

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

На правах рукописи

Неробелов Георгий Максимович

ОЦЕНКИ АНТРОПОГЕННЫХ ЭМИССИЙ CO₂ МЕГАПОЛИСА
САНКТ-ПЕТЕРБУРГА НА ОСНОВЕ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Научная специальность 1.6.18. Науки об атмосфере и климате

Диссертация на соискание ученой степени кандидата
физико-математических наук

Научный руководитель:
доктор физ.-мат. наук, профессор
Тимофеев Юрий Михайлович

Санкт-Петербург

2023 г.

Оглавление

Введение.....	4
Глава 1. Парниковый газ CO₂ и методы его мониторинга в атмосфере.....	17
1.1 Изменение климата Земли - причины и современное состояние.....	17
1.2 Роль CO ₂ в климатических изменениях.....	20
1.3 Основные источники и стоки CO ₂	22
1.4 Современные методы мониторинга пространственно-временных вариаций содержания CO ₂ в атмосфере.....	23
1.5 Современные методики определения эмиссий CO ₂ , их преимущества и недостатки.....	32
Глава 2. Оценка антропогенных эмиссий CO₂ Санкт-Петербурга с помощью боксовой модели.....	35
2.1 Задача экспериментального определения эмиссий CO ₂ , как последовательность решения обратных задач атмосферной оптики и атмосферного переноса.....	35
2.2 Концепция балансового подхода для оценки антропогенных эмиссий CO ₂	39
2.3 Данные и методы.....	40
2.3.1 Дифференциальный спектроскопический метод определения антропогенных эмиссий CO ₂	40
2.3.2 Измерения ОС CO ₂ в рамках кампании ЕММЕ.....	42
2.3.3 Боксовая модель атмосферного переноса.....	44
2.4 Анализ неопределенностей оценки эмиссий CO ₂ с помощью ДС метода.....	49
2.5 Оценка территории Санкт-Петербурга, покрытой измерениями ЕММЕ.....	52
2.6 Определение антропогенных эмиссий CO ₂ дифференциальным спектроскопическим методом.....	58
2.6.1 Моделирование антропогенного вклада Санкт-Петербурга в ОС CO ₂ с помощью боксовой модели.....	59
2.6.2 Оценки суммарных антропогенных эмиссий CO ₂ Санкт-Петербурга.....	61
2.7 Основные результаты и выводы.....	62
Глава 3. Валидация WRF-Chem моделирования CO₂ в Санкт-Петербурге с помощью локальных и дистанционных измерений.....	64
3.1 Трехмерное моделирование переноса CO ₂ в атмосфере.....	64
3.2 Измерение содержания CO ₂ и состояния атмосферы.....	66
3.2.1 Метеорологические параметры.....	67
3.2.2 Приземное отношение смеси CO ₂	69
3.2.3 Среднее отношение смеси CO ₂ в атмосфере (XCO ₂).....	70

3.3 Модель WRF-Chem.....	70
3.3.1 Описание численного эксперимента WRF-Chem.....	71
3.3.2 Адаптация модели WRF-Chem к условиям Санкт-Петербурга.....	78
3.4 Валидация результатов моделирования WRF-Chem.....	82
3.4.1 Сравнения результатов моделирования с данными измерений.....	82
3.4.2 Сравнения результатов моделирования WRF-Chem с независимой модельной информацией.....	95
3.5 Соответствие погрешностей моделирования XCO ₂ современным требованиям.....	96
3.6. Основные результаты и выводы.....	99
Глава 4. Оценка антропогенных эмиссий CO₂ Санкт-Петербурга с помощью модели WRF-Chem.....	101
4.1 WRF-Chem моделирование антропогенного вклада Санкт-Петербурга в ОС CO ₂	101
4.2 Решение обратной задачи по оценке антропогенных эмиссий CO ₂ Санкт-Петербурга с помощью модели WRF-Chem.....	106
4.3 Сравнение независимых оценок антропогенных эмиссий CO ₂ Санкт-Петербурга.....	109
4.4 Основные результаты и выводы.....	111
Заключение.....	113
Благодарности.....	115
Список сокращений и условных обозначений.....	117
Литература.....	119
Приложение А.....	142
Приложение В.....	144

Введение

Изменение содержания парниковых газов в атмосфере Земли влияет на радиационный баланс планеты, уменьшая уходящее от земной поверхности тепловое излучение и замедляя ее выхолаживание [1-3]. Последние несколько десятков лет наблюдается увеличение содержания CO_2 и других парниковых газов в атмосфере Земли, которое связывают с деятельностью человека [4-6]. Это в свою очередь приводит к глобальному увеличению температуры поверхности Земли и нижнего слоя атмосферы [7-10]. Увеличение температуры поверхности Земли имеет преимущественно отрицательные последствия для человека, приводя к увеличению количества неблагоприятных погодных явлений [11].

CO_2 называют основным антропогенным парниковым газом из-за его наибольшего влияния на уходящее излучение Земли. Это связано с наибольшим количеством молекул CO_2 в атмосфере и эмиссиями по сравнению с другими парниковыми газами [12].

Для того, чтобы контролировать выполнение принятых международных соглашений по снижению эмиссий CO_2 в атмосферу Земли [13, 14] необходима качественная и актуальная информация об источниках и стоках CO_2 . Согласно [15] выбросы CO_2 с территорий крупных городов имеют вклад до более 70% относительно всех антропогенных эмиссий CO_2 . Поэтому в первую очередь необходимы качественные оценки выбросов газа с урбанизированных территорий планеты.

Сегодня известны два подхода к оценке антропогенных эмиссий CO_2 . Первый - метод инвентаризации. Он основан на оценке эмиссий по данным, характеризующим человеческую активность, которая приводит к антропогенным выбросам CO_2 в атмосферу Земли (например, количество сжигаемого ископаемого топлива за промежуток времени, положение промышленных предприятий и т.д.) [16, 17]. Погрешности антропогенных эмиссий CO_2 по данным инвентаризаций на масштабе стран могут достигать всего нескольких процентов [18, 19]. Однако, на

городском масштабе погрешности инвентаризационного подхода могут достигать 100% и более [20].

В связи с этим разрабатывается независимый подход оценки антропогенных эмиссий CO_2 на масштабе городов. Он основан на измерениях пространственно-временной вариации содержания CO_2 в окрестностях города, априорной информации и численном моделировании атмосферного переноса высокого пространственного разрешения. Оценка антропогенных эмиссий CO_2 при помощи данного метода является некорректной в классическом смысле обратной задачей и в некоторых исследованиях называется обратной задачей атмосферного переноса.

Измерения содержания CO_2 в окрестностях города могут быть реализованы с помощью дифференциального спектроскопического подхода. Его суть заключается в параллельных наземных измерениях общего содержания (ОС) CO_2 при помощи взаимокалиброванных спектрометров. При этом, измерения одного из приборов описывают содержание CO_2 в наветренной (незагрязненной) части города, а второго - в подветренной (загрязненной). Разность между измерениями при определенных метеорологических условиях должна характеризовать антропогенный вклад города в ОС CO_2 . Подобные измерения тщательно планируются и фильтруются для последующей оценки антропогенных эмиссий CO_2 . Поэтому метод определения антропогенных эмиссий CO_2 города на основе подобных измерений называется экспериментальным - он контролируется исследователями.

Дифференциальные спектроскопические измерения уже несколько лет проводятся регулярно и эпизодически в некоторых городах Земли в рамках измерительной сети COCCON [21-23]. Санкт-Петербург – один из крупнейших промышленных центров России. Вероятно территория города является крупным антропогенным источником CO_2 в России и на планете. В 2019-2020 гг. учеными из СПбГУ и двух немецких научных учреждений (Karlsruhe Institute of Technology и University of Bremen) был проведен совместный эксперимент (Emission Monitoring Mobile Experiment или ЕММЕ), целью которого являлась оценка

антропогенных эмиссий основных парниковых газов, включая CO_2 , с территории Санкт-Петербурга. В рамках кампании ЕММЕ в марте и апреле 2019 г. проводились дифференциальные спектроскопические измерения общего содержания ряда газов с помощью двух взаимокалиброванных инфракрасных (ИК) Фурье-спектрометров. Один из приборов располагался в наветренной, а второй - в подветренной частях города. Подробности эксперимента и первые оценки удельных антропогенных эмиссий CO_2 Санкт-Петербурга приведены в работе [22].

В дальнейшем, рядом исследователей были проведены оценки антропогенных эмиссий CO_2 со всей территории Санкт-Петербурга за 2019 г. на основе измерений кампании ЕММЕ, априорной информации и численных моделей атмосферного переноса [24-26]. Исследования показали, что различия в используемой априорной информации, моделях атмосферного переноса и в количестве используемых данных измерений приводят к разностям в оценках антропогенных эмиссий CO_2 Санкт-Петербурга ~30% и более. Это указывает на то, что проблема оценки эмиссий CO_2 с территории Санкт-Петербурга на основе решения обратной задачи атмосферного переноса не является до конца определенной и требует продолжения исследований с привлечением дополнительной априорной информации и моделей атмосферного переноса.

Целью исследования является оценка антропогенных эмиссий CO_2 Санкт-Петербурга на основе наземных спектроскопических измерений, полученных в рамках кампании ЕММЕ, различной априорной информации и моделей атмосферного переноса.

Для достижения цели в исследовании решались следующие научные **задачи:**

- оценка антропогенных эмиссий CO_2 со всей территории Санкт-Петербурга при помощи дифференциальных спектроскопических измерений содержания газа в атмосфере, априорной информации и одномерной боксовой модели атмосферного переноса, учитывая пространственное покрытие измерений;

- оценка влияния поглощения и выделения CO_2 с водной поверхности Финского залива на содержание газа в районе Санкт-Петербурга и их вклад в оценки антропогенных эмиссий CO_2 ;
- оценка возможности успешного использования численной модели химического состава тропосферы WRF-Chem для оценки антропогенных эмиссий CO_2 Санкт-Петербурга при помощи адаптации модели к области моделирования с помощью измерений содержания CO_2 в атмосфере и ее состояния;
- оценка антропогенных эмиссий CO_2 со всей территории Санкт-Петербурга при помощи дифференциальных спектроскопических измерений общего содержания газа в атмосфере, априорной информации и модели WRF-Chem;
- сравнения оценок антропогенных эмиссий CO_2 Санкт-Петербурга на основе инвентаризационного подхода и метода решения обратной задачи атмосферного переноса.

Метод научного исследования

Основным методом данной работы является численное моделирование атмосферного переноса с использованием в качестве инструментов одномерной боксовой модели, трехмерной модели дисперсии частиц в атмосфере STILT и трехмерной региональной численной модели прогноза погоды и состава тропосферы WRF-Chem версии 4.1.3.

Научная новизна

Новизна работы заключается в совместной оценке антропогенных эмиссий CO_2 Санкт-Петербурга на основе дифференциальных спектроскопических измерений общего содержания CO_2 и разных по сложности моделей атмосферного переноса - одномерная боксовая модель атмосферного переноса и трехмерная численная модель прогноза погоды и состава тропосферы WRF-Chem.

В отличие от ранних работ, где боксовая модель применялась для оценки эмиссий Санкт-Петербурга, в текущем исследовании применяется методика, в рамках которой пространственное покрытие спектроскопических измерений ОС CO_2 влияет на оценку антропогенных эмиссий CO_2 с помощью боксовой модели.

В исследовании проведен анализ чувствительности оценок антропогенных эмиссий CO_2 Санкт-Петербурга методом решения обратной задачи атмосферного переноса к пространственному покрытию данных измерений, априорной информации и используемой модели атмосферного переноса.

Кроме того, впервые численная модель WRF-Chem была адаптирована к условиям Санкт-Петербурга при помощи комплексных измерений содержания газа в атмосфере и ее состояния для моделирования переноса CO_2 на городском масштабе (2 км) за период более года.

Также впервые в исследовании собраны и проанализированы все доступные на данный момент оценки антропогенных эмиссий CO_2 Санкт-Петербурга за 2019 г., полученные на основе инвентаризационного подхода и метода решения обратной задачи атмосферного переноса.

Теоретическая и практическая значимость работы

Полученные в исследовании значения антропогенных эмиссий CO_2 Санкт-Петербурга подкрепляют вывод о том, что для качественной оценки выбросов газа с территорий крупных городов кроме традиционного метода инвентаризации следует использовать независимый подход, основанный на данных параллельных спектроскопических измерений общего содержания CO_2 в атмосфере и моделировании атмосферного переноса. Это в свою очередь указывает на необходимость налаживания регулярных измерений в районе объекта исследования и совершенствование современных моделей атмосферного переноса высокого пространственного разрешения.

Анализ влияния водной поверхности Финского залива на оценки антропогенных эмиссий CO_2 Санкт-Петербурга указывает на то, что вклад водной поверхности даже в экстремальных условиях не сравнится с антропогенным влиянием. Таким образом, при оценке антропогенных эмиссий CO_2 Санкт-Петербурга экспериментальным методом вкладом водной поверхности в содержание газа в атмосфере можно пренебречь.

Проведенная в исследовании адаптация численной модели прогноза погоды и состава тропосферы высокого пространственного разрешения WRF-Chem к

условиям Санкт-Петербурга и окрестностям позволяет использовать эту модель для оценки антропогенных эмиссий CO₂ с территории города при наличии высокоточных спектроскопических измерений общего содержания CO₂ в районе города.

Личный вклад

Все результаты численного моделирования, представленные в данной диссертации, получены автором самостоятельно. Автор лично проводил все численные эксперименты. Обработка и анализ результатов моделирования, а также их сравнении с данными измерений проводилась автором лично или при его непосредственном участии. Написание скриптов на языках Python и Bash для обработки и анализа данных моделирования и измерений проводилось автором самостоятельно.

Гранты

- Грант Российского фонда фундаментальных исследований (РФФИ) № 20-05-00627.
- СПбГУ «Лаборатория исследования озонового слоя и верхних слоев атмосферы» при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации по договору 075-15-2021-583.
- Государственный контракт № 13.2251.21.0005 Министерства науки и высшего образования РФ.

Публикации автора по теме диссертации

Основные результаты по теме диссертации представлены в публикациях, индексируемые в базах Web of Science и Scopus:

- Y. M. Timofeyev, G. M. **Nerobelov**, Ya. A. Virolainen, A. V. Poberovskii, S. C. Foka. Estimates of CO₂ anthropogenic emission from the megacity St. Petersburg. *Dokl. Earth Sci.* 494(1): 753–756, 2020. <https://doi.org/10.1134/S1028334X20090184>
- **Nerobelov** G.M., Y. Timofeyev, S. Smyshlyaev, Y. Virolainen, M. Makarova, S. Foka. Comparison of CAMS Data on CO₂ with Measurements in Peterhof. *Atmos Ocean Opt*, 34: 689–694, 2021. <https://doi.org/10.1134/S102485602106018X>

- **Nerobelov** G., Timofeyev Y., Smyshlyaev S., Foka S., Mammarella I., Virolainen Y. Validation of WRF-Chem Model and CAMS Performance in Estimating Near-Surface Atmospheric CO₂ Mixing Ratio in the Area of Saint Petersburg (Russia). *Atmosphere*, 12(3): 387, 2021. <https://doi.org/10.3390/atmos12030387>
- Никитенко А.А., Г.М. **Неробелов**, Ю.М. Тимофеев, А.В. Поберовский. Анализ наземных спектроскопических измерений содержания CO₂ в Петергофе. *Современные проблемы дистанционного зондирования Земли из космоса*, 18(6): 265–272, 2021.
- Timofeyev, Y.M., **Nerobelov**, G.M., Poberovskii, A.V., Filippov N.N. Determining Both Tropospheric and Stratospheric CO₂ Contents Using a Ground-Based IR Spectroscopic Method. *Izv. Atmos. Ocean. Phys.* 57: 286–296, 2021. <https://doi.org/10.1134/S0001433821020110>
- **Nerobelov**, G.M., Timofeyev, Y.M. Estimates of CO₂ Emissions and Uptake by the Water Surface near St. Petersburg Megalopolis. *Atmos Ocean Opt.*, 34: 422–427, 2021. <https://doi.org/10.1134/S1024856021050158>
- Nikitenko, A.A., Timofeev, Y.M., Virolainen, Y.A., **Nerobelov** G.M., Poberovskii A.V. Comparison of Stratospheric CO₂ Measurements by Ground- and Satellite-Based Methods. *Atmos Ocean Opt.* 35: 341–344, 2022. <https://doi.org/10.1134/S1024856022040145>
- Timofeyev, Y.M., **Nerobelov**, G.M., Poberovskii, A.V. Experimental Estimates of Integral Anthropogenic CO₂ Emissions in the City of St. Petersburg. *Izv. Atmos. Ocean. Phys.* 58: 237–245, 2022. <https://doi.org/10.1134/S0001433822030100>
- **Nerobelov** G.M., Timofeyev Yu.M., Smyshlyaev S.P., Foka S.Ch., Imhasin H.H. Comparison of CO₂ Content in the Atmosphere of St. Petersburg According to Numerical Modeling and Observations. *Izv. Atmos. Ocean. Phys.* 59: 275–286, 2023. <https://doi.org/10.1134/S0001433823020056>
- **Nerobelov** G., Timofeyev Y., Foka S., Smyshlyaev S., Poberovskiy A., Sedeeva M. Complex Validation of Weather Research and Forecasting—Chemistry Modelling of Atmospheric CO₂ in the Coastal Cities of the Gulf of Finland. *Remote Sens*, 15: 1-30, 2023. <https://doi.org/10.3390/rs15245757>

Степень достоверности и апробация результатов исследования

Основные результаты работы представлены на следующих международных и всероссийских конференциях:

- Yuri Timofeev, Georgy **Nerobelov**, Anatolii Poberovskii. Estimation of Anthropogenic CO₂ Emissions of St. Petersburg Megacity by Different Methods. Устный доклад на конференции AOGS2023, Сингапур, 30 июля – 4 августа 2023 г.
- Georgy **Nerobelov**, Yuri Timofeev, Sergei Smyshlyaev, Stephany Foka. WRF-Chem Modelling of CO₂ Transport in St. Petersburg Megacity. Устный доклад на конференции AOGS2023, Сингапур, 30 июля – 4 августа 2023 г.
- Тимофеев Ю.М., **Неробелов** Г.М., Поберовский А.В. Сравнения оценок антропогенных эмиссий мегаполиса Санкт-Петербурга, полученных разными методами. Устный доклад на международной конференции МСАРД-2023, Санкт-Петербург, Россия, 21-23 июнь 2023 г.
- **Неробелов** Г.М., Тимофеев Ю.М., Смышляев С.П., Фока С.Ч. Валидация WRF-Chem моделирования переноса CO₂ в Санкт-Петербурге и Хельсинки. Устный доклад на международной конференции МСАРД-2023, Санкт-Петербург, Россия, 21-23 июнь 2023 г.
- **Nerobelov G.**, Timofeyev Yu., Smyshlyaev S., Foka S., Hatakka J., Virolainen Ya. Validation of WRF-Chem modelling of Saint-Petersburg anthropogenic contribution to CO₂ content Presentation at 19th Russian open international conference «Sovremennye problemy distantsionnogo zondirovaniya Zemli iz kosmosa». Moscow, Space Research Institute of the Russian Academy of Sciences. DOI 10.21046/19DZZconf-2021a, 2021
- Timofeyev Yu., **Nerobelov G.**, Virolainen Ya., Poberovskii A., Polyakov A. Analysis of robustness of differential spectroscopic IR method to estimate anthropogenic CO₂ emission (with focus on Saint-Petersburg) Presentation at 19th Russian open international conference «Sovremennye problemy distantsionnogo zondirovaniya Zemli iz kosmosa». Moscow, Space Research

Institute of the Russian Academy of Sciences. DOI 10.21046/19DZZconf-2021a, 2021

- **Nerobelov G.**, Timofeyev Y., Smyshlyayev S., Foka S., Mammarella I., Virolainen Y. (2021): Validation of the capability of WRF-Chem model and CAMS to simulate near surface atmospheric CO₂ mixing ratio for the territory of Saint-Petersburg. European Geosciences Union (EGU) General Assembly, 19-30 April 2021, Viena, Austria (virtual meeting); Geophysical Research Abstracts, Oral presentation, EGU21-1497, <https://doi.org/10.5194/egusphere-egu21-1497>
- Timofeyev Y., **Nerobelov G.**, Poberovskii A., Filippov N. (2021): Estimation of the tropospheric and stratospheric CO₂ content by ground-based IR technique. European Geosciences Union (EGU) General Assembly, 19-30 April 2021, Viena, Austria (virtual meeting); Geophysical Research Abstracts, Oral presentation, EGU21-1477, <https://doi.org/10.5194/egusphere-egu21-1477>
- Timofeev Yu.M., **Nerobelov G.M.**, Virolainen Ya.A., Poberovskii A.V., Foka S.C. (2020) Comparison of different estimates of CO₂ anthropogenic emissions from Saint-Petersburg metropolis. Published in the report of a conference “Modern Problems of Hydrometeorology and Environment Monitoring on the Territory of CIS”. ISBN: 978-5-86813-508-8, p. 794.
- **Nerobelov G.M.**, Timofeev Yu.M., Smyshlyayev S.P., Virolainen Ya.A., Makarova M.V., Foka S.C. (2020) Validation of CAMS database and WRF-Chem 3D modelling of CO₂ content near Saint-Petersburg. Published in the report of a conference “Modern Problems of Hydrometeorology and Environment Monitoring on the Territory of CIS”. ISBN: 978-5-86813-508-8, p. 794.
- Timofeyev Y., **G. Nerobelov**, S. Smyshlyayev, I. Berezin, Ya. Virolainen, M. Makarova, A. Poberovsky, A. Polyakov, S. Foka (2020): Estimates of anthropogenic CO₂ emissions from satellite and ground based measurements. European Geosciences Union General Assembly, 4-8 May 2020, Vienna, Austria; Geophysical Research Abstracts, Oral presentation, EGU2020-2580

Основные научные результаты

1. Адаптация численной модели WRF-Chem к условиям Санкт-Петербурга позволяет описывать изменение содержания CO₂ в атмосфере за год с высоким пространственным разрешением (2-3 км) со средним расхождением от измерений на менее 0.6%. При этом, модель WRF-Chem лучше описывает пространственно-временное изменение содержания CO₂ в районе Санкт-Петербурга, чем доступные данные моделирования на глобальном масштабе CAMS и CarbonTracker. Адаптированная модель WRF-Chem может быть использована для оценки антропогенных эмиссий CO₂ с территории Санкт-Петербурга.

Результат изложен в публикации **Nerobelov** G.M., Timofeyev Yu.M., Smyshlyaev S.P., Foka S.Ch., Imhasin H.H. Comparison of CO₂ Content in the Atmosphere of St. Petersburg According to Numerical Modeling and Observations. *Izv. Atmos. Ocean. Phys.* 59: 275–286, 2023. <https://doi.org/10.1134/S0001433823020056> на странице 284; в публикации **Nerobelov** G., Timofeyev Y., Foka S., Smyshlyaev S., Poberovskiy A., Sedeeva M. Complex Validation of Weather Research and Forecasting—Chemistry Modelling of Atmospheric CO₂ in the Coastal Cities of the Gulf of Finland. *Remote Sens*, 15: 1-30, 2023. <https://doi.org/10.3390/rs15245757> на страницах 23-24; в публикации Никитенко А.А., Г.М. **Неробелов**, Ю.М. Тимофеев, А.В. Поберовский. Анализ наземных спектроскопических измерений содержания CO₂ в Петергофе. *Современные проблемы дистанционного зондирования Земли из космоса*, 18(6): 265–272, 2021 на страницах 267-268; в публикации Timofeyev, Y.M., **Nerobelov**, G.M., Poberovskii, A.V., Filippov N.N. Determining Both Tropospheric and Stratospheric CO₂ Contents Using a Ground-Based IR Spectroscopic Method. *Izv. Atmos. Ocean. Phys.* 57: 286–296, 2021. <https://doi.org/10.1134/S0001433821020110> на страницах 294-295; в публикации Nikitenko, A.A., Timofeev, Y.M., Virolainen, Y.A., **Nerobelov** G.M., Poberovskii A.V. Comparison of Stratospheric CO₂ Measurements by Ground- and Satellite-Based Methods. *Atmos Ocean Opt.* 35: 341–344, 2022.

<https://doi.org/10.1134/S1024856022040145> на странице 343; в публикации **Nerobelov G.M.**, Y. Timofeyev, S. Smyshlyaev, Y. Virolainen, M. Makarova, S. Foka. Comparison of CAMS Data on CO₂ with Measurements in Peterhof. *Atmos Ocean Opt*, 34: 689–694, 2021. <https://doi.org/10.1134/S102485602106018X> на странице 693; и в публикации **Nerobelov G.**, Timofeyev Y., Smyshlyaev S., Foka S., Mammarella I., Virolainen Y. Validation of WRF-Chem Model and CAMS Performance in Estimating Near-Surface Atmospheric CO₂ Mixing Ratio in the Area of Saint Petersburg (Russia). *Atmosphere*, 12(3): 387, 2021. <https://doi.org/10.3390/atmos12030387> на страницах 19-20.

Вклад личного участия соискателя заключается в адаптации численной модели WRF-Chem к условиям Санкт-Петербурга и проведении численного эксперимента по переносу CO₂ в атмосфере в районе Санкт-Петербурга за период более года; в валидации модели WRF-Chem с помощью комплексных измерений; в сопоставлении данных моделирования WRF-Chem с данными моделирования на глобальном масштабе CAMS и CarbonTracker.

2. Диапазон значений антропогенных эмиссий CO₂ Санкт-Петербурга за 2019 г., полученный с помощью решения обратной задачи атмосферного переноса с помощью дифференциальных спектроскопических измерений и одномерной модели атмосферного переноса с учетом пространственного охвата территории города измерениями составляет 76–105 Мт/год при средней оценке 91 ± 19 Мт г⁻¹. Учет ограниченного пространственного покрытия парных спектроскопических измерений содержания CO₂ в атмосфере приводит к уменьшению оценок антропогенных эмиссий Санкт-Петербурга на ~22-55%.

Результат изложен в публикации Y. M. Timofeyev, G. M. **Nerobelov**, Ya. A. Virolainen, A. V. Poberovskii, S. C. Foka. Estimates of CO₂ anthropogenic emission from the megacity St. Petersburg. *Dokl. Earth Sci.* 494(1): 753–756, 2020. <https://doi.org/10.1134/S1028334X20090184> на странице 755; и в публикации Timofeyev, Y.M., **Nerobelov**, G.M., Poberovskii, A.V. Experimental Estimates of Integral Anthropogenic CO₂ Emissions in the City of St. Petersburg.

Izv. Atmos. Ocean. Phys. 58: 237–245, 2022.
<https://doi.org/10.1134/S0001433822030100> на странице 243.

Вклад личного участия соискателя заключается в оценке антропогенных эмиссий CO₂ Санкт-Петербурга с помощью решения обратной задачи атмосферного переноса с помощью дифференциальных спектроскопических измерений и одномерной модели атмосферного переноса с учетом пространственного охвата территории города.

3. Вклад поверхности Финского залива в содержание CO₂ в районе Санкт-Петербурга составляет менее 1% антропогенного вклада города и может не учитываться при численном моделировании переноса CO₂ в атмосфере на территории города.

Результат изложен в публикации **Nerobelov, G.M., Timofeyev, Y.M.** Estimates of CO₂ Emissions and Uptake by the Water Surface near St. Petersburg Megalopolis. *Atmos Ocean Opt.*, 34: 422–427, 2021.
<https://doi.org/10.1134/S1024856021050158> на странице 426.

Вклад личного участия соискателя заключается в оценке поглощения и эмиссий CO₂ с поверхности Финского залива на основе судовых измерений и в оценке вклада поверхности Финского залива в содержание CO₂ в районе Санкт-Петербурга по сравнению с антропогенным вкладом.

Положения, выносимые на защиту

- Вклад учета пространственного покрытия парных спектроскопических измерений при оценке антропогенных эмиссий CO₂ Санкт-Петербурга за 2019 г. с помощью одномерной боксовой модели достигает ~40%.
- Адаптация численной модели WRF-Chem к условиям Санкт-Петербурга позволяет использовать модель для решения обратной задачи по оценке антропогенных эмиссий CO₂ города (погрешность моделирования ~0.2%) в ~60% случаев.
- Использование разного набора измерений, априорной информации и моделей атмосферного переноса приводят к диапазону значений антропогенных эмиссий CO₂ Санкт-Петербурга от ~62 до более 90 Мт г⁻¹.

- Средняя антропогенная эмиссия CO_2 Санкт-Петербурга в 2019 г. на основе метода решения обратной задачи атмосферного переноса составляет 73 ± 13 Мт г⁻¹.

Глава 1. Парниковый газ CO₂ и методы его мониторинга в атмосфере

1.1 Изменение климата Земли - причины и современное состояние

В данной главе рассмотрим какое место в изменении климата Земли занимает углекислый газ (CO₂) в атмосфере и какие существуют пути по мониторингу пространственно-временной вариации этого газа.

Климатом Земли можно назвать среднее многолетнее состояние ее поверхности и атмосферы, которое описывается такими характеристиками, как температурой воздуха и поверхности планеты, количеством выпадающих осадков, высотой уровня поверхности океана, облачностью, атмосферным составом и тд. С момента формирования земной атмосферы её среднее состояние очень сильно изменилось и продолжает меняться в результате взаимодействия с остальными оболочками Земли (гидросфера, биосфера, криосфера, литосфера), а также с внешними факторами (изменение приходящего солнечного излучения, вариация газового и аэрозольного состава атмосферы в результате вулканических извержений и антропогенной активности) [1].

Анализ многолетнего изменения климатических характеристик Земли, а также исследования атмосфер других планет Солнечной системы указывают на значимость состава атмосферы, а именно содержания парниковых газов, в формировании климата планеты. Парниковыми газами называют химические соединения, молекулы которых способны поглощать и переизлучать электромагнитное (ЭМ) излучение в инфракрасном диапазоне длин волн (ИК или тепловом). В атмосфере Земли содержится множество парниковых газов (H₂O, CO₂, CH₄, N₂O, O₃ и тд.), имеющих как естественное, так и антропогенное происхождение. Большинство парниковых газов химически малоактивны (например, CO₂, CH₄, N₂O), что способствует их длительному времени жизни в атмосфере (от нескольких до сотен и тысяч лет [1, 2]). Присутствие некоторых парниковых газов в атмосфере Земли с максимальным содержанием в её нижнем слое нарушает радиационный баланс планеты, уменьшая пропускную

способность атмосферы для уходящего от земной поверхности теплового излучения и замедляя выхолаживание поверхности. Данное явление называется парниковым эффектом. Оно приводит к нагреванию нижней тропосферы и обеспечивает пригодные условия для комфортной жизни человека и иных живых организмов на Земле [3].

Наблюдающееся глобально с середины прошлого века многолетнее накопление парниковых газов в атмосфере [4, 5] связано с человеческой (или антропогенной) активностью. Об этом свидетельствуют такие факты, как (1) уменьшение концентрации молекулярного кислорода (O_2) со скоростью, пропорциональной антропогенным эмиссиям CO_2 ; (2) уменьшение относительного содержания изотопа углерода ^{14}C в воздухе, который отсутствует в ископаемом топливе; (3) рост содержания CO_2 имеет большую скорость в Северном полушарии, где расположено гораздо больше антропогенных источников газа, по сравнению с Южным [6].

Сегодня всё больше уверенности в том, что антропогенная активность способствует наблюдающемуся постепенному росту средней глобальной температуры приземного воздуха и земной поверхности и, как следствие, изменению других характеристик климата Земли. Согласно докладам ИРСС (Intergovernmental Panel on Climate Change, <https://www.ipcc.ch/>) [7, 8], аномалия средней глобальной температуры воздуха у поверхности Земли в период 2010-2019 гг. по отношению к 1850-1900 гг. находится в диапазоне от +0.8 до 1.3 °C. При этом с большой вероятностью основной причиной глобального потепления и связанных с ним климатических изменений является увеличение содержания парниковых газов в атмосфере от выбросов антропогенных источников [9, 10]. Результаты моделирования прошлых состояний климата Земли, а также анализ многолетних измерений указывают на корреляцию глобальных климатических изменений и увеличения содержания парниковых газов в атмосфере, которое активно растет примерно с начала индустриальной революции, т.е. с середины 18-го века [7]. Наблюдающиеся глобальные климатические изменения из-за увеличивающийся средней температуры

поверхности Земли и воздуха в нижней тропосфере имеют преимущественно отрицательные последствия для человека. К наиболее значимым последствиям приводят увеличение количества и интенсивности ежегодных неблагоприятных погодных явлений. К ним относятся экстремальные температуры воздуха, сильные осадки, наводнение, засуха и другое [11].

Климатические изменения заметны и на региональном масштабе. Например, в докладе [27] указывается, что средняя температура воздуха и земной поверхности продолжает увеличиваться с наибольшей скоростью в высоких широтах северной части Европы (от Беларуси до Финляндии по классификации регионов IPCC). За период 2002-2011 гг. рост температуры в этой части Земли составляет $\sim 1.3 \pm 0.11^\circ\text{C}$ относительно периода 1850-1899 гг. Кроме того, с 1950 г. количество осадков увеличилось в северной части Европы (примерно на 70 мм в десятилетие) и уменьшилось в южной. Согласно докладу [28] средняя температура земной поверхности в арктической части Канады увеличивается со скоростью примерно в 3 раза выше, чем в среднем на Земле. Это может быть вызвано серией обратных связей. Анализ климатических изменений на территории России на основе данных наблюдений [29] указывает на выраженное постепенное увеличение средней температуры поверхности Земли. Так, к 2014 г. средняя температура увеличилась на $\sim 1.5^\circ\text{C}$ по отношению к средней температуре за период 1961-1990 гг. (базовый период принят ВМО) с наивысшей скоростью в северных широтах. При этом скорость увеличения температуры земной поверхности за период 1976-2012 гг. в России, оказалась более, чем в два раза выше, чем в среднем в мире (0.45 против 0.17°C за 10 лет). Тренд изменения сумм осадков за 1976-2010 гг. также положительный и составляет ~ 0.3 мм за 10 лет. За период с 1996 по 2012 гг. в России выросло количество случаев неблагоприятных погодных явлений, причиняющих ущерб экономике и здоровью населения.

Согласно докладу [30] последствия глобального потепления заметны на территории крупного российского города г. Санкт-Петербурга (Ленинградская область). Так, за 30 лет с 1988 по 2017 гг. средняя температура воздуха в городе увеличилась на 1.3°C по отношению к средней температуре за период 1961-1990

гг. С 1881 по 2017 гг. наблюдается рост выпадающих осадков с ~500 до 700 мм в год.

1.2 Роль CO₂ в климатических изменениях

Несмотря на то, что многие парниковые газы имеют и природное происхождение, преобладающий вклад в продолжающееся увеличение содержания этих газов в атмосфере Земли вносит увеличивающаяся антропогенная активность. Увеличение антропогенной активности связано с ростом численности населения планеты и развитием экономики, т.е. с расширением производств и урбанизацией новых территорий [31, 32]. Основным источником антропогенных парниковых газов является сжигание ископаемого топлива (энергетика, транспорт, промышленность и др.). По данным доклада [29] основными источниками парниковых газов на территории России являются энергетика, промышленность, сельское хозяйство и переработка отходов.

К основным антропогенным парниковым газам по степени воздействия на климат Земли относятся углекислый газ (CO₂), метан (CH₄) и закись азота (N₂O). Преобладание перечисленных парниковых газов над другими обусловлено их наибольшей концентрацией в атмосфере. По данным шестого доклада IPCC от 2021 г. [33] из-за развития антропогенной активности после индустриальной революции и, как следствие, роста количества и мощности антропогенных источников парниковых газов, в период с 1750 по 2019 гг. содержание в атмосфере CO₂, CH₄ и N₂O увеличилось на ~47, 158 и 23%, соответственно. Не смотря на международные соглашения о сокращении эмиссий основных парниковых газов, принятые многими развитыми странами (Киотский протокол [13], Парижское соглашение [14], Монреальский протокол [34], Кигалийская поправка [35] и другие), их содержание продолжает достаточно быстро увеличиваться. Например, если в 60-70х годах прошлого века скорость роста глобального содержания CO₂ находилась в диапазоне ~0.5-1.5 ppm/год, то сегодня она составляет более ~2 ppm/год, и вероятно продолжит расти [36, 37].

Не смотря на стремление человечества к переходу на почти безэмиссионный тип энергетики, по одному из сценариев [38] на переход к чистому, с точки зрения воздействия на климат Земли, производству энергии к 2050 г. требуется потратить $\sim 4 \cdot 10^{12}$ USD в год, что составляет около 4% от мирового внутри валового продукта (ВВП) в 2021 г. (около $96 \cdot 10^{12}$ USD) и является колоссальными затратами. Для примера, предполагаемые ежегодные траты на чистую энергетику приблизительно равны ВВП Германии в 2021 г. ($4.2 \cdot 10^{12}$ USD) и больше ВВП России ($1.78 \cdot 10^{12}$ USD), Великобритании ($3.19 \cdot 10^{12}$ USD), Франции ($2.94 \cdot 10^{12}$ USD), Италии ($2.1 \cdot 10^{12}$ USD) и многих других стран [39]. Тем не менее, прогнозируется, что следуя данному сценарию к 2050 г. лишь менее 50% всей потребляемой энергии может приходиться на чистое производство [38]. Поэтому очевидно, что в ближайшие десятилетия мы продолжим регистрировать увеличение содержания парниковых газов в атмосфере от человеческой активности.

CO₂ называют основным антропогенным парниковым газом, рост содержания которого оказывает наибольшее воздействие на увеличение глобальной температуры поверхности Земли. По данным [12] радиационный форсинг CO₂ (т.е. влияние на изменение радиационного баланса Земли), примерно в 4 раза больше форсинга метана, в 6-7 раз больше хлорфторуглеродов и в 8-10 раз больше закиси азота. Это связано с наибольшим уровнем содержания молекул CO₂ в атмосфере Земли, к чему приводят большее количество антропогенных источников и величины их эмиссий. Так, в среднем содержание CO₂ в атмосфере в ~ 200 раз выше, чем CH₄ и в ~ 1000 , чем N₂O. Что касается количества выбрасываемого вещества в атмосферу, то эмиссии CO₂ в ~ 3 раза больше эмиссий CH₄ и в ~ 10 раз, чем N₂O.

1.3 Основные источники и стоки CO₂

Атмосфера Земли является одним из четырех резервуаров углерода (в основном в виде CO₂), в котором постоянно происходит изменение содержания вещества благодаря взаимодействию с тремя другими резервуарами - биотой (в частности растения), океаном и залежами ископаемого топлива в недрах Земли. Вид и скорость взаимодействий между атмосферой и тремя другими резервуарами определяет разнообразие источников и стоков CO₂ и степень их воздействия на содержание газа в атмосфере [40].

