

УДК 551.521.32

# ОЗОН В МЕЗОСФЕРЕ ПО ДАННЫМ СПУТНИКОВОГО ЭКСПЕРИМЕНТА CRISTA-1: 1. МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ ВЕРТИКАЛЬНЫХ ПРОФИЛЕЙ И АНАЛИЗ ЕГО ТОЧНОСТИ

© 2005 г. В. С. Косцов, Ю. М. Тимофеев

*Научно-исследовательский институт физики, Санкт-Петербургский государственный университет  
198904 Санкт-Петербург, Петродворец, ул. Ульяновская, 1*

*E-mail: vlad@troll.phys.spbu.ru*

*tim@troll.phys.spbu.ru*

Поступила в редакцию 18.03.2004 г., после доработки 30.07.2004 г.

Описан метод одновременного восстановления профилей содержания озона и неравновесной населенности колебательных состояний молекул озона (колебательных температур) по данным измерений уходящего инфракрасного излучения на касательных трассах при наличии эффекта нарушения локального термодинамического равновесия (ЛТР). Метод не требует моделирования процессов, определяющих неравновесную населенность колебательных состояний. На основе численных экспериментов и расчетов матрицы ошибок исследована точность метода при интерпретации спектров, зарегистрированных в области 10 мкм спутниковым прибором CRISTA в эксперименте 1994 г. Метод позволяет восстанавливать вертикальные профили содержания озона в диапазоне высот 40–90 км. Для дневных условий погрешности составляют 3–15% до высоты 65 км и 20–47% в области 70–90 км. Для ночных условий погрешности составляют 4–13% до высоты 70 км и 17–24% в вышележащих слоях. Метод позволяет восстанавливать профили колебательной температуры для шести групп колебательных состояний молекул озона – (001, 100), (011, 110), (002, 101, 200), (021, 120), (012, 111, 210), (003, 102, 201), а также для состояния 00011 молекул углекислого газа. Погрешности определения колебательных температур существенно различны для различных состояний и времени суток и варьируют в широких пределах (1–40 К), тем не менее, они существенно меньше, чем величина эффекта нарушения ЛТР (разность между значениями колебательной и кинетической температуры). Приведены примеры результатов численных экспериментов и результатов обработки отдельных измерений. Проведено сопоставление результатов восстановления профилей озона с данными эксперимента HALOE.

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Исследования пространственных распределений и временных вариаций содержания озона в средней атмосфере проводились (и интенсивно проводятся в настоящее время) с помощью различных космических дистанционных методов. При этом используются спектральные измерения поглощения солнечного излучения в полосах поглощения озона (эксперименты SAGE, HALOE, Озон-Мир, РОЕМ, ATMOS), собственного излучения атмосферы в инфракрасном (ИК) и микроволновом диапазонах (аппаратура MLS, CLAES, ISAMS, CIRRIS, CRISTA), а также отраженного и рассеянного солнечного излучения (аппаратура TOMS, SBUV, GOME) [1–6]. Большая часть измерений относится к стратосфере и нижней мезосфере. Области высот 60–90 км изучены недостаточно полно.

Известно, что излучение в полосах озона, образованных колебательно-вращательными переходами (инфракрасная область), начиная с опре-

деленных высот в атмосфере, является неравновесным. Разработан ряд численных моделей для расчета неравновесной населенности колебательных состояний молекул озона [7–12]. Модели постоянно совершенствуются на основе новых данных о скоростях различных процессов, определяющих неравновесную населенность.

Эффект нарушения локального термодинамического равновесия (ЛТР) требуется учитывать при интерпретации измерений излучения в инфракрасной области спектра. На это было указано еще в работе [13], посвященной анализу измерений радиометра LIMS. Высотные области, для которых необходим такой учет, различны для различных полос, поскольку уровни нарушения ЛТР зависят от конкретного колебательного состояния молекул озона (они также зависят от времени суток).

