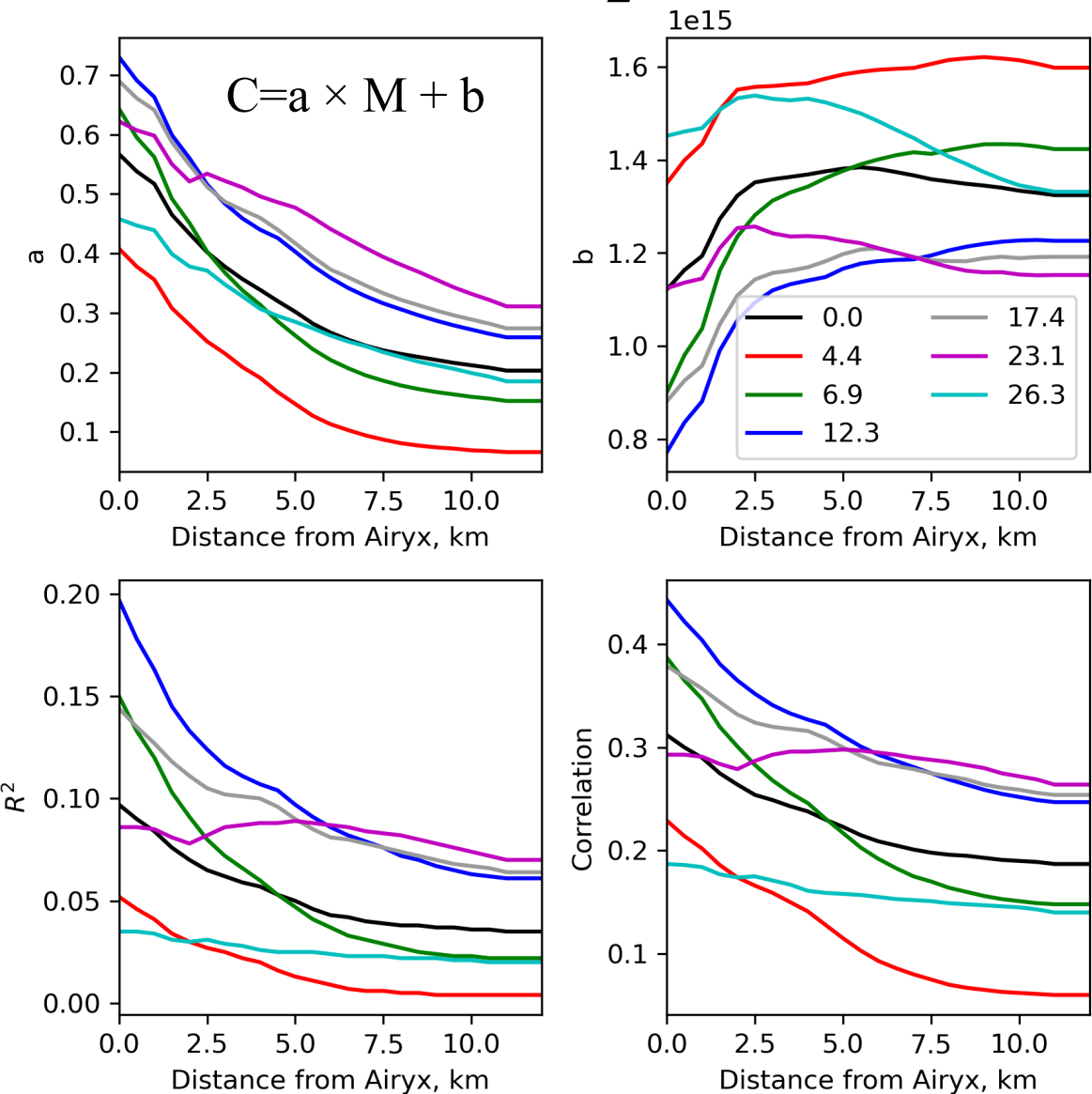
Tropospheric NO₂ integral content

MAX-DOAS vs CHIMERE



Tropospheric NO₂ integral content

MAX-DOAS vs CHIMERE



M: MAX-DOAS
C: CHIMERE

Другой подход к сопоставлению данных

Сопоставление содержания NO2 в наклонном столбе атмосферы S_{MEASi} и S_{SIMi}

Измеренное S_{MEASi} определяется из спектров, результат анализа DOAS:

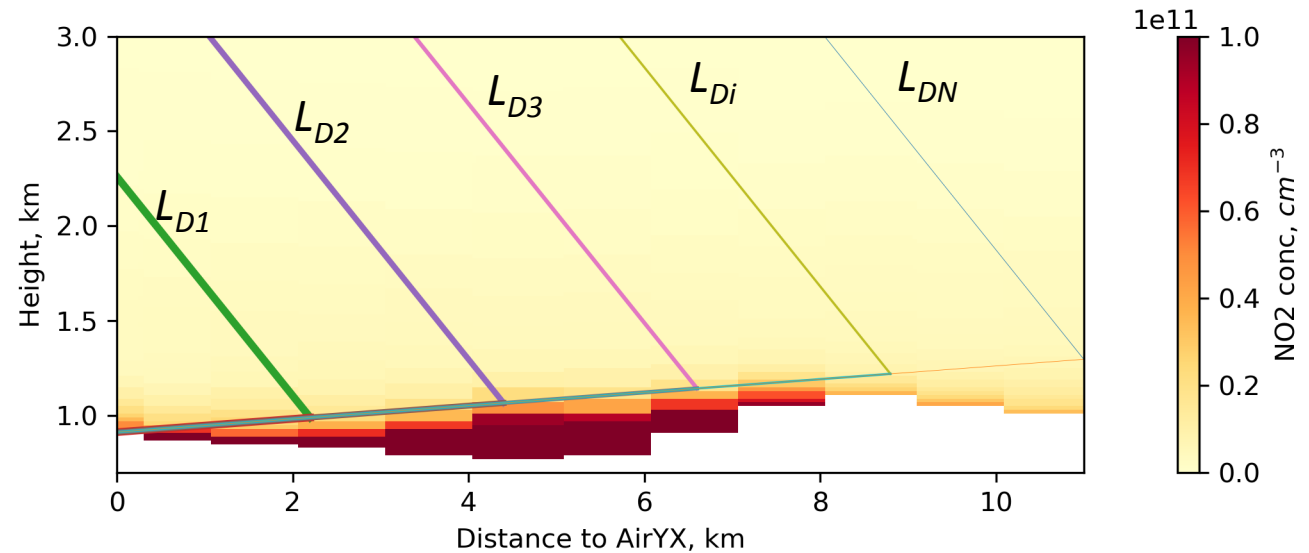
$$S_{MEASi}: \sum_k \left(\ln \left(\frac{I_0(\lambda_k)}{I(\lambda_k)} \right) - \sum_i \sigma_i(\lambda_k) \cdot S_{MEASi} \right)^2 \rightarrow \min$$

и при однородном поле NO2 интерпретируется как

$$S_{MEASi} = \int a(h)n(h) dh$$

Моделированное S_{SIMi} определяется как взвешенное среднее S по всем путям луча
В приближении однократного рассеяния:

$$S_{SIMi} = \sum_{Di} \left[w_{Di} \int_{L_{Di}} a_i(h_l) n_{SIM}(x_l, y_l, h_l) dl \right]$$



Заключение

Разработанная технология измерения вертикального распределения двуокси азота в нижней тропосфере применена к данным наблюдений в г. Кисловодске.

Разработана методология сопоставления данных измерений и моделирования

Данные наземных и спутниковых измерений и моделирования подготовлены для взаимного сопоставления

Первичное сопоставление данных моделирования и измерений показывает наличие общих паттернов в пространственно-временной изменчивости концентрации NO_2 , в том числе её высотного распределения. Для увеличения согласованности между данными измерений и моделирования необходимо вносить корректировки как в параметры моделирования, так и в технологию измерений, особенно в части учёта влияния оптических характеристик аэрозоля, а также эффективного расстояния от прибора до точки рассеяния (в приближении однократного рассеяния).

Спасибо за внимание!