Недра Земли являются самым крупным резервуаром углерода, где он накапливается в виде ископаемого топлива (уголь, природный газ, нефть), а также в форме осадочных пород, на которую приходится наибольшая часть. Для примера, запасы углерода в виде осадочных пород в недрах Земли составляют около 100 т м⁻² (примерно в 60 тысяч раз больше, чем в атмосфере), а в виде ископаемого топлива - 0.01 т м⁻² (в среднем по площади поверхности Земли). Несмотря на размер этого резервуара, большая часть накопленного углерода имеет очень малую скорость обмена с атмосферой, которая занимает сотни тысяч и миллионы лет [2]. Из-за большого размера занимаемой территории и высокой скорости обмена океан называют основным естественным источником и поглотителем CO₂ в атмосфере на глобальном масштабе за временные промежутки от десятков лет до тысячелетий. По запасу углерода этот резервуар находится на втором месте, вмещая примерно в 60 раз больше вещества, чем атмосфера [41]. Биота является естественным фактором, более значимым для динамики CO₂ в атмосфере на временных промежутках от дней до месяцев. При этом основной вклад вносит процесс фотосинтеза в растениях, который имеет выраженный сезонный характер [2, 6, 41-43].

Антропогенная активность приводит преимущественно к увеличению содержания CO₂ в атмосфере, так как не имеет таких крупных и сильных стоков газа, как поверхность океана и биота. Основным антропогенным источником CO₂ является сжигание ископаемого топлива, в результате чего углерод из самого

крупного резервуара, недр Земли, переходит в атмосферный резервуар, где может задерживаться сотни и тысячи лет [6, 43].

Из этого можно заключить, что основные источники атмосферного CO_2 определяют содержание газа в первую очередь в нижнем слое атмосферы. Так, в работе [44] показано, что содержание CO_2 в слое до 12 км во-первых выше, чем в вышележащем слое, а во-вторых подвержено большему сезонному изменению. Второй вывод подтвержден в исследовании [45].

Суммарный вклад биосферы и поверхности океана приводит к постоянному поглощению около 50% CO_2 от антропогенных источников. По результатам исследования [46] за 2010-2019 гг. вероятный прирост CO_2 в атмосфере составил 5.1 ± 0.02 ГтС г-1, чему способствовали антропогенные эмиссии CO_2 в результате сжигания ископаемого топлива (9.6 ± 0.5 ГтС г-1), изменение землепользования (преимущественно вырубка лесов, 1.6 ± 0.7 ГтС г-1), естественное поглощение газа поверхностью океана (2.5 ± 0.6 ГтС г-1) и биотой или биосферой (3.4 ± 0.9 ГтС г-1). При этом, постоянный круговорот гораздо большего количества углерода между системами атмосфера-океан (около 90 Гт г-1) и атмосфера-биосфера (около 120 Гт г-1) не оказывают заметного вклада в климатические изменения [46].

1.4 Современные методы мониторинга пространственно-временных вариаций содержания CO_2 в атмосфере

Из-за значимости диоксида углерода в изменении климата Земли ученые со всего мира уже десятки лет создают и развивают системы мониторинга этого газа в атмосфере. Мониторинг изменения содержания CO_2 и других парниковых газов в атмосфере Земли был начат еще в середине прошлого века с работ американского ученого Чарльза Килинга [4]. Сегодня мониторинг и анализ полученной информации выполняется регулярно учеными со всего Мира, в нём задействованы как всевозможные измерения (наземные локальные и дистанционные, спутниковые, самолетные и тд.), так и численные модели состава атмосферы [47-51].

Заметим, что современный мониторинг динамики диоксида углерода в атмосфере Земли заключается не только в оценке содержания газа, но и в анализе источников и стоков. Если по содержанию CO_2 в атмосфере можно судить о текущем климатическом воздействии газа, то информация об источниках и стоках даёт понять что вносит наиболее значимый вклад в содержание. К примеру, как было сказано, сегодня наибольший вклад в увеличение содержания CO_2 глобально вносят выбросы газа из антропогенных источников, ~50% которых ежегодно остается в атмосфере, а другая половина - преимущественно поглощается поверхностью океана и растительностью. Однако, некоторые исследования [52] свидетельствуют о том, что в дальнейшем при текущей или увеличенной скорости выбросов доля CO_2 от антропогенных источников, выходящая из атмосферы в естественные стоки, будет уменьшаться. Это должно приводить к увеличению скорости роста содержания CO_2 в атмосфере и, как следствие, к ускорению увеличения температуры поверхности Земли. Поэтому в настоящий момент имеет ценность корректная информация об источниках и стоках CO_2 на различных пространственных масштабах. Такая информация позволит получать прогноз изменения климата Земли по наиболее правдоподобиному сценарию, а также следить за вкладом стран, регионов, городов и отдельных объектов (ТЭЦ, промышленные предприятия и др.) в рост содержание CO_2 в атмосфере Земли.

Информация о вариации содержания CO_2 в атмосфере, полученная различными методами, имеет свои плюсы и недостатки. Достаточно детальный обзор современных измерительных методов и приборов для мониторинга CO_2 в атмосфере дан в отчете [16]. Ниже вкратце опишем основные современные измерительные системы и численные модели для мониторинга диоксида углерода в атмосфере, а также методы оценки источников и стоков CO_2 .

Сегодня на регулярной основе глобально проводятся два типа измерений CO_2 - локальные, характеризующие малый объем воздуха (например, в окрестностях измерительной станции у поверхности Земли), и дистанционные, представляющие информацию в основном об интегральном содержании газа во всей атмосфере и в ее выделенных слоях (например, в тропосфере и стратосфере).

Из глобальных сетей локальных измерений приземного содержания CO_2 можно выделить программу BMO GAW (The Global Atmosphere Watch) [53]. В рамках данной программы с 1989 г. проводятся глобальные измерения атмосферного состава при помощи наземных, мачтовых, радиозондовых, самолётных, спутниковых и иных измерений. В рамках программы в том числе на множестве наземных станций измеряется приземная концентрация CO_2 [54]. Кроме этой программы существует глобальная измерительная сеть Global Greenhouse Gas Reference Network [55], которая является частью американского исследовательского центра National Oceanic and Atmospheric Administration, Earth System Research Laboratories (NOAA ESRL) [56] и направлена на исследование атмосферного содержания трех основных парниковых газов - CO_2 , CH_4 и N_2O . На сети выполняются измерения локального содержания CO_2 у поверхности Земли и на конкретных высотах (самолетные, мачтовые и радиозондовые измерения).

Регулярные локальные измерения CO_2 у поверхности Земли, а также на мачтах проводятся на финских измерительных станциях SMEAR (Station for Measuring Ecosystem-Atmosphere Relations) [57]. Также отметим европейскую измерительную сеть ICOS (Integrated Carbon Observation System, <https://icos-atc.lsce.ipsl.fr/>), целью которой является исследование источников основных парниковых газов, в том числе CO_2 , в атмосфере Земли. В рамках сети ICOS с 2009 г. уже примерно на 40 станциях проводятся регулярные наземные измерения локального содержания парниковых газов [58].

В России отсутствует широкая национальная сеть регулярных измерений парниковых газов. Регулярные измерения CO_2 в России проводятся под руководством Росгидромета и обслуживаются сотрудниками Главной геофизической обсерватории им. Воейково (Санкт-Петербург) на трех станциях - с. Териберка (Кольский полуостров, с 1988 г.), с. Новый порт (полуостров Ямал, с 2002 г.) и п. Тикси (север республики Саха (Якутия), с 2011 г.). Все три станции удалены от крупных антропогенных источников и расположены в арктической части России. Ранее под руководством Росгидромета измерения также

проводились на двух островных станциях - о. Беринга (1986-1994 гг.) и о. Котельный (1983-1993 гг.) [59].

С 2004 г. в рамках программы Japan–Russia Siberian Tall Tower Inland Observation Network (JR-STATION), на территории западной и восточной Сибири ученые из Института оптики атмосферы им. Зюева СО РАН (г. Томск, Россия) совместно с коллегами из Японии (National Institute for Environmental Studies, г. Цукуба и Center for Environmental Remote Sensing, Chiba University, г. Чибя) организована сеть мониторинга за локальными концентрациями углекислого газа и метана, состоящая на сегодняшний момент из 9 постов наблюдений [60, 61]. Большинство станций удалены от крупных антропогенных источников CO_2 , что также позволяет исследовать естественное изменение содержания углекислого газа в атмосфере. Измерения проводятся у поверхности Земли и на высотах при помощи мачт и самолетных наблюдений.

На базе физического факультета СПбГУ в г. Петергофе (г. Санкт-Петербург) с 2013 г. проводятся эпизодические измерения приземного содержания CO_2 при помощи газоанализатора Los Gatos Research Greenhouse Gas Analyzer (GGA-24r-EP) [62-64].

Регулярные измерения содержания CO_2 проводятся и в Центральной России. На научно-исследовательской станции “Обнинск” под руководством ученых из Федерального Государственного бюджетного учреждения “Научно-производственное объединение Тайфун” (г. Обнинск, Центральная Россия) с 1998 г. проводятся измерения приземного содержания CO_2 и CH_4 при помощи Фурье-спектроскопии [65].

При помощи подобных измерений можно охарактеризовать локальные особенности вариации содержания CO_2 , которые применимы к ограниченным объемам воздуха (например, приземный слой атмосферы), территории (к примеру, территория мегаполиса, пригород, лес и тд.) и временному периоду (день, ночь, зима, лето). Не смотря на ограниченность, локальные измерения явно отражают сезонное и годовое изменение содержания CO_2 в атмосфере [62].

В отличие от измерений приземного содержания CO_2 , содержание газа во всей атмосфере менее чувствительно к динамическим процессам в пограничном слое Земли. Измерения содержания CO_2 во всей сухой атмосфере (далее общее содержание или ОС) характеризует динамику газа в атмосфере под влиянием источников и стоков различного рода. Часто для описания ОС используют величину $X\text{CO}_2$, которая характеризует среднее отношение количества молекул CO_2 к количеству молекул сухого воздуха во всей атмосфере или ее выделенном слое. Данная величина выражается в ppm (parts per million, миллионные доли массы или объема).

Измерения общего содержания CO_2 и других парниковых газов регулярно выполняются на глобальных измерительных сетях TCCON (Total Carbon Column Observing Network) и COCCON (Collaborative Carbon Column Observing Network). Измерения на сети TCCON [66] выполняются с 2004 г. при помощи ИК Фурье-спектрометров фирмы Bruker Optics GmbH на более, чем 20 станциях. Требования к точности измерений составляют 0.25%, но измерители на сети не ограничиваются этим значением, стараясь добиться наименьшей погрешности восстановления CO_2 [67]. Один из наиболее надежных и распространенных приборов на сети TCCON Bruker 125RH измеряет спектры приходящего солнечного излучения в ИК диапазоне со спектральным разрешением около $0.02\text{-}0.002\text{ см}^{-2}$. Для восстановления ОС CO_2 и иных газов решается обратная задача атмосферной оптики, в которой измеренные спектры интерпретируют при помощи априорной информации (состояние атмосферы, вертикальный профиль исследуемого газа и мешающих газов) и специальных программ (например, PROFFIT [68] и GFIT [69]).

Измерения на сети COCCON [21] начаты с 2016 г., в которых на сегодняшний день задействовано около 18 научных групп со всего мира. В отличие от TCCON, основным прибором этой сети является ИК Фурье-спектрометр Bruker EM27/SUN. Данный спектрометр обладает более грубым спектральным разрешением 0.5 см^{-1} , который однако измеряет ИК спектры также с малыми погрешностями благодаря тщательной взаимокалибровке

приборов [70, 71]. Кроме того, спектрометр Bruker EM27/SUN мобильный и может быть использован не только в стационарных, но и в полевых измерениях [72, 22, 24]. Случайная погрешность измерений XCO_2 приборами Bruker EM27/SUN примерно на порядок ниже, чем у Bruker 125HR и составляет 0.03-0.08% [70, 22].

Также отметим измерительную сеть NDACC (Network for the Detection of Atmospheric Composition Change, <https://www-air.larc.nasa.gov/missions/ndacc/>) [73], включающую в себя измерения приходящего ИК излучения Фурье-спектрометрами с конца 20-го века по настоящее время, которые могут быть интерпретированы для восстановления общего содержания CO_2 . Однако, к основным целям данной сети не относятся измерения CO_2 , поэтому восстановлением содержания этого газа на сети NDACC занимаются в частных исследованиях (см. например [74-77]).

В России измерения общего содержания CO_2 проводятся отдельными научными институтами. Например, на станции в г. Петергоф, Санкт-Петербург с 2009 г. выполняются измерения серии экологически и климатически важных газов (в том числе CO_2) при помощи Фурье-спектрометра Bruker 125HR [75-77, 44]. При этом, с 2012 г. измерения серии газов на станции в г. Петергоф входят в международную измерительную сеть NDACC, описанную выше.

Результаты наземных измерений ОС CO_2 представляют ценность в качестве эталонных данных для валидации и калибровки спутниковых измерений, так как обладают большей точностью [78]. В то же время наземные дистанционные измерения нерегулярны в пространстве (расстояния между ближайшими станциями может достигать тысяч километров) и обладают малым территориальным покрытием.

Главное преимущество спутниковых измерений это глобальное покрытие. Спутниковые измерения CO_2 основаны на регистрации отраженного и рассеянного солнечного излучения, а также собственного излучения Земли в ИК диапазоне длин волн [16]. Возможность восстановления содержания CO_2 из спутниковых измерений появилась после в 1979 г. с выводом американского

прибора TOVS (Television Infrared Observation Satellite Operational Vertical Sounder, спутники серии NOAA) на Земную орбиту [79]. Прибор измерял уходящее от Земли ИК излучение в диапазоне 4.3-15 мкм на примерно 20 спектральных каналах и был создан с целью восстановления профиля температуры, влажности и других атмосферных параметров. Пространственное разрешение измерений ИК излучения составляло около 20 км. Показано, что восстановления ОС CO₂ на основе измерений TOVS с разрешением 15° имеет погрешности порядка 2 ppm (менее 1 %).

Первые спутниковые измерения, нацеленные на исследование парниковых газов, включая CO₂, были начаты учеными из Японии в 1996 г. с запуском прибора IMG (Interferometric Monitor for Greenhouse gases) [80]. Прибор обладал спектральным разрешением 0.1 см⁻¹ и измерял уходящее от Земли ИК излучение в диапазоне 3.3-14 мкм с пространственным разрешением 8 км [81].

К сегодняшнему дню космическими агентствами со всего Мира было введено в эксплуатацию более десяти спутниковых приборов, которые, на основе измерений переизлученного Землей и отраженного ИК излучения, позволяют получать информацию о содержании CO₂ и других газах как во всей сухой атмосфере, так и в выделенных слоях. Это приборы GOSAT, GOSAT2 (Япония), SCIAMACHY, IASI (ЕС), OCO-2, OCO-3, AIRS, TES (США), ИКФС-2 (Россия), TanSat (Китай) и другие [47, 82-87]. Современные спутниковые измерительные системы позволяют получать информацию об ОС CO₂ с пространственным разрешением до 2-3 км (например, TanSat и OCO-2/OCO-3) и со систематической и случайной погрешностями до около 0.4 ppm (0.1%) и 0.7-1.4 ppm (0.2-0.3 %), соответственно [88].

Благодаря достигнутым успехам в понимании атмосферных физических процессов и пространственно-временной вариации источников и стоков CO₂, современные численные модели динамики газового и аэрозольного состава в атмосфере последние несколько десятилетий активно используются для мониторинга углекислого газа совместно с комплексными измерениями [89-93]. В отличие от измерений данные моделирования имеют требующуюся временную

периодичность и пространственное покрытие, полностью контролируются исследователем и часто гораздо дешевле, чем организация регулярных стационарных или полевых измерений [93]. Однако, даже самые развитые модели имеют ограничения в информации об основных влияющих факторах - атмосферный перенос, распределение источников и стоков CO_2 , величины эмиссий CO_2 , суточная и сезонная вариация эмиссий газа и т.д., которые сказываются на погрешностях моделирования.

Численные модели атмосферного переноса и динамики состава атмосферы имеют широкое применение в мониторинге атмосферного CO_2 . Они используются для (1) определения факторов, влияющих на вариацию CO_2 в атмосфере [94, 95]; (2) оценки источников и стоков газа [96, 97]; (3) прогнозирования возможных климатических изменений на Земле при различных сценариях будущих эмиссий CO_2 [98-100], а также и для иных задач.

На сегодняшний день не существует универсальной численной модели динамики газового состава атмосферы, которая подходила бы под всевозможные задачи. Можно сказать, что для определенных областей применения (например, одна из трех перечисленных выше), пространств и временных промежутков существует свой класс численных моделей. Модели, использующие для прогнозирования возможных климатических изменений от воздействия увеличивающегося содержания CO_2 в атмосфере, в основном покрывают всю поверхность Земли и наибольшую часть атмосферного слоя (как правило до сотен километров). Такие модели относятся к наиболее сложным, так как должны учитывать весь спектр физических и химических процессов (в том числе обратных связей), протекающих как в атмосфере, так и в остальных оболочках всей Земли. Примером такой модели является SOCOL (Solar Climate Ozone Links) [101]. Последняя версия этой модели SOCOL v4.0 [101] состоит из трех основных частей - модели взаимодействия между оболочками Земли (MPI-ESM1.2 [102]), химической модели, представляющей реакции с газами и аэрозолями (MEZON [103]) и модели микрофизики серосодержащих аэрозолей AER [104]. Горизонтальное пространственное разрешение модели составляет $1.9^\circ \times 1.9^\circ$ (т.е. в

среднем $\sim 200 \times 200$ км²) с вертикальным распределением на 47 гибридных уровнях от поверхности Земли до примерно 0.01 гПа. Однако в данной версии модели пространственно-временное изменение CO₂ не рассчитывается, а задается заранее из результатов иных глобальных моделей или, например, данных реанализа. Предзаданная информация о содержании CO₂ связана со схемами параметризации коротко- и длинноволновой электромагнитной радиации, приходящей к Земле и уходящей от нее, что позволяет учесть влияние вариации газа в атмосфере на изменение температуры земной поверхности и иных характеристик атмосферы.

Другой тип моделей - численные модели прогноза погоды и динамики состава атмосферы высокого пространственного разрешения на ограниченной области. Они используются, например, для исследований динамики CO₂ на территориях районов или городов с пространственным разрешением до 1 км и менее. Такие модели учитывают локальные метеорологические условия, сложный рельеф, неоднородное распределение источников и стоков CO₂ на территориях городов и иные особенности, которые пока невозможно полностью учесть в глобальных моделях.

Примером модели такого класса, которая активно используется в научных сообществах многих стран для мониторинга CO₂ и оценки антропогенных эмиссий этого газа, является WRF-Chem (Weather Research and Forecasting - Chemistry [105-107]). Как и глобальная модель SOCOL, WRF-Chem состоит из динамической и химической частей. Однако, ограничение территории исследования, задание геофизических свойств (рельеф, альbedo, температура, тип подстилающей поверхности и тд.) с пространственным разрешением до нескольких метров и описание атмосферных процессов с разрешением до 1 км и менее позволяют использовать модель WRF-Chem для анализа процессов и явлений с временными масштабами до минут (например, локальные короткопериодные изменения приземной концентрации CO₂).

1.5 Современные методики определения эмиссий CO₂, их преимущества и недостатки

Третьей составляющей современного мониторинга CO₂ в атмосфере является оценка эмиссий источников и стоков газа. Существует два метода оценки эмиссий. Первый и широко применяемый - инвентаризационный подход. Он основан на оценке антропогенных эмиссий CO₂ с помощью информации, характеризующую человеческую активность [16, 17]. Примерами подобной информации являются количество потребляемого ископаемого топлива в энергетической отрасли, промышленности, транспорте, и др., данные о землепользовании, положение теплоэлектростанций (ТЭС) и промышленных предприятий (например, металлургия), ночная засветка урбанизированных территорий и многое другое. Часть подобных данных характеризует величины эмиссий CO₂, тогда как другая - пространственно-временное распределение источников и стоков, что является важным при распределении интегральных эмиссий, например, всей страны по регионам, городам и даже по отдельным районам городов. Например, одна из глобальных баз данных антропогенных эмиссий CO₂ ODIAC (The Open-source Data Inventory for Anthropogenic CO₂) [108] обладает пространственным разрешением в среднем ~1 км, которое получено благодаря пространственному распределению суммарных эмиссий отдельных стран по известным точечным источникам и по ночной спутниковой съемке. На национальном уровне также существуют базы данных антропогенных эмиссий CO₂ высокого пространственного разрешения (например, для Китая [109]). Погрешности антропогенных эмиссий CO₂ на основе инвентаризационного подхода на национальном уровне (т.е. с территорий стран) могут достигать всего нескольких процентов [18, 19]. Однако, при переходе на масштаб города и выше погрешности оценок эмиссий могут превышать 100% [20]. Например, в работах [110] и [111] представлены оценки эмиссий CO₂ с территорий Китайских городов за 2010 и 2012 гг. Разности в оценках для некоторых городов достигают почти 80%.

Вероятно для контроля за национальным вкладом большинства развитых стран в рост содержания CO_2 в атмосфере Земли достаточно применения существующих методик инвентаризационного подхода. Однако, во-первых, не все страны предоставляют информацию, на основе которой возможно оценить антропогенные эмиссии CO_2 , равного качества и с единой регулярностью [112]. Во-вторых, для мониторинга и контроля вклада субъектов страны вплоть до анализа отдельных городов и источников на их территориях, погрешности инвентаризационного подхода, как уже было сказано, могут достигать 100% и более [20, 113]. В-третьих, согласно оценкам от ~35% [114] до более 70% [15] антропогенных эмиссий CO_2 приходится на урбанизированные территории. Соответственно, требуется качественный и комплексный мониторинг антропогенных эмиссий CO_2 и других парниковых газов с территорий крупных городов для контроля принятых обязательств по ограничению эмиссий.

Эти и другие причины привели к развитию независимого метода оценки антропогенных эмиссий CO_2 и иных парниковых газов. Он основан на высококачественных измерениях пространственно-временной вариации содержания газа, априорной информации и численном моделировании атмосферного переноса.

Суть метода заключается в соотнесении измеренного увеличения содержания CO_2 с источником при помощи информации о состоянии атмосферы за прошедший промежуток времени. Информация о прошлом состоянии атмосферы может быть получена при помощи численных моделей динамики газового состава разной сложности. В данном подходе часто используются измерения содержания CO_2 либо у поверхности Земли, либо во всей атмосфере, полученной на основе наземных, мачтовых, самолетных и спутниковых измерений [22, 24, 96, 115, 116]. Из недостатков метода можно выделить высокую стоимость измерительной аппаратуры и ее зависимость от погодных условий, что может значительно влиять на количество качественных измерений в течение года. Кроме того, как будет показано далее, недостатком метода является комплексность

численных моделей атмосферного переноса, что, например, усложняет оценку погрешности метода.

Глава 2. Оценка антропогенных эмиссий CO₂ Санкт-Петербурга с помощью боксовой модели

2.1 Задача экспериментального определения эмиссий CO₂, как последовательность решения обратных задач атмосферной оптики и атмосферного переноса

Оценка антропогенных эмиссий CO₂ при помощи данных измерений содержания газа в атмосфере, априорной информации и модели атмосферного переноса представляет из себя некорректную в классическом смысле обратную задачу и в некоторых исследованиях называется обратной задачей атмосферного переноса [117, 25, 118]. Кроме того, обратной задаче атмосферного переноса предшествует некорректная в классическом смысле обратная задача атмосферной оптики, с помощью решения которой восстанавливается содержание CO₂ в атмосфере.

Под корректностью обратной задачи в классическом смысле понимаются условия корректности по Адамару. Согласно [119] эти условия можно сформулировать следующим образом:

1. всякой функции f из множества F соответствует решение φ из множества Φ ;
2. решение φ единственно;
3. малым вариациям f соответствуют малые вариации решения φ , т.е. задача устойчива.

Ранее считалось, что задачи, не попадающие под условия корректности по Адамару не могли быть решены. Однако в 60-х годах советский математик и геофизик Андрей Николаевич Тихонов сформулировал новые условия корректности, которые позволили приближенно решать обратные некорректные в классическом смысле задачи [120]. Условия корректности по Тихонову можно сформулировать, как это сделано в [119]:

1. заранее известно, что некоторым функциям f из множества F соответствует решение φ , принадлежащие ограниченной части множества Φ (назовем его множеством M);
2. решение φ единственно, но на ограниченном множестве M ;
3. малым вариациям f , которые не выводят решение φ за пределы множества M , соответствуют малые вариации φ .

С появлением новых неклассических условий корректности по Тихонову появились возможности для решения широкого класса задач атмосферной оптики и, как следствие, задач атмосферного переноса. На Рисунке 1 представлена общая схема, описывающая основные этапы решения обратных задач атмосферной оптики и атмосферного переноса, которые в конечном итоге приводят к оценке эмиссий CO_2 . Данная схема объединяет в себе основные этапы решения двух обратных задач, которые описаны во множестве исследований [24, 96, 112, 25, 121, 26]. Несмотря на то, что далее мы сконцентрируемся на обратной задаче атмосферного переноса, схема обратной задачи атмосферной оптики представлена для того, чтобы продемонстрировать комплексность процедуры определения эмиссий CO_2 на основе измерений.



Рисунок 1: Схема обратных задач атмосферной оптики и атмосферного переноса

Не смотря на то, что определение эмиссий CO_2 на основе измеренного содержания газа и прямого моделирования переноса CO_2 от источников является

обратной задачей, сегодня не существует общей теории, которая бы использовалась для её решения. Ученые используют различные математические алгоритмы, основная задача которых минимизировать различие между данными измерений и моделирования при условии ограничения априорной информацией (например, Байесовский подход, описанный в [122]).

Как можно отметить из Рисунка 1 метод определения антропогенных эмиссий CO_2 при помощи решения обратной задачи атмосферного переноса применяют не отдельно, а вместе с инвентаризационным подходом. С точки зрения обратной задачи данные об эмиссиях на основе инвентаризационного подхода являются априорной информацией, которая часто доступна с глобальным покрытием, высоким пространственным разрешением и временной изменчивостью (от межгодовой до суточной). Используя априорную информацию и прямой оператор, которым является хорошо валидированная модель атмосферного переноса, можно перейти от эмиссий CO_2 к пространственно-временному распределению содержания газа в атмосфере. Сравнивая результаты моделирования с высококачественными измерениями содержания CO_2 , априорные эмиссии корректируются до тех пор, пока разности между результатами моделирования и измерениями не достигнут минимума. Скорректированные эмиссии при достижении условия минимизации являются решением обратной задачи атмосферного переноса. Априорная информация при этом позволяет во-первых ограничить возможные решения, а во-вторых ускоряет процесс поиска единственного решения. Используемый метод является относительно простым представлением решения обратной задачи, так как кроме всего нужно учитывать погрешности моделирования, априорной информации и измерений, от чего будут зависеть погрешности восстановленных эмиссий.

Погрешности решений некорректных в классическом смысле обратных задач сильно зависят от качества используемой априорной информации и прямого оператора. Прямым оператором обратной задачи атмосферной оптики является хорошо изученная и валидированная модель переноса радиации в атмосфере. В свою очередь прямым оператором обратной задачи атмосферного переноса

является модель динамики газового состава атмосферы (например, упомянутая ранее WRF-Chem). Такие модели очень сложны, так как описывают множество динамических и химических атмосферных процессов, взаимодействующих друг с другом.

В работе [115] представлены оценки суммарных эмиссий CO_2 от естественных и антропогенных источников для всей поверхности Земли за 2004-2006 гг. в сравнении с независимыми оценками на основе метода решения обратной задачи атмосферного переноса. Согласно исследованию, оценки варьируются от 12000 до 13000 Мт С год⁻¹, т.е. до примерно 8% относительно минимальной оценки (случайная погрешность). Однако, оценки естественных эмиссий CO_2 с твердой поверхности различаются с априорными в некоторых случаях более, чем на 100%. В работе [121] показано, что в зависимости от выбора априорных естественных эмиссий CO_2 , случайная погрешность оценок может достигать около 10% для всей поверхности Земли. При этом полученные оценки для отдельных регионов превышают априорные до ~100% (например, для территории России).

Мегаполис Санкт-Петербург – один из крупнейших промышленных центров России. Население города составляет более 5 миллионов человек, а площадь ~1400 км². На территории города расположено около десяти ТЭЦ, множество промышленных предприятий, а также наблюдается высокая транспортная активность. Очевидно, что Санкт-Петербург является крупным антропогенным источником CO_2 в России и на планете в целом. Качественная оценка антропогенных эмиссий крупных городов является важной задачей, например, для определения суммарного и регионального ежегодных вкладов России в содержание CO_2 , т.е. вкладов в изменение радиационного форсинга этого газа.

В исследованиях [24, 26] определяются суммарные антропогенные эмиссии CO_2 с территории Санкт-Петербурга на основе спектроскопических измерений общего содержания газа. Показано, что модели атмосферного переноса, используемые в данных работах, приводят к оценкам эмиссий CO_2 , которые различаются на ~30% и более. Согласно [123, 124] различия в численных моделях

динамики атмосферного состава приводят к еще более значимым разностям в оценках антропогенных и естественных эмиссий CO_2 , которые достигают ~50% и более.

Целью текущей главы является оценка антропогенных эмиссий CO_2 Санкт-Петербурга на основе решения обратной задачи атмосферного переноса при помощи измерений общего содержания CO_2 и моделирования атмосферного переноса с помощью боксовой модели. Отличием от уже проведенных оценок эмиссий CO_2 Санкт-Петербурга в [22, 24, 26] заключается в том, что, оценка эмиссий будет дана для территории города, покрытой измерениями ОС CO_2 .

2.2 Концепция балансового подхода для оценки антропогенных эмиссий CO_2

Оценка эмиссий CO_2 на основе балансового подхода основана на условии, что входящее в некоторый объем и выходящее из него количество молекул газа должно быть равным при условии отсутствия источников или стоков CO_2 внутри данного объема [125]. Таким образом не нулевая разность между вошедшим и вышедшим количеством молекул CO_2 из объема будет определять наличие и величину источников или стоков внутри объема.

Простейшее использование балансового подхода для оценки антропогенных эмиссий CO_2 может быть реализовано при помощи боксовой модели атмосферного переноса и измерений содержания газа в атмосфере (Рисунок 2) [125]. В рамках боксовой модели выделяется некоторый объем атмосферы с фиксированным размером. На границах и внутри выделенного объема X задаются входные параметры, которые описывают перенос воздуха через объем (например, скорость ветра) и его изменение внутри (количество солнечной радиации, источники и стоки газов, газовый и аэрозольный состав и др.).

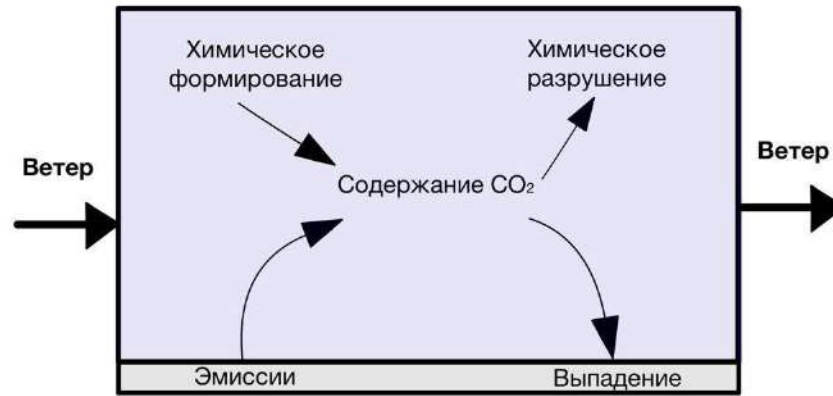


Рисунок 2: Схематическое изображение простейшей боксовой модели атмосферного переноса в форме Эйлера (адаптация изображения из [125])

Рассматривая изменение внутри выделенного объема такого газа, как CO₂, можно сделать несколько предположений, позволяющих упростить моделирование переноса газа. Во-первых, CO₂ близок к инертному и обычно при моделировании изменения его содержания в атмосфере химические реакции не учитываются. Кроме того, основным стоком CO₂ на масштабе города является растительность в вегетационный период (примерно с середины весны по середину осени) [126]. Соответственно, рассматривая динамику содержания CO₂ в месяцы со слабой активностью растений, с точки зрения выделения и поглощения CO₂, для северных регионов России можно предположить, что растительность почти не вносит вклад в содержание газа. Таким образом, в некотором приближении можно считать, что источниками CO₂ при переносе объема воздуха над некоторой территорией за короткий промежуток времени (несколько часов) является только антропогенная активность.

2.3 Данные и методы

2.3.1 Дифференциальный спектроскопический метод определения антропогенных эмиссий CO₂

В последние годы балансовый подход на основе боксовой модели реализуется для оценки антропогенных эмиссий CO₂ при помощи дистанционных спектроскопических измерений электромагнитного излучения в атмосфере. С

помощью подобных измерений возможно получить информацию о суммарном (или общем) содержании CO_2 и других газов во всей атмосфере. Главное преимущество измерений общего содержания (ОС) CO_2 в атмосфере от локальных измерений заключается в том, что они характеризуют вклад факторов в атмосферное содержание CO_2 на различных высотах [72].

Можно предположить, что исследование ОС CO_2 приведет к большей неопределенности при оценке антропогенного вклада города в содержание CO_2 . Однако, в последнее десятилетие активно развивается дифференциальный спектроскопический (далее ДС) метод оценки антропогенных эмиссий CO_2 и других парниковых газов [72, 22, 24, 95, 26, 127, 128].

Суть ДС метода основана на одновременных измерениях ОС CO_2 в наветренной и подветренной частях города при помощи взаимокалиброванных мобильных спектрометров. Так как наземные спектроскопические измерения ОС характеризуют объем воздуха, охватывающий слои тропосферы и стратосферы, то, в случае CO_2 данные измерения отражают суммарное влияние всех основных факторов. К ним относятся атмосферный перенос, биогенное воздействие, антропогенный вклад, поглощение CO_2 водной поверхностью, горение биомассы, извержения вулканов и т.д. Соответственно, разность между измерениями ОС CO_2 двух взаимокалиброванных приборов в наветренной и подветренной части города при определенных условиях должна выделить влияние города (антропогенный вклад), уменьшив влияние факторов за его пределами. Под “определенными условиями” может выступить, например, состояние атмосферы с мало изменяющимся направлением ветра, высокой скоростью ветра [127], а также с относительно большой выборкой измерений ОС CO_2 в наветренной и подветренной частях города. Первое условие, если мысленно убрать антропогенное воздействие города, обеспечит перенос близкой по свойствам фоновой воздушной массы к пунктам измерений в наветренной и подветренной частях города. Второе условие должно снизить время пребывания воздушной массы на территории города и уменьшить степень изменения её физических свойств под влиянием локальных особенностей (например, под влиянием

городского “острова тепла”). Наконец, третье условие обеспечит достоверность выводов об измеряемом вкладе города в ОС CO_2 .

Плюсы этого метода в высокой точности измерений ОС CO_2 , которая достигается за счет взаимной калибровки приборов перед измерениями. Из недостатков можно выделить ограничение измерений дневным временем и наличием облачности (при использовании солнечного излучения), а также относительно высокую стоимость мобильных спектрометров. Тем не менее дифференциальный метод измерений эмиссий может рассматриваться как перспективный наземный способ для валидации инвентаризационного и спутниковых методов определения антропогенных эмиссий CO_2 . Например, в Мюнхене создана система оперативного контроля антропогенных выбросов, основанная на основе ДС метода [129].

2.3.2 Измерения ОС CO_2 в рамках кампании ЕММЕ

В период 2019-2020 гг. в крупном российском мегаполисе Санкт-Петербурге ученые из СПбГУ и двух немецких институтов - Karlsruhe Institute of Technology (Карлсруэ, Германия) и University of Bremen (Бремен, Германия) – провели совместный проект Emission Monitoring Mobile Experiment (ЕММЕ). Одной из основных целей проекта являлась оценка эмиссий парниковых газов на основе ДС метода с территории Санкт-Петербурга. Для этого использовалась пара взаимокалиброванных ИК Фурье-спектрометров фирмы Bruker модели EM27/SUN. В период с марта по апрель 2019 г. в течение 11 дней проводились параллельные измерения ОС CO_2 и иных парниковых газов на основе в наветренной (фоновой) и подветренной (загрязненной) частях города. Для этого выбор каждого дня тщательно планировался с привлечением данных метеорологических измерений, прогноза и расчета численной модели дисперсии частиц в атмосфере HYSPLIT. Из 11 только 9 дней было выбрано участниками кампании ЕММЕ для анализа, из которых также выделялось 4 наилучших дня для оценки антропогенных эмиссий CO_2 . Описание проводимых измерений, а также

измерительных приборов подробно представлены в работе [22]. Результаты измерений кампании ЕММЕ представлены на сайте <https://www.imk-asf.kit.edu/english/3884.php> [последний доступ 05.07.2023].

Впоследствии полученные парные измерения использовались для определения антропогенного вклада Санкт-Петербурга в содержание CO_2 (Δc) в конкретный день. С помощью решения обратной задачи, используя боксовую модель и Δc , полученный, как разность между параллельными измерениями ОС CO_2 , авторы работы [22] оценили удельные антропогенные эмиссии CO_2 с территории Санкт-Петербурга и получили оценку погрешностей восстановления. Так, антропогенные эмиссии CO_2 с единичной площади Санкт-Петербурга на основе измерений ЕММЕ в 2019 г. составляют $89 \text{ кт км}^{-2} \text{ г}^{-1}$ с изменчивостью в $28 \text{ кт км}^{-2} \text{ г}^{-1}$ на основе девяти дней и $85 \text{ кт км}^{-2} \text{ г}^{-1}$ с изменчивостью $12 \text{ кт км}^{-2} \text{ г}^{-1}$ на основе 4 лучших дней измерений. Систематическая и случайная погрешности составляют около 14 и 40%, соответственно.

В работе [26] измерения ЕММЕ использовались совместно с одномерной боксовой моделью атмосферного переноса для оценки суммарных антропогенных эмиссий CO_2 Санкт-Петербурга за 2019 г. Согласно исследованию антропогенные эмиссии CO_2 Санкт-Петербурга в 2019 г. составляли $\sim 65 \text{ Мт г}^{-1}$ с погрешностью 20-40%.