Существует несколько подходов к решению задачи определения профилей содержания озона по измерениям инфракрасного излучения гори-

зонты в средней атмосфере. В основе одного из подходов лежит использование численных моделей неравновесной населенности колебательных состояний в алгоритме решения обратной задачи. Примером такого подхода служит интерпретация результатов измерений уходящего излучения аппаратурой CIRRI-1A в полосе озона 9.6 мкм [14]. По интегральному значению излучения в фундаментальной полосе озона определялась населенность возбужденного состояния 001. Затем с помощью численной модели рассчитывались значения колебательной температуры состояния 001. По значениям населенности и соответствующей колебательной температуры определялась полная счетная концентрация молекул озона в средней атмосфере.

Метод, использованный в Вуппертальском университете (ФРГ) для обработки результатов измерений уходящего излучения в области 9.6 мкм, выполненных аппаратурой CRISTA, также основан на привлечении численной модели неравновесных процессов [15]. Моделирование и решение обратной задачи по восстановлению профилей озона осуществлялось в итерационном процессе, каждый шаг которого включал 2 этапа. На первом этапе рассчитывались значения неравновесной населенности колебательных состояний. На втором этапе эти значения использовались при расчете уходящего излучения в алгоритме восстановления профилей озона по данным измерений аппаратурой CRISTA. На каждом последующем шаге итерационного процесса профили озона, восстановленные на предыдущем шаге, использовались для новых, уточненных расчетов населенностей.

Точность алгоритма решения обратных задач дистанционного зондирования, использующего модель неравновесных процессов, зависит от степени адекватности используемой модели, точности ее параметров (констант скоростей процессов) и от качества различной привлекаемой априорной информации о состоянии атмосферы. Отметим, что по сравнению, например, с хорошо развитыми моделями для колебательных состояний углекислого газа модели для молекул озона характеризуются существенно большей степенью неопределенности. Кроме того, при использовании в алгоритме решения обратной задачи большого количества априорной информации (кинетические модели, параметры состояния атмосферы) информационный вклад измерений уходящего излучения в формирование решения (искомых профилей) относительно мал [16].

В настоящей работе использован другой подход к решению обратной задачи – одновременное определение как профиля содержания озона, так и населенностей колебательных состояний (колебательных температур) без привлечения численных моделей неравновесной населенности. Физи-

ческой основой такого подхода является использование измерений, выполненных с высоким или средним спектральным разрешением в широкой спектральной области, включающей линии, принадлежащие различным колебательно-вращательным полосам, что позволяет “разделить переменные” в решаемой комплексной задаче.

Метод дает возможность, во-первых, извлекать из измерений уходящего излучения максимум информации о состоянии атмосферы и, во-вторых, избегать погрешностей, характерных для первого подхода и обусловленных неопределенностью параметров модели.

## 2. ИСХОДНЫЕ ДАННЫЕ, ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И АЛГОРИТМ РЕШЕНИЯ

Массив данных, предназначенных для обработки, составляли спектры, зарегистрированные спутниковой аппаратурой CRISTA в период 5–12 ноября 1994 г. в интервале частот 980–1100 см<sup>-1</sup> в диапазоне прицельных высот 40–110 км. Аппаратура имела следующие характеристики: средний шаг по прицельной высоте – 2.5 км; случайный шум детектора – 0.006 мВт.(м<sup>2</sup> ср см<sup>-1</sup>); спектральная разрешающая способность прибора – 390; шаг измерений по частоте – 0.67 см<sup>-1</sup>; полуширина угловой аппаратной функции прибора – 1.7 км. Для обозначения совокупности спектров, полученных для конкретного набора прицельных высот, будем употреблять термин “атмосферный скан”. Массив данных содержал около 900 атмосферных сканов в широтной области 55°S – 65°N.

В дополнение к спектральным измерениям уходящего излучения при решении обратной задачи мы использовали для каждого из сканов профили кинетической температуры, давления, содержания углекислого газа и колебательных температур нижних колебательных состояний молекул CO<sub>2</sub>. Эти профили были получены нами в результате обработки спектров излучения зарегистрированных в области 15 мкм в том же самом эксперименте CRISTA-1 [17, 18]. При интерпретации измерений, выполненных в области 15 мкм, использовался метод, позволяющий, наряду с профилями температуры, давления и содержания газов, одновременно получать профили неравновесной населенности колебательных состояний молекул (в терминах колебательных температур). Этот метод подробно описан в работе [19]. Мы использовали данный метод и для обработки спектров в области 10 мкм. Приведем его краткое описание. В общей формулировке задачи уходящее излучение горизонта ( $I$ ) на частоте  $\nu$  и прицельной высоте  $z$ , рассматривается как нелинейный функционал, зависящий от вертикального распределения совокупности параметров состояния атмосферы, включая парамет-

ры, описывающие неравновесную населенность колебательных состояний:

$$I(\nu, z_i) = A[T_k(z), p(z), n_g(z), T_v^{gs}(z)], \quad (1)$$

где  $A$  – обозначение нелинейного оператора “прямой задачи”,  $z$  – вертикальная координата,  $T_k$  – кинетическая температура,  $p$  – давление,  $n$  – концентрация газа,  $T_v$  – колебательная температура,  $g$  – наименование газа и  $s$  – наименование колебательного состояния. Уравнение переноса излучения (функционал (1)) линеаризуется и приводится к векторно-матричной форме:

$$\delta y = A \delta x, \quad (2)$$

где  $y$  – вектор, компонентами которого являются измеренные значения интенсивности излучения на определенных высотах и частотах,  $\delta y$  – вектор вариаций интенсивности по отношению к средним значениям  $y_m$ , рассчитанным на основе средних профилей атмосферных параметров  $x_m$  ( $\delta y = y - y_m$ ),  $\delta x$  – совокупный вектор вариаций параметров по отношению к их средним значениям,  $A$  – линеаризованный интегральный оператор “прямой” задачи.

Совокупный вектор определяемых параметров включает в себя профили содержания озона и профили колебательных температур состояний молекул основного изотопа озона (010, 020, 001, 100, 011, 110, 002, 101, 200, 021, 120, 012, 111, 210, 003, 102, 201), второго изотопа озона (001, 100) и третьего изотопа озона (001, 100). Эти состояния ответственны за переходы, дающие основной вклад в рассматриваемую спектральную полосу. Вектор определяемых параметров также включал профиль колебательной температуры состояния 00011 молекул четырех основных изотопов углекислого газа, так как излучение в исследуемой спектральной области зависит от так называемого “лазерного” перехода 00011–10002, центрированного на частоте  $1063.735 \text{ см}^{-1}$  (для основного изотопа). Таким образом, исходный вектор неизвестных параметров содержал 26 ( $1 + 17 + 4 + 4$ ) профилей. Отметим, что выбор искомым параметров был осуществлен нами на основе многочисленных расчетов уходящего излучения и анализа вкладов различных переходов в формирование излучения (см., например, [20]).

Количество неизвестных параметров было уменьшено с помощью использования дополнительной априорной информации в виде определенных условий, ограничений или приближений. Известно, что колебательные состояния с близкими значениями энергий характеризуются так называемым “внутренним ЛТР”, т.е. их неравновесные населенности по отношению друг к другу распределены по закону Больцмана. Для молекул озона рассматриваемые состояния группируются следующим образом: (001, 100), (011, 110), (002, 101, 200), (021, 120), (012, 111, 210), (003, 102, 201);

при этом вместо 15 неизвестных параметров мы имеем 6.

Переходы из состояний 010 и 020 вносят малый вклад в формирование излучения, по сравнению с другими переходами. Поэтому мы исключили из рассмотрения эти состояния, используя приближение равенства их колебательных температур и колебательной температуры состояния 001. Аналогично мы не рассматриваем профили колебательных температур неосновных изотопов озона и углекислого газа, т.е. принимаем, что колебательные температуры соответствующих состояний различных изотопов равны по значению. Как показали численные эксперименты, эти приближения не повлияли на точность решения обратной задачи по отношению к оставшимся неизвестным параметрам.

Таким образом, в результате введенных приближений количество неизвестных профилей сократилось до 8: профиль озона, профили колебательных температур, отвечающих состояниям 001, 011, 002, 021, 012, 003 молекул озона, и профиль колебательной температуры, отвечающий состоянию 00011 молекул углекислого газа.

Чтобы учесть описанные выше дополнительные условия (а также ряд других, см. ниже), алгоритм решения обратной задачи, включающий векторно-матричное уравнение (2), был дополнен векторно-матричными уравнениями, соответствующими этим условиям:

$$\begin{cases} \delta y = A \delta