Результаты более подробного исследования по оценке суммарных эмиссий CO_2 Санкт-Петербурга в 2019 и 2020 гг. на основе измерений ЕММЕ приведены в работе [24]. В отличие от [22, 26] в исследовании [24] используется модель дисперсии частиц в атмосфере HYSPLIT. Согласно исследованию, суммарные эмиссии Санкт-Петербурга в 2019 и 2020 гг. составляют примерно 75.8 и 68.4 Мт г^{-1} с изменчивостью 5.4 и 7.1 Мт г^{-1} , соответственно. Авторы указывают, что полученные оценки более, чем в два раза завышают эмиссии инвентаризационных баз данных для территории Санкт-Петербурга. Кроме того, в исследовании приводится оценка суммарных антропогенных эмиссий CO_2 Санкт-Петербурга на основе измерений приземного содержания газа. Полученная оценка примерно на 30% меньше, чем на основе ДС ИК метода. Этот вывод подкрепляет утверждения

о возможной неопределенности оценки эмиссий CO_2 на основе локальных измерений содержания газа.

В рамках программы EMME в 2019 г. использовалась пара взаимокалиброванных ИК Фурье-спектрометров фирмы Bruker EM27/SUN [70, 130]. Приборы измеряют спектры прямого солнечного излучения в ИК диапазоне длин волн $4000\text{--}12000\text{ см}^{-1}$ при спектральном разрешении 0.5 см^{-1} . На основе измеренных солнечных спектров и алгоритма, описанного в [70], восстанавливалось ОС CO_2 в сухой атмосфере. Согласно [70, 130, 71], систематическая и случайная погрешности восстановленных значений содержания CO_2 на основе измерений Bruker EM27/SUN достигают $\sim 0.5\%$ и $0.025\text{--}0.075\%$, соответственно. Однако, благодаря предварительной взаимокалибровки между двумя спектрометрами и использования разности между ними, систематические различия существенно уменьшаются (порядка 0.02%).

2.3.3 Боксовая модель атмосферного переноса

Запишем уравнение боксовой модели в лагранжевой форме (1). В отличие от эйлеровской формы, лагранжевый подход рассматривает перемещение в пространстве и времени выделенного объема воздуха. Согласно (1), концентрация CO_2 в малом объеме, переносимом над некоторой территорией, зависит только от эмиссий с поверхности этой территории

$$E = u \times \frac{H \cdot \Delta c}{\Delta x} \quad (1)$$

Здесь Δc - суммарный вклад территории, над которой проходит объем воздуха, в концентрацию CO_2 данного объема; Δx - одно из горизонтальных измерений выделенного пространства, вдоль которого перемещается выделенный объем воздуха; u - средняя скорость ветра (принимается за константу внутри объема); H - высота объема воздуха.

Δc в уравнении (1) может характеризовать вклад города, например Санкт-Петербурга, в содержание CO_2 в объеме воздуха высотой H . Высота H

может быть, например, высотой пограничного слоя Земли. Учет H в уравнении (1) связан с тем, что кроме наземных источников, газ переносится на территорию исследования с удаленных областей на разных высотах. В самом простом виде, имея лишь измерения содержания CO_2 в малом объеме воздуха (например, полученные с помощью газоанализатора), при оценке эмиссий с помощью боксовой модели полагают, что вертикальное распределение содержания газа одинаково в пределах H . Соответственно, при условиях сильно неоднородного распределения CO_2 по высоте оценки эмиссий на основе уравнения (1) и локальных измерений содержания газа могут иметь дополнительные погрешности.

Имея информацию о Δc и скорости ветра на основе измерений, с помощью уравнения (1) возможно оценить эмиссии CO_2 с территории города. Балансовый подход, реализуемый с помощью боксовой модели в различных приближениях, уже несколько десятков лет используется учеными для оценки эмиссий CO_2 , а также других климатически- и экологически важных газов и аэрозолей. Например в работе [131] используется простейшая боксовая модель совместно с парными измерениями газового и аэрозольного состава в приземном слое для анализа влияния дорожных работ на качество окружающего воздуха в районе Лондона, Великобритания. Парные измерения характеризовали содержание загрязнителей в наветренной и подветренной части автомобильной дороги. Таким образом при определенных метеорологических условиях разность между ними можно интерпретировать, как вклад в содержание загрязнителей от процессов, протекающих на самой дороге (т.е. в основном эмиссии от автомобилей и ремонтных работ). В работе [132] боксовая модель совместно с измерениями у поверхности Земли применялась для оценки эмиссий ртути в Цюрихе, Швейцария. В отличие от предыдущего исследования, вместо парных измерений использовались данные наблюдений газов ртути на станции в самом городе, а также измерения в фоновом воздухе периферийной части города, проводимые в отдельный непересекающийся период времени. Такой подход несомненно увеличивает погрешность оценок эмиссий. Отметим, что из-за локальности

измерений, используемых для оценки эмиссий в обеих работах, используется допущение о слабом вертикальном перемешивании воздуха. Для этого, например, в исследовании [132] рассматривались лишь дни с температурной инверсией в приземном слое, т.е. со слабым вертикальным переносом воздуха. В исследовании [133] мобильные спектроскопические измерения содержания NO_2 в тропосфере используются совместно с боксовой моделью для оценок суммарных годовых эмиссий газа с территории Санкт-Петербурга. Согласно результатам исследования, оценки эмиссий значительно варьируется в зависимости от дня наблюдений (почти в 4 раза относительно минимального значения).

Благодаря одновременным дистанционным спектроскопическим измерениям ОС CO_2 в фоновом и загрязненном воздухе Санкт-Петербурга, проведенным в рамках кампании ЕММЕ, в конкретный день оценивается значение антропогенного вклада города в содержание газа или Δc . Считая, что основной вклад в городские антропогенные эмиссии CO_2 вносят стационарные источники (например, сеть ТЭЦ Санкт-Петербурга), можно предположить, что Δc зависит от эмиссий CO_2 с площадей распространения воздушных масс (далее будем называть такие площади “трассами”). Таким образом Δc характеризует эмиссии CO_2 определенных частей Санкт-Петербурга.

Согласно уравнению боксовой модели (1), измеренное значение Δc зависит от величины локальных антропогенных эмиссий CO_2 , скорости ветра и длины пути перемещения воздушной массы. В нашем подходе из уравнения боксовой модели (1) для конкретного пути перемещения воздушной массы (Δx_i) на основе информации о скорости ветра (u_i) и априорных эмиссиях CO_2 (E_i) рассчитывается $\Delta c_{mod,i}$ (2). $\Delta c_{mod,i}$ характеризует антропогенный вклад Санкт-Петербурга в содержание CO_2 в день измерений ЕММЕ i на основе моделирования. Затем для каждого дня i определяется коэффициент R_i , как частное между измеренным и модельным Δc в эти дни (3). R в дальнейшем используется для коррекции априорных антропогенных эмиссий CO_2 на территории Санкт-Петербурга. Таким образом R и в последствии скорректированные априорные эмиссии CO_2 с

территории города будут являться решением обратной задачи атмосферного переноса.

В отличие от (1) переменная H (высота слоя перемешивания) в уравнении (2) здесь не используется явно, так как Δc характеризует содержание CO_2 во всей атмосфере и, таким образом, неявно содержит этот параметр.

$$\Delta c_{mod,i} = \frac{E_i \Delta x}{u_i} \quad (2)$$

$$R_i = \frac{\Delta c_{obs,i}}{\Delta c_{mod,i}} \quad (3)$$

Чтобы оценить $\Delta c_{mod,i}$ для каждого дня измерений ЕММЕ составлены свои уравнения (2) с отличающимися входными параметрами. На Рисунке 3 приводятся положения парных измерений ЕММЕ (соединены отрезками) совместно с априорными антропогенными эмиссиями CO_2 на основе базы данных ODIAС за 2019 г. Отметим, что при таком рассмотрении одна из трасс повторялась трижды, так как для одной и той же пары позиций (А2-В2) измерения ОС CO_2 проводились в три разных дня. Таким образом в первом приближении используется не более 5-ти заметно отличающихся геометрий наблюдений на территории мегаполиса.

На Рисунке 3 отчетливо видны крупные антропогенные источники CO_2 (11 темно-зеленых ячеек). Их положение хорошо согласуется с координатами ТЭЦ Санкт-Петербурга. Согласно данным ODIAС за 2019 г., эмиссии CO_2 , которые соотносятся с выбросами ТЭЦ, более, чем на два порядка превышают все остальные антропогенные эмиссии газа в городе и составляют около 30% суммарных эмиссий.

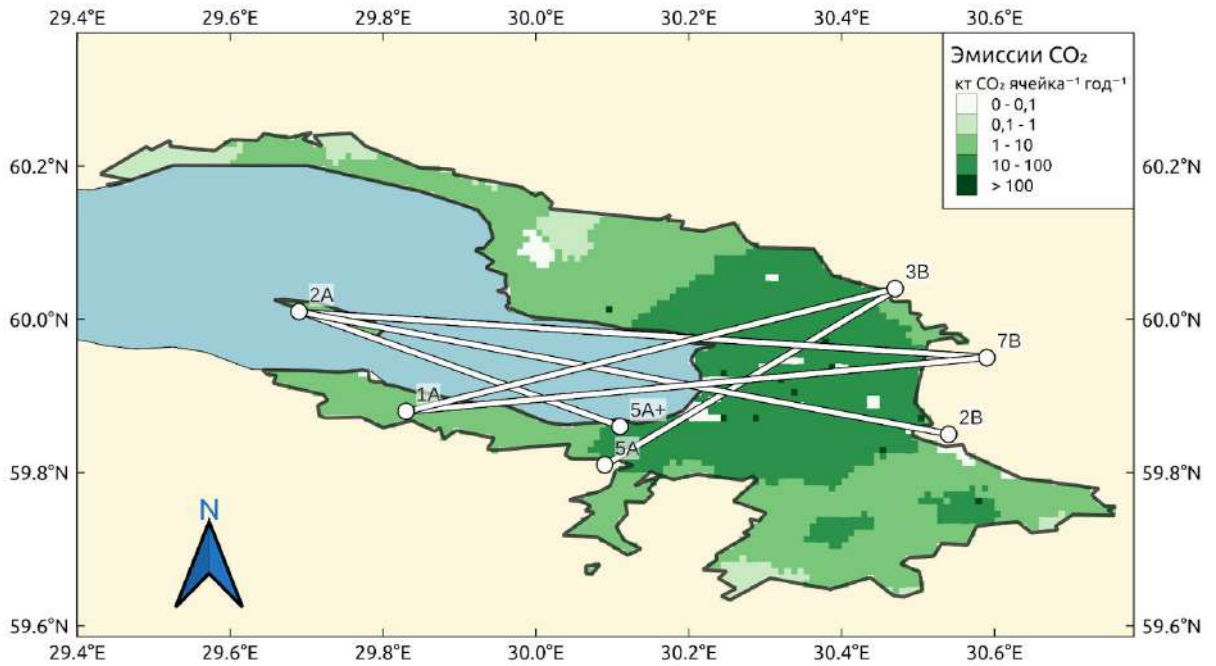


Рисунок 3: Антропогенные эмиссии CO_2 в Санкт-Петербурге по данным ODIAC за 2019 г. и позиции парных измерений ОС CO_2 в рамках кампании EMME 2019 г.

В качестве априорной информации о пространственно-временном распределении антропогенных эмиссий CO_2 в уравнении (2) используется инвентаризационная база данных ODIAC за 2019 г. (E_i). Пространственное разрешение ODIAC составляет $\sim 1 \text{ км}^2$ в среднем для всей земной поверхности и $\sim 0.43 \text{ км}^2$ для территории Санкт-Петербурга и окрестностей [134].

В качестве данных о скорости ветра в (2) используются результаты расчета численной модели прогноза погоды WRF версии 4.1.2. Численный эксперимент с помощью модели WRF проведен за март-апрель 2019 г. с пространственным разрешением 8 км. Данные моделирования выводились через час. В качестве начальных и граничных условий для моделирования WRF использовались данные анализа Global forecast system (GFS) (<https://www.ncdc.noaa.gov/data-access/model-data/model-datasets/global-forecast-system-gfs>). В работе используются значения скорости ветра у поверхности Земли и среднее в слое 0-1350 м (значение близкое к высоте пограничного слоя Земли в дневное время) на основе моделирования WRF.

В работе [26] в качестве траекторий движений воздушной массы Δx из уравнения (2) принимались прямые, соединяющие парные измерения ЕММЕ (Рисунок 3). Однако, как, например, отмечено в [22], направление приземного ветра в пределах территории города может изменяться на противоположное в период проведения параллельных измерений, т.е. в течение 3-4 ч.

Чтобы уменьшить погрешности от простого приближения атмосферного переноса воздушных масс на территории города и задать Δx в уравнении (2), в текущем исследовании использовалась модель дисперсии частиц STILT [135], объединенная с моделью прогноза погоды WRF [105] (WRF-STILT). О деталях применения модели WRF-STILT будет сказано в следующих главах.

2.4 Анализ неопределенностей оценки эмиссий CO_2 с помощью ДС метода

Напомним, что при решении обратной задачи по определению суммарных эмиссий CO_2 со всей территории Санкт-Петербурга в исследованиях [24, 26] априорные антропогенные эмиссии CO_2 с территории города домножались на поправочные множители, рассчитанные на основе отношения между измеренными и модельными Δc (3). Эти множители, определенные в конкретные дни измерений ЕММЕ (Рисунок 3), применялись для коррекции априорных антропогенных эмиссий CO_2 со всей территории Санкт-Петербурга, а не с районов города, которые вносят наибольший вклад в измеренные содержания CO_2 . Однако, в данных исследованиях не учитывался тот факт, что измерения кампании ЕММЕ охватывали преимущественно центральную часть города, где, по данным ODIAC 2018 и 2019 гг., расположены самые крупные источники антропогенных эмиссий CO_2 . Соответственно, применение корректирующих множителей, полученных на основе измерений ЕММЕ и боксовой модели (см. уравнения 2 и 3), для восстановления суммарных эмиссий с территории города, могут привести к дополнительным погрешностям.

Для количественной оценки данного фактора приведем гистограммы, которые описывают распределение антропогенных эмиссий CO_2 базы ODIAC на

всей территории Санкт-Петербурга (Рисунок 4 а). Кроме того приводятся три гистограммы распределения эмиссий территориях Санкт-Петербурга, охваченных наблюдениями на основе упрощенных прямолинейных трасс в дни измерений программы ЕММЕ в 2019 г. (Рисунок 4 б). На гистограммах приводится распределение эмиссий CO_2 по отношению к общему количеству ячеек данных ODIAC для площади всего города (Рисунок 4 а) и на выделенных упрощенных трассах (Рисунок 3) - за 4, 7 и 9 дней (Рисунок 4 б). Здесь мы используем данные ODIAC за 2018 г., так как в работе [26] используется именно эта версия. 4, 7 и 9 дней соответствуют дням измерений кампании ЕММЕ, данные которых использовались в работах [22, 24, 26].

Из приведенных гистограмм можно сделать вывод, что, согласно данным ODIAC, большую часть территории Санкт-Петербурга (Рисунок 4а) занимают эмиссии CO_2 со значениями меньше $\sim 20 \text{ кт км}^{-2} \text{ год}^{-1}$. В свою очередь наименьшую часть города занимают эмиссии со значениями более $\sim 40 \text{ кт км}^{-2} \text{ год}^{-1}$. Территории, покрываемые упрощенными трассами переноса воздуха в дни измерений ЕММЕ (Рисунок 4 б), в основном охватывают высокие значения эмиссий - от 15 до $55 \text{ кт км}^{-2} \text{ год}^{-1}$.

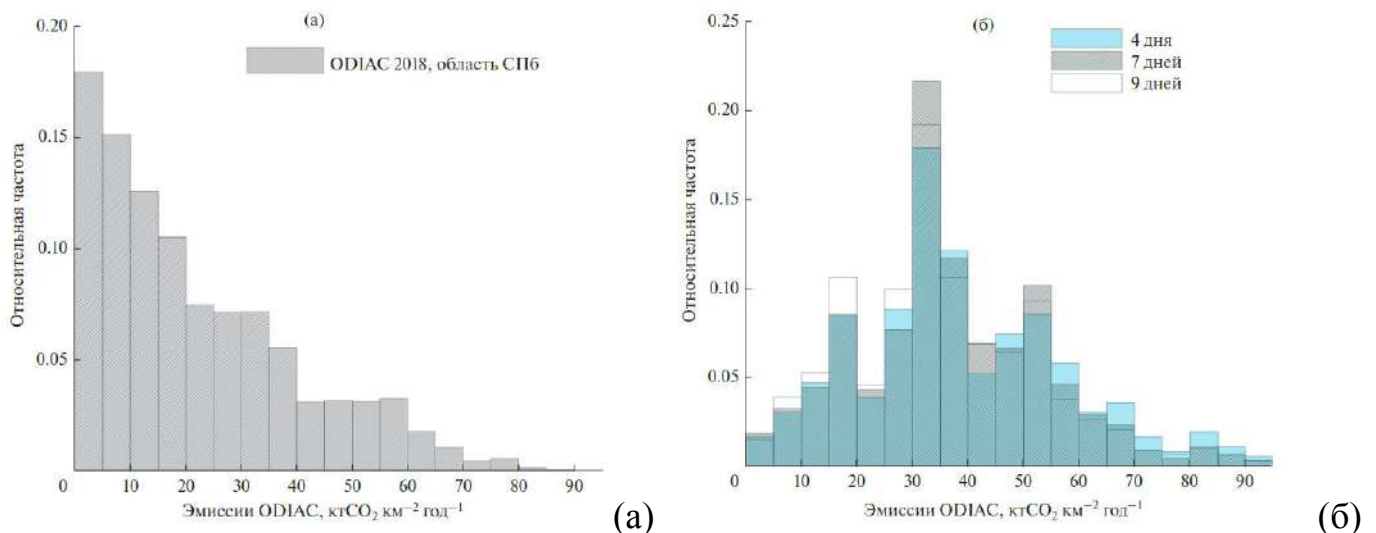


Рисунок 4: Гистограмма распределения эмиссий CO_2 по данным ODIAC за 2018 г. на всей территории Санкт-Петербурга (а) и на территориях прямолинейных трасс движения воздушных масс (б) с шириной 1 км в дни измерений ЕММЕ.

Таким образом, систематические погрешности определения суммарных антропогенных эмиссий CO_2 Санкт-Петербурга на основе измерений ЕММЕ в

2019 г. [24, 26] и выражений (2) и (3) могут быть связаны с тем, что измерения покрывали в основном части города с очень высокими удельными эмиссиями CO_2 .

Рассмотрим простой пример, иллюстрирующий влияние данного фактора. Предположим, что данные ODIAC корректно описывают пространственное распределение антропогенных эмиссий CO_2 в Санкт-Петербурге. В таком случае средние удельные эмиссии CO_2 по данным ODIAC за 2018 г. для всей территории Санкт-Петербурга, площадь которого $\sim 1400 \text{ км}^2$, составляют $\sim 21.6 \text{ кт км}^{-2} \text{ год}^{-1}$. Т.е. умножив данное значение удельной эмиссии на площадь города, мы получим “истинную” величину интегральной эмиссии CO_2 Санкт-Петербурга. Для центральной части города с наибольшими эмиссиями CO_2 по данным ODIAC (Рисунок 4, площадь $\sim 1000 \text{ км}^2$) средняя удельная эмиссия составляет примерно $28.8 \text{ кт км}^{-2} \text{ год}^{-1}$. Это примерно на 30% больше по сравнению со средними удельными эмиссиями CO_2 территории всего города. Соответственно, умножив эту величину на площадь всего города мы получим завышенное на 30% (относительно “реального”) значение суммарной антропогенной эмиссий CO_2 Санкт-Петербурга.

Соответственно возникает вопрос - каким образом возможно учесть данный фактор при оценке антропогенных эмиссий CO_2 с территории Санкт-Петербурга, используя парные ДС ИК измерения и простую боксовую модель?

Мы предлагаем подход, который заключается в оценке антропогенных эмиссий CO_2 только для территорий Санкт-Петербурга, покрытой измерениями EMME. Оставшиеся же участки города предложено покрыть априорной информацией - базой данных ODIAC за 2019 г. Уравнение (4) описывает новый подход для оценки суммарных антропогенных эмиссий CO_2 со всей территории города. В (4) \bar{R} - средний корректирующий множитель на основе всех используемых дней измерений EMME; E_c - априорные антропогенные эмиссии CO_2 с территории Санкт-Петербурга, покрытой измерениями EMME; E_{nc} - априорные антропогенные эмиссии CO_2 с территории Санкт-Петербурга, не покрытой измерениями EMME.

$$\overline{E}_s = \overline{R} * E_c + E_{nc} \quad (4)$$

2.5 Оценка территории Санкт-Петербурга, покрытой измерениями ЕММЕ

Кроме моделирования траектории перемещения воздушной массы, с помощью модели WRF-STILT возможно оценить пространственно-временное распределение вклада Санкт-Петербурга в содержание CO_2 на основе измерений ЕММЕ. Представим, что в районе Санкт-Петербурга в один из дней наблюдений кампании ЕММЕ проведено измерение ОС CO_2 в подветренной (загрязненной) части города x_{ri}, y_{rj} (точка А). Имея при этом параллельные измерения в наветренной (фоновой) части города (точка Б) и направление атмосферного переноса из А в Б можно описать антропогенный вклад Санкт-Петербурга в ОС CO_2 , как функцию от времени $\Delta c(t_m)$. Величина Δc на станции измерений x_{ri}, y_{rj} в точке А в определенный момент времени t_m зависит от переноса молекул CO_2 с удаленной от станции территории, которая включает в себя Санкт-Петербург. Если проследить откуда каждая из частиц, составляющая Δc , переместилась на измерительную станцию x_{ri}, y_{rj} к моменту времени t_m и при этом мысленно нарисовать траектории их движения на географической проекции Земли, то на этой проекции траектории сформируют область, проходящую над городом, и расширяющуюся уходя вглубь города от измерительной станции. Если при этом разделить каждую траекторию на отрезки, которые частицы преодолели за единицу времени (например за час), то выяснится, что длины отрезков изменяются. Два этих явления связаны с тем, что скорость и направления ветра в пространстве (в том числе и на территории города) постоянно изменяется. Если считать, что измеренное Δc в момент времени t_m зависит только от антропогенных эмиссий CO_2 источников Санкт-Петербурга и скорости переноса частиц над ними, то время нахождения частиц в определенных районах города

будет являться характеристикой, описывающей влияние конкретных частей города на измеренный антропогенный вклад Δc в точке x_{ri}, y_{rj} .

Модель WRF-STILT позволяет определить данную характеристику на основе расчета обратного во времени переноса частиц в атмосфере. В настоящем исследовании при помощи этой модели проведены численные эксперименты по переносу частиц назад во времени в дни измерений EMME 2019 г. Таким образом получена информация о пространственно-временном распределении частиц, пришедших в подветренный пункт измерений.

Для моделирования переноса частиц в пространстве используются метеорологические данные на основе численной модели прогноза погоды высокого пространственного разрешения WRF. С помощью WRF-STILT моделировался перенос 2000 частиц из подветренных пунктов измерений EMME отдельно для каждого из девяти дней кампании. В рамках численных экспериментов частицы перемещались назад во времени в течение 6 ч от 10 ВКВ, распределяясь по территории Санкт-Петербурга до высоты около 1500 м. Численные эксперименты проведены для каждого дня измерений EMME.

Затем, на основе полученной модельной информации с помощью уравнения (5) моделью рассчитывался параметр $f(x_i, y_j, t_m)$. Переменная f определялась для наветренного пространства, относительно измерительной станции x_i, y_j , на основе суммарного времени (Δt), в течение которого пришедшие на измерительную станцию модельные частицы (p) находились в той или иной части пространства. Единицы измерения f [ppm мкмоль⁻¹ м² с]. Таким образом, множество значений f отражает потенциальный вклад наветренной части города в измеренное Δc в конкретный момент времени t_m .

$$f(x_i, y_j, t_m) = \frac{m_{air}}{h\bar{\rho}(x_i, y_j, t_m)} \frac{1}{N_{tot}} \sum_{p=1}^{N_{tot}} \Delta t_{p,i,j,k} \quad (5)$$

В уравнении (5) $\bar{\rho}$ – средняя плотность воздуха в наветренной области города, относительно измерений; h – высота, до которой учитывается воздействие

наветренной области города на выпущенные из пункта измерений частицы; m_{air} – молярная масса воздуха; N_{tot} – количество выпущенных частиц из пункта измерений (в нашем случае 2000); x_r, t_r – место и время измерений (или, иными словами, срок, от которого проводилось моделирование переноса частиц назад во времени); x_i, y_j – место, в которое частицы были перенесены назад во времени к моменту t_m (например, место проведения измерений).

Однако, f не учитывает влияние антропогенных эмиссий CO_2 на Δc . Чтобы это исправить воспользуемся выражением (6). В нем параметр $\Delta C_{m,i,j}$ [ppm] рассчитывается, как произведение множества значений f [ppm мкмоль⁻¹ м² с] и соответствующих ему территориально априорных эмиссий CO_2 E [мкмоль м⁻² с⁻¹]. Параметр $\Delta C_{m,i,j}$ характеризует вклад наветренной части города в антропогенный вклад Δc в месте проведения измерений x_i, y_j . Он зависит от времени нахождения частиц над конкретными участками города и от пространственного распределения и величины априорных эмиссий CO_2 . Например, при высоких значениях f , но при малых или отсутствующих эмиссиях E , $\Delta C_{m,i,j}$ также будет мало или равно нулю, соответственно и наоборот. Таким образом можно считать, что пространственное распределение значений $\Delta C_{m,i,j}$ в определенный день измерений ЕММЕ является характеристикой вклада конкретной части города в измеренный Δc . Т.е. с помощью описанного метода можно оценить пространственное покрытие измерениями ЕММЕ в конкретный день.

$$\Delta C_{m,i,j}(x_r, t_r) = f(x_i, y_i, t_m)E(x_i, y_i, t_m) \quad (6)$$

На Рисунке 5 приведены значения $\Delta C_{m,i,j}(x_r, t_r)$ за период девяти дней измерений ЕММЕ 2019 г. в процентах. Данные нормированы относительно суммарного значения $\Delta C_{m,i,j}(x_r, t_r)$ на территории Санкт-Петербурга для каждого дня отдельно. Пространственное распределение $\Delta C_{m,i,j}(x_r, t_r)$ (цветная область) характеризует, согласно модели WRF-STILT, территории мегаполиса,

оказывающие основное влияние на формирование измеренного антропогенный вклад города в ОС CO_2 в каждый конкретный день. Также на изображениях нанесены прямые, соединяющие позиции параллельных измерений и характеризующие упрощенное перемещение воздушной массы этот день. На Рисунке 5 оставлены только значения $\Delta C_{m,i,j}(x_r, t_r)$, которые оказывают влияние на суммарный антропогенный вклад более 0.01%.

Анализ областей города, ответственных за формирование антропогенного вклада Санкт-Петербурга на основе данных моделирования, свидетельствует о том, что измерение фонового и загрязненного содержания CO_2 в некоторые дни проводилось относительно разных воздушных масс (3, 4, 16 и 25 апреля). Соответственно, использование измерений ЕММЕ, которые были получены в эти дни, и боксовой модели (2) для оценок антропогенных эмиссий Санкт-Петербурга предполагает горизонтальное однородное распределение содержания CO_2 в воздушной массе, приходящей к городу с разных сторон.

В некоторых случаях прямая линия достаточно хорошо аппроксимирует перемещение воздуха (например, 21 и 27 марта, 1, 6 и 24 апреля), но в других - сильно упрощает реальный характер движения (например, 16 и 25 апреля). Судя по всему, 16 и 25 апреля наблюдалась сложная метеорологическая ситуация, из-за которой $\Delta C_{m,i,j}(x_r, t_r)$, по данным моделирования, концентрируется в одной небольшой области, а не "растягивается" по территории города, как в другие дни. Анализ направления ветра по данным измерений метеостанции на крыше физического факультета СПбГУ в Петергофе показал, что в оба дня направление ветра у поверхности Земли изменялось почти на противоположное. При этом модель WRF имеет большие ошибки в моделировании направления приземного ветра именно в эти два дня (в отдельные часы до почти 180°). Данные факты могут говорить о том, что, во-первых, измерения в эти дни не стоит привлекать для оценки антропогенного вклада в нашем исследовании. Во-вторых, это может значить, что сложности в моделировании наблюдающейся метеорологической

ситуации также приводят к трудностям интерпретации измерений на основе численного моделирования.

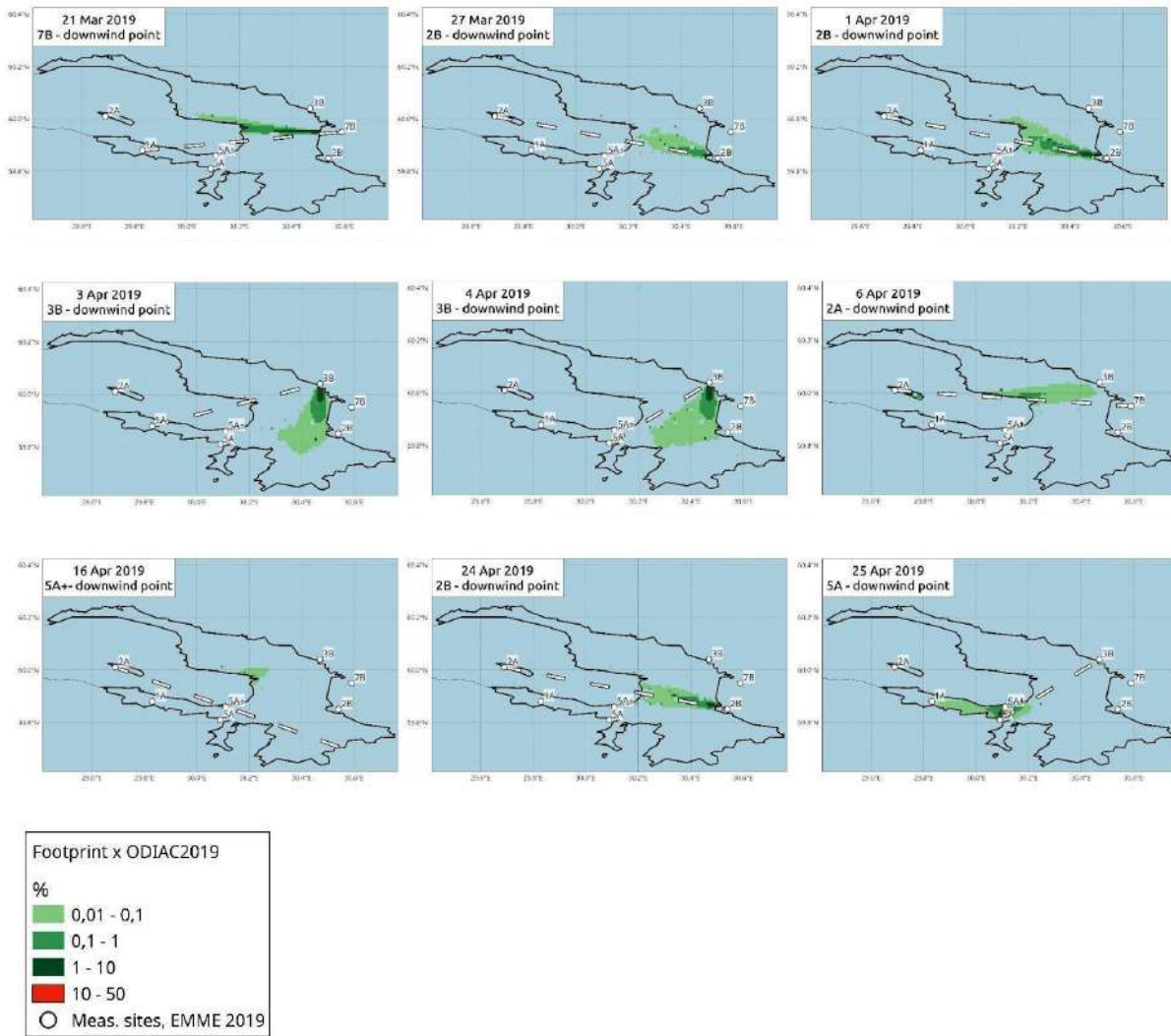


Рисунок 5: Пространственное распределение областей формирования антропогенного вклада Санкт-Петербурга в разные дни измерений программы EMME 2019 г. по данным модели WRF-STILT ($\Delta C_{m,i,j}$)

Далее $\Delta C_{m,i,j}(x_r, t_r)$ были объединены в определенные дни, чтобы оценить, какую часть города преимущественно покрывают измерения EMME. На Рисунке 6 приведен суммарный вклад наветренных областей в измерения Δc EMME 2019 за 7 (исключая 16 и 25 апреля) и 5 (исключая 3, 4, 16, 25 апреля) дней наблюдений на основе моделирования WRF-STILT. Вклад в каждой отдельной ячейке представлен в процентах относительно общего суммарного вклада на территории всего города за 7 дней.

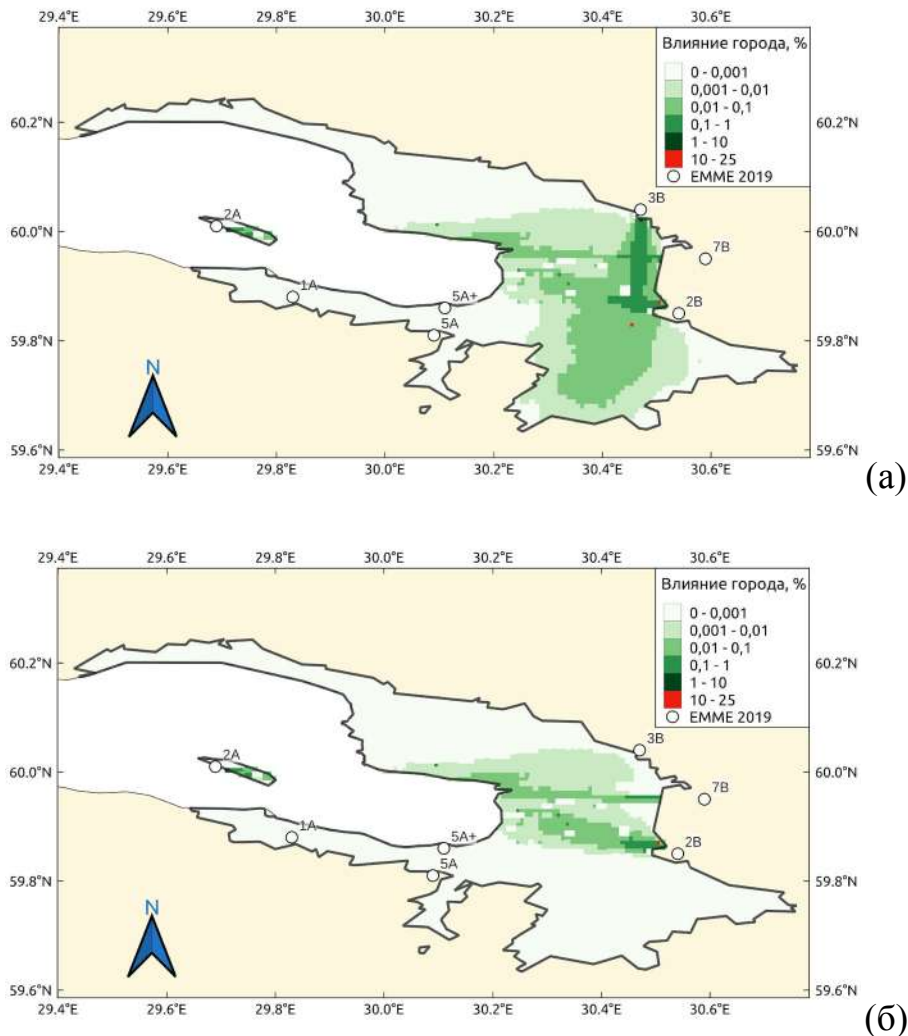


Рисунок 6: Область Санкт-Петербурга, формирующая антропогенный вклад за 7 (а) и 5 (б) дней измерений программы EMME 2019 г.

Согласно Рисунку 6 “а”, за 7 дней измерений EMME наибольшую территорию города занимают области с антропогенным влиянием в диапазоне 0-0.01%. Однако, их общее влияние составляет всего ~3.3% от суммарного антропогенного вклада за все 7 дней. Далее по размеру занимаемой площади следуют значения из диапазона 0.01-0.1%, которые составляют ~20.4% от суммарного антропогенного вклада Санкт-Петербурга (центр и юг города). Территория, оказывающая наибольшее воздействие (~76.3%) на антропогенный вклад Санкт-Петербурга имеет диапазон значений 1-21% (25% в легенде) и занимает совсем небольшую область на востоке от центра города. Из Рисунка 6 “б” для 5 дней измерений EMME отметим лишь то, что территориальный охват антропогенного вклада города примерно в два раза меньше, чем за 7 дней.

Так как выделенные на Рисунке 6 области Санкт-Петербурга, согласно данным моделирования, характеризуют часть города с наибольшим вкладом в измеренные величины Δc , то можно сказать, что данные области характеризуют покрытие города измерениями ЕММЕ за 7 и 5 дней. Из Рисунка 6 “а” видно, что 7 дней измерений покрывают около половины территории Санкт-Петербурга и большинство ТЭЦ. Это вероятно связано с тщательным планированием измерений, а также с метеорологическими условиями в течение дня. Так, в зависимости от метеорологических условий измеряемое значение Δc обусловлено переносом с разных частей Санкт-Петербурга. Согласно Рисункам 3 и 6, измерения за 7 дней не покрывают ту часть города, где по данным ODIAC 2019 удельные эмиссии CO_2 минимум на порядок меньше, чем в области, покрытой измерениями. Тем не менее, суммарные эмиссии CO_2 с площади, не покрытой измерениями, составляет примерно 50% от суммарных эмиссий Санкт-Петербурга. В свою очередь 5 дней измерений покрывают примерно в два раза меньшую территорию города и преимущественно на севере. В этом случае эмиссии CO_2 по данным ODIAC с непокрытой измерениями площади города составляют более 60% от суммарных эмиссий Санкт-Петербурга.

2.6 Определение антропогенных эмиссий CO_2 дифференциальным спектроскопическим методом

Проведем оценку суммарных антропогенных эмиссий CO_2 Санкт-Петербурга в 2019 г. на основе ДС ИК измерений антропогенного вклада города, априорных антропогенных эмиссий CO_2 из данных ODIAC и боксовой модели (2). Отметим, что в этом и других приведенных исследованиях оценка антропогенных эмиссий CO_2 дается для всего 2019 г. несмотря на то, что измерения кампании ЕММЕ проводились в течение нескольких дней марта и апреля 2019 г. Данное приближение выдвинуто из-за малого изменения антропогенных эмиссий CO_2 на основе инвентаризационной базы данных ODIAC

за 2019 г. от месяца к месяцу. Так, наибольшая суммарная разность между эмиссиями CO_2 с территории Санкт-Петербурга за месяц составляет не более 2% от суммарных годовых эмиссий города. Как будет показано далее данные 2% лежат внутри погрешности оценки антропогенных эмиссий CO_2 .

2.6.1 Моделирование антропогенного вклада Санкт-Петербурга в ОС CO_2 с помощью боксовой модели

Для дальнейшей коррекции априорных эмиссий CO_2 и новых оценок суммарных антропогенных эмиссий CO_2 Санкт-Петербурга воспользуемся боксовой моделью атмосферного переноса (уравнение 2). Используем пять дней измерений, в которые, согласно моделированию WRF-STILT, примерный перенос воздушной массы может быть аппроксимирован прямой - 21 и 27 марта, 1, 6 и 24 апреля. Как было сказано ранее, измерения фонового и загрязненного ОС CO_2 в четыре оставшихся дня (3, 4, 16 и 25 апреля) могут относиться к разным воздушным массам, поэтому найденные на их основе значения Δc вероятно имеют больше неопределенности и не используются здесь для оценки антропогенных эмиссий CO_2 .

Используя априорные антропогенные эмиссии CO_2 на примерном пути движения воздушных масс по данным WRF-STILT, информацию о скорости ветра из результатов численного моделирования WRF и боксовую модель (2) была смоделирована разность измерений ОС CO_2 в наветренной и подветренной частях Санкт-Петербурга. В Таблице 1 приведены даты пяти дней (первый столбец); оценки суммарных антропогенных эмиссий CO_2 с пути движения воздушных масс по данным ODIAС за 2018 и 2019 гг. (второй столбец); скорости ветра у поверхности Земли и среднего в слое 0-1350 м (третий и пятый столбцы); модельные оценки антропогенного вклада Санкт-Петербурга в виде $d\text{OCCO}_2$ [молек. см^{-2}], полученные с помощью боксовой модели, при разных скоростях ветра (четвертый и шестой столбцы); $d\text{OCCO}_2$ по данным измерений EMME в 2019 г. (седьмой столбец).

Согласно анализу, суммарные антропогенный эмиссии на основе данных ODIAC 2018 существенно меньше, чем ODIAC 2019 (почти в 3 раза 1-го апреля). Исключение составляет 6-е апреля, что является отражением пространственной неоднородности внесенных уточнений в базе данных ODIAC 2019. Отметим, что $dOCCO_2$ с территории города на основе моделирования, данных ODIAC 2019 г. и при использовании приземной скорости ветра, имеет лучшее соответствие с измерениями (не учитывая 6-е апреля), однако в 3 из 5 дней завышают измеренные значения. При использовании средних скоростей ветра в слое до 1350 м средняя разность между данными моделирования и измерениями увеличивается, во все дни модель занижает $dOCCO_2$ на основе измерений. Стоит выделить случай 6-го апреля, когда модельное значение более, чем в 4 раза меньше измеренного. В свою очередь среднее отклонение модельного $dOCCO_2$ по данным ODIAC 2018 по отношению к измерениям оказалось меньше на около 34% при использовании приземной скорости ветра и на более 100% при использовании средних скоростей в слое до 1350 м.

Таблица 1: Разность между ОС CO_2 ($dOCCO_2$) в наветренной и подветренной частях Санкт-Петербурга за 5 дней марта и апреля 2019 г. на основе боксовой модели (для ODIAC 2018 и 2019 гг.) и измерений EMME в 2019 г.; $dOCCO_2$ в [молек. $см^{-2} 10^{19}$]; СВ (скорость ветра) в [$м с^{-1}$] у поверхности Земли (а) и средняя в слое 0-1350 м (б).

Дата	ODIAC, $МтCO_2 г^{-1}$ (2018/2019)	Ср. СВ (~30 м)	WRF-STILT $dOCCO_2$ а	Ср. СВ (0-1350 м)	WRF-STILT $dOCCO_2$ б	$dOCCO_2$ (EMME)
21.03	3.7/7.09	7.2	0.56/1.07	11.2	0.36/0.69	1.13
27.03	8.0/14.3	3.2	1.09/1.95	7	0.5/0.89	1.67
01.04	6.2/15.2	6.4	0.6/1.48	10.5	0.37/0.9	0.98
06.04	2.9/3.1	3.6	0.87/0.93	5.4	0.58/0.62	4.24

Дата	ODIAC, МтCO ₂ г ⁻¹ (2018/2019)	Ср. СВ (~30 м)	WRF-STILT dOCCO ₂ а	Ср. СВ (0-1350 м)	WRF-STILT dOCCO ₂ б	dOCCO ₂ (EMME)
24.04	5.2/12.8	2.6	1.3/3.3	5.9	0.59/1.45	2.2

2.6.2 Оценки суммарных антропогенных эмиссий CO₂ Санкт-Петербурга

Используя расчеты dOCCO₂ с помощью боксовой модели и впоследствии уравнения (3) и (4), проведена оценка корректирующего множителя R и суммарных антропогенных эмиссий CO₂ Санкт-Петербурга за 2019 г. Напомним, что коррекция антропогенных эмиссий CO₂ выполняется только для части города, которая, на основе расчета модели WRF-STILT, покрыта измерениями EMME (более 0.001%, см. Рисунок 6 “б”). Полученные по методу (4) новые оценки антропогенных эмиссий CO₂ Санкт-Петербурга в 2019 г. на основе различной априорной информации и приближений даны в Таблице 2.

Согласно анализу, изменение методики решения обратной задачи, без изменений других особенностей интерпретации измерений привело к заметному уменьшению оценок антропогенных эмиссий – с 65 Мт/год [26] до 46 Мт/год. Т.е. уменьшение составило ~30%, что близко к оценке погрешностей эмиссий CO₂ за счет покрытия измерениями EMME преимущественно центральной части Санкт-Петербурга [26]. Вариации априорных антропогенных эмиссий, скорости ветра и типа учета измерений в определенные дни (три близкие геометрии измерений - 27 марта, 1 и 24 апреля) приводят к значительным вариациям оценок городских эмиссий от 46 до 105 Мт/год со стандартным отклонением или случайной погрешностью 19 Мт/год. Полученные суммарные эмиссии CO₂ Санкт-Петербурга в среднем в 2.3 и 1.4 раза больше эмиссий на основе инвентаризационной базы данных ODIAC за 2018 и 2019 гг. Изменение априорной информации с 2018 на 2019 гг. приводит к увеличению оценок антропогенных эмиссий CO₂ предложенной методикой примерно на 50%. Это связано с различием

между суммарными эмиссиями CO₂ Санкт-Петербурга по данным ODIAC за 2018 и 2019 гг.

Коррекция антропогенных эмиссий CO₂ Санкт-Петербурга, путем домножения априорных данных ODIAC за 2019 г. со всей территории города, как в раннем исследовании [26], приводит к увеличению оценок из Таблицы 2 на ~22-55% (в таблице не приводится).

При этом, в качестве конечного значения суммарных антропогенных эмиссий CO₂ Санкт-Петербурга за 2019 г. на основе текущего метода можно привести значение 91 ± 19 Мт г⁻¹. Оно получено, как среднее между оценками на основе базы данных ODIAC за 2019 г. и средней скорости ветра в слое 0-1350 м. Результаты и методы этого исследования представлены в работе [25].

Таблица 2: Оценки антропогенных эмиссий CO₂ Санкт-Петербурга за 2019 г. (кроме ODIAC 2018) на основе априорных (ODIAC) и скорректированных данных; WS_{surf} и WS_{avg} – скорость ветра у поверхности Земли и средняя в слое 0-1350 м по данным реанализа ERA5.

Условия расчетов		Суммарные антропогенные эмиссии CO ₂ Санкт-Петербурга, Мт г ⁻¹		
		ODIAC 2018	ODIAC 2019	
Априорные эмиссии CO ₂		31	49	
		3 отдельных измерения A2-B2	WS_{surf}	46
		WS_{avg}	66	88
Среднее по трем измерениям A2-B2		WS_{surf}	52	76
		WS_{avg}	72	105

2.7 Основные результаты и выводы

В данной части исследования показано, что:

1. Точность оценки антропогенных эмиссий CO₂ с территорий крупных городов на основе решения обратной задачи атмосферного переноса зависит от

многих факторов. К ним относятся объем и погрешности измерений содержания CO_2 в атмосфере, пространственное покрытие измерений, сложность модели атмосферного переноса, качество априорной информации и др.

2. При оценке суммарных антропогенных эмиссий CO_2 Санкт-Петербурга с помощью ДС ИК метода и одномерной боксовой модели атмосферного переноса, геометрия и количество измерений имеют важное значение. Большие систематические погрешности в оценках суммарных эмиссий могут быть вызваны такими факторами, как сильной пространственной неоднородностью антропогенных удельных эмиссий CO_2 на территории города; использованием измерений на ограниченных территориях города; различиями в априорных антропогенных эмиссиях CO_2 .

3. Предложенная методика решения обратной задачи атмосферного переноса для оценки суммарных антропогенных эмиссий CO_2 Санкт-Петербурга, учитывающая пространственный охват территории города измерениями, представляет значения антропогенных эмиссий CO_2 за 2019 г. в диапазоне 52–105 Мт/год. Этот широкий диапазон связан с использованием различных скоростей ветра, а также априорных эмиссий CO_2 в боксовой модели. Коррекция антропогенных эмиссий CO_2 по старой методике, т.е. на всей территории Санкт-Петербурга, приводит к увеличению оценок на ~22-55%.

Оценка суммарной антропогенной эмиссии CO_2 Санкт-Петербурга за 2019 г. на основе текущего метода составляет 91 ± 19 Мт г^{-1} и получена, как среднее между оценками на основе базы данных ODIAС за 2019 г. и средней скорости ветра в слое 0-1350 м.

Глава 3. Валидация WRF-Chem моделирования CO₂ в Санкт-Петербурге с помощью локальных и дистанционных измерений

3.1 Трехмерное моделирование переноса CO₂ в атмосфере

В предыдущей главе обратная задача по оценке антропогенных эмиссий CO₂ Санкт-Петербурга решается при помощи очень простой одномерной боксовой модели атмосферного переноса. Мы указываем на то, что использование этой модели оправдано в случае относительно небольших пространственных масштабов (километры и десятки километров) и мало меняющихся метеорологических условий в период проведения парных ДС измерений. Кроме того, условием для применения боксовой модели является направление переноса воздушной массы от наветренной позиции измерений к подветренной. В таком случае разность между измерениями с большей уверенностью должна минимизировать влияние иных факторов на измеряемый сигнал и выделить вклад эмиссий CO₂ с территории города. Однако, при невозможности проведения измерений в подобных условиях для последующей интерпретации антропогенного вклада города в содержание CO₂ следует рассмотреть другой класс численных моделей атмосферного переноса. Одной из таких является трехмерная численная модель прогноза погоды и состава тропосферы и нижней стратосферы высокого пространственного разрешения WRF-Chem (Weather Research and Forecast - Chemistry) [106]. Она уже много лет используется для исследований в самых разных областях атмосферных наук.

Погрешности моделирования переноса CO₂ в тропосфере с помощью WRF-Chem изучаются многими учеными. Например, в работе [136] среднее содержание CO₂ в тропосфере (XCO₂) на основе моделирования WRF-Chem и измерений ИК Фурье-спектрометром Bruker 125HR в районе г. Сен-Дени (Франция, о. Реюнион, Индийский океан) за период более года имеют среднюю разность (CP) и стандартное отклонение (COP) около -0.09 и 0.2%, соответственно при высоком коэффициенте корреляции 0.9. В работе [23] похожие исследования

проводились в Берлине (Германия) с использованием серии мобильных Фурье-спектрометров Bruker EM27/SUN за временной промежуток около месяца. При этом СР между измеренными и модельными значениями XCO_2 составляют 0.2-0.5%.

В работе [137] для анализа качества численной модели WRF-Chem описывать перенос CO_2 на территории Санкт-Петербурга используются локальные измерения приземного отношения смеси этого газа, полученные с помощью оборудования ресурсного центра (РЦ) СПбГУ “Геомодель”. Однако главный недостаток этого подхода для валидации модели заключается в том, что содержание CO_2 у поверхности Земли характеризует малый объем воздуха. Поэтому из подобных данных можно получить информацию об антропогенных эмиссиях CO_2 лишь при определенных метеорологических условиях, т.е. этой валидации недостаточно. В свою очередь среднее отношение смеси газа в слое от поверхности Земли до заданной высоты в атмосфере или XCO_2 характеризует все факторы, влияющие на содержание CO_2 в рассматриваемом слое (например, антропогенные источники, горизонтальный и вертикальный перенос, биогенный вклад и др.). Так, в исследовании [138] показано, что СР и СОР между данными моделирования WRF-Chem и измерениями XCO_2 в районе Санкт-Петербурга составляет -1 и 0.5% до коррекции химических граничных условий и -0.6 и 0.5% - после коррекции.

Адаптация модели к условиям Санкт-Петербурга и окружающей территории является важной задачей еще из-за возможного влияния на содержание CO_2 растительности в вегетационный сезон. Так, Санкт-Петербург граничит с большими лесными массивами, расположенными, как на территории Ленинградской области, так и в соседней стране - Финляндии [139].

Целью данной главы диссертации является комплексная оценка возможности трехмерной численной модели WRF-Chem описывать пространственно-временные изменения содержания CO_2 на территории Санкт-Петербурга за период около года. Оценка выполняется на основе сопоставления результатов моделирования WRF-Chem с измерениями состояния

атмосферы и содержания CO_2 на территории Санкт-Петербурга и приграничных территорий, включая южную часть Финляндии. Также анализируется согласие результатов модели WRF-Chem с независимыми данными моделирования.

Напомним, что адаптация модели и валидация ее возможности описывать перенос CO_2 в атмосфере является важным шагом при решении обратной задачи атмосферного переноса, так как от качества прямого оператора (численной модели атмосферного переноса) сильно зависит решение обратной задачи, т.е. оценки антропогенных эмиссий CO_2 .

3.2 Измерение содержания CO_2 и состояния атмосферы

На территории г. Санкт-Петербурга в Петергофе в 2019-2020 гг. проводились измерения общего содержания CO_2 в атмосфере. Измерительная станция базируется на физическом факультете СПбГУ (59.88°с.ш. , 29.83°в.д.). Петергоф расположен на удалении примерно 25 км от центра Санкт-Петербурга, являясь его частью. Он находится в слабо урбанизированной части города и окружен преимущественно смешанным лесом и полями. На территории Петергофа и прилегающей территории отсутствуют крупные стационарные источники CO_2 , в отличие от центральных районов Санкт-Петербурга.

Учеными Финского Метеорологического Института (FMI, Хельсинки, Финляндия) и Университета Хельсинки (UNEL) (60.20°с.ш. , 24.96°в.д.) выполняются наблюдения за приземной концентрацией CO_2 с крыши института [140] и множеством других параметров атмосферы. Место измерений находится в частично урбанизированном районе города Хельсинки, который окружен автомобильными дорогами, парками, садами, лесными зонами, а также в основном административными зданиями. Преобладающим типом растительности в окрестности является смешанный лес. Из-за относительной близости территорий Хельсинки и Санкт-Петербурга (около 330 км) и схожих климатических особенностей городов измерения на станции в Хельсинки будут

использоваться в исследовании для дополнительной валидации данных моделирования переноса CO₂ в приземном слое.

Также для адаптации модели биогенного вклада в исследовании используются данные измерений эмиссий и поглощения CO₂ растительностью, полученных в ходе измерений на фоновой финской станции. Станция расположена на удалении от антропогенного воздействия Хельсинки в южной части Финляндии и окружена хвойными лесами.

Кроме информации о содержании газа в атмосфере, для валидации WRF-Chem моделирования переноса CO₂ используются данные измерений метеорологических параметров, наиболее важных для атмосферного переноса - скорости и направления ветра. Метеорологические измерения выполняются как в Петергофе на базе СПбГУ, так и в Хельсинки на базе FMI и UHEL. Ниже приводятся характеристики приборов и описание измерений, которые используются в исследовании для валидации данных моделирования WRF-Chem.

3.2.1 Метеорологические параметры

В г. Петергофе (Санкт-Петербург) на базе физического факультета Санкт-Петербургского государственного университета (СПбГУ) регулярно измеряются приземные метеорологические параметры, в том числе скорость и направление ветра. Измерения выполняются при помощи прибора Weather station WXT536 на крыше физического факультета (высота ~18-20 м) и на выходе доступны примерно через каждые 10 секунд (<https://www.campbellsci.com.au/wxt536>). Измерительный прибор предоставлен РЦ СПбГУ “Геомодель”.

Измерения скорости и направления ветра у поверхности Земли в Хельсинки проводятся на станции SMEAR III Kumpula, которая расположена на территории физического факультета UHEL. Сами метеорологические измерения проводятся на крыше факультета на высоте примерно 30 м над поверхностью Земли (<https://www.atm.helsinki.fi/smeared/index.php/smeared-iii/measurements>). Параметры

ветра измеряются при помощи метеостанции Vaisala WAA141, тогда как измерения температуры воздуха - при помощи термометра Pt100. Данные получены с сайта <https://smear.avaa.csc.fi> и доступны с шагом в 1 минуту.

В п. Воейково (Ленинградская обл.) в 0 и 12 ВКВ проводятся аэрологические измерения вертикальных профилей таких метеорологических параметров, как скорость и направление ветра, температура воздуха и др. Измерения выполняются до высот ~30 км. Данные аэрологических измерений находятся в свободном доступе на сайте <http://weather.uwyo.edu/upperair/sounding.html>.

Чтобы сопоставить измеренные профили метеорологических параметров с данными численного моделирования WRF-Chem, модельные профили приведены к измеренным по давлению при помощи линейной интерполяции до высот около 50 гПа или ~20 км (верхняя граница данных моделирования WRF-Chem). На Рисунке 7 приведены примеры профилей температуры воздуха, скорости и направления ветра по данным измерений и моделирования WRF-Chem (до и после приведения к измеренному профилю) в п. Воейково за 19.12.2019 12 ВКВ. Из примеров видно, что модельный профиль, приведенный по высотам к измеренному, мало различается с оригинальным профилем по данным моделирования.

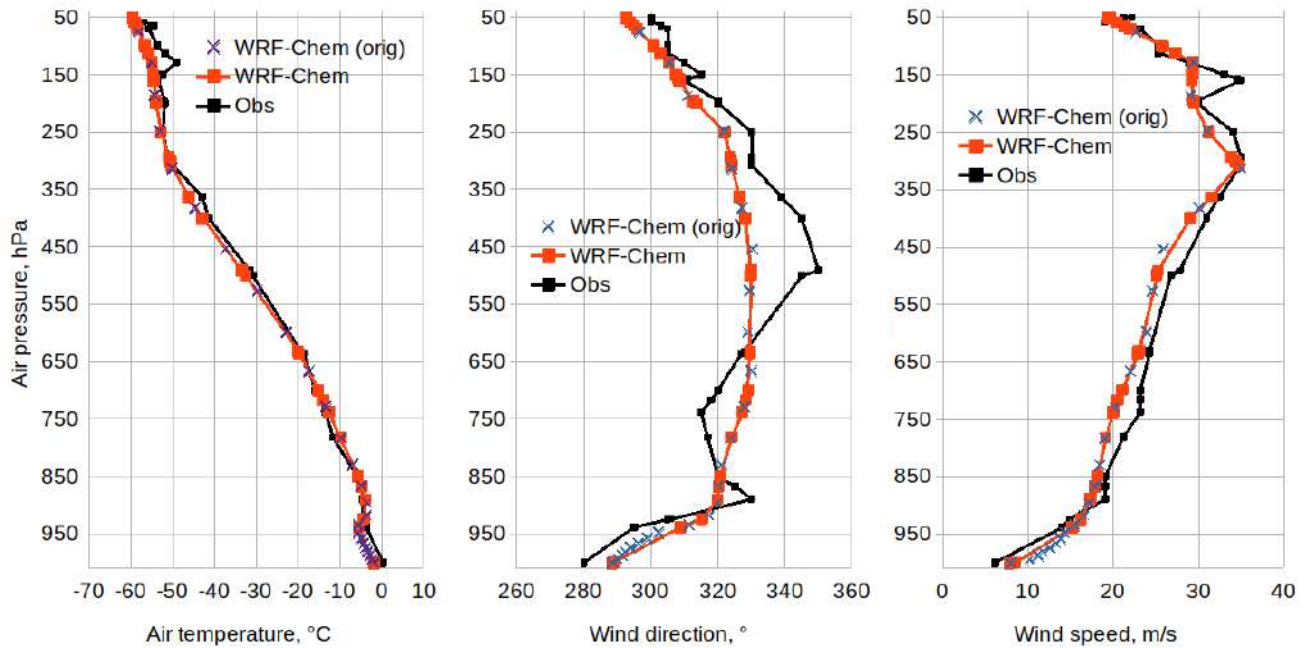


Рисунок 7: Вертикальные профили температуры воздуха, направления и скорости ветра (слева-направо) в п. Воейково за 19.12.2019 12 ВКВ по данным измерений и моделирования WRF-Chem; обозначение “WRF-Chem orig” - данные моделирования WRF-Chem до приведения к высотам измеренного профиля; “WRF-Chem” - данные моделирования WRF-Chem после приведения к высотам измеренного профиля.

3.2.2 Приземное отношение смеси CO_2

Локальные измерения приземного содержания CO_2 в Хельсинки проводятся с 2010 г. на крыше здания Финского метеорологического института на высоте около 36 м над поверхностью Земли [140]. Измерения выполняются газоанализатором фирмы Picaro модели G1301 и основаны на спектроскопическом методе внутривибраторного затухания (cavity ring-down spectroscopy или CRDS). Прибор калибруется 2-3 раза в год по стандартам WMO/GAW (<https://community.wmo.int/activity-areas/gaw>). Средняя разность измерений данного прибора и эталона (систематическая погрешность) составляет 0.01-0.04 ppm, а среднеквадратическое отклонение разности (случайная погрешность) - 0.02–0.07 ppm. Данные доступны с временным шагом в 1 ч.

3.2.3 Среднее отношение смеси CO₂ в атмосфере (XCO₂)

В исследовании используются результаты восстановления среднего отношения смеси CO₂ в сухой атмосфере (XCO₂). Значения XCO₂ получены на основе измерений проходящего солнечного ИК излучения откалиброванным прибором ИК Фурье-спектрометром Bruker EM27/SUN. Спектры измеряются в диапазоне 4000–12000 см⁻¹ с разрешением 0.5 см⁻¹. Для интерпретации спектров и восстановления вертикального профиля содержания CO₂ используется алгоритм, описанный в [70]. Значения XCO₂ рассчитываются, как среднее отношение смеси во всей сухой атмосфере на основе восстановленного профиля. Независимые исследования показали, что систематические и случайные погрешности восстановленных значений XCO₂ на основе измерений прибором Bruker EM27/SUN могут достигать ~0.5 и 0.025–0.075%, соответственно [70, 71, 130]. Восстановленные значения XCO₂ доступны с шагом ~1 мин за 3-4 часов в день с 01.2019 по 03.2020 гг. Однако, временной ряд имеет множество пропусков, как в течение дня, так и за весь исследуемый период, что в основном связано с метеорологическими условиями (доступно 83 дня измерений). Напомним, что измерения с помощью одного спектрометра проводились в Петергофе в рамках международной кампании по измерению содержания, оценке антропогенных эмиссий парниковых газов (в том числе CO₂) с территории Санкт-Петербурга (EMME) и валидации спутниковых измерений [141].

3.3 Модель WRF-Chem

Численная модель WRF-Chem (Weather Research and Forecasting - Chemistry) создана для прогноза погоды и состава нижней атмосферы (тропосфера и нижняя стратосфера). В исследовании проводится моделирование переноса CO₂ в тропосфере на территории Санкт-Петербурга (Россия), Хельсинки (Финляндия) и прилегающих территорий за период с января 2019 по март 2020 гг. В данный

временной интервал доступны комплексные измерения содержания CO_2 на исследуемых территориях как у поверхности Земли, так и во всей атмосфере.

3.3.1 Описание численного эксперимента WRF-Chem

Моделирование переноса CO_2 выполнено на четырех областях, из которых три вложенные в родительские для более корректного задания граничных условий на областях моделирования с самым высоким пространственным разрешением (Рисунок 8). Внешняя родительская область (d01) покрывает территорию площадью $800 \times 800 \text{ км}^2$ с шагом по пространству (Δx) 8 км. Область включает часть Северо-Запада России, юг Финляндии, Эстонию и Латвию. Вторая область (d02) является дочерней для d01 с площадью около $320 \times 320 \text{ км}^2$ и $\Delta x = 4 \text{ км}$. Две самые маленькие области - d03 и d04 - имеют одинаковые площади (около $110 \times 110 \text{ км}^2$) и Δx (2 км). При этом, d03 вложена в d02 и покрывает территорию г. Санкт-Петербурга, тогда как d04 вложена в d01 и покрывает г. Хельсинки. По вертикали расчет выполнен на 25 гибридных модельных уровнях с верхней границей на уровне атмосферного давления 50 гПа, что примерно соответствует высоте 18-20 км. Выше 20 км содержание CO_2 учитывается из данных моделирования сервиса CAMS, об этом подробно написано в главе 3.3.2. Шаг моделирования по времени (Δt) составляет 40 с для области d01, 20 с для d02 и 10 с для областей d03 и d04. В данном численном эксперименте CO_2 рассматривается, как полностью инертный газ, т.е. без учета химических превращений. При моделировании учитываются четыре основных фактора, влияющих на динамику содержания CO_2 в атмосфере - (1) атмосферный перенос, (2) химические граничные условия, (3) антропогенные источники и (4) биогенное поглощение и выделение CO_2 . Три последних фактора в рамках модели WRF-Chem описаны ниже. Чтобы наиболее эффективно задействовать доступные измерения содержания CO_2 и состояния атмосферы, данные моделирования WRF-Chem выводятся с частотой в 10 минут.

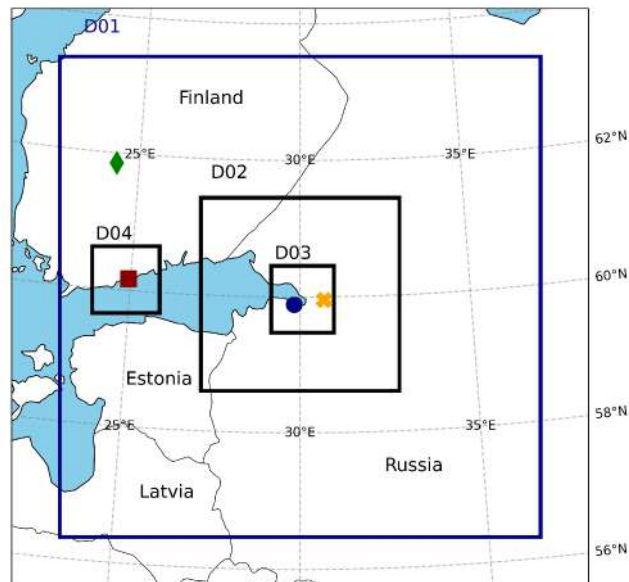


Рисунок 8: Области моделирования WRF-Chem; символы обозначают измерительные станции; Петергоф, Санкт-Петербург (синий круг); Воейково (оранжевый крестик); Хельсинки, Кумпула (красный квадрат); SMEAR II Huuhtilä forest (зеленый ромб).

В Таблице 3 приведены атмосферные процессы, параметризация которых на подсеточном масштабе использовалась при WRF-Chem моделировании. Большое количество описываемых физических процессов указывает на сложность модели WRF-Chem и высокие требования к валидации при помощи дополнительной информации на основе измерений.

Отметим, что все процессы из таблицы, кроме вертикального переноса и конвективной облачности, моделировались при помощи параметризации на всех четырех областях моделирования. В случае вертикального переноса схемы параметризаций использовались только для областей d01 и d02 (Δx 8 и 4 км, соответственно). Для областей d03 и d04 ($\Delta x=2$ км) вертикальный перенос моделировался с помощью решения дифференциального уравнения переноса по вертикали в приближенной форме. Такой подход считается более правильным при моделировании с $\Delta x < 5$ км [105].

Таблица 3: Атмосферные процессы, учитываемые в WRF-Chem на подсеточном масштабе и названия схем

Процесс	Название схемы	Ссылка
Перенос длинноволнового ЭМ излучения в атмосфере	RRTM Longwave Scheme	[142]
Перенос коротковолнового ЭМ излучения в атмосфере	Dudhia Shortwave Scheme	[143]
Модель пограничного слоя Земли	Mellor–Yamada–Janjic	[144]
Модель приземного слоя Земли	Eta Similarity Scheme	[145, 146]
Взаимодействие между поверхностью земли и нижнем слое атмосферы	Unified Noah land-surface scheme for non-urban landcover surface energy fluxes	[147]
Вертикальный перенос и образование конвективной облачности	The Grell 3D ensemble cumulus convection scheme	[148]
Микрофизика облачности	WRF Single–moment 6–class Schemes	[149]
Влияние городской застройки	Building Effect Parameterization (BEP)	[150]

Для задания начальных (НУ) и граничных (ГУ) метеорологических условий используются данные метеорологического реанализа ERA5, полученные на основе объединения данных моделирования и измерений с помощью алгоритма ассимиляции 4DVar. Данные ERA5 имеют горизонтальное пространственное разрешение 0.25° (~25 км) и распределены вертикально на 137 гибридных уровнях, покрывая слой атмосферы от поверхности Земли до около 80 км [151, 152]. Метеорологические НУ и ГУ включают такие параметры, как атмосферное давление, скорость и направление ветра, температуру воздуха, массовую долю водяного пара и геопотенциал. Метеорологические ГУ задаются в течение всего периода моделирования через каждые 6 часов.

Для задания химических ГУ используются данные CarbonTracker версии Near-Real Time v.2022-1 (CT-NRT.v2022-1). Данные представляют из себя

отношение смеси CO₂ на глобальном масштабе с пространственным разрешением 2x3° (~200x300 км²) на 35 вертикальных гибридных уровнях от поверхности Земли до высоты около 200 км [153]. CarbonTracker поддерживается сотрудниками NOAA ESRL, Боулдер, Колорадо, США (<http://carbontracker.noaa.gov>). Данные CT-NRT.v2022-1 создаются с помощью глобальной численной модели атмосферного переноса TM5 и ассимиляции локальных наземных, судовых, мачтовых и самолетных измерений содержания газа (<https://gml.noaa.gov/ccgg/carbontracker/CT2019B/>). В текущей работе химические ГУ задаются с тем же интервалом, с которым доступны сами данные CarbonTracker - 6 ч.

Антропогенные эмиссии CO₂

В качестве антропогенных эмиссий CO₂ используется инвентаризационная база данных ODIAC (Open-source Data Inventory for Anthropogenic CO₂) с глобальным пространственным распределением и высоким разрешением (0.43 км² для области моделирования) [134]. Данные за 2019 г. доступны в виде суммарных значений за каждый месяц года.

На Рисунке 9 нанесены антропогенные эмиссии CO₂ по данным ODIAC за март 2019 г. для территорий Санкт-Петербурга и Хельсинки в тCO₂ за месяц. Белым кругом на Рисунке 9 отмечены положения измерительных станций (Петергоф, Санкт-Петербург и Кумпула, Хельсинки). Согласно данным ODIAC пространственное распределение антропогенных эмиссии CO₂ по территории Санкт-Петербурга неоднородно и имеет тенденцию к максимуму в центральной части города с уменьшением к периферии. Эмиссии CO₂ с территории Хельсинки существенно ниже, чем в Санкт-Петербурге, а также имеют более однородное пространственное распределение. На примере марта 2019 г. средние удельные антропогенные эмиссии CO₂ с территории Хельсинки ниже примерно в 2.3 раза, чем в Санкт-Петербурге.

Значения эмиссий CO_2 по данным ODIAC, которые соответствовали положению теплоэлектростанций (ТЭЦ) в Санкт-Петербурге и Хельсинки согласно <https://openinframap.org>, вынесены на первые четыре вертикальных модельных уровня (высоты 50-200 м над поверхностью Земли). Суммарные антропогенные эмиссии CO_2 Санкт-Петербурга по данным ODIAC за 2019 г. составляют ~ 49.1 Мт/год.

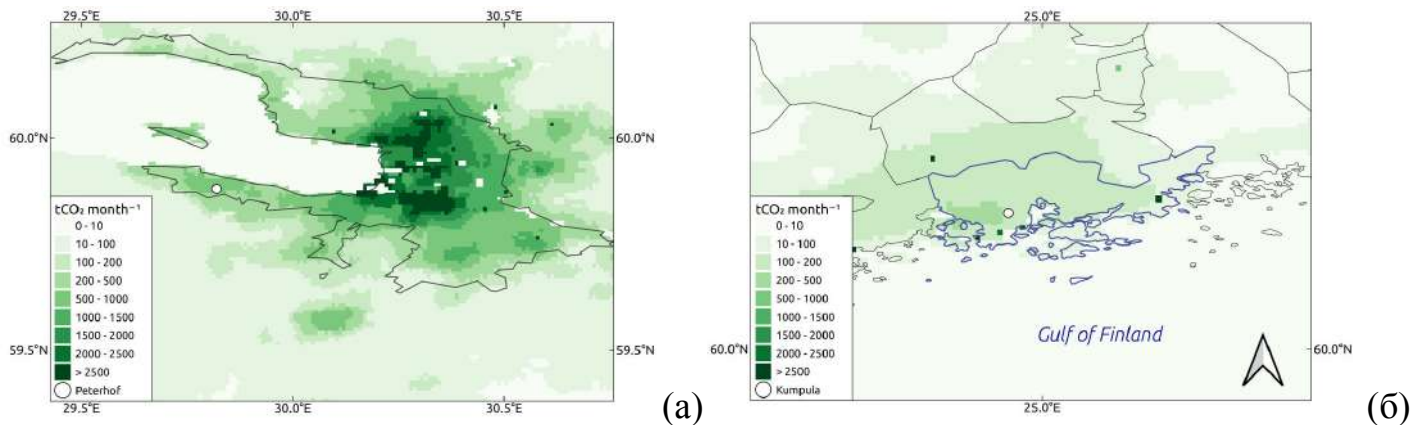


Рисунок 9: Пространственное распределение антропогенных эмиссий CO_2 по данным ODIAC за март 2019 г. для территории Санкт-Петербурга (а) и Хельсинки (б); положение измерительных станций Peterhof и Kumpula выделены белыми кругами; территория Хельсинки выделена дополнительным контуром.

Биогенные потоки CO_2

Территории городов Санкт-Петербурга и Хельсинки окружены различными типами растительности - от вечнозеленых еловых до лугов. Поэтому биогенный фактор (поглощение и выделение CO_2 растительностью в вегетационный период) может оказывать заметное воздействие на содержание газа в атмосфере в период конца весны, лета и начала осени. В исследовании [44] было показано, что содержание CO_2 в тропосфере подвержено сезонному изменению, на что скорее всего влияет активность растений в период вегетационного сезона. В исследовании [154] показано, что начало вегетационного сезона в южной части Финляндии приходится примерно на конец марта-начало апреля. При моделировании WRF-Chem для учета поглощения и выделения CO_2 растительностью в результате фотосинтеза используется модель VPRM (Vegetation

Photosynthesis and Respiration Model) [155], которая является частью используемой версии WRF-Chem. Расчет выделения и поглощения CO_2 растительностью выполняется параллельно с моделью WRF-Chem.

VPRM позволяет явно оценить поглощение CO_2 в результате процесса фотосинтеза (Gross Ecosystem Exchange или GEE) в солнечное время дня и выделение CO_2 (дыхание) в ночной период (Respiration или Resp) для семи типов растительности. Сумма этих компонент определяет поток CO_2 , вызванный активностью растений в вегетационный сезон (Net Ecosystem Exchange или NEE). Подробное описание модели представлено в работе [155]. GEE и Resp в рамках модели VPRM являются функциями температуры приземного воздуха, отраженного коротковолнового солнечного излучения в определенных диапазонах длин волн и количества поглощенной растениями фотосинтетической активной радиации.

В данном исследовании модель VPRM оптимизирована при помощи коррекции параметра Resp на основе измерений на финской станции “SMEAR II Нуутиälä Forest” для одного типа растительности (из семи учитываемых), который является преобладающим в районе станции - хвойный лес (needleleaf forest). Измерения характеристик биогенного влияния на станциях SMEAR описаны в Приложении А.

В модели VPRM параметр Resp рассчитывается при помощи линейной регрессии от температуры приземного воздуха (T_{air}). На основе измерений T и Resp подбираются параметры линейной регрессии a и b для конкретного типа растительности. В Таблице А1 приводятся оригинальные параметры a и b и адаптированные при помощи измерений к условиям в районе станции Нуутиälä. Данные параметры были добавлены в один из скриптов кода модели WRF-Chem и доступны для выбора перед запуском модели.

Оптимизация позволила уменьшить среднюю разность между данными моделирования и измерениями Resp более, чем на 10% по отношению к оригинальным параметрам a и b . На Рисунке В1 (Приложение В) приведены временные ряды GEE и Resp по данным моделирования VPRM в рамках

WRF-Chem со скорректированными параметрами a и b и измерениями на станции Нуутиälä. Модель повторяет временную изменчивость параметров с высоким коэффициентом корреляции около 0.9. При этом в среднем модель занижает измеренные на финской станции GEE и завышает Resp примерно на 11.7 и 6.9%, соответственно. Наибольшие разности наблюдаются летом, т.е. в пик вегетационного сезона.

Отметим, что согласно расчетам модели VPRM на примере июня 2019 г., биогенные эмиссии CO_2 на территории Санкт-Петербурга в среднем составляют ~3% от антропогенных эмиссий города по данным ODIAС за 2019 г. Это позволяет говорить о том, что основной вклад в содержание CO_2 на территории Санкт-Петербурга обеспечен выбросами от антропогенных источников (энергетика, автомобильный транспорт, предприятия и др.).

Другие источники и стоки CO_2

Кроме приведенных выше факторов, содержание CO_2 в атмосфере Земли зависит от менее значимых на масштабе города процессов. Один из них - поглощение и выделение CO_2 водными поверхностями [156].

Санкт-Петербург расположен на берегу крупного водного объекта - Финского залива Балтийского моря. Чтобы оценить возможное воздействие поверхности Финского залива на содержание CO_2 в Санкт-Петербурге проведено отдельное исследование, основанное на ряде независимых работ и экспериментальных данных. Для оценки эмиссий CO_2 водной поверхностью (F) используется параметризация (7) из исследований [157 - 159].

$$F = 0.251 \times U^2 \times \left(\frac{Sc}{660} \right)^{-0.5} \times K_0 \times (e_{sea} - e_{air}) \quad (7)$$

где U - скорость ветра у поверхности воды; Sc - функция от температуры поверхности воды (коэффициент Шмидта); K_0 - функция от температуры поверхности и солёности воды (коэффициент растворимости); e_{sea} и e_{air} - парциальное давление CO_2 в воде и в воздухе над её поверхностью.

Для расчета F используются данные о парциальном содержании CO_2 в воде Финского залива, температура и соленость воды на основе судовых измерений SOCOM (Surface Ocean $p\text{CO}_2$ Mapping intercomparison, <http://www.bgc-jena.mpg.de/SOCOM/>), данные парциального давления CO_2 на основе наземных спектроскопических измерений в Петергофе ИК Фурье-спектрометром Bruker 125HR и данные скорости ветра в приземном слое на основе измерений на Финской островной станции. Прибор Bruker 125HR относится к РЦ СПбГУ “Геомодель”.

Результаты указывают на то, что эмиссии CO_2 водной поверхностью согласно параметризации (7) существенно зависят от вариации скорости ветра и отношения между парциальным давлением CO_2 в воде и воздухе. Возможный вклад водной поверхности Финского залива в содержание CO_2 очень мал по отношению к антропогенному (1.7-3%). Поэтому в текущем исследовании вклад поверхности Финского залива в содержание CO_2 не учитывается при моделировании. Более детальное описание методов и полученных результатов приведены в исследовании [160].

Вклад в содержание CO_2 от лесных пожаров учитывался только через химические граничные условия.

3.3.2 Адаптация модели WRF-Chem к условиям Санкт-Петербурга

Коррекция химических граничных условий

Анализ указывает на то, что данные CarbonTracker, используемые для задания химических НУ и ГУ при WRF-Chem моделировании, завышают наземные измерения XCO_2 на основе измерений Bruker EM27/SUN в Петергофе за период 01.2019-03.2020 в среднем на 3.3 ppm с COP 1.3 ppm (Рисунок 10). Это может говорить о том, что данные CarbonTracker подвержены локальному источнику ошибок, которыми могут являться погрешности в априорных антропогенных эмиссиях CO_2 и невозможность учесть локальные особенности их распределения в районе Санкт-Петербурга из-за грубого пространственного

разрешения данных CarbonTracker. Таким образом, данные CarbonTracker требуется скорректировать перед использованием в качестве химических НУ и ГУ.

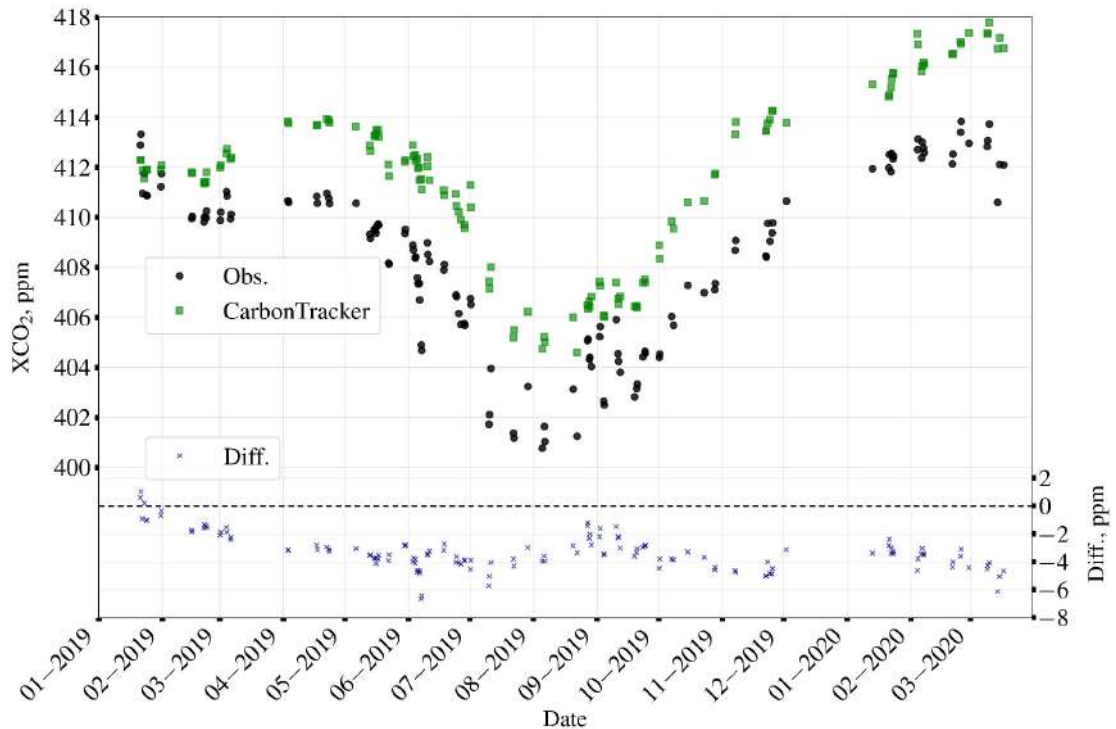


Рисунок 10: Временные ряды XCO_2 по данным измерений Bruker EM27/SUN и моделирования CarbonTracker v2022-1 за 01.2019 – 03.2020 гг., а также разность между ними (Obs-CarbonTracker, шкала справа).

При моделировании WRF-Chem данные CarbonTracker задаются на границах области. Однако в этой области отсутствуют измерения XCO_2 и прямая коррекция при помощи сопоставления с измерениями невозможна. Чтобы скорректировать химические ГУ при помощи измерений в Петергофе можно предположить, что при определенных условиях, содержание CO_2 в воздушной массе, приходящей в Петергоф, обусловлено только переносом с удаленной территории (например, с границ области моделирования). Такие условия могут быть достигнуты при отсутствии влияния крупных локальных антропогенных источников CO_2 и биогенных эмиссий газа на содержание CO_2 в Петергофе. Соответственно, отфильтруем пары данных CarbonTracker и измерений Bruker EM27/SUN в Петергофе по этим критериям.

В работе [161] проведено исследование по выявлению направлений ветра, при которых прибор Bruker 125HR в Петергофе может регистрировать

антропогенный вклад Санкт-Петербурга на содержание CO_2 . Поэтому для учета первого критерия проведен анализ измерений XCO_2 прибором Bruker EM27/SUN и приземного направления ветра в Петергофе. По результатам анализа измерения при направлениях ветра, соответствующих переносу с территории Санкт-Петербурга ($20\text{-}150^\circ$), были исключены. Для учета второго критерия данные измерений и моделирования CarbonTracker фильтруются по периоду, в который биогенный вклад максимален. Согласно данным моделирования VPRM ему соответствует период с начала весны по середину осени.

После фильтрации из 128 осталось 14 пар значений XCO_2 на основе измерений Bruker EM27/SUN и CarbonTracker в Санкт-Петербурге. Можно предположить, что отфильтрованные значения XCO_2 характеризуют общее содержание CO_2 в Санкт-Петербурге, которое в первую очередь связано с переносом воздушных масс с границ области моделирования WRF-Chem. Таким образом, благодаря отбору содержание CO_2 в этих воздушных массах при переносе от границы области к Петергофу изменялось незначительно. СР между отфильтрованными парами модельных и измеренных значений XCO_2 составляет около -1.8 ppm ($\sim -0.4\%$), т.е. данные CarbonTracker преимущественно завышают измерения XCO_2 в Санкт-Петербурге. Это является обоснованием для корректировки (уменьшения) данных CarbonTracker примерно на 0.4% для использования в качестве химических ГУ. Отношение смеси CO_2 в качестве ГУ на основе CarbonTracker были уменьшены на 0.4% на всех вертикальных уровнях.

Учет содержания CO_2 во всем слое атмосферы

Как уже было сказано в главе с описанием модели, WRF-Chem учитывает процессы в слое тропосферы и нижней стратосферы (до около $18\text{-}20 \text{ км}$). В свою очередь восстановленные значения XCO_2 на основе наземных спектроскопических измерений в Петергофе характеризуют всю атмосферу. Не учет содержания CO_2 выше $18\text{-}20 \text{ км}$ по данным WRF-Chem может привести к искусственному завышению XCO_2 относительно измеренных значений. В нашем исследовании

[138] для учета CO_2 выше примерно 20 км привлекаются данные реанализа службы Copernicus Atmosphere Monitoring Service (CAMS) версии v21r2 [162].

Отметим, что XCO_2 в районе Санкт-Петербурга за период с января 2019 по март 2020 гг. на основе CAMS в слое до около 70 км завывают измерения прибором Bruker EM27/SUN в среднем на 2.2 ppm или около 0.5%. Для дальнейшего использования данных реанализа CAMS выше примерно 20 км проведена коррекция (уменьшение) этих данных примерно на 0.5%.

В итоге XCO_2 по данным моделирования WRF-Chem ($\text{XCO}_{2\text{wrf}}$) рассчитывается следующим образом:

$$\text{XCO}_{2\text{wrf}} = \frac{(TCCO_{2\text{wrf}, <20\text{ km}} + TCCO_{2\text{CAMS}, >20\text{ km}})}{(TC_{\text{air}, \text{wrf}} - TC_{\text{water}, \text{wrf}}) * 10^6} \quad (8)$$

$$TCCO_{2\text{wrf}, <20\text{ km}} = \sum_{i=1}^N \Delta P_i * CO_{2i} \quad (9)$$

где $TCCO_{2\text{wrf}, <20\text{ km}}$ - количество молекул CO_2 в слое от поверхности Земли до примерно 20 км по данным моделирования WRF-Chem; $TCCO_{2\text{CAMS}, >20\text{ km}}$ - количество молекул CO_2 в слое выше примерно 20 км по данным реанализа CAMS; $TC_{\text{air}, \text{wrf}}$ и $TC_{\text{water}, \text{wrf}}$ - количество молекул воздуха и воды во всем атмосферном столбе; N - количество вертикальных уровней данных моделирования WRF-Chem; ΔP_i - давление выделенного вертикального слоя i по данным WRF-Chem; CO_{2i} - отношение смеси CO_2 на вертикальном уровне i по данным WRF-Chem.

3.4 Валидация результатов моделирования WRF-Chem

3.4.1 Сравнения результатов моделирования с данными измерений

Приземные скорость и направление ветра

Согласно результатам анализа модель WRF-Chem представляет изменение скорости и направления ветра у поверхности Земли в Санкт-Петербурге и Хельсинки с заметно различными погрешностями. СР достигают -1.7 м/с и 38.2° для Санкт-Петербурга и -0.8 м/с и 21.6° для Хельсинки. В среднем модель имеет лучшее соответствие для территории Хельсинки. СОР скорости ветра близко в обоих городах и составляет $1.5-1.6$ м/с. Однако, СОР направления ветра больше в Хельсинки (48.2°), чем в Санкт-Петербурге (29.3°). Завышение приземной скорости ветра моделью WRF-Chem возможно вызвано трудностями представления штилевых метеорологических условий, например ночью или в холодное время года (см. [163, 164]). Также, превышение приземной скорости ветра моделью относительно измерений могут быть вызваны близким расположением Санкт-Петербурга и Хельсинки к территории Финского залива (Балтийское море). Это может приводить к образованию локальных циркуляций в пограничном слое Земли с горизонтальным масштабом менее пространственного разрешения моделирования WRF-Chem [165]. Кроме того, на особенности локальной циркуляции воздуха может оказывать влияние другой относительно крупный водный объект, расположенный недалеко от Санкт-Петербурга - Ладожское озеро. КК между данными WRF-Chem и измерениями скорости и направления приземного ветра составляют 0.76 и 0.80 для Петергофа и 0.67 и 0.78 для Хельсинки. Похожие оценки получены в исследованиях [166, 136].

На Рисунке 11 приведены гистограммы распределения направления и скорости ветра у поверхности Земли в Петергофе (01.2019-03.2020 гг.) и Хельсинки (2019 г.) по данным измерений и моделирования. Во-первых отметим, как явно отличаются распределения направления ветра у поверхности Земли в

двух городах за период около года. В Петергофе преобладают направления в диапазонах 140-180° (ЮЮВ-Ю) и 220-260° (ЗЮЗ), а скорости - 1-4 м/с. В Хельсинки распределение направления ветра более сложное и не имеет выраженных преобладающих диапазонов. Тем не менее можно выделить 100-120°, 200-240° и 280-320°, что соответствует ВЮВ, ЮЮЗ-ЗЮЗ и ЗСЗ-ССЗ. Лишь один из данных диапазонов направлений ветра пересекается с преобладающими значениями в Петергофе - 200-240°. Возможно такие различия при относительно близком расположении двух городов обусловлены локальными особенностями, влияющие на динамические процессы малого масштаба. Анализ изменения направления ветра по сезонам указывает на то, что левый горб в распределении в Хельсинки связан в основном с направлениями весной и летом. В свою очередь левый горб в распределении направлений ветра в Петергофе по данным измерений вызван направлениями ветра в зимний и осенний периоды.

Модель WRF-Chem повторяет в основном преобладающие направления ветра в обоих городах. Однако, в Петергофе модель не воспроизводит один из двух преобладающих интервалов направления ветра - 140-180°. В свою очередь в Хельсинки, согласно данным моделирования выделяется два основных диапазона направлений ветра - 80-120° и 220-260°. Они пересекаются с двумя наблюдаемыми преобладающими диапазонами. Однако третий диапазон направлений - 280-320° - модель не повторяет. Анализ указывает на то, что модель WRF-Chem хуже представляет направление приземного ветра в Хельсинки, чем в Петергофе. На это также указывает оценка COP, приведенная выше.

Распределение скорости приземного ветра в Петергофе и Хельсинки схоже. Диапазоны наиболее частых скоростей приземного ветра в двух городах близки и составляют 1-3 м/с в Петергофе и 2-4 м/с в Хельсинки. Модель частично повторяет форму распределения измеренных скоростей ветра как в Петергофе, так и в Хельсинки. Диапазон наиболее частых значений скорости ветра по данным модели в двух городах составляет 2-4 м/с. Как было показано на примере CP, и как видно из Рисунка 11, WRF-Chem завышает скорость приземного ветра в обоих

городах. Однако модель лучше повторяет распределение скоростей ветра в Хельсинки. Анализ распределения параметров ветра в Петергофе за период только 2019 г. (как в Хельсинки) указывает на то, что оно почти не меняется по отношению ко всему периоду (01.2019-03.2020 гг.).

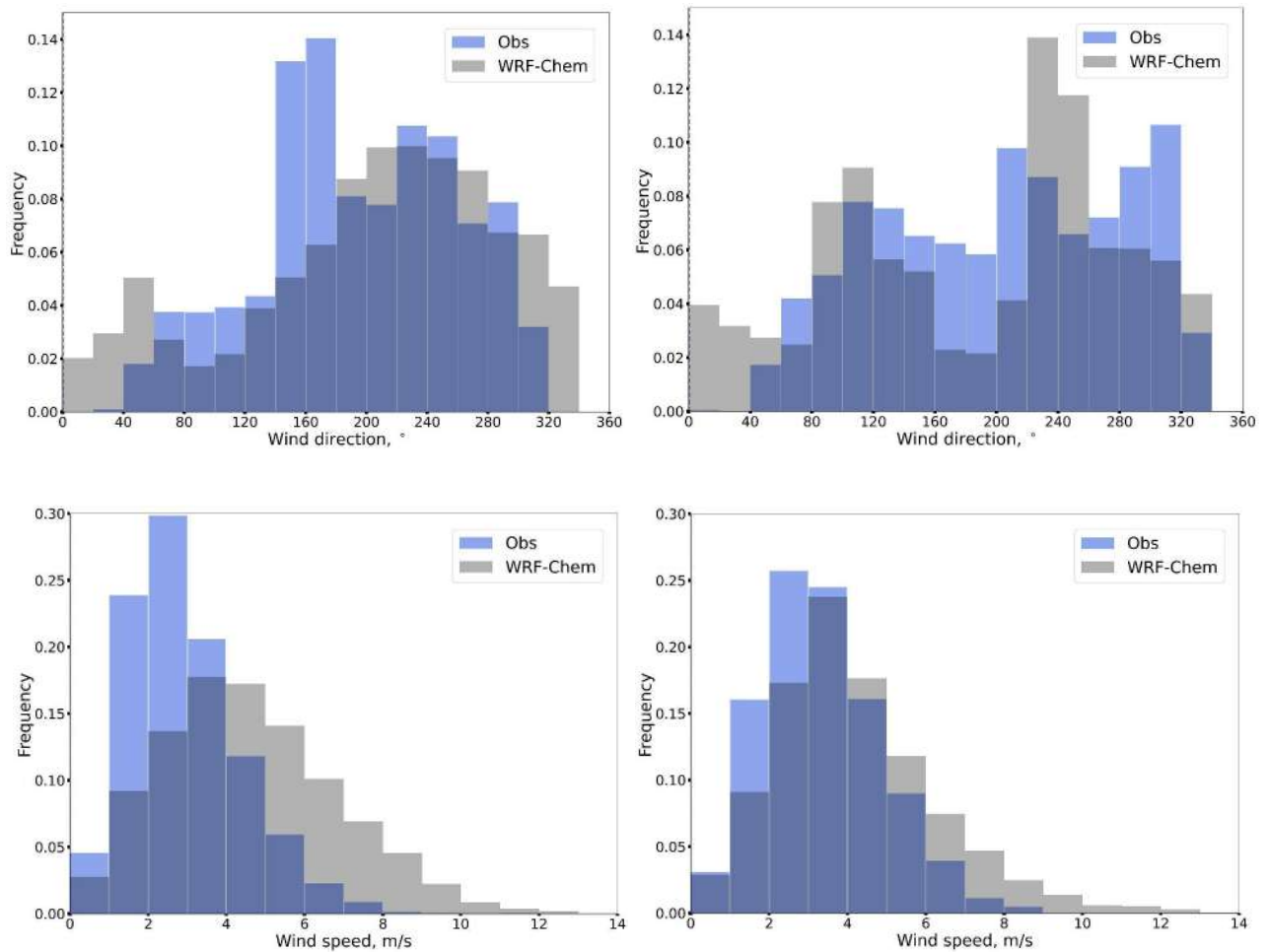


Рисунок 11: Гистограммы распределения параметров приземного ветра (направление - сверху, скорости - снизу) в Петергофе (слева) за 01.2019-03.2020 гг. и Хельсинки (справа) за 2019 г. по данным измерений и моделирования WRF-Chem

Вертикальное распределение метеорологических параметров в районе Санкт-Петербурга

На основе анализа аэрологических измерений и данных моделирования вертикальных профилей метеорологических параметров в п. Воейково за

01.2019-03.2020 гг. можно сказать, что модель WRF-Chem способна описывать вертикальный профиль изменения скорости и направления ветра и температуры воздуха в тропосфере в районе Санкт-Петербурга.

Температура воздуха по данным моделирования лучше всего согласуется с измерениями, имея СР 0.4°C, СОР 2.5°C и КК 0.99. СР и СОР для скорости ветра достигают 0.5 и 4.1 м/с, а для направления - 12.1 и 28.3°. В верхней тропосфере скорость ветра по данным измерений и моделирования может принимать значения более 40-50 м/с, что объясняет относительно большое значение СОР. КК для скорости и направления ветра составляют 0.93 и 0.86, соответственно.

Согласно результатам сопоставления вертикальных профилей скорости и направления ветра по данным моделирования и измерений, с помощью модели WRF-Chem возможно описать вариацию содержания CO₂ в тропосфере. Кроме того, вертикальный профиль температуры воздуха по данным моделирования соответствует измеренному. Вероятно это значит, что с помощью модели можно качественно описывать и вертикальный атмосферный перенос CO₂ в районе Санкт-Петербурга.

Приземное отношение смеси CO₂ в Хельсинки

На Рисунке 12 приведено временное изменение приземного отношения смеси CO₂ по данным моделирования WRF-Chem и измерений в Хельсинки за период 2019 г. В Таблице 4 приведены основные статистические характеристики рассогласования этих данных. Для средних значений приводятся доверительные интервалы при доверительной вероятности 95%, рассчитанные на основе [167]:

$$\overline{VMR}_{CO_2} \pm z \frac{STD}{\sqrt{N}} \text{ [ppm]} \quad (10)$$

где \overline{VMR}_{CO_2} - среднее отношение смеси CO₂ у поверхности Земли; z - квантиль нормального распределения или критерий Стьюдента для доверительной

вероятности 95%; STD - стандартное отклонение отношение смеси CO₂ от среднего; N - размер выборки.

Данные моделирования WRF-Chem имеют достаточно схожий характер изменения с наземными наблюдениям - КК за весь период составил около 0.73. CP и COP между измерениями и данными моделирования составляют 0.15 и 1.68%. В среднем, приземное содержание CO₂ в Хельсинки в 2019 г. по данным моделирования ниже, чем по измеренным значениям. Кроме того, отметим очень близкую естественную изменчивость (стандартное отклонение от среднего) данных наблюдений и моделирования - около 9.5-9.7 ppm.

По Рисунку 12 можно наблюдать проявляющийся вегетационный период, наиболее активное влияние которого начинается примерно в апреле и заканчивается в октябре. При этом, уменьшение приземного содержания CO₂ в период с апреля по август (пик биогенного воздействия) по отношению к периоду с января по апрель занижено по данным модели примерно на 3 ppm.

Исключение биогенного воздействия приводит к увеличению CP с 0.15 до 0.45%, но к уменьшению COP с 1.68 до 1.56%. Вероятно малая изменчивость CP между данными моделирования и измерениями при учете и не учете биогенного вклада на области моделирования связана с влиянием переноса воздуха от границ области моделирования и сильной суточной вариацией этого фактора, которая может частично сглаживать рассогласованность.

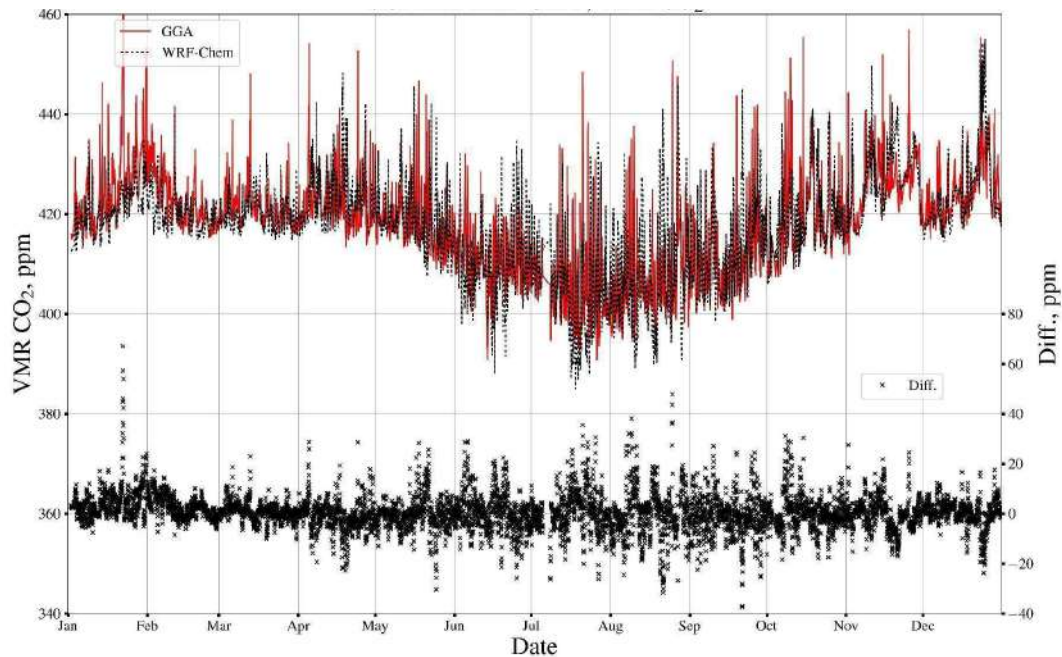


Рисунок 12: Временное изменение приземного отношения смеси CO_2 в Хельсинки (в ppm) по данным WRF-Chem и измерений за 2019 г. и разность между ними (Obs-WRF-Chem, шкала справа); GGA - данные измерений.

Таблица 4: Статистические характеристики разности среднечасового приземного отношения смеси CO_2 по данным WRF-Chem и измерениям в Хельсинки за период 2019 г.; значения в % даны относительно среднего на основе измерений; CO – стандартное отклонение, CP – средняя разность, COP – стандартное отклонение разности, КК – коэффициент корреляции; для средних значений приводится доверительный интервал при доверительной вероятности 95%.

Данные	Кол-во пар	Среднее и CO, ppm	CP и COP, ppm (%)	КК
Измерения - WRF-Chem	8565	418.0±0.2 и 9.7/ 417.4±0.2 и 9.5	0.6±0.15 и 7.0 (0.15±0.04 и 1.7)	0.73

Из 8565 пар измеренных и модельных значений с шагом в 10 минут около 59.6% всех значений имеют разность менее 1% (4.2 ppm), примерно 32.6% пар с разностью от 1 до 3% (4.2-12.5 ppm) и лишь ~8% пар с разностью более 3%. Среди наибольших разностей наблюдаются значения, достигающие 10-15% (40-60 ppm), однако их совсем немного (около 9 пар или 0.1% от всей выборки) и вероятно можно отнести к аномальным величинам.

Попробуем выяснить чем преимущественно обусловлены погрешности моделирования приземного отношения смеси CO_2 в Хельсинки в 2019 г. Рассмотрим изменение разностей между измеренными и модельными значениями

при изменении погрешности моделирования скорости и направления ветра. Очевидной связи между погрешностями моделирования приземного содержания CO_2 и погрешностями моделирования ветра у поверхности Земли в Хельсинки обнаружено не было, КК составил ~ 0.1 . Однако, рассмотрев погрешности моделирования более 3% (т.е. более ~ 12 ppm), учитывая знак погрешности, была выявлена не слишком явная обратная связь между погрешностями моделирования приземного содержания CO_2 и скорости ветра. При рассмотрении погрешностей от 12 ppm КК составил около 0.4 при размере выборки более 699 пар (из 8565). При увеличении порога погрешности до 17 ppm КК увеличился до 0.48 однако при размере выборки всего в 282 пары. Получено, что при изменении знака наибольших погрешностей моделирования приземного содержания CO_2 (более 3%), знак погрешности моделирования приземной скорости ветра меняется на противоположный. Это логично, так как при завышении приземной скорости ветра по данным модели, модельное приземное содержание CO_2 должно уменьшаться. Таким образом, можно сказать, что наибольшие погрешности моделирования приземного содержания CO_2 в Хельсинки (более 3%) вызваны погрешностями моделирования скорости приземного ветра.

На Рисунке 13 а приведен суточный ход приземного содержания CO_2 на станции в Хельсинки по данным моделирования WRF-Chem и измерениям. Время приведено в ВКВ. Цветом выделены доверительные интервалы. Как видно из графика, модель в основном повторяет изменение приземного отношения смеси CO_2 в течение дня. Так, WRF-Chem повторяет увеличение содержания CO_2 в 4-5 ВКВ с последующим уменьшением до 15 ВКВ и дальнейшим ростом. Как было указано выше, модель преимущественно занижает приземное содержание CO_2 по отношению к измерениям - до примерно 1.5 ppm в ночные часы и до менее 1 ppm в дневные. Анализ суточного хода приземного содержания CO_2 и скорости ветра за отдельные сезоны (графики не приводятся) за 2019 г. в Хельсинки указывают на то, что форма общего среднего суточного хода (Рисунок 13 а) вероятно вызвана влиянием растительности в вегетационный период (примерно с середины весны по начало осени) и выраженным суточным ходом скорости ветра весной и летом

(максимум в 12-14 ВКВ). Зимой приземное содержание CO_2 имеет относительно сглаженный суточный ход с увеличением на примерно 5 ppm к 12 ВКВ (по данным измерений), тогда как летом содержание CO_2 изменяется в течение дня до 10 ppm и более. Вероятно зимнее увеличение вызвано более частыми штилевыми условиями и большим количеством температурных инверсий. Хуже всего модель WRF-Chem представляет средний суточный ход зимой, а лучше - весной. Это возможно связано со средним завышением приземной скорости ветра в Хельсинки по данным моделирования. Доверительные интервалы по данным измерений и моделирования близки и составляют примерно 1 ppm, немного увеличиваясь к 11-12 ВКВ.

Анализ изменения приземного отношения смеси CO_2 в зависимости от дня недели указывает на то, что данные моделирования повторяют уменьшение содержания газа в выходные дни - субботу и воскресенье - по данным измерений (в среднем на 1-1.5 ppm). Снижение приземного содержания CO_2 вероятно связано с уменьшением в эти дни использования транспорта, а также с временным прекращением работы некоторых предприятий. Подобная информация не задается явно через антропогенные эмиссии CO_2 базы данных ODIAC и, очевидно, содержится в химических граничных условиях базы данных CarbonTracker, которые задаются с шагом в 6 ч.

Анализ сезонного изменения приземного отношения смеси CO_2 в Хельсинки за 2019 г. (Рисунок 13 б) по данным измерений и моделирования указывает во-первых на то, что с помощью модели WRF-Chem возможно его описывать. Во-вторых, проявляется выраженное уменьшение приземного содержания CO_2 к июлю с последующим увеличением, как было указано выше. Амплитуда изменений составляет около 24 ppm (~5-6% от среднего измеренного). Худшее согласие между данными измерений и моделирования наблюдается в январе-феврале (3-4 ppm) и в июле (1-2 ppm). Однако, в июле (как и в большинство месяцев) доверительные интервалы для данных измерений и моделирования перекрываются, что говорит о незначимости различий между среднемесячными значениями двух наборов данных в этот период. В среднем

доверительные интервалы для данных измерений и моделирования близки и составляют ~ 0.5 ppm.

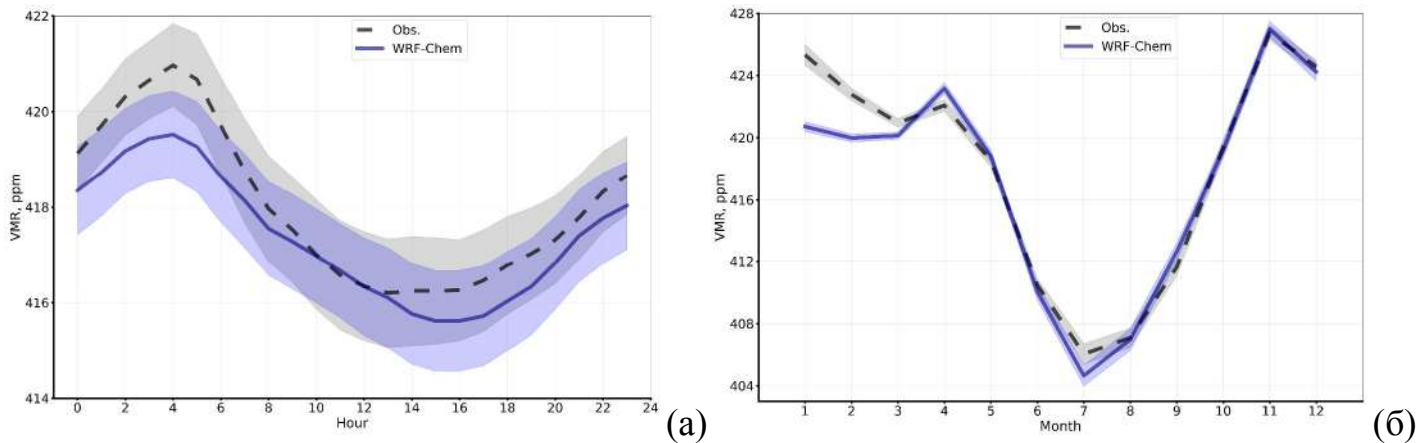


Рисунок 13: Суточный (а) и сезонный (б) ход приземного отношения смеси CO₂ в Хельсинки по данным WRF-Chem и измерений за 2019 г.; время дано в ВКВ (а) и в месяцах (б); цветом выделены доверительные интервалы средних для доверительной вероятности 95%.

ХСО₂ в Санкт-Петербурге

Временные ряды ХСО₂ (среднего отношения смеси во всей атмосфере) по данным моделирования WRF-Chem и измерений прибором Bruker EM27/SUN очень близки, имея КК ~ 0.95 (Рисунок 14, Таблица 5). Модель описывает измеренное уменьшение и последующий рост ХСО₂, вызванные активностью растений в вегетационный период (примерно с мая по октябрь 2019 г.). Анализ отдельных составляющих ХСО₂ по данным моделирования WRF-Chem показывает, что вид сезонного хода передается через химические ГУ. Внутри области моделирования модель VPRM описывает локальные особенности биогенного вклада, которые корректируют его воздействие на содержание CO₂. СР и СОР между данными моделирования и измерений составляют -1.3 и 1.2 ppm, соответственно ($\sim -0.3\%$). Анализ указывает на то, что систематическая погрешность моделирования ХСО₂ может быть связана с ошибками химических граничных условий, а также с ошибками моделирования атмосферного переноса.

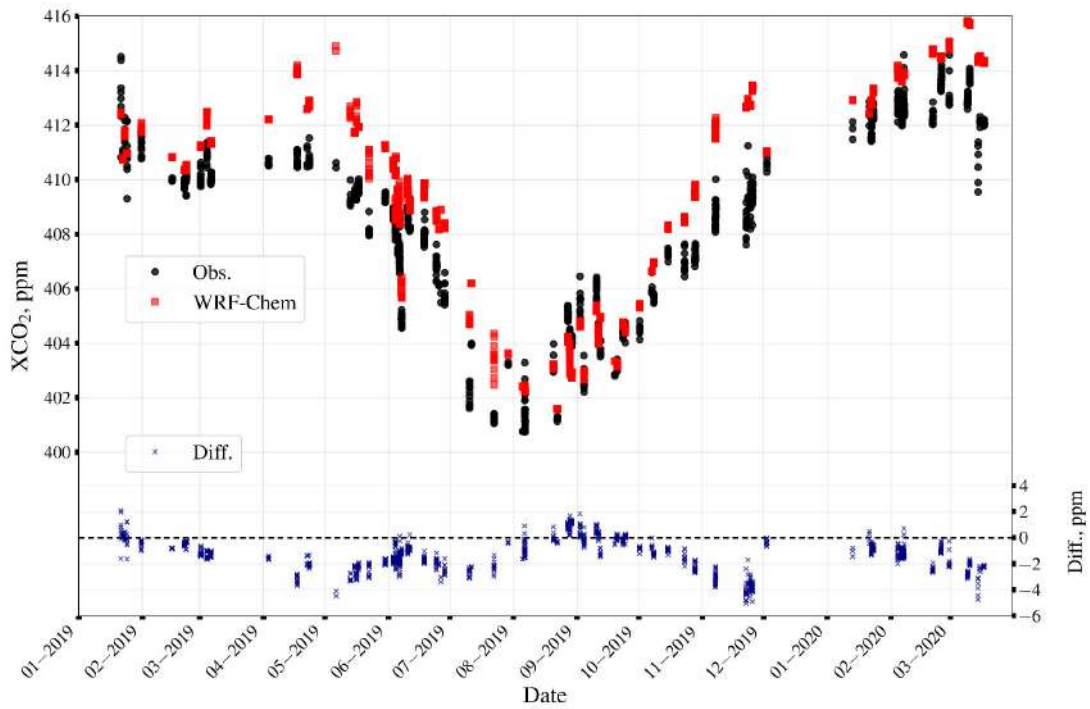


Рисунок 14: Временные ряды XCO_2 в районе Санкт-Петербурга по данным измерений Bruker EM27/SUN и моделирования WRF-Chem за 01.2019 – 03.2020 гг., а также разность между ними (Obs-WRF-Chem, шкала справа).

Таблица 5: Статистические характеристики разности XCO_2 по данным измерений Bruker EM27/SUN и моделирования WRF-Chem в районе Санкт-Петербурга за 01.2019 г. – 03.2020 г.; значения в % даны относительно среднего XCO_2 на основе измерений; CO – стандартное отклонение, CP – средняя разность, COP – стандартное отклонение разности, КК – коэффициент корреляции; для средних значений приводится доверительный интервал при доверительной вероятности 95%.

Данные	Среднее и CO, ppm	CP и COP, ppm (%)	КК
Измерения - WRF-Chem	408.4±0.2 и 3.4/ 409.7±0.2 и 3.9	-1.3±0.07 и 1.2 (-0.3±0.02 и 0.3)	0.95

Серия численных экспериментов WRF-Chem при упрощенном задании химических ГУ по вертикали, а также с использованием информации о содержании водяного пара на основе спектроскопических измерений прибором Bruker 125HR привели к CP между данными моделирования и измерениями примерно в 0.6%, т.е. в два раза выше, чем результаты из Таблицы 5 [138]. Это обусловлено, во-первых, погрешностями задания химических ГУ в слое верхней тропосферы. Во-вторых более высокое значение CP вызвано использованием

ограниченного набора данных водяного пара в атмосфере для расчета XCO_2 на основе измерений. Так, данные измерений общего содержания водяного пара прибором Bruker доступны всего за 77 дней периода 01.2019-03.2020 в виде среднесуточных. Результаты текущего исследования показывают, что корректное задание химических ГУ и привлечение информации о содержании водяного пара в атмосфере из данных моделирования WRF-Chem приводят к улучшению соответствия между модельными и измеренными значениями XCO_2 в Санкт-Петербурге. Более детальная информация о методах и результатах приведена в работе [138].

Оценим вклад трех основных факторов, влияющих на динамику XCO_2 в районе Санкт-Петербурга - (1) перенос от границ области моделирования (химические граничные условия), (2) антропогенные эмиссии CO_2 и (3) поглощение и выделение CO_2 растительностью в вегетационный период. С помощью модели WRF-Chem перенос CO_2 от трех перечисленных источников моделируется в виде трех отдельных переменных - $XCO_{2 \text{ Границы}}$, $XCO_{2 \text{ Ант}}$ и $XCO_{2 \text{ Био}}$. Сумма этих переменных (11), после интегрирования по вертикали, дает общее содержание CO_2 или XCO_2 , которое представлено в анализе выше:

$$XCO_2 = XCO_{2 \text{ Границы}} + XCO_{2 \text{ Ант}} + XCO_{2 \text{ Био}} \quad (11)$$

Данный подход позволяет проанализировать несколько сценариев при которых будем варьировать три компоненты XCO_2 . Во первых мы сможем понять значимость каждого из трех факторов, а во вторых оценить какой из сценариев приведет к меньшей систематической и случайной погрешности моделирования XCO_2 . Отметим, что $XCO_{2 \text{ Ант}}$ и $XCO_{2 \text{ Био}}$ зависят только от антропогенной и биогенной активности внутри области моделирования. Влияние антропогенных эмиссий CO_2 и активности растений вне области моделирования задается через граничные условия. Таким образом принятие $XCO_{2 \text{ Ант}}$ и $XCO_{2 \text{ Био}}$ в (11) за 0 ppm исключает влияние антропогенной и биогенной активности только на области моделирования.

В Таблице 6 перечислены 9 сценариев, включая контрольный (Контр.) и дано краткое описание в чем они заключаются. На Рисунке 15 представлены значения CP (а) и COP (б) между данными измерений Bruker EM27/SUN и моделирования WRF-Chem в Санкт-Петербурге за 01.2019-03.2020 гг. На графике с CP нанесены доверительные интервалы для вероятности 95%.

Во-первых отметим, что для всех сценариев COP варьируется от примерно 0.30 до 0.33%, что составляет ~ 0.1 ppm. Можно считать, что COP практически не изменяется. Исключение биогенного вклада (сценарий 2) приводит к увеличению CP примерно на 0.1%, тогда как исключение только антропогенного вклада (сценарий 3) приводит к незначительному уменьшению CP на 0.05% относительно контрольного сценария 1. Нужно отметить, что CP для первых пяти сценариев перекрываются в доверительном интервале и можно считать разности между ними статистически не значимыми. Наименьшее CP наблюдается для сценария 6 (уменьшение химических граничных условий на 0.3%), при этом доверительный интервал не перекрывается с CP остальных сценариев. При последующем уменьшении вклада переноса CO_2 от границ области моделирования (сценарии 7-9) CP относительно сильно увеличивается (до $\sim 0.7\%$).

Таблица 6: Сценарии вариации компонент XCO_2 в Санкт-Петербурге за 01.2019-03.2020 гг. по данным моделирования WRF-Chem; $XCO_{2\text{ Границы}}$, $XCO_{2\text{ Био}}$, $XCO_{2\text{ Ант}}$ - значения XCO_2 на основе данных моделирования в районе наземных измерений в Петергофе от границ области моделирования, биогенной активности и антропогенных эмиссий, соответственно; N - номер сценария.

N	Название	Описание
1	Контр.	Контрольный численный эксперимент WRF-Chem $XCO_2 = XCO_{2\text{ Границы}} + XCO_{2\text{ Ант}} + XCO_{2\text{ Био}}$
2	Без $XCO_{2\text{ Био}}$	$XCO_2 = XCO_{2\text{ Границы}} + XCO_{2\text{ Ант}}$
3	Без $XCO_{2\text{ Ант}}$	$XCO_2 = XCO_{2\text{ Границы}} + XCO_{2\text{ Био}}$
4	Без $XCO_{2\text{ Био}}$ и $XCO_{2\text{ Ант}}$	$XCO_2 = XCO_{2\text{ Границы}}$
5	$XCO_{2\text{ Границы}}$ уменьшено	$XCO_2 = XCO_{2\text{ Границы}} * 0.999 + XCO_{2\text{ Ант}} + XCO_{2\text{ Био}}$

N	Название	Описание
	на 0.1%	
6	ХСО ₂ Границы уменьшено на 0.3%	$ХСО_2 = ХСО_{2\text{ Границы}} * 0.997 + ХСО_{2\text{ Ант}} + ХСО_{2\text{ Био}}$
7	ХСО ₂ Границы уменьшено на 0.5%	$ХСО_2 = ХСО_{2\text{ Границы}} * 0.995 + ХСО_{2\text{ Ант}} + ХСО_{2\text{ Био}}$
8	ХСО ₂ Границы уменьшено на 0.7%	$ХСО_2 = ХСО_{2\text{ Границы}} * 0.993 + ХСО_{2\text{ Ант}} + ХСО_{2\text{ Био}}$
9	ХСО ₂ Границы уменьшено на 1%	$ХСО_2 = ХСО_{2\text{ Границы}} * 0.990 + ХСО_{2\text{ Ант}} + ХСО_{2\text{ Био}}$

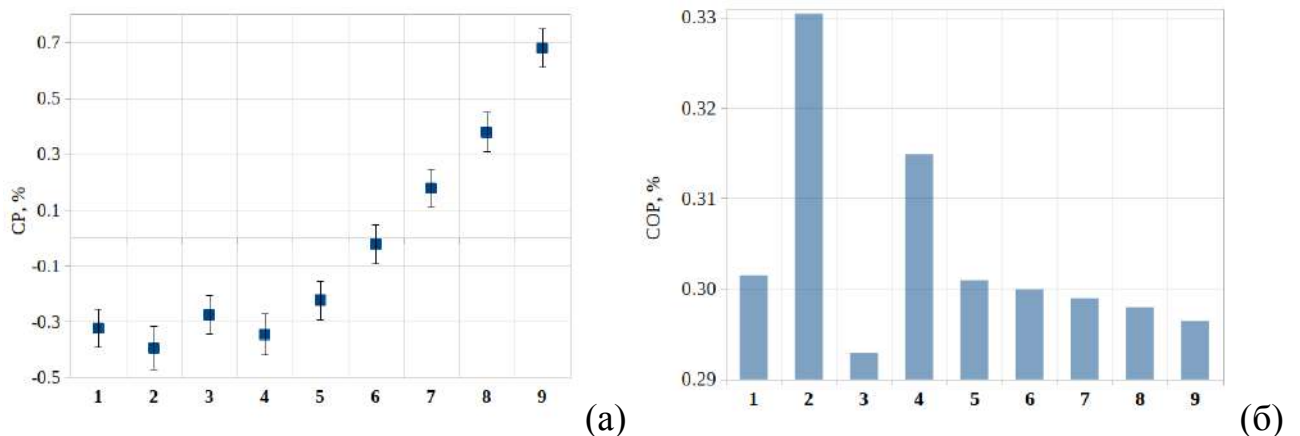


Рисунок 15: CR (а) и COP (б) между ХСО₂ по данным измерений Bruker EM27/SUN и моделирования WRF-Chem по девяти сценариям в Санкт-Петербурге за 01.2019-03.2020 гг.; описание сценариев см. в Таблице 6; значения даны в % относительно среднего ХСО₂ на основе измерений.

Таким образом, уменьшение вклада от химических граничных условий в ХСО₂ на территории Санкт-Петербурга можно добиться при их дополнительном уменьшении еще на 0.3%. Тем не менее, COP при этом практически не изменится и также будет составлять ~0.3%. Можно предположить, что величину COP обеспечивают погрешности в априорных антропогенных эмиссиях СО₂ и погрешности моделирования биогенного вклада. Тот факт, что исключение обоих факторов не приводит к заметным изменениям COP может свидетельствовать,

например, о погрешностях пространственного распределения эмиссий CO_2 или их суточной, недельной или месячной вариации.

3.4.2 Сравнения результатов моделирования WRF-Chem с независимой модельной информацией

Из-за более грубого пространственного разрешения реанализа CAMS v21r2 по отношению к данным моделирования WRF-Chem, сопоставление проведено только относительно XCO_2 . Так, в исследовании [168] сопоставлены значения приземного отношения смеси CO_2 и XCO_2 на основе реанализа CAMS более ранней версии (v18r3) и измерений (локальных и дистанционных) в районе г. Санкт-Петербурга (Россия) за 2018 г. Показано, что разности приземного отношения смеси CO_2 на основе данных реанализа CAMS и локальных измерений значительно зависят от сезона и меняются до 3%. Тоже касается и корреляции, которая варьируется от 0.26 до 0.81 в зависимости от месяца. Однако, этого следовало ожидать из-за зависимости приземного отношения смеси CO_2 от локальных особенностей территории Санкт-Петербурга, которые невозможно учесть при пространственном разрешении более 100 км.

Анализ сопоставления XCO_2 по данным WRF-Chem и CAMS за период с января 2019 по март 2020 гг. указывает на их близость. Так, CP и COP составляют 0.15 и 0.3% при очень высокой корреляции ($\text{KK} = \sim 0.96$). Данные WRF-Chem в основном немного занижают XCO_2 относительно данных CAMS. При этом наибольшие разности наблюдаются в вегетационный период - примерно с мая по октябрь 2019 г. (в некоторые дни до более 5 ppm). Это может указывать на различия двух моделей в представлении биогенного вклада в содержание CO_2 . Отметим, что вариация XCO_2 на основе реанализа CAMS более сглаженная по сравнению с WRF-Chem. Их стандартные отклонения от среднего составляют около 3.4 и 4.2 ppm, соответственно. Возможно это связано с более грубым пространственным разрешением данных CAMS, которое сглаживает локальные особенности антропогенного влияния Санкт-Петербурга на XCO_2 .

На Рисунке 16 приведены разности между данными XCO_2 в Санкт-Петербурге на основе измерений (Bruker EM27/SUN) и моделирования (WRF-Chem, CAMS v21r2 и CarbonTracker v2022-1). Отметим, что данные CAMS и CarbonTracker доступны с частотой 3 и 6 ч, соответственно, из-за чего минимальный временной шаг при сопоставлении составляет 6 ч. Можно заключить, что данные моделирования WRF-Chem лучше всего соответствуют измерениям. СР для WRF-Chem, CAMS и CarbonTracker составляют 1.3, 2.3 и 3.3 ppm (0.3, 0.5 и 0.8%), соответственно. Вероятно лучшее соответствие между данными измерений и моделирования WRF-Chem связаны с более высоким пространственным разрешением по отношению к данным CAMS и CarbonTracker.

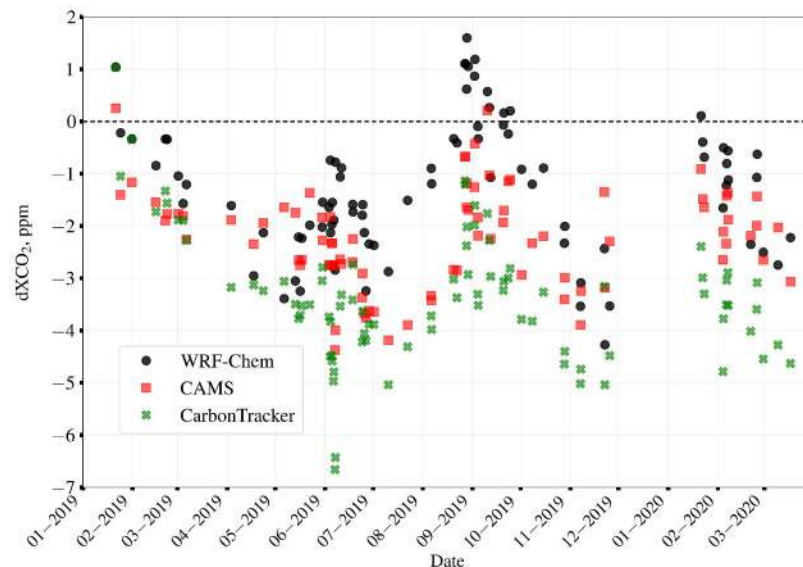


Рисунок 16: Разности между XCO_2 в районе Санкт-Петербурга по данным измерений (Bruker EM27/SUN) и моделирования (WRF-Chem, CAMS v21r2, CarbonTracker v2022-1) за 01.2019 – 03.2020 гг.

3.5 Соответствие погрешностей моделирования XCO_2 современным требованиям

На сегодняшний день проведено множество исследований, в которых оцениваются возможности модели WRF-Chem представлять приземное содержание, вертикальный профиль, а также содержание CO_2 во всей атмосфере на временных интервалах от суточных до многолетних [23, 136, 138].

Погрешности моделирования XCO_2 в исследованиях обычно менее 0.1% или около 0.5 ppm.

В работах [22, 24, 95] показано, что антропогенный вклад города в содержание CO_2 , измеренный при помощи парных высокоточных спектрометров, находится в диапазоне от менее ~ 0.5 до 5 ppm. Данная характеристика имеет прямую связь с антропогенными эмиссиями CO_2 с территории города и получена при помощи параллельных спектроскопических измерений XCO_2 . Суть подобных измерений заключается в уменьшении влияния основных факторов на содержание CO_2 и выделении влияния антропогенных выбросов газа с территории исследуемого города. При таком подходе, учитывая, что модель качественно представляет атмосферный перенос, варьируя априорные антропогенные эмиссии города можно добиться наилучшего соответствия между результатами моделирования и измерениями XCO_2 .

Скорректированные таким образом априорные эмиссии будут являться решением обратной задачи атмосферного переноса. Однако, если доступны измерения XCO_2 лишь одним прибором, то при моделировании важно корректно учитывать и иные влияющие факторы (т.е. перенос CO_2 с границ области моделирования, биогенный вклад и др.). Поэтому при таком подходе допустимая погрешность моделирования динамики CO_2 зависит от величины антропогенного вклада. Например, если антропогенный вклад города в общее содержание CO_2 по данным измерений составляет 5 ppm, то при погрешности моделирования 1 ppm систематическая ошибка скорректированных антропогенных эмиссий CO_2 составит 20%. Если вклад по данным измерений равен 1 ppm, то при той же погрешности моделирования систематическая ошибка апостериорных эмиссий составит 100%.

Опираясь на диапазон антропогенного вклада Санкт-Петербурга из работ [22, 24], можно сказать, что для оценки антропогенных эмиссий города с использованием только одного измерительного прибора погрешность моделирования должна быть ~ 1 ppm (0.2%) и ниже.

На Рисунке 17 приведены гистограммы распределения погрешностей моделирования XCO_2 с помощью WRF-Chem (а - оригинальные данные моделирования, б - XCO_2 от химических граничных условий уменьшен на 0.3%) в Санкт-Петербурге за 01.2019-03.2020 гг. На гистограмме зеленым цветом выделены интервалы погрешностей, которые можно считать допустимыми (от -1 до 1 ppm), согласно приведенному выше анализу исследований. На выделенный интервал погрешностей для данных оригинального численного эксперимента (Рисунок 17 а) приходится примерно 35% (425) всех значений погрешностей. Смещенность распределения влево и анализ, приведенный выше указывает на то, что наиболее вероятной причиной завышенного XCO_2 по данным моделирования являются погрешности систематического характера, например - погрешности химических граничных условий. Уменьшение XCO_2 от химических граничных условий на 0.3% (Рисунок 17 б) смещает распределение погрешности вправо и на допустимый диапазон для моделирования XCO_2 от -1 до 1 ppm приходится ~60% всех погрешностей.

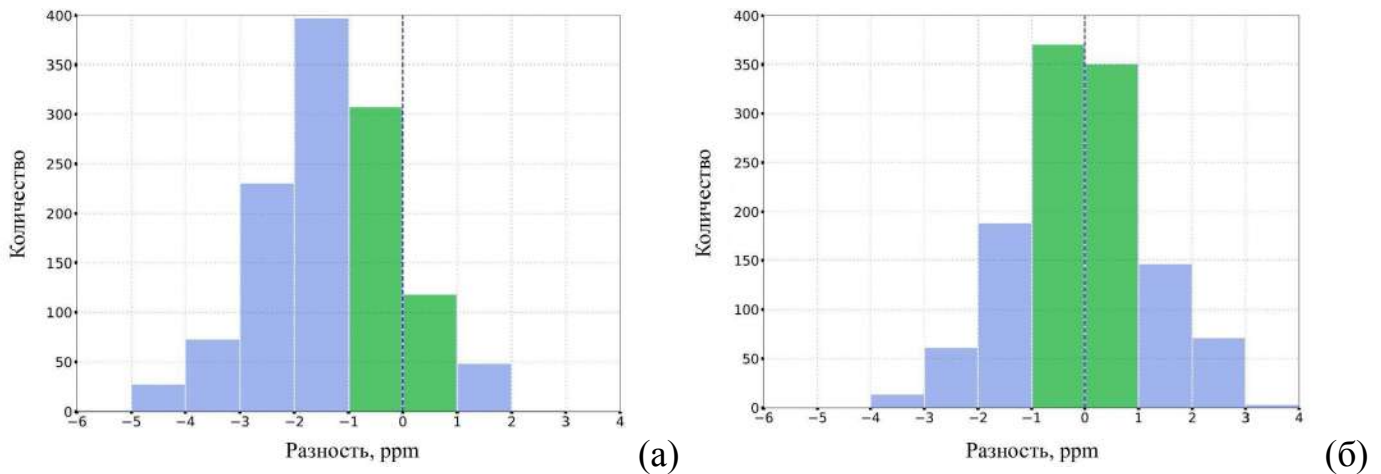


Рисунок 17: Гистограмма распределения погрешностей моделирования XCO_2 с помощью WRF-Chem (а - $\text{XCO}_2 = \text{XCO}_{2 \text{ Границы}} + \text{XCO}_{2 \text{ Ант}} + \text{XCO}_{2 \text{ Био}}$; б - $\text{XCO}_2 = \text{XCO}_{2 \text{ Границы}} * 0.997 + \text{XCO}_{2 \text{ Ант}} + \text{XCO}_{2 \text{ Био}}$, см. Таблицу 6) в Санкт-Петербурге за 01.2019-03.2020 гг.

3.6. Основные результаты и выводы

В главе проведена комплексная валидация возможности численной модели WRF-Chem описывать изменение CO_2 в тропосфере в районе Санкт-Петербурга. Результаты указывают на то, что модель WRF-Chem описывает годовое изменение CO_2 у поверхности Земли и во всей атмосфере. Результаты исследования опубликованы в работе [169].

1. С помощью модели возможно представить сезонную и суточную вариацию содержания газа, связанную с влиянием растительности. Корреляция с отношением смеси CO_2 у поверхности Земли на станции в г. Хельсинки (удаление от Санкт-Петербурга ~ 300 км) высокая ($KK \sim 0.73$) при погрешности моделирования и её стандартном отклонении 0.15 ± 0.04 и 1.7%.
2. Модель WRF-Chem описывает временное изменение среднего отношения смеси CO_2 в сухой атмосфере (XCO_2) в районе Санкт-Петербурга с очень высоким коэффициентом корреляции ~ 0.95 . Погрешности моделирования XCO_2 составляют $\sim -0.3 \pm 0.02\%$ при стандартном отклонении 0.3%, что согласуется с оценками независимых исследований для других городов. Систематическая погрешность вероятнее всего связана с ошибками в химических граничных условиях.
3. Временной ряд XCO_2 в Санкт-Петербурге, полученный с помощью модели WRF-Chem, согласуется с независимыми наборами данных на основе численного моделирования и измерений CAMS и CarbonTracker. При этом данные WRF-Chem немного лучше согласуются с измерениями. Вероятно это связано со способностью модели WRF-Chem учитывать влияние локальных динамических особенностей территории исследования, а также специфику пространственного распределения априорных источников и стоков CO_2 . Это подчеркивает значимость моделей прогноза погоды и газового состава атмосферы высокого пространственного разрешения в задаче оценки антропогенных эмиссий CO_2 .

4. Анализ измерений и моделирования общего содержания CO_2 в Санкт-Петербурге в течение периода более года указал на то, что данные о пространственно-временном распределении CO_2 в атмосфере CarbonTracker Near-Real Time v.2022-1 (CT-NRT.v2022-1) завышены на границах области моделирования. Уменьшение данных CarbonTracker на 0.4% позволило добиться погрешности моделирования $\sim 0.3\%$, что почти в 2 раза меньше, чем в раннем исследовании с использованием оригинальных данных CarbonTracker. Анализ показал, что дополнительное уменьшение химических граничных условий еще на $\sim 0.3\%$ приведет к почти полному уменьшению систематической разности, однако не изменит её стандартное отклонение.
5. Исследование показало, что с помощью модели WRF-Chem можно описывать годовую вариацию CO_2 в атмосфере в районе Санкт-Петербурга с высоким пространственным разрешением (2 км). При соблюдении рекомендаций, приведенных в данном исследовании, погрешности моделирования ОС CO_2 в большинстве случаев будут соответствовать требованиям, которые, как мы указывали составляют 1 ppb и менее, нужно выдвигать численным моделям при решении обратных задач по оценке антропогенных эмиссий CO_2 (0.2%). Таким образом, мы можем сказать, что модель WRF-Chem может быть использована при решении обратных задач по оценке антропогенных эмиссий CO_2 с территории Санкт-Петербурга при условиях адаптации модели к области исследования и тщательной валидации данных моделирования.

Глава 4. Оценка антропогенных эмиссий CO₂ Санкт-Петербурга с помощью модели WRF-Chem

4.1 WRF-Chem моделирование антропогенного вклада Санкт-Петербурга в ОС CO₂

Как уже указывалось в главе 2, в 2019 г. в рамках измерительной кампании ЕММЕ проводились парные спектроскопические измерения ОС CO₂ в наветренной и подветренной частях Санкт-Петербурга, разность между которыми при определенных метеорологических условиях можно интерпретировать, как вклад Санкт-Петербурга в содержание CO₂. На основе численного эксперимента WRF-Chem по переносу CO₂ в районе Санкт-Петербурга в 01.2019-03.2020 гг., описанного в главе 3, возможно получить оценку модельного антропогенного вклада Санкт-Петербурга и сравнить его с измерениями ЕММЕ. Для этого из каждой модельной ячейки, соответствующей парным измерениям двумя ИК Фурье-спектрометрами Bruker EM27/SUN за 8 лучших дней измерений марта-апреля 2019 г., были получены значения ОС CO₂ в единицах [молек см⁻²]. Это 21 и 27 марта, 1, 3, 4, 6, 16 и 24 апреля 2019 г. Данные были отобраны по критериям, описанным в [22], которые связаны с метеорологическими условиями и положением определенных измерений с крупными локальными источниками CO₂. Затем, между модельными данными в соответствующих ячейках определена разность (dOCCO₂).

Как было показано в главе 3, погрешность моделирования CO₂ в тропосфере зависит от таких факторов, как ошибки моделирования физических атмосферных процессов, погрешности химических граничных условий, эмиссий и стоков CO₂. Сопоставление ОС CO₂ по данным моделирования с измерениями дает оценку общей погрешности моделирования данного параметра, которая включает в себя все перечисленные факторы.

Рассчитаем влияния погрешности моделирования переноса CO₂ с помощью модели WRF-Chem на оценку dOCCO₂. Для этого рассчитаем dOCCO₂, как

разность между модельными ячейками в дни измерений ЕММЕ 2019 г., которые отстоят друг от друга в азимутальном угле, соответствующем погрешности моделирования атмосферного переноса. За погрешность моделирования атмосферного переноса примем среднюю разность между модельным и измеренным вертикальным профилем направления ветра (12.7° или 5%, см. главу 3) (Рисунок 18). При расстоянии между двумя модельными ячейками, которые соответствуют позициям парных измерений в конкретный день, ~ 30 км, используя простое тригонометрическое преобразование, можно определить, что угол $\alpha=12.7^\circ$ относительно положения наветренной ячейки соответствует расстоянию ~ 4 км вокруг подветренной ячейки. Соответственно, для оценки $d\text{OCCO}_2$ рассчитаем разность между каждой парой наветренной и подветренных ячеек в 8 дней измерений ЕММЕ. Общее количество таких пар для каждого дня составляет 8-15. Пример таких ячеек выделен красным цветом на Рисунке 18.

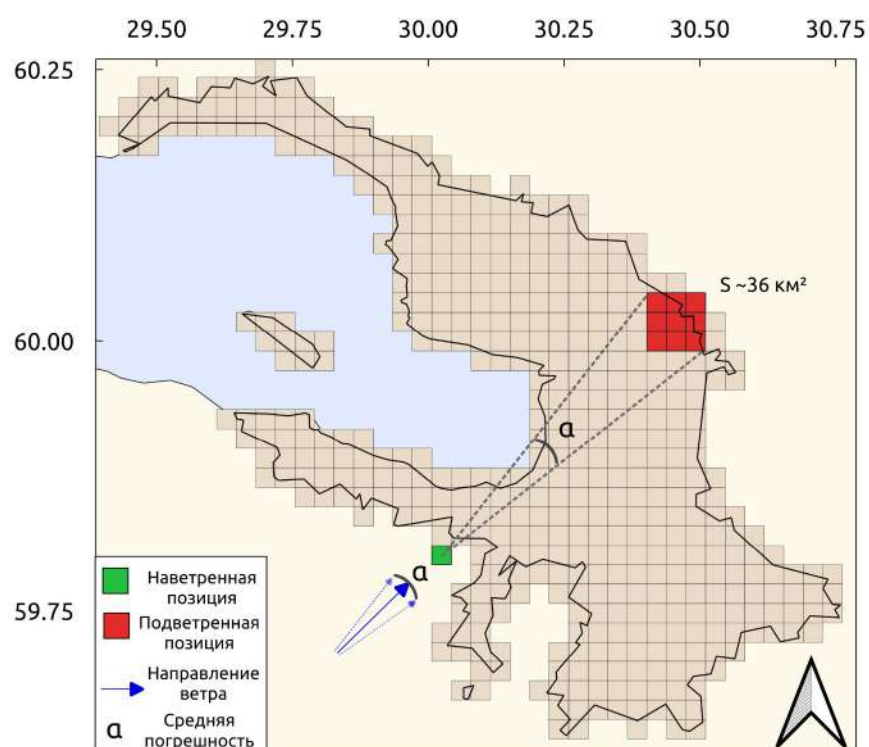


Рисунок 18: Схематичное представление влияния погрешности моделирования направления ветра на $d\text{OCCO}_2$ между наветренной и подветренными позициями вокруг Санкт-Петербурга; сетка - пространственное покрытие Санкт-Петербурга данными моделирования WRF-Chem с шагом в 2 км; S - площадь выделенной области.

На Рисунке 19 приводятся временные ряды $dOCCO_2$ через 10 минут (слева) и в виде среднедневных (справа) за каждый из 8 дней марта-апреля 2019 г. по данным парных измерений в рамках программы EMME и моделирования WRF-Chem. На графиках приводятся данные моделирования из парных ячеек с наилучшим соответствием измерениям (синяя кривая), с наихудшим соответствием (зеленая кривая), а также осредненное по всем модельным $dOCCO_2$ в конкретный день (красная кривая). Отметим, что данные моделирования с наилучшим соответствием в среднем удалены от “истинных” положений измерений EMME на 2.4 км. В свою очередь, данные моделирования $dOCCO_2$ с худшим соответствиям измерениям отстоят от истинных позиций наблюдений в среднем на 3.7 км.

Как видно из Рисунка 19, данные моделирования с наилучшим соответствием хорошо согласуются с измерениями во все дни, кроме 24-го апреля, когда модель значительно недооценивает $dOCCO_2$. Для наилучшего соответствия между данными моделирования и измерениями средняя разность (СР) и стандартное отклонение разности (СОР) составляют 6.7 и 36.9%, соответственно. Коэффициент корреляции (КК) между данными моделирования и измерениями составляет 0.78. Если исключить 24-е апреля, то СР и СОР уменьшаются до -0.3 и 33.2%, КК увеличивается до 0.84.

24-го апреля 2019 г. данные моделирования сильно занижают $dOCCO_2$ на основе измерений (примерно на 70%). Возможно это связано с погрешностями моделирования переноса или же с погрешностями задания химических граничных условий. Анализ $dOCCO_2$ отдельно от трех факторов ($OC\ CO_2_{\text{Ант}}$, $OC\ CO_2_{\text{Био}}$, $OC\ CO_2_{\text{Границы}}$) показывает, что для достижения согласия между данными измерений и моделирования 24-го апреля антропогенные эмиссии нужно увеличить примерно в 2.5 раза (т.е. на 250%) либо полностью исключить вклад в $dOCCO_2$ от химических граничных условий. Первый сценарий скорее всего не правдоподобен, так как настолько сильный источник CO_2 был бы заметен и в иные дни измерений EMME. В свою очередь влияние переноса CO_2 от химических граничных условий могло бы являться причиной подобной погрешности.

Данные моделирования WRF-Chem из ячеек с наихудшим согласием с измерениями имеют CP и COP 52.5 и 102.5%, соответственно. КК равен 0.67. Исключение 24-го апреля приводит к изменению CP и COP до 36 и 99% при КК 0.73.

В свою очередь средние по пространству модельные $d\text{OCCO}_2$ повторяют измеренные значения с относительно высоким КК в 0.69. При этом CP и COP составляют 17.2 и 55.1%, соответственно. В два из восьми дней (1 и 24 апреля) модельные значения $d\text{OCCO}_2$, осредненные по пространству, отрицательные в отличие от измерений. Это связано с тем, что содержание CO_2 , переносимое от границ области моделирования в наветренные относительно города области, в основном было больше, чем в подветренных областях города. Исключение 24-го апреля приводит к уменьшению CP и COP до 3.1 и 41.9%, КК увеличивается до 0.82.

При осреднении суточного хода $d\text{OCCO}_2$ (Рисунок 19 справа), COP уменьшается на ~7-10%, а CP немного увеличивается (на 1-6%). Например, осреднение суточного хода для средних по пространству модельных $d\text{OCCO}_2$ приводит к изменению CP и COP до 4.7 и 34.6%.

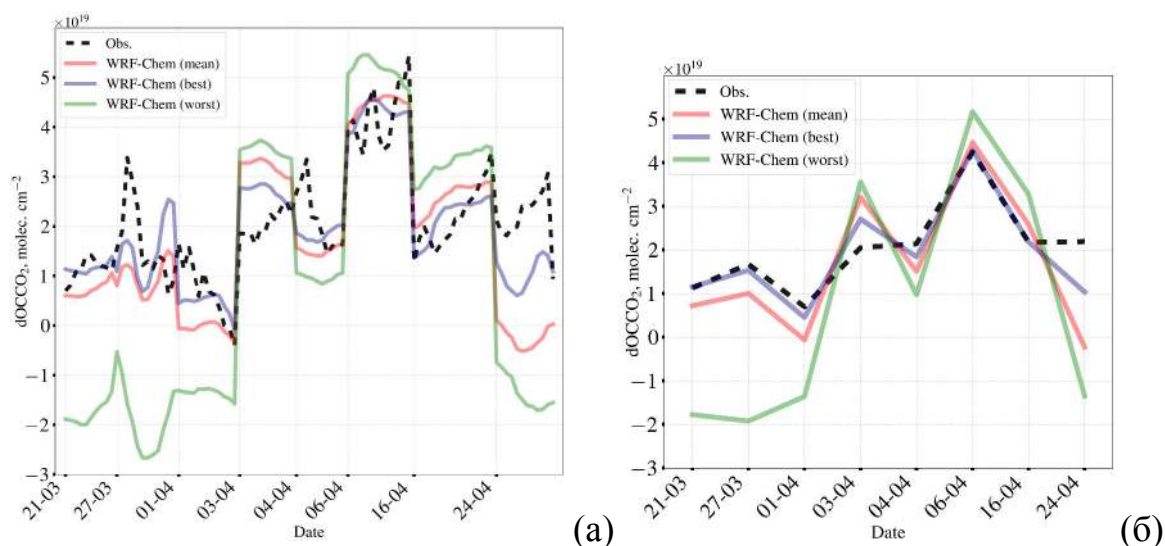


Рисунок 19: Временные ряды $d\text{OCCO}_2$, осредненные через 10 минут (а) и среднесуточные (б) за 8 дней марта-апреля 2019 г. по данным парных измерений (EMME) и моделирования WRF-Chem; данные моделирования из ячеек с наилучшим соответствием измерениям (голубая кривая); с наихудшим соответствием (зеленая кривая); осредненное по пространству в конкретный день (красная кривая).

Анализ показывает, что средняя погрешность моделирования направления атмосферного переноса 12.7° (около 5% относительно измерений) может приводить к погрешностям моделирования антропогенного вклада до более 50%. Однако, используемая в качестве примера средняя погрешность моделирования переноса принимается за одинаковую на всей территории Санкт-Петербурга, хотя ближайшие аэрологические измерения проводятся в Воейково и лишь два раза в день (на удалении от центра Санкт-Петербурга около 20 км). Кроме того, данная погрешность характеризует в среднем вертикальный слой, покрывающий примерно всю тропосферу и часть нижней стратосферы. Погрешность моделирования профиля ветра в конкретный день, временной срок и на определенной высоте может быть меньше 5% (даже близка к 0%).

Вероятно оптимальным решением будет рассматривать в качестве модельного $dOCCO_2$ среднее значение по пространству около 36 км^2 вокруг “истинной” подветренной позиции измерений EMME (красная область на Рисунке 18 и красная кривая на Рисунке 19). Из этого заключим, что модель WRF-Chem описывает изменение антропогенного вклада Санкт-Петербурга в содержание CO_2 со средней погрешностью $\sim 35\%$ (исключая 24-е апреля и используя среднедневные значения).

Еще раз отметим, что полученная погрешность моделирования $dOCCO_2$ включает в себя погрешность моделирования атмосферного переноса и погрешность априорных эмиссий CO_2 (антропогенных и биогенных). Однако, она не включает влияние объема используемых измерений, объема априорной информации, суточной изменчивости измеренного $dOCCO_2$ и других возможных факторов. Так, влияние первого фактора наблюдалось при исключении измерений, проведенных 24-го апреля 2019 г., и при осреднении данных моделирования и измерений за сутки. Как было показано, это привело к уменьшению погрешности моделирования $dOCCO_2$ с 55 до 35% (т.е. на $\sim 20\%$). Влияние второго фактора не исследовалось для модели WRF-Chem, но частично анализировалось для одномерной боксовой модели атмосферного переноса. Так, изменение априорных антропогенных эмиссий CO_2 по данным базы ODIAC 2018 на ODIAC 2019

приводит к увеличению оценок эмиссий Санкт-Петербурга на ~30%. Третий фактор (суточная изменчивость измеренного $dOCCO_2$) был оценен в исследовании [22]. Его вклад в погрешность составил 33% для 9 дней измерений. Для случая из текущего исследования (7 дней измерений, без 24-го апреля) данный фактор вносит вклад в погрешность ~27%. Если учесть данные погрешности в этом виде, то суммарная погрешность моделирования $dOCCO_2$ и впоследствии погрешность оценки антропогенной эмиссий CO_2 Санкт-Петербурга за 2019 г. составит ~57%. Однако, так как с большей достоверностью известна погрешность моделирования переноса CO_2 (примерно 35%), то в данном исследовании для оценки погрешности антропогенных эмиссий CO_2 Санкт-Петербурга оставим только её, имея в виду, что реальная погрешность может быть больше.

Ранее было показано, что случайная погрешность моделирования ОС CO_2 в Санкт-Петербурге за 83 дня с января 2019 по март 2020 гг. с помощью модели WRF-Chem составляет 0.3%. Такие существенные различия между ранним и текущими значениями случайной погрешности (34-37%) можно объяснить тем, что в данном случае оценка погрешности основана всего на 7 днях измерений в марте и апреле. Очевидно, что при увеличении выборки измерений случайная погрешность должна уменьшиться. Кроме того, в главе 3 дана оценка погрешности моделирования ОС CO_2 (в виде XCO_2), тогда как здесь оценивается погрешность моделирования $dOCCO_2$. Разность между модельными значениями $OCCO_2$ также может увеличивать случайную и, как следствие, суммарную погрешность моделирования $dOCCO_2$.

4.2 Решение обратной задачи по оценке антропогенных эмиссий CO_2 Санкт-Петербурга с помощью модели WRF-Chem

Проведём с помощью модели WRF-Chem серию численных экспериментов по моделированию антропогенного вклада Санкт-Петербурга ($dOCCO_2$) за 7 дней измерений ЕММЕ 2019 г., исключая 24-е апреля.

В каждый из численных экспериментов будем изменять антропогенные эмиссии CO_2 Санкт-Петербурга. Тот набор измененных априорных антропогенных эмиссий CO_2 , при котором данные моделирования $d\text{OCCO}_2$ будут иметь наименьшую разность с данными на основе парных спектроскопических измерений, послужит решением обратной задачи по оценке антропогенных эмиссий CO_2 в Санкт-Петербурге за 2019 г. Напомним, что оценка эмиссий для всего года на основе единичных измерений в марте и апреле 2019 г. оправдывается в данной работе вероятной малой сезонной изменчивостью антропогенных эмиссий CO_2 Санкт-Петербурга (по данным ODIAС за 2019 г.).

Описание восьми численных экспериментов приведены в Таблице 7. Первый - контрольный эксперимент - с “эталонными” эмиссиями и химическими граничными условиями. Относительно результатов контрольного численного эксперимента делается вывод, как нужно корректировать априорную информацию, чтобы добиться лучшего соответствия между модельным и измеренным $d\text{OCCO}_2$. В 5-ти численных экспериментах увеличивались антропогенные эмиссии CO_2 на территории Санкт-Петербурга на 5, 10, 15, 20 и 25%. Для 7-го численного эксперимента антропогенные эмиссии CO_2 Санкт-Петербурга были увеличены только в той части города, которая, согласно результатам моделирования STILT (Рисунок 6 а), покрыта измерениями. И наконец, в 8-й численном эксперименте на 20% были увеличены антропогенные эмиссии CO_2 в ячейках, соответствующих положениям ТЭЦ Санкт-Петербурга.

Таблица 7: Описание численных экспериментов WRF-Chem; СПб - эмиссии со всей территории Санкт-Петербурга.

Эксперимент	Описание
1 (контрольный)	Антропогенные эмиссии CO_2 - ODIAС 2019
2	ODIAС 2019 (СПб) + 5%
3	ODIAС 2019 (СПб) + 10%
4	ODIAС 2019 (СПб) + 15%

Эксперимент	Описание
5	ODIAC 2019 (СПб) + 20%
6	ODIAC 2019 (СПб) + 25%
7	ODIAC 2019 (СПб) + 25% + STILT
8	ODIAC 2019 (ТЭЦ) + 20%

На Рисунке 20 приведены суммарные погрешности моделирования $d\text{OCCO}_2$ на основе сопоставления данных моделирования и измерений за 7 дней марта и апреля 2019 г. в Санкт-Петербурге в % относительно измерений. Суммарные погрешности рассчитаны, как квадратный корень из суммы квадратов средней разности между данными моделирования и измерений (систематическая погрешность моделирования) и ее стандартного отклонения (случайная погрешность моделирования).

Из графика видно, что лучшее согласие наблюдается при увеличении антропогенных эмиссий на 20% только с территорий ТЭЦ (~34%). При этом согласие ухудшается до более ~39% при увеличении эмиссий до 25% со всей территории города. Изменение CP при увеличении антропогенных эмиссий со всей территории Санкт-Петербурга носит почти линейный характер.

Учитывая, что интегральные антропогенные эмиссии CO_2 Санкт-Петербурга на основе данных ODIAC 2019 составляют 49.1 Mt g^{-1} , их увеличение с территорий ТЭЦ на 20% приводит к эмиссиям города $\sim 62.3 \pm 21 \text{ Mt g}^{-1}$. Возможно, увеличение априорных эмиссий CO_2 с позиций, соответствующих ТЭЦ города, более, чем на 20% позволит в дальнейшем уменьшить суммарную погрешность $d\text{OCCO}_2$ и лучше скорректировать априорные эмиссии.

Как видно из Рисунка 20, увеличение антропогенных эмиссий на 20% со всей территории Санкт-Петербурга и только с приблизительных позиций ТЭЦ приводит к разности ~4% между погрешностями моделирования. При этом, погрешность моделирования при увеличении эмиссий на 20% только с позиций ТЭЦ близка к погрешности эксперимента, где эмиссии CO_2 со всей территории

Санкт-Петербурга увеличивались на 5 и 10%, а также к контрольному эксперименту (разность $\sim 2\%$).

Это указывает на неоднозначность оценок антропогенных эмиссий CO_2 Санкт-Петербурга на основе метода решения обратной задачи атмосферного переноса. Например, увеличение априорных суммарных антропогенных эмиссий CO_2 всего Санкт-Петербурга за 2019 г. по данным ODIAС на 5% приведет к значению $\sim 51 \text{ Мт г}^{-1}$. В свою очередь, как уже указывалось выше, увеличение на 20% априорных эмиссий лишь с территорий ТЭЦ приведет к оценке 62.3 Мт г^{-1} , т.е. примерно на 22% больше.

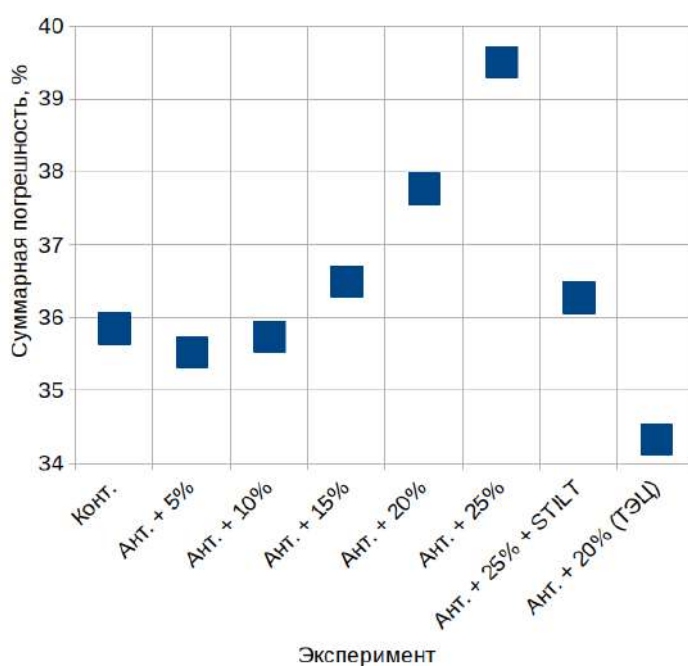


Рисунок 20: Суммарная погрешность моделирования $d\text{OCCO}_2$ за 7 дней марта-апреля 2019 г. в Санкт-Петербурге; разности даны в % относительно измерений.

4.3 Сравнение независимых оценок антропогенных эмиссий CO_2 Санкт-Петербурга

В Таблице 8 приведены оценки суммарных антропогенных эмиссий CO_2 Санкт-Петербурга, полученных на основе текущего исследования и других источников информации. Общий диапазон оценок для 2019 г. составляет 49-91 Мт г^{-1} . При этом диапазон оценок на основе метода решения обратной задачи атмосферного переноса составляет 62-91 Мт г^{-1} . Полученное в данной главе

значение суммарной антропогенной эмиссии CO_2 Санкт-Петербурга за 2019 г. (62 Мт г^{-1}) согласуется со значением, которое получено при помощи боксовой модели (65 Мт г^{-1}) в рамках погрешностей. При этом средняя оценка по всем приведенным значениям на основе решения обратной задачи составляет 73 при стандартном отклонении 13 Мт г^{-1} .

Разность с оценкой эмиссии CO_2 Санкт-Петербурга за 2019 г., полученной с использованием дисперсионной модели HYSPLIT [24], составляет минимум $\sim 16 \text{ Мт г}^{-1}$. Вероятно это связано с различиями в описании атмосферного переноса в используемых моделях и в априорной информации и объеме используемых измерений EMME.

Оценка суммарных эмиссий CO_2 Санкт-Петербурга за 2015 г. инвентаризационным методом по данным [170] минимум на 27% меньше оценок на основе решения обратной задачи атмосферного переноса (с учетом погрешности). Однако, тот факт, что оценка на основе инвентаризации дана для 2015 г. не позволяет с уверенностью утверждать о погрешностях инвентаризационного метода.

Оценка на основе инвентаризационной базы данных ODIAC за 2019 г. составляет 49 Мт г^{-1} с погрешностью от $\sim 15 \text{ Мт г}^{-1}$. Если рассматривать края диапазонов оценок с учетом погрешностей, то антропогенные эмиссии CO_2 Санкт-Петербурга на основе ODIAC меньше эмиссий города, полученной с помощью модели WRF-Chem ($62 \pm 21 \text{ Мт г}^{-1}$), на $\sim 11\%$. При этом оценки согласуются в пределах погрешности в диапазоне $41\text{-}64 \text{ Мт г}^{-1}$.

Таблица 8: Суммарные антропогенные эмиссии CO_2 Санкт-Петербурга за 2019 г. на основе априорных (ODIAC 2019) и апостериорных данных

Метод	Источник информации	Антропогенные эмиссии CO_2 в Мт г^{-1}	Погрешность
Инвентаризация	[170]	29.6 (2015 г.)	-
	ODIAC 2018	31 (2018 г.)	от $\sim 30\text{-}40\%$

Метод	Источник информации	Антропогенные эмиссии CO ₂ в Мт г ⁻¹	Погрешность
	ODIAC 2019	49 (2019 г.)	[20]
Решение обратной задачи атмосферного переноса	[24] Dispersion model HYSPLIT + ODIAC 2018	75.8 (2019 г.)	-
	[26] Box model + ODIAC 2018	65 (2019 г.)	от ~19 Мт г ⁻¹
	Текущее исследование - Box model + ODIAC 2019	91 (2019 г.)	
	Текущее исследование - WRF-Chem + ODIAC 2019 + (Ант. 20% с территорий ТЭЦ)	62 (2019 г.)	~21 Мт г ⁻¹

4.4 Основные результаты и выводы

В этой части исследования проведена оценка суммарных антропогенных эмиссий CO₂ со всей территории Санкт-Петербурга за 2019 г. с помощью решения обратной задачи атмосферного переноса. Оценка выполнена с привлечением парных спектроскопических измерений ОС CO₂ и численной модели прогноза погоды и состава тропосферы высокого пространственного разрешения WRF-Chem.

Суммарная антропогенная эмиссия CO₂ Санкт-Петербурга за 2019 г. на основе решения обратной задачи атмосферного переноса с помощью модели WRF-Chem составляет ~62±21 Мт г⁻¹. Данная оценка минимум на 27% превышает

инвентаризационные данные за 2015 г. Об этом также говорится в других исследованиях для Санкт-Петербурга [24, 26].

При этом весь диапазон оценок эмиссий Санкт-Петербурга, полученный с помощью дифференциальных спектроскопических измерений общего содержания CO_2 кампании ЕММЕ и разных моделей атмосферного переноса, составляет 62-91 Мт г^{-1} . Все оценки согласуются друг с другом в диапазоне погрешностей (19-21 Мт г^{-1}).

Средняя оценка антропогенных эмиссий CO_2 Санкт-Петербурга в 2019 г. по приведенным значениям на основе решения обратной задачи составляет 73 Мт г^{-1} при стандартном отклонении 13 Мт г^{-1} .

Заключение

Данная диссертация посвящена исследованию методов оценки антропогенных эмиссий парникового газа CO_2 с территории крупных городов на примере российского мегаполиса Санкт-Петербурга. Рассматривались методы оценки эмиссий CO_2 , основанные на решении обратной задачи атмосферного переноса. В работе изучено влияние выбора модели атмосферного переноса, априорной информации (априорное распределение и значения антропогенных эмиссий CO_2) и данных измерений общего содержания CO_2 в атмосфере на оценки антропогенных эмиссий CO_2 Санкт-Петербурга.

Согласно исследованию, погрешности оценок антропогенных эмиссий CO_2 Санкт-Петербурга при помощи спектроскопических измерений содержания газа в атмосфере и одномерной боксовой модели атмосферного переноса зависят от пространственного распределения эмиссий CO_2 внутри города; пространственного покрытия измерений; качества априорной информации; сложности модели атмосферного переноса. Учет ограниченного пространственного покрытия парных спектроскопических измерений содержания CO_2 в атмосфере приводит к уменьшению оценок антропогенных эмиссий Санкт-Петербурга на ~22-55%.

Исследование указывает на малый вклад водной поверхности Финского залива в оценки антропогенных эмиссий CO_2 Санкт-Петербурга даже при экстремальных метеорологических условиях. Соответственно, при оценка антропогенных эмиссий CO_2 Санкт-Петербурга вкладом водной поверхности Финского залива можно пренебрегать.

В работе на примере 2019 г. показано, что в ~60% случаев численную трехмерную модель прогноза погоды и состава тропосферы WRF-Chem можно использовать для решения обратной задачи по оценке антропогенных эмиссий CO_2 Санкт-Петербурга (погрешность моделирования ~0.2%). На основе анализа чувствительности модели сделан вывод о том, что случайная погрешность моделирования содержания CO_2 в атмосфере может быть связана с

погрешностями пространственного распределения априорных эмиссий CO_2 и их временной вариации.

Показано, что сложность модели атмосферного переноса, качество априорной информации и пространственное покрытие измерений содержания CO_2 в атмосфере приводит к широкому диапазону оценок антропогенных эмиссий CO_2 Санкт-Петербурга от ~62 до более 90 Мт г^{-1} . При этом средняя оценка по всем приведенным значениям на основе решения обратной задачи составляет 73 Мт г^{-1} при стандартном отклонении 13 Мт г^{-1} . Оценки на основе решения обратной задачи атмосферного переноса превышают значения на основе инвентаризации на 11-27%. Это указывает на значимость независимых методов оценки эмиссий CO_2 , которая позволит валидировать и, при надобности, корректировать существующие инвентаризации выбросов углекислого газа в атмосферу.

Развитие этого независимого метода оценки антропогенных эмиссий CO_2 особенно актуально сейчас в связи с (1) эксплуатацией и подготовкой к запускам спутниковых систем, измеряющих ОС CO_2 с высоким пространственным разрешением; (2) наличием высокоточных спектрометров, позволяющих проводить наземные дистанционные измерения ОС CO_2 ; и (3) развитием трехмерных численных моделей атмосферного переноса высокого пространственного разрешения, благодаря которым возможно разрешать перенос газа на масштабе крупного города с учетом физических свойств городской застройки.

Данное исследование и ряд цитируемых работ указывают на перспективу метода оценки антропогенных эмиссий CO_2 на основе высокоточных спектроскопических измерений содержания газа в атмосфере и моделирования атмосферного переноса. Для его реализации необходимо стремиться к налаживанию соответствующих регулярных измерений в крупных городах как России, так и других стран. Подобные измерения уже несколько лет реализуются в крупных Европейских городах (Мюнхен, Париж).

Благодарности

Автор благодарит своего научного руководителя - д.ф.-м.н. Тимофеева Юрия Михайловича (СПбГУ) - и д.ф.-м.н. Смышляева Сергея Павловича (РГГМУ) за неоценимую поддержку в академической и жизненной сферах, переданные знания и опыт в научных областях дистанционных измерений, решения обратных задач атмосферной оптики и численного моделирования химического состава атмосферы Земли, за бесконечное количество дискуссий и споров, критический, строгий, но справедливый взгляд на проводимые исследования, за поддержку в ходе написания диссертации и просто за дружеское отношение.

Автор благодарен коллективу ученых из National Oceanic and Atmospheric Administration (NCAR), University Corporation for Atmospheric Research (UCAR), the National Oceanic and Atmospheric Administration (NOAA) и the Air Force (AFWA), США, которые разработали, развивают и бесплатно распространяют численную модель WRF-Chem. Также автор выражает благодарность коллективу ученых кафедры физики атмосферы СПбГУ и ГГО им. Воейково и конкретно Макаровой Марии Владимировне за организацию и руководство измерительной кампании ЕММЕ, данные которой используются в моей диссертации. Автор благодарит ресурсный центр СПбГУ “Геомодель” за предоставление измерительного оборудования. Также автор благодарен ученым Juha Hatakka и Ivan Mammarella их Финского метеорологического института и Университета Хельсинки за предоставление измерений приземного содержания CO₂ и биогенных потоков газа на территории Финляндии (данные получены в 2020 г.). Автор выражает благодарность научной команде NOAA ESRL за свободный доступ к данным CarbonTracker (данные получены в 2021 г.). Наконец автор благодарит коллег из Max Planck Institute for Biogeochemistry (Йена, Германия) за помощь в работе с моделью VPRM (общение в период 2020-2021 гг.).

Также автор благодарит остальных членов коллектива кафедры физики атмосферы СПбГУ и Лаборатории исследования озонового слоя и верхней атмосферы (ОЗЛаб), в частности Виролайнен Яну Акселевну, Полякова

Александра Викторовича, Поберовского Анатолия Васильевича и Розанова Евгения Владимировича за переданный опыт в проведении исследований, написании статей, анализе различных данных измерений и жизненных вопросах.

Автор выражает отдельные благодарности своим коллегам - Александру Махура (Университет Хельсинки, Финляндия), Роману Нутерману (Институт Нильса Бора, Дания) и Сулейману Мостаманди (Научно-технологический университет имени короля Абдаллы, Саудовская Аравия), которые внесли большой вклад в становление автора, как молодого ученого путем проведения множества неформальных дискуссий, семинаров, практических занятий, научных стажировок и в целом длительного научного сотрудничества.

Автор также благодарит коллектив Научно-исследовательского центра экологической безопасности РАН (НИЦЭБ РАН), а в особенности Горного Виктора Ивановича, и коллектив Лаборатории моделирования средней и верхней атмосферы РГГМУ за ценные комментарии к отдельным частям диссертации, полученные в ходе неформальных бесед и научных семинаров. Также автор отдельно благодарит коллектив РГГМУ и ОЗЛаб за предоставления доступа к вычислительным ресурсам.

Список сокращений и условных обозначений

- ЭМ** - электромагнитный
- ИК** - инфракрасный
- IPCC** - Intergovernmental Panel on Climate Change
- ВМО** - всемирная метеорологическая организация
- ppm** - parts per million
- USD** - The United States dollar
- ВВП** - внутри валовой продукт
- ТЭЦ** - теплоэлектростанция
- GAW** - The Global Atmosphere Watch
- NOAA ESRL** - National Oceanic and Atmospheric Administration, Earth System Research Laboratories
- SMEAR** - Station for Measuring Ecosystem-Atmosphere Relations
- ICOS** - Integrated Carbon Observation System
- JR-STATION** - Japan–Russia Siberian Tall Tower Inland Observation Network
- РАН** - Российская академия наук
- СПбГУ** - Санкт-Петербургский государственный университет
- GGA** - Greenhouse Gas Analyzer
- TCCON** - Total Carbon Column Observing Network
- COCCON** - COllaborative Carbon Column Observing Network
- NDACC** - Network for the Detection of Atmospheric Composition Change
- TOVS** - Television Infrared Observation Satellite Operational Vertical Sounder
- IMG** - Interferometric Monitor for Greenhouse gases
- GOSAT** - Greenhouse gases Observing SATellite
- SCIAMACHY** - The SCanning Imaging Absorption spectroMeter for Atmospheric CartograpHY
- IASI** - Infrared Atmospheric Sounding Interferometer
- OCO** - Orbiting Carbon Observatory
- AIRS** - Atmospheric Infra-Red Sounder

TES - Tropospheric Emission Spectrometer

ИКФС-2 - Инфракрасный Фурье-спектрометр

TanSat - Exploratory Satellite for Atmospheric CO₂

SOCOL - SOLar Climate Ozone Links

MPI-ESM - Max Planck Institute Earth System Model

MEZON - Model for Evaluation of oZONe trends

WRF-Chem - Weather Research and Forecasting model coupled with Chemistry

ODIAC - Open-source Data Inventory for Anthropogenic CO₂

OC - общее содержание

ДС - дифференциальный спектроскопический

EMME - Emission Monitoring Mobile Experiment

HYSPLIT - The Hybrid Single-Particle Lagrangian Integrated Trajectory model

ВКВ - всемирно координированное время

GFS - Global forecast system

STILT - the Stochastic Time-Inverted Lagrangian Transport model

НУ - начальные условия

ГУ - граничные условия

Литература

- [1] Wallace, J.; Hobbs, P. Atmospheric Science—An Introductory Survey, 2nd ed. *Elsevier Academic Press: Amsterdam, The Netherlands*, P. 484, 2006.
- [2] Seinfeld, J.H.; Pandis, S.N. Atmospheric Chemistry and Physics: From Air Pollution to Climate Change, 2nd ed. *John Wiley & Sons, Inc.: Hoboken, NJ, USA*, P. 1225, 2006.
- [3] Тимофеев Ю.М., А.В. Поляков, В. Делер, Д. Шпенкух, Д. Ортел. Анализ спектров уходящего теплового излучения, измеренных аппаратурой SI-1. *Современные проблемы дистанционного зондирования Земли из космоса*, 15(3): 236–242, 2018.
- [4] Keeling, C.D. The Concentration and Isotopic Abundances of Carbon Dioxide in the Atmosphere. *Tellus*, 12: 200-203, 1960.
- [5] Keeling, C. D, Piper, S. C, Bacastow, R. B, Wahlen, M., Whorf, T. P, Heimann, M., Meijer, H. A. Exchanges of Atmospheric CO₂ and ¹³CO₂ with the Terrestrial Biosphere and Oceans from 1978 to 2000. *I. Global Aspects. UC San Diego: Scripps Institution of Oceanography*, 117: 83-113, 2001.
- [6] F. Dentener, R. Derwent, E. Dlugokencky, E. Holland, I. Isaksen, J. Katima, V. Kirchhoff, P. Matson, P. Midgley, M. Wang. The Carbon Cycle and Atmospheric Carbon Dioxide In: “Climate Change 2001: The Scientific Basis. Contribution of Working Group I to the Third Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change”. *Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom and New York, NY, USA*, 2001.
- [7] Eyring, V., N.P. Gillett, K.M. Achuta Rao, R. Barimalala, M. Barreiro Parrillo, N. Bellouin, C. Cassou, P.J. Durack, Y. Kosaka, S. McGregor, S. Min, O. Morgenstern, Y. Sun. Human Influence on the Climate System. 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”. *Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom and New York, NY, USA*, 2021.

- [8] Bindoff, N.L., P.A. Stott, K.M. AchutaRao, M.R. Allen, N. Gillett, D. Gutzler, K. Hansingo, G. Hegerl, Y. Hu, S. Jain, I.I. Mokhov, J. Overland, J. Perlwitz, R. Sebbari, X. Zhang. Detection and Attribution of Climate Change: from Global to Regional. In “Climate Change 2013: The Physical Science Basis. Contribution of Working Group I to the Fifth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change”. *Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom and New York, NY, USA*, 2013.
- [9] Stips, A., Macias, D., Coughlan, C., Garcia-Gorriz E., X. San Liang. On the causal structure between CO₂ and global temperature. *Sci Rep*, 6: 21691, 2016.
- [10] Chan, D., & Wu, Q. Attributing Observed SST Trends and Subcontinental Land Warming to Anthropogenic Forcing during 1979–2005. *Journal of Climate*, 28(8): 3152-3170, 2015.
- [11] Seneviratne, S.I., X. Zhang, M. Adnan, W. Badi, C. Dereczynski, A. Di Luca, S. Ghosh, I. Iskandar, J. Kossin, S. Lewis, F. Otto, I. Pinto, M. Satoh, S.M. Vicente-Serrano, M. Wehner, B. Zhou. Weather and Climate Extreme Events in a Changing Climate. 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”. *Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom and New York, NY, USA*, 2021.
- [12] 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, H. Zhang. 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”. *Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom and New York, NY, USA*, 2021.
- [13] United Nations Framework Convention on Climate Change (UNFCCC). Kyoto Protocol to the United Nations Framework Convention on Climate Change. 2303: 162, 1998.

- [14] United Nations Framework Convention on Climate Change (UNFCCC). The Paris Agreement - Publication. *Paris Climate Change Conference - November 2015*. 2018.
- [15] Lwasa, S., K.C. Seto, X. Bai, H. Blanco, K.R. Gurney, Ş. Kilkış, O. Lucon, J. Murakami, J. Pan, A. Sharifi, Y. Yamagata. Urban systems and other settlements. In “IPCC, 2022: Climate Change 2022: Mitigation of Climate Change. Contribution of Working Group III to the Sixth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change”. *Cambridge University Press, Cambridge, UK and New York, NY, USA*, 2022.
- [16] D. McMorrow. Methods for Remote Determination of CO₂ Emissions. *JASON The MITRE Corporation*. P. 198, 2011
- [17] A. Agustí-Panareda, D. Brunner. D5.4 Final report on service elements for CO₂ emission and transport model integration. *CHE Consortium*, P. 49, 2020.
- [18] K. Rypdal, W. Winiwarter. Uncertainties in greenhouse gas emission inventories — evaluation, comparability and implications. *Environmental Science & Policy*, 4(2–3): 107-116, 2001.
- [19] EPA (2022) Inventory of U.S. Greenhouse Gas Emissions and Sinks: 1990-2020. *U.S. Environmental Protection Agency, EPA 430-R-22-003*, P. 841, 2022.
- [20] T. Oda, R. Bun, V. Kinakh, P. Topylko, M. Halushchak, G. Marland, T. Lauvaux, M. Jonas, S. Maksyutov, Z. Nahorski, M. Lesiv, O. Danylo, J. Horabik-Pyzel. Errors and uncertainties in a gridded carbon dioxide emissions inventory. *Mitig Adapt Strateg Glob Change*, 24: 1007–1050, 2019.
- [21] Collaborative Carbon Column Observing Network.
[<https://www.imk-asf.kit.edu/english/COCCON.php>]
- [22] Makarova, M. V., Alberti, C., Ionov, D. V., Hase, F., Foka, S. C., Blumenstock, T., Warneke, T., Virolainen, Y. A., Kostsov, V. S., Frey, M., Poberovskii, A. V., Timofeyev, Y. M., Paramonova, N. N., Volkova, K. A., Zaitsev, N. A., Biryukov, E. Y., Osipov, S. I., Makarov, B. K., Polyakov, A. V., Ivakhov, V. M., Imhasin, H. Kh., Mikhailov, E. F. Emission Monitoring Mobile Experiment (EMME): an overview

- and first results of the St. Petersburg megacity campaign 2019. *Atmos. Meas. Tech.*, 14: 1047–1073, 2021.
- [23] Zhao, X., Marshall, J., Hachinger, S., Gerbig, C., Frey, M., Hase, F., and Chen, J. Analysis of total column CO₂ and CH₄ measurements in Berlin with WRF-GHG. *Atmos. Chem. Phys.*, 19: 11279–11302, 2019.
- [24] Ionov, D. V., Makarova, M. V., Hase, F., Foka, S. C., Kostsov, V. S., Alberti, C., Blumenstock, T., Warneke, T., Virolainen, Y. A. The CO₂ integral emission by the megacity of St Petersburg as quantified from ground-based FTIR measurements combined with dispersion modelling. *Atmos. Chem. Phys.*, 21: 10939–10963, 2021.
- [25] Timofeyev, Y.M., Nerobelov, G.M., Poberovskii, A.V. Experimental Estimates of Integral Anthropogenic CO₂ Emissions in the City of St. Petersburg. *Izv. Atmos. Ocean. Phys.* 58: 237–245, 2022.
- [26] Y. M. Timofeyev, G. M. Nerobelov, Ya. A. Virolainen, A. V. Poberovskii, S. C. Foka. Estimates of CO₂ anthropogenic emission from the megacity St. Petersburg. *Dokl. Earth Sci.* 494(1): 753–756, 2020.
- [27] Kovats, R.S., R. Valentini, L.M. Bouwer, E. Georgopoulou, D. Jacob, E. Martin, M. Rounsevell, J.-F. Soussana. Europe. In “Climate Change 2014: Impacts, Adaptation, and Vulnerability. Part B: Regional Aspects. Contribution of Working Group II to the Fifth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change”. *Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom and New York, NY, USA*, 2014.
- [28] Flato, G., Gillett, N., Arora, V., Cannon, A. Anstey, J. Modelling Future Climate Change; Chapter 3 in “Canada’s Changing Climate Report”. *Government of Canada, Ottawa, Ontario*, 2019.
- [29] V.M. Kattsov and S.M. Semenov. Assessment report on climate change and its consequences in Russian Federation. General Summary. *Roshydromet*, P. 56, 2014.
- [30] И.А.Серебрицкий. Опыт Санкт-Петербурга в вопросах управления адаптацией к изменениям климата и смягчения антропогенного воздействия на

климатическую систему. Информационно-аналитическая записка.

Электронный ресурс - [<https://www.infoeco.ru/index.php?id=8780>]

- [31] Trading Economics. Электронный ресурс - [<https://tradingeconomics.com>]
- [32] The World Bank (данные об изменении численности населения). Электронный ресурс - [<https://data.worldbank.org/indicator/SP.POP.TOTL>]
- [33] P. A. Arias, N. Bellouin, E. Coppola, R. G. Jones, G. Krinner, J. Marotzke, V. Naik, M.D. Palmer, G.K. Plattner, J. Rogelj, M. Rojas, J. Sillmann, T. Storelvmo, P.W. Thorne, B. Trewin. Technical Summary. 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”. *Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom and New York, NY, USA, 2021.*
- [34] United Nations Environment Programme (UNEP) Ozone Secretariat. The Montreal Protocol on Substances that Deplete the Ozone Layer, which entered into force January 1, 1989, 26 I.L.M.: 1541, 1550, 1987.
- [35] Amendment to the Montreal Protocol on Substances that Deplete the Ozone Layer (Kigali Amendment), 2016.
- [36] Gulev, S.K., P.W. Thorne, J. Ahn, F.J. Dentener, C.M. Domingues, S. Gerland, D. Gong, D.S. Kaufman, H.C. Nnamchi, J. Quaas, J.A. Rivera, S. Sathyendranath, S.L. Smith, B. Trewin, K. von Schuckmann, R.S. Vose. Changing State of the Climate System. 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”. *Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom and New York, NY, USA, 2021.*
- [37] WMO. WMO Greenhouse Gas Bulletin - The State of Greenhouse Gases in the Atmosphere Based on Global Observations through 2017. 14: P. 9, 2018.
- [38] International Energy Agency (IEA). World Energy Outlook 2021. *IEA, Paris, P. 386, 2021.*
- [39] The World Bank (данные о внутриваловом продукте за период более 50 лет по 2021 г. во всем мире и в отдельных странах). Электронный ресурс - [<https://data.worldbank.org/indicator/NY.GDP.MKTP.CD>].

- [40] Bach W., Crane A.J., Berger A.L., Longhetto A. Carbon dioxide: current views and developments in energy/climate research. *Conference on climate and energy: carbon dioxide, Erice, Italy, 16 Jul 1982*, P. 525, 1983.
- [41] T. DeVries. The Ocean Carbon Cycle. *Annual Review of Environment and Resources*, 47(1): 317-34, 2022.
- [42] Kirschbaum M.U.F., Mueller R. Net Ecosystem Exchange. *Cooperative Research Centre for Greenhouse Accounting*, P. 139, 2001.
- [43] Archer, D., Brovkin, V. The millennial atmospheric lifetime of anthropogenic CO₂. *Climatic Change*. 90: 283–297, 2008.
- [44] Timofeyev, Y.M., Nerobelov, G.M., Poberovskii, A.V., Filippov N.N. Determining Both Tropospheric and Stratospheric CO₂ Contents Using a Ground-Based IR Spectroscopic Method. *Izv. Atmos. Ocean. Phys.* 57: 286–296, 2021.
- [45] Nikitenko, A.A., Timofeev, Y.M., Virolainen, Y.A., Nerobelov G.M., Poberovskii A.V. Comparison of Stratospheric CO₂ Measurements by Ground- and Satellite-Based Methods. *Atmos Ocean Opt.* 35: 341–344, 2022.
- [46] Friedlingstein, P., O'Sullivan, M., Jones, M. W., Andrew, R. M., Hauck, J., Olsen, A., Peters, G. P., Peters, W., Pongratz, J., Sitch, S., Le Quéré, C., Canadell, J. G., Ciais, P., Jackson, R. B., Alin, S., Aragão, L. E. O. C., Arneeth, A., Arora, V., Bates, N. R., Becker, M., Benoit-Cattin, A., Bittig, H. C., Bopp, L., Bultan, S., Chandra, N., Chevallier, F., Chini, L. P., Evans, W., Florentie, L., Forster, P. M., Gasser, T., Gehlen, M., Gilfillan, D., Gkritzalis, T., Gregor, L., Gruber, N., Harris, I., Hartung, K., Haverd, V., Houghton, R. A., Ilyina, T., Jain, A. K., Joetzjer, E., Kadono, K., Kato, E., Kitidis, V., Korsbakken, J. I., Landschützer, P., Lefèvre, N., Lenton, A., Lienert, S., Liu, Z., Lombardozi, D., Marland, G., Metzl, N., Munro, D. R., Nabel, J. E. M. S., Nakaoka, S.-I., Niwa, Y., O'Brien, K., Ono, T., Palmer, P. I., Pierrot, D., Poulter, B., Resplandy, L., Robertson, E., Rödenbeck, C., Schwinger, J., Séférian, R., Skjelvan, I., Smith, A. J. P., Sutton, A. J., Tanhua, T., Tans, P. P., Tian, H., Tilbrook, B., van der Werf, G., Vuichard, N., Walker, A. P., Wanninkhof, R.,

- Watson, A. J., Willis, D., Wiltshire, A. J., Yuan, W., Yue, X., Zaehle, S. Global Carbon Budget 2020, *Earth Syst. Sci. Data*, 12: 3269–3340, 2020.
- [47] Yue T.X., Zhang L.L., Zhao M.W., Wang Y.F., Wilson J. Space- and ground-based CO₂ measurements: A review. *Science China Earth Sciences*, 59: 2089–2097, 2016.
- [48] Róžański K., Chmura Ł., Gałkowski M., N. Jarosław, Z. Mirosław, B. Jakub, O'D. Simon. Monitoring of Greenhouse Gases in the Atmosphere – A Polish Perspective. *Papers on Global Change*, 23: 111–126, 2016.
- [49] Биненко В.И., Решетников А.И., Шевчук Н.О. Анализ изменчивости концентрации углекислого газа на основе наземных и спутниковых измерений на региональном уровне. *Ученые записки РГГМУ*, 38: 175-187, 2015.
- [50] Тимофеев Ю.М., И. А. Березин, Я. А. Виролайнен, М. В. Макарова, А. В. Поляков, А. В. Поберовский, Н. Н. Филиппов, С. Ч. Фока. Пространственно-временные вариации содержания CO₂ по данным спутниковых и наземных измерений вблизи Санкт-Петербурга. *Изв. РАН, ФАО*, 55(1): 65-72, 2019.
- [51] Рокотян Н.В., Имасу Р., Захаров В.И., Грибанов К.Г., Хаматнурова М.Ю. Амплитуда сезонного цикла CO₂ в атмосфере Уральского региона по результатам наземного и спутникового ИК-зондирования. *Оптика атмосферы и океана*, 27(9): 819–825, 2014.
- [52] S.-J. Wang, L. Cao, N. Li. Responses of the ocean carbon cycle to climate change: Results from an earth system climate model simulation. *Advances in Climate Change Research*, 5(3): 123-130, 2014.
- [53] WMO. The Global Atmosphere Watch Programme: 25 Years of Global Coordinated Atmospheric Composition Observations and Analyses. *WMO*, P. 48, 2014.
- [54] WMO. Global Atmosphere Watch measurements guide. *WMO*, P. 87, 2001.
- [55] What is the Global Greenhouse Gas Reference Network? Электронный ресурс - [<https://gml.noaa.gov/ccgg/ggrn.php>].

- [56] Earth System Research Laboratories. Электронный ресурс - [https://www.esrl.noaa.gov/]
- [57] Hari P., E. Nikinmaa, T. Pohja, E. Siivola, J. Bäck, T. Vesala, M. Kulmala. Station for Measuring Ecosystem-Atmosphere Relations: SMEAR. *Physical and Physiological Forest Ecology*. Springer, Dordrecht, 471–487, 2013.
- [58] Hazan L., Tarniewicz J., Ramonet M., Laurent O., Abbaris A. Automatic processing of atmospheric CO₂ and CH₄ mole fractions at the ICOS Atmosphere Thematic Centre. *Atmos. Meas. Tech.*, 9: 4719–4736, 2016.
- [59] Алферов А.М., Блинов В.Г., Гитарский М.Л., Грабар В.А., Замолотчиков Д.Г., Зинченко А.В., Иванова Н.П., Ивахов В.М., Карабань Р.Т., Карелин Д.В., Калюжный И.Л., Кашин Ф.В., Конюшков Д.Е., Коротков В.Н., Кровотынцев В.А., Лавров С.А., Марунич А.С., Парамонова Н.Н., Романовская А.А., Трунов А.А., Шилкин А.В., Юзбеков А.К. Мониторинг потоков парниковых газов в природных экосистемах. *Монография. Саратов: Амирит*, С. 279, 2017.
- [60] Belikov D., Arshinov M., Belan B., Davydov D., Fofonov A., Sasakawa M., Machida T. Analysis of the Diurnal, Weekly, and Seasonal Cycles and Annual Trends in Atmospheric CO₂ and CH₄ at Tower Network in Siberia from 2005 to 2016. *Atmosphere*, 10(11): 689, 2019.
- [61] М.Ю. Аршинов, Б.Д. Белан, Д.К. Давыдов, Г.М. Креков, А.В. Фофонов, С.В. Бабченко, G. Inoue, T. Machida, Sh. Maksutov, M. Sasakawa, K. Shimoyama. Динамика вертикального распределения парниковых газов в атмосфере. *Оптика атмосферы и океана*, 25(12): 1051-1061, 2012.
- [62] Фока С.Ч., М.В. Макарова, А.В. Поберовский, Ю.М. Тимофеев. Временные вариации концентрации CO₂, CH₄ и СО в пригороде Санкт-Петербурга (г. Петергоф). *Оптика атмосферы и океана*, 32(10): 860–866, 2012.
- [63] Makarova M.V., D.K. Arabadzhyan, S.Ch. Foka, N.N. Paramonova, A.V. Poberovskii, Yu.M. Timofeev, N.V. Pankratova, V.S. Rakitin. Estimation of Nocturnal Area Fluxes of Carbon Cycle Gases in Saint Petersburg Suburbs. *Russ. Meteorol. Hydrol.* 43: 449–455, 2018.

- [64] Арабаджян Д.К., Парамонова Н.Н., Макарова М.В., Поберовский А.В. Анализ временной изменчивости концентрации метана в атмосфере по данным наземных наблюдений. *Вестник СПбГУ*, 2(4): 204-215, 2015.
- [65] Арефьев В.Н., Н. Е. Каменоградский, Ф. В. Кашин, А. В. Шилкин. Фоновая составляющая концентрации двуокси углерода в приземном воздухе (станция мониторинга «Обнинск»). *Изв. РАН. Физика атмосферы и океана*, 50(6): 655–662, 2014.
- [66] Total Carbon Column Observing Network. Электронный ресурс - [<http://www.tccon.caltech.edu/>]
- [67] Wunch D., Toon G.C., Blavier J.-F.L., Washenfelder R.A., Notholt J., Connor B.J., Griffith D.W.T., Sherlock V., Wennberg P.O. The Total Carbon Column Observing Network. *Phil. Trans. R. Soc. A*, 369(1943): 2087–2112, 2011.
- [68] Hase F., Hannigan J., Coffey M.T., Goldman A., Hopfner M., Jones N. B., Rinsland C.P., Wood S.W. Intercomparison of retrieval codes used for the analysis of high-resolution, ground-based FTIR measurements. *Journal Of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 87: 25-52, 2004.
- [69] Zeng Z.-C., Natraj V., Xu F., Chen S., Gong F.-Y., Pongetti T. J., Sung K., Toon G., Sander S.P., Yung Y.L. GFIT3: a full physics retrieval algorithm for remote sensing of greenhouse gases in the presence of aerosols. *Atmos. Meas. Tech.*, 14: 6483–6507, 2021.
- [70] Frey M., Sha M.K., Hase F., Kiel M., Blumenstock T., Harig R., Surawicz G., Deutscher N. M., Shiomi K., Franklin J. E., Bösch H., Chen J., Grutter M., Ohyama H., Sun Y., Butz A., Mengistu Tsidu G., Ene D., Wunch D., Cao Z., Garcia O., Ramonet M., Vogel F., Orphal J. Building the COCCON: long-term stability and ensemble performance of the EM27/SUN Fourier transform spectrometer. *Atmos. Meas. Tech.*, 12: 1513–1530, 2019.
- [71] Frey M., Hase F., Blumenstock T., Groß J., Kiel M., Mengistu Tsidu G., Schäfer K., Sha M. K., Orphal J. Calibration and instrumental line shape characterization of

- a set of portable FTIR spectrometers for detecting greenhouse gas emissions. *Atmos. Meas. Tech.*, 8: 3047–3057, 2015.
- [72] Hase F., Frey M., Blumenstock T., Groß J., Kiel M., Kohlhepp R., Mengistu Tsidu G., Schäfer K., Sha M. K., Orphal J. Application of portable FTIR spectrometers for detecting greenhouse gas emissions of the major city Berlin. *Atmos. Meas. Tech.*, 8: 3059–3068, 2015.
- [73] De Mazière M., Thompson A.M., Kurylo M.J., Wild J.D., Bernhard G., Blumenstock T., Braathen G.O., Hannigan J.W., Lambert J.-C., Leblanc T., McGee T.J., Nedoluha G., Petropavlovskikh I., Seckmeyer G., Simon P.C., Steinbrecht W., Strahan S.E. The Network for the Detection of Atmospheric Composition Change (NDACC): history, status and perspectives. *Atmos. Chem. Phys.*, 18: 4935–4964, 2018.
- [74] Barthlott S., Schneider M., Hase F., Wiegele A., Christner E., González Y., Blumenstock T., Dohe S., García O.E., Sepúlveda E., Strong K., Mendonca J., Weaver D., Palm M., Deutscher N.M., Warneke T., Notholt J., Lejeune B., Mahieu E., Jones N., Griffith D. W.T., Velazco V. A., Smale D., Robinson J., Kivi R., Heikkinen P., Raffalski U. Using XCO₂ retrievals for assessing the long-term consistency of NDACC/FTIR data sets. *Atmos. Meas. Tech.*, 8: 1555–1573, 2015.
- [75] Timofeyev Yu., Ya. Virolainen, M. Makarova, A. Poberovsky, A. Polyakov, D. Ionov, S. Osipov, H. Imhasin. Ground-based spectroscopic measurements of atmospheric gas composition near Saint Petersburg (Russia). *J. Mol.Spectr.*, 323: 2–14, 2016.
- [76] Virolainen Y.A. Methodical Aspects of the Determination of Carbon Dioxide in Atmosphere Using FTIR Spectroscopy. *J Appl Spectrosc.* 85: 462–469, 2018.
- [77] Makarova M.V., O. Kirner, Yu.M. Timofeev, A.V. Poberovskii, Kh.Kh. Imkhasin, S.I. Osipov, B.K. Makarov. Analysis of methane total column variations in the atmosphere near St. Petersburg using ground-based measurements and simulations. *Izvestiya, Atmospheric and Oceanic Physics*, 51(2): 177–185, 2015.
- [78] M. Zhou, Q. Ni, Z. Cai, B. Langerock, W. Nan, Ya. Yang, Ke. Che, Dongxu Yang, Ting Wang, Yi Liu, Pucai Wang. CO₂ in Beijing and Xianghe Observed by

- Ground-Based FTIR Column Measurements and Validation to OCO-2/3 Satellite. *Observations.Remote Sens*, 14: 3769, 2022.
- [79] Peylin P., F.M. Bréon, S. Serrar, Y. Tiwari, A. Chédin, M. Gloor, T. Machida, C. Brenninkmeijer, A. Zahn, P. Ciais. Evaluation of Television Infrared Observation Satellite (TIROS-N) Operational Vertical Sounder (TOVS) spaceborne CO₂ estimates using model simulations and aircraft data. *J. Geophys. Res.*, 112: D09313, 2007.
- [80] H. Kobayashi, A. Shimota, K. Kondo, E. Okumura, Y. Kameda, H. Shimoda, T. Ogawa. Development and evaluation of the interferometric monitor for greenhouse gases: a high-throughput Fourier-transform infrared radiometer for nadir Earth observation. *Appl. Opt.* 38: 6801-6807, 1999.
- [81] Observing Systems Capability Analysis and Review Tool (OSCAR).
Электронный ресурс -
<https://space-test.oscar.wmo.int/oscar-test/instruments/view/img>
- [82] Crevoisier C., Chédin A., Matusueda H., Machida T., Armante R., Scott N.A. First year of upper tropospheric integrated content of CO₂ from IASI hyperspectral infrared observations. *Atmos. Chem. Phys.*, 9: 4797–4810, 2009.
- [83] Kulawik S.S., Jones D.B.A., Nassar R., Irion F.W., Worden J.R., Bowman K.W., Machida T., Matusueda H., Sawa Y., Biraud S. C., Fischer M.L., Jacobson, A.R. Characterization of Tropospheric Emission Spectrometer (TES) CO₂ for carbon cycle science. *Atmos. Chem. Phys.*, 10: 5601–5623, 2010.
- [84] C. Moustafa T., T. S. Pagano, H. H. Aumann, R. Atlas, C. Barnet, J. Blaisdell, L. Chen, M. Divakarla, E. J. Fetzer, M. Goldberg, C. Gautier, S. Granger, S. Hannon, F. W. Irion, R. Kakar, E. Kalnay, B. H. Lambrigtsen, S.-Y. Lee, J.L. Marshall, W. Wallace Mcmillan, L. Mcmillin, E.T. Olsen, H. Revercomb, P. Rosenkranz, W.L. Smith, D. Staelin, L.L. Strow, J. Susskind, D. Tobin, W. Wolf, L. Zhou. AIRS. *Bulletin of the American Meteorological Society*, 87(7): 911-926, 2006.
- [85] M. Reuter, H. Bovensmann, M. Buchwitz, J. P. Burrows, B. J. Connor, N. M. Deutscher, D. W. T. Griffith, J. Heymann, G. Keppel-Aleks, J. Messerschmidt, J. Notholt, C. Petri, J. Robinson, O. Schneising, V. Sherlock, V. Velazco, T.

- Warneke, P. O. Wennberg, D. Wunch. Retrieval of atmospheric CO₂ with enhanced accuracy and precision from SCIAMACHY: Validation with FTS measurements and comparison with model results. *J. Geophys. Res.*, 116: D04301, 2021.
- [86] Peiro, H., Crowell, S., Schuh, A., Baker, D. F., O'Dell, C., Jacobson, A. R., Chevallier, F., Liu, J., Eldering, A., Crisp, D., Deng, F., Weir, B., Basu, S., Johnson, M. S., Philip, S., Baker, I. Four years of global carbon cycle observed from the Orbiting Carbon Observatory 2 (OCO-2) version 9 and in situ data and comparison to OCO-2 version 7. *Atmos. Chem. Phys.*, 22: 1097–1130, 2022.
- [87] Yang, D., Liu, Y., Boesch, H. et al. A New TanSat XCO₂ Global Product towards Climate Studies. *Adv. Atmos. Sci.*, 38: 8–11, 2021.
- [88] O'Dell, C. W., Eldering, A., Wennberg, P. O., Crisp, D., Gunson, M. R., Fisher, B., Frankenberg, C., Kiel, M., Lindqvist, H., Mandrake, L., Merrelli, A., Natraj, V., Nelson, R. R., Osterman, G. B., Payne, V. H., Taylor, T. E., Wunch, D., Drouin, B. J., Oyafuso, F., Chang, A., McDuffie, J., Smyth, M., Baker, D. F., Basu, S., Chevallier, F., Crowell, S. M. R., Feng, L., Palmer, P. I., Dubey, M., García, O. E., Griffith, D. W. T., Hase, F., Iraci, L. T., Kivi, R., Morino, I., Notholt, J., Ohyama, H., Petri, C., Roehl, C. M., Sha, M. K., Strong, K., Sussmann, R., Te, Y., Uchino, O., Velazco, V. A. Improved retrievals of carbon dioxide from Orbiting Carbon Observatory-2 with the version 8 ACOS algorithm. *Atmos. Meas. Tech.*, 11: 6539–6576, 2018.
- [89] Pearman, G. I., Hyson, P., Fraser, P. J. The global distribution of atmospheric carbon dioxide: 1. Aspects of observations and modeling. *J. Geophys. Res.*, 88(C6): 3581-3590, 1983.
- [90] Jiang, X., Q. Li, M.-C. Liang, R.-L. Shia, M. T. Chahine, E. T. Olsen, L. L. Chen, Y. L. Yung. Simulation of upper tropospheric CO₂ from chemistry and transport models. *Global Biogeochem. Cycles*, 22: GB4025, 2008.
- [91] Wang Q., Mustafa F., Bu L., Yang J., Fan C., Liu J., Chen W. Monitoring of Atmospheric Carbon Dioxide over a Desert Site Using Airborne and Ground Measurements. *Remote Sens.*, 14: 5224, 2022.

- [92] Cheng Y. , An X., Yun F., Zhou L., Liu L., Fang S., Xu L. Simulation of CO₂ variations at Chinese background atmospheric monitoring stations between 2000 and 2009: Applying a CarbonTracker model. *Chin. Sci. Bull.*, 58: 3986–3993, 2013.
- [93] Park C., Park S.-Y., Gurney K.R., Gerbig C., DiGangi J.P., Choi Y., Hwa W.L.. Numerical simulation of atmospheric CO₂ concentration and flux over the Korean Peninsula using WRF-VPRM model during Korus-AQ 2016 campaign. *PLoS ONE*, 15(1): e0228106, 2020.
- [94] Balsamo G., Engelen R., Thieme D., Agustí-Panareda A., Bousserez N., Broquet G., Brunner D., Buchwitz M., Chevallier F., Choulga M., Denier Van Der Gon H., Florentie L., Haussaire J.-M., Janssens-Maenhout G., Jones M.W., Kaminski T., Krol M., Le Quéré C., Marshall J., McNorton J., Prunet P., Reuter M., Peters W., Scholze M. The CO₂ Human Emissions (CHE) Project: First Steps Towards a European Operational Capacity to Monitor Anthropogenic CO₂ Emissions. *Front. Remote Sens.*, 2: 707247, 2021.
- [95] Cory R. Martin, N. Zeng, A. Karion, K. Mueller, S. Ghosh, I. Lopez-Coto, K.R. Gurney, T. Oda, K. Prasad, Y. Liu, R.R. Dickerson, J. Whetstone. Investigating sources of variability and error in simulations of carbon dioxide in an urban region. *Atmospheric Environment*, 199: 55-69, 2019.
- [96] T. Zheng, R. Nassar, M. Baxter. Estimating power plant CO₂ emission using OCO-2 XCO₂ and high resolution WRF-Chem simulations. *Environmental Research Letters*, 14(8), 2019.
- [97] R. Lei, S. Feng, A. Danjou, G. Broquet, D. Wu, J. C. Lin, C. W. O'Dell, T. Lauvaux. Fossil fuel CO₂ emissions over metropolitan areas from space: A multi-model analysis of OCO-2 data over Lahore, Pakistan. *Remote Sensing of Environment*, 264: 112625, 2021.
- [98] McGuffie K., Henderson-Sellers A. Forty years of numerical climate modelling. *Int. J. Climatol.*, 21: 1067-1109, 2001.
- [99] Flato, G., Gillett, N., Arora, V., Cannon, A., Anstey, J. Modelling Future Climate Change. *Chapter 3 in Canada's Changing Climate Report, Government of Canada, Ottawa, Ontario, 74–111, 2019.*

- [100] Chiodo G., Polvani L.M., Marsh D.R., Stenke A., Ball W., Rozanov E., Muthers S., Tsigaridis K. The response of the ozone layer to quadrupled CO₂ concentrations. *J Clim.*, 32(22): 7629-7642, 2019.
- [101] Sukhodolov, T., Egorova, T., Stenke, A., Ball, W. T., Brodowsky, C., Chiodo, G., Feinberg, A., Friedel, M., Karagodin-Doyennel, A., Peter, T., Sedlacek, J., Vattioni, S., Rozanov, E. Atmosphere–ocean–aerosol–chemistry–climate model SOCOLv4.0: description and evaluation. *Geosci. Model Dev.*, 14: 5525–5560, 2021.
- [102] Mauritsen, T., Bader, J., Becker, T., Behrens, J., Bittner, M., Brokopf, R., Brovkin, V., Claussen, M., Crueger, T., Esch, M., Fast, I., Fiedler, S., Fläschner, D., Gayler, V., Giorgetta, M., Goll, D. S., Haak, H., Hagemann, S., Hedemann, C., Hohenegger, C., Ilyina, T., Jahns, Th., Jimenéz-de-la-Cuesta, D., Jungclaus, J., Kleinen, Th., Kloster, S., Kracher, D., Kinne, S., Kleberg, D., Lasslop, G., Kornblueh, L., Marotzke, J., Matei, D., Meraner, K., Mikolajewicz, U., Modali, K., Möbis, B., Müller, W. A., Nabel, J. E. M. S., Nam, C. C. W., Notz, D., Nyawira, S.-S., Paulsen, H., Peters, K., Pincus, R., Pohlmann, H., Pongratz, J., Popp, M., Raddatz, Th. J., Rast, S., Redler, R., Reick, Ch. H., Rohrschneider, T., Schemann, V., Schmidt, H., Schnur, R., Schulzweida, U., Six, K. D., Stein, L., Stemmler, I., Stevens, B., von Storch, J.-S., Tian, F., Voigt, A., Vrese, Ph., Wieners, K.-H., Wilkenskjaeld, S., Winkler, A., Roeckner, E. Developments in the MPI-M Earth System Model version 1.2 (MPI-ESM1.2) and its response to increasing CO₂. *J. Adv. Model. Earth Sy.*, 11: 998–1038, 2019.
- [103] Egorova, T., Rozanov, E., Zubov, V., Karol, I. Model for investigating ozone trends (MEZON). *Izvestiya, Atmos. Ocean. Phys.*, 39: 277–292, 2003.
- [104] Weisenstein, D.K., Yue, G.K., Ko, M.K. W., Sze, N.-D., Rodriguez, J. M., Scott, C. J. A two-dimensional model of sulfur species and aerosols. *J. Geophys. Res.*, 102: 13019–13035, 1997.
- [105] Skamarock, W. C., Klemp, J. B., Dudhia, J., Gill, D. O., Liu, Z., Berner, J., Wang, W., Powers, J.G., Duda, M.G., Barker, D., Huang, X. -yu. A Description of the Advanced Research WRF Model Version 4.1 (No. NCAR/TN-556+STR), P.

162, 2019, электронная версия -
[\[https://opensky.ucar.edu/islandora/object/technotes%3A576\]](https://opensky.ucar.edu/islandora/object/technotes%3A576).

- [106] Grell G.A., S.E. Peckham, R. Schmitz, S.A. McKeen, G. Frost, W.C. Skamarock, B. Eder. Fully coupled 'online' chemistry in the WRF model. *Atmos. Environ*, 39: 6957-6976, 2005.
- [107] Beck, V., T. Koch, R. Kretschmer, J. Marshall, R. Ahmadov, C. Gerbig, D. Pillai, M. Heimann. The WRF Greenhouse Gas Model (WRF-GHG). *Technical Report No. 25. Max Planck Institute for Biogeochemistry, Jena, Germany*, P. 81, 2011.
- [108] Oda, T., Maksyutov, S., and Andres, R. J. The Open-source Data Inventory for Anthropogenic CO₂, version 2016 (ODIAC2016): a global monthly fossil fuel CO₂ gridded emissions data product for tracer transport simulations and surface flux inversions. *Earth Syst. Sci. Data*, 10: 87–107, 2018.
- [109] Bofeng Cai, Sai Liang, Jiong Zhou, Jinnan Wang, Libin Cao, Shen Qu, Ming Xu, Zhifeng Yang. China high resolution emission database (CHRED) with point emission sources, gridded emission data, and supplementary socioeconomic data. *Resources, Conservation and Recycling*, 129: 232-239, 2018.
- [110] Liu Zhu, Bofeng Cai. High-resolution Carbon Emissions Data for Chinese Cities. *Paper, Environment and Natural Resources Program, Belfer Center*, 2018.
- [111] Xinwanghao Xu, Hong Huo, Jingru Liu, Yuli Shan, Yuan Li, Heran Zheng, Dabo Guan, Zhiyun Ouyang, Patterns of CO₂ emissions in 18 central Chinese cities from 2000 to 2014. *Journal of Cleaner Production*, 172: 529-540, 2018.
- [112] Bergamaschi, P., A. Danila, R. F. Weiss, P. Ciais, R. L. Thompson, D. Brunner, I. Levin, Y. Meijer, F. Chevallier, G. Janssens-Maenhout, H. Bovensmann, D. Crisp, S. Basu, E. Dlugokencky, R. Engelen, C. Gerbig, D. Günther, S. Hammer, S. Henne, S. Houweling, U. Karstens, E. Kort, M. Maione, A. J. Manning, J. Miller, S. Montzka, S. Pandey, W. Peters, P. Peylin, B. Pinty, M. Ramonet, S. Reimann, T. Röckmann, M. Schmidt, M. Strogies, J. Sussams, O. Tarasova, J. van Aardenne, A. T. Vermeulen, F. Vogel. Atmospheric monitoring and inverse modelling for verification of greenhouse gas inventories. *EUR 29276 EN, Publications Office of the European Union, Luxembourg*, 2018.

- [113] Super, I., Dellaert, S. N. C., Visschedijk, A. J. H., Denier van der Gon, H. A. C. Uncertainty analysis of a European high-resolution emission inventory of CO₂ and CO to support inverse modelling and network design. *Atmos. Chem. Phys.*, 20: 1795–1816, 2020.
- [114] M. Crippa, D. Guizzardi, E. Pisoni, E. Solazzo, A. Guion, M. Muntean, A. Florczyk, M. Schiavina, M. Melchiorri, A. Fuentes Hutfilte. Global anthropogenic emissions in urban areas: patterns, trends, and challenges. *Environ. Res. Lett.*, 16: 074033, 2021.
- [115] Feng, L., Palmer, P. I., Yang, Y., Yantosca, R. M., Kawa, S. R., Paris, J.-D., Matsueda, H., Machida, T. Evaluating a 3-D transport model of atmospheric CO₂ using ground-based, aircraft, and space-borne data. *Atmos. Chem. Phys.*, 11: 2789–2803, 2011.
- [116] Hakkarainen J., Ialongo I., Tamminen J. Direct space-based observations of anthropogenic CO₂ emission areas from OCO-2. *Geophys. Res. Lett.*, 43: 11.400–11.406, 2016.
- [117] Maksyutov, S., Oda, T., Saito, M., Janardanan, R., Belikov, D., Kaiser, J. W., Zhuravlev, R., Ganshin, A., Valsala, V. K., Andrews, A., Chmura, L., Dlugokencky, E., Haszpra, L., Langenfelds, R. L., Machida, T., Nakazawa, T., Ramonet, M., Sweeney, C., Worthy, D. Technical note: A high-resolution inverse modelling technique for estimating surface CO₂ fluxes based on the NIES-TM–FLEXPART coupled transport model and its adjoint. *Atmos. Chem. Phys.*, 21: 1245–1266, 2021.
- [118] Monteil, G., Broquet, G., Scholze, M., Lang, M., Karstens, U., Gerbig, C., Koch, F.-T., Smith, N. E., Thompson, R. L., Luijkx, I. T., White, E., Meesters, A., Ciais, P., Ganesan, A. L., Manning, A., Mischurow, M., Peters, W., Peylin, P., Tarniewicz, J., Rigby, M., Rödenbeck, C., Vermeulen, A., Walton, E. M. The regional European atmospheric transport inversion comparison, EUROCOM: first results on European-wide terrestrial carbon fluxes for the period 2006–2015. *Atmos. Chem. Phys.*, 20: 12063–12091, 2020.

- [119] Тимофеев Ю.М., Поляков А.В. Математические аспекты решения обратных задач атмосферной оптики: Учеб. пособие. СПб.: Изд-во С.-Петербур. ун-та, С. 188, 2001.
- [120] А. Н. Тихонов. О регуляризации некорректно поставленных задач. *Докл. АН СССР*, 153(1): 49–52, 1963.
- [121] Chandra, N., Patra, P. K., Niwa, Y., Ito, A., Iida, Y., Goto, D., Morimoto, S., Kondo, M., Takigawa, M., Hajima, T., Watanabe, M. Estimated regional CO₂ flux and uncertainty based on an ensemble of atmospheric CO₂ inversions. *Atmos. Chem. Phys.*, 22: 9215–9243, 2022.
- [122] Menke W. Geophysical data analysis: discrete inverse theory. *San Diego: Academic Press*, P. 285, 1984.
- [123] Houweling S., I. Aben, F.-M. Breon, F. Chevallier, N. Deutscher, R. Engelen, C. Gerbig, D. Griffith, K. Hungershofer, R. Macatangay, J. Marshall, J. Notholt, W. Peters, S. Serrar. The importance of transport model uncertainties for the estimation of CO₂ sources and sinks using satellite measurements. *Atmos. Chem. Phys.* 10: 9981–9992, 2010.
- [124] Peylin, P., Law, R. M., Gurney, K. R., Chevallier, F., Jacobson, A. R., Maki, T., Niwa, Y., Patra, P. K., Peters, W., Rayner, P. J., Rödenbeck, C., van der Laan-Luijkx, I. T., Zhang, X. Global atmospheric carbon budget: results from an ensemble of atmospheric CO₂ inversions. *Biogeosciences*, 10: 6699–6720, 2013.
- [125] Jacob, Daniel J. Introduction to Atmospheric Chemistry. *Princeton: Princeton University Press*, P. 264, 1999.
- [126] Velasco, E., Roth, M., Tan, S. H., Quak, M., Nabarro, S. D. A., Norford, L. The role of vegetation in the CO₂ flux from a tropical urban neighbourhood. *Atmos. Chem. Phys.*, 13: 10185–10202, 2013.
- [127] Chen, J., Viatte, C., Hedelius, J. K., Jones, T., Franklin, J. E., Parker, H., Gottlieb, E. W., Wennberg, P. O., Dubey, M. K., Wofsy, S. C. Differential column measurements using compact solar-tracking spectrometers. *Atmos. Chem. Phys.*, 16: 8479–8498, 2016.

- [128] Viatte, C., Lauvaux, T., Hedelius, J. K., Parker, H., Chen, J., Jones, T., Franklin, J. E., Deng, A. J., Gaudet, B., Verhulst, K., Duren, R., Wunch, D., Roehl, C., Dubey, M. K., Wofsy, S., Wennberg, P. O. Methane emissions from dairies in the Los Angeles Basin. *Atmos. Chem. Phys.*, 17: 7509–7528, 2017.
- [129] Dietrich F., Chen J., Voggenreiter B., Aigner P., Nachtigall N., Reger B. MUCCnet: Munich Urban Carbon Column network. *Atmos. Meas. Tech.*, 14: 1111–1126, 2021.
- [130] Gisi, M., Hase, F., Dohe, S., Blumenstock, T., Simon, A., Keens, A. XCO₂-measurements with a tabletop FTS using solar absorption spectroscopy. *Atmos. Meas. Tech.*, 5: 2969–2980, 2012.
- [131] A. Font, Timothy B., I.S. Mudway, E. Purdie, C. Dunster, C.W. Fuller. Degradation in urban air quality from construction activity and increased traffic arising from a road widening scheme. *Science of The Total Environment*, 497–498: 123-132, 2014.
- [132] Denzler, B., Bogdal, C., Kern, C., Tobler, A., Huo, J., Hungerbühler, K. Urban source term estimation for mercury using a boundary-layer budget method. *Atmos. Chem. Phys.*, 19: 3821–3831, 2019.
- [133] Ионо́в Д.В., А.В. Поберовский. Интегральная эмиссия окислов азота с территории Санкт-Петербурга по данным мобильных измерений и результатам численного моделирования. *Изв. РАН, ФАО*, 53(2): 232–241, 2017.
- [134] Tomohiro O., Maksyutov S. ODIAC Fossil Fuel CO₂ Emissions Dataset (Version name: ODIAC2020b). *Center for Global Environmental Research, National Institute for Environmental Studies*, 2015.
- [135] Lin J.C., Gerbig C., Wofsy S.C., Andrews A.E., Daube B.C., Davis K.J., Grainger C.A. A near-field tool for simulating the upstream influence of atmospheric observations: The Stochastic Time-Inverted Lagrangian Transport (STILT) model. *J. Geophys. Res.*, 108: 4493, 2003.
- [136] Callewaert, S., Brioude, J., Langerock, B., Dufлот, V., Fonteyn, D., Müller, J.-F., Metzger, J.-M., Hermans, C., Kumps, N., Ramonet, M., Lopez, M., Mahieu, E., De Mazière, M. Analysis of CO₂, CH₄, and CO surface and column concentrations

- observed at Réunion Island by assessing WRF-Chem simulations. *Atmos. Chem. Phys.*, 22: 7763–7792, 2022.
- [137] Nerobelov G., Timofeyev Y., Smyshlyaev S., Foka S., Mammarella I., Virolainen Y. Validation of WRF-Chem Model and CAMS Performance in Estimating Near-Surface Atmospheric CO₂ Mixing Ratio in the Area of Saint Petersburg (Russia). *Atmosphere*, 12(3): 387, 2021.
- [138] Nerobelov G.M., Timofeyev Yu.M., Smyshlyaev S.P., Foka S.Ch., Imhasin H.H. Comparison of CO₂ Content in the Atmosphere of St. Petersburg According to Numerical Modeling and Observations. *Izv. Atmos. Ocean. Phys.* 59: 275–286, 2023.
- [139] Kempeneers, F. Sedano, L. Seebach, P. Strobl J. San-Miguel-Ayanz. Data Fusion of Different Spatial Resolution Remote Sensing Images Applied to Forest-Type Mapping. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 49(12): 4977-4986, 2011.
- [140] Kilkki J., Aalto T., Hatakka J., Portin H., Laurila T. Atmospheric CO₂ observations at Finnish urban and rural sites. *Boreal Env. Res.* 20: 227–242, 2015.
- [141] A. Carlos, Q. Tu, F. Hase, M. V. Makarova, K. Griбанov, S.C. Foka, V. Zakharov, T. Blumenstock, M. Buchwitz, C. Diekmann, B. Ertl, M.M. Frey, H. Kh. Imhasin, D.V. Ionov, F. Khosrawi, S.I. Osipov, M. Reuter, M. Schneider, T. Warneke. Investigation of spaceborne trace gas products over St Petersburg and Yekaterinburg, Russia, by using Collaborative Column Carbon Observing Network (COCCON) observations. *Atmos. Meas. Tech.* 15: 2199–2229, 2022.
- [142] Mlawer, E. J., Taubman, S. J., Brown, P. D., Iacono, M. J., Clough, S. A. Radiative transfer for inhomogeneous atmospheres: RRTM, a validated correlated-k model for the longwave. *J. Geophys. Res.*, 102(D14): 16663–16682, 1997.
- [143] Dudhia, J. Numerical Study of Convection Observed during the Winter Monsoon Experiment Using a Mesoscale Two-Dimensional Model. *J. Atmos. Sci.*, 46: 3077–3107, 1989.

- [144] Janjic Zavisla I. The Step–Mountain Eta Coordinate Model: Further developments of the convection, viscous sublayer, and turbulence closure schemes. *Mon. Wea. Rev.*, 122: 927–945, 1994.
- [145] Monin A. S., A. M. Obukhov. Basic laws of turbulent mixing in the surface layer of the atmosphere. *Contrib Geophys Inst Acad Sci USSR*, 151:163–187, 1954.
- [146] Janjic Zavisla I. The surface layer in the NCEP Eta Model. *Eleventh conference on numerical weather prediction. Norfolk, VA, 19–23 August 1996. Amer Meteor Soc, Boston, MA*, 354–355, 1996.
- [147] Chen F., J. Dudhia. Coupling an Advanced Land Surface-Hydrology Model with the Penn State-NCAR MM5 Modeling System. Part I: Model Implementation and Sensitivity. *Mon. Wea. Rev.*, 129: 569-585, 2001.
- [148] Grell Georg A. Prognostic Evaluation of Assumptions Used by Cumulus Parameterizations. *Mon. Wea. Rev.*, 121: 764–787, 1993.
- [149] Hong S.–Y., J.–O. J. Lim The WRF single–moment 6–class microphysics scheme (WSM6). *J. Korean Meteor. Soc.*, 42: 129–151, 2006.
- [150] Salamanca, F., A. Martilli. A new building energy model coupled with an urban canopy parameterization for urban climate simulations—part II. Validation with one dimension off–line simulations. *Theor. Appl. Climatol.*, 99: 345–356, 2010.
- [151] H. Hersbach, B. Bell, P. Berrisford, S. Hirahara, A. Horányi, J. Muñoz-Sabater, J. Nicolas, C. Peubey, R. Radu, D. Schepers, A. Simmons, C. Soci, S. Abdalla, X. Abellan, G. Balsamo, P. Bechtold, G. Biavati, J. Bidlot, M. Bonavita, G. De Chiara, P. Dahlgren, D. Dee, M. Diamantakis, R. Dragani, J. Flemming, R. Forbes, M. Fuentes, A. Geer, L. Haimberger, S. Healy, R.J. Hogan, E. Hólm, M. Janisková, S. Keeley, P. Laloyaux, P. Lopez, C. Lupu, G. Radnoti, P. de Rosnay, I. Rozum, F. Vamborg, S. Villaume, J.-N. Thépaut. The ERA5 global reanalysis. *Q J R Meteorol Soc.*, 146: 1999-2049, 2020.
- [152] Hersbach, H., Bell, B., Berrisford, P., Biavati, G., Horányi, A., Muñoz Sabater, J., Nicolas, J., Peubey, C., Radu, R., Rozum, I., Schepers, D., Simmons, A., Soci, C., Dee, D., Thépaut, J.-N. ERA5 hourly data on single levels from 1959 to present. *Copernicus Climate Change Service (C3S) Climate Data Store (CDS)*, 2018.

- [153] A. R. Jacobson, K. N. Schuldt, J. B. Miller, P. Tans, A. Andrews, J. Mund, T. Aalto, P. Bakwin, P. Bergamaschi, S. C. Biraud, H. Chen, A. Colomb, S. Conil, P. Cristofanelli, K. Davis, M. Delmotte, J. P. DiGangi, E. Dlugokencky, L. Emmenegger, M. L. Fischer, J. Hatakka, M. Heliasz, O. Hermanssen, J. Holst, D. Jaffe, A. Karion, P. Keronen, K. Kominkova, D. Kubistin, O. Laurent, T. Laurila, J. Lee, I. Lehner, M. Leuenberger, M. Lindauer, M. O. Löfvenius, M. Lopez, I. Mammarella, G. Manca, M. V. Marek, P. Marklund, M. Y. Martin, K. McKain, C. E. Miller, M. Mölder, C. L. Myhre, J. M. Pichon, C. Plass-Dölmer, M. Ramonet, B. Scheeren, M. Schumacher, C. D. Sloop, M. Steinbacher, C. Sweeney, K. Thoning, K. Tørseth, J. Turnbull, B. Viner, G. Vitkova, S. D. Wekker, D. Weyrauch, D. Worthy. CarbonTracker Near-Real Time, CT-NRT.v2020-1. *NOAA Earth System Research Laboratory, Global Monitoring Division*, 2020.
- [154] Böttcher K., Markkanen T., Thum T., Aalto T., Aurela M., Reick C.H., Kolari P., Arslan A.N., Pulliainen J. Evaluating Biosphere Model Estimates of the Start of the Vegetation Active Season in Boreal Forests by Satellite Observations. *Remote Sensing*, 8(7): 580, 2016.
- [155] Mahadevan, P., S. C. Wofsy, D. M. Matross, X. Xiao, A. L. Dunn, J. C. Lin, C. Gerbig, J. W. Munger, V. Y. Chow, E. W. Gottlieb. A satellite-based biosphere parameterization for net ecosystem CO₂ exchange: Vegetation Photosynthesis and Respiration Model (VPRM). *Global Biogeochem. Cycles*, 22: GB2005, 2008.
- [156] K. Wesslander, A. O., B. Schneider. Inter-annual and seasonal variations in the air–sea CO₂ balance in the central Baltic Sea and the Kattegat. *Continental Shelf Research*, 30(14): 1511-1521, 2010.
- [157] Wesslander K. The Carbon Dioxide System in the Baltic Sea Surface Waters. *Doctoral thesis. University of Gothenburg, Department of Earth Sciences*, P. 36, 2011.
- [158] Humborg Ch., Geibel M.C., Sun X., McCrackin M., Mörth C.M., Stranne Ch., Jakobsson M., Gustafsson B., Sokolov A., Norkko A., Norkko J. High emissions of carbon dioxide and methane from the coastal Baltic Sea at the end of a summer heat wave. *Front. Mar. Sci.*, 6: 493, 2019.

- [159] Wanninkhof R. Relationship between wind speed and gas exchange over the ocean revisited. *Limnol. Oceanogr. Methods*, 12: 351–362, 2014.
- [160] Nerobelov, G.M., Timofeyev, Y.M. Estimates of CO₂ Emissions and Uptake by the Water Surface near St. Petersburg Megalopolis. *Atmos Ocean Opt.*, 34: 422–427, 2021.
- [161] Никитенко А.А., Г.М. Неробелов, Ю.М. Тимофеев, А.В. Поберовский. Анализ наземных спектроскопических измерений содержания CO₂ в Петергофе. *Современные проблемы дистанционного зондирования Земли из космоса*, 18(6): 265–272, 2021.
- [162] F. Chevallier, P. Ciais, T. J. Conway, T. Aalto, B. E. Anderson, P. Bousquet, E. G. Brunke, L. Ciattaglia, Y. Esaki, M. Fröhlich, A. Gomez, A. J. Gomez-Pelaez, L. Haszpra, P. B. Krummel, R. L. Langenfelds, M. Leuenberger, T. Machida, F. Maignan, H. Matsueda, J. A. Morguí, H. Mukai, T. Nakazawa, P. Peylin, M. Ramonet, L. Rivier, Y. Sawa, M. Schmidt, L. P. Steele, S. A. Vay, A. T. Vermeulen, S. Wofsy, D. Worthy. CO₂ surface fluxes at grid point scale estimated from a global 21 year reanalysis of atmospheric measurements. *J. Geophys. Res.*, 115: D21307, 2010.
- [163] Mues, A., Lauer, A., Lupascu, A., Rupakheti, M., Kuik, F., and Lawrence, M. G. WRF and WRF-Chem v3.5.1 simulations of meteorology and black carbon concentrations in the Kathmandu Valley. *Geosci. Model Dev.* 11: 2067–2091, 2018.
- [164] H.D. Li, B. Claremar, L.C. Wu, C. Hallgren, H. Körnich, S. Ivanell, E. Sahlée A sensitivity study of the WRF model in offshore wind modeling over the Baltic Sea. *Geosci. Front.*, 12: 101229, 2021.
- [165] Miller, S. T. K., Keim, B. D., Talbot, R. W., Mao, H. Sea breeze: Structure, forecasting, and impacts. *Rev. Geophys.*, 41: 1011, 2003.
- [166] Lauvaux, T., Miles, N. L., Richardson, S. J., Deng, A., Stauffer, D. R., Davis, K. J., Jacobson, G., Rella, C., Calonder, G.-P., DeCola, P. L. Urban Emissions of CO₂ from Davos, Switzerland: The First Real-Time Monitoring System Using an Atmospheric Inversion Technique. *Journal of Applied Meteorology and Climatology*, 52(12): 2654–2668, 2013.

- [167] Dekking, F. M.; Kraaikamp, C.; Lopuhaä, H. P.; Meester, L. E. A Modern Introduction to Probability and Statistics. *Springer Texts in Statistics, Springer London*, P. 488, 2005.
- [168] Nerobelov G.M., Y. Timofeyev, S. Smyshlyayev, Y. Virolainen, M. Makarova, S. Foka. Comparison of CAMS Data on CO₂ with Measurements in Peterhof. *Atmos Ocean Opt*, 34: 689–694, 2021.
- [169] Nerobelov G., Timofeyev Y., Foka S., Smyshlyayev S., Poberovskiy A., Sedeeva M. Complex Validation of Weather Research and Forecasting—Chemistry Modelling of Atmospheric CO₂ in the Coastal Cities of the Gulf of Finland. *Remote Sens*, 15: 1-30, 2023.
- [170] Serebriy I.A. (Ed.) The Report on Environmental Conditions in St. Petersburg for 2017. Электронный ресурс - [https://www.gov.spb.ru/static/writable/ckeditor/uploads/2018/06/29/Doklad_EKOLOGIA2018.pdf]

Приложение А

Измерения поглощения и выделения CO₂ растительностью на станциях SMEAR

Для оптимизации и валидации модели VPRM в исследовании используются измерения температуры воздуха, GPP (Gross Primary Product; CO₂, поглощенное растительностью) и NEE (Net Ecosystem Exchange; разность между GPP и Resp) со станции “SMEAR II Huuhtälä forest”. Параметр Resp (Respiration; CO₂, выделяемое растительностью) рассчитывается, как сумма NEE и GPP. На станции Huuhtälä измерения NEE и GPP выполняются на высоте около 23-25 м (<https://wiki.helsinki.fi/display/SMEAR/Eddy233>). Оценка GPP, Resp и NEE проводится на основе простой эмпирической модели [155] и измерений биогенных потоков CO₂ при помощи комплекса приборов, состоящего из ультразвукового анемометра Gill HS-50, измеряющего скорость ветра и температуру и газоанализатора Li-7200, измеряющего концентрацию CO₂ и водяного пара. Данные доступны на сайте <https://smear.avaa.csc.fi/download>.

На станции Huuhtälä доступны мачтовые измерения на нескольких высотах около 10, 20 м и выше. Мы использовали данные о температуре воздуха наиболее близкие к поверхности Земли из-за того, что выделение CO₂ растительностью в модели VPRM рассчитывается на основе линейной регрессии с температурой воздуха. Кроме того, анализ показал, что температура воздуха на высоте около 27 м на основе измерений на станции Huuhtälä различается с температурой на высоте 1.5 м в среднем на ~3% и имеют корреляцию ~0.99. GPP, Resp и NEE получены с помощью метода турбулентных пульсаций.

Таблица А1: Параметры а и б для расчета Resp моделью VPRM до и после коррекции на основе измерений

Параметры	До коррекции	После коррекции
a	0.1797	0.1816
b	0.8800	1.4650

Приложение В

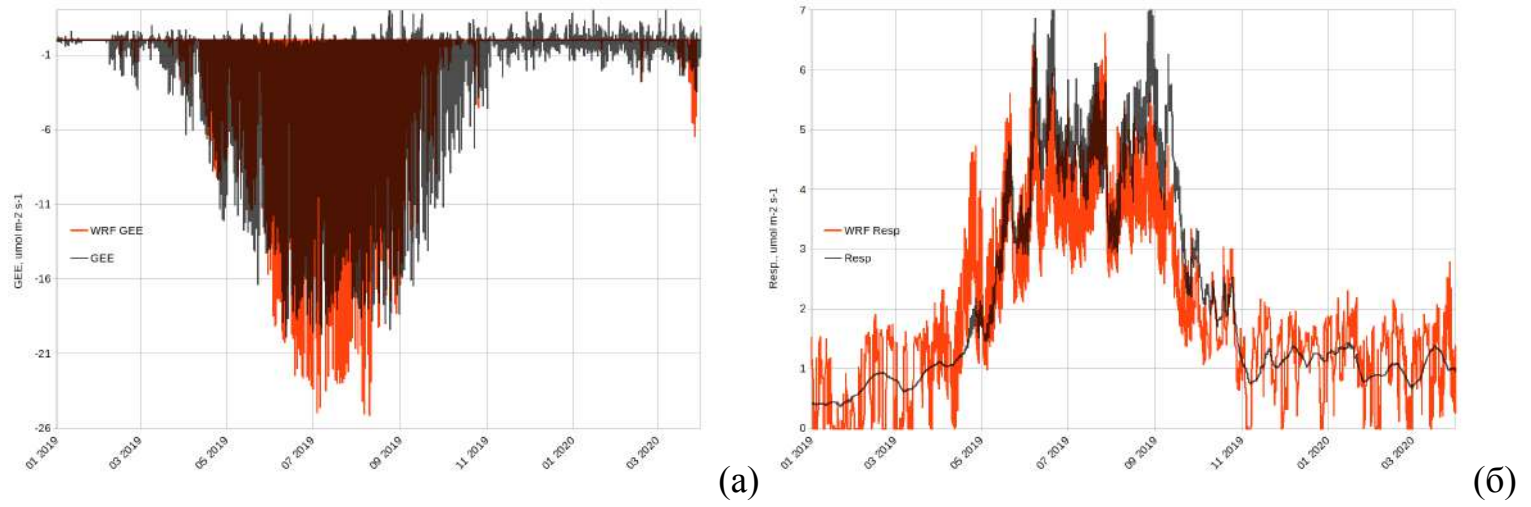


Рисунок В1: Временное изменение GEE (a) и Resp (b) по данным моделирования WRF-Chem и измерений на станции “SMEAR II Huuhtilä forest” в Финляндии за 01.2019 - 03.2020 гг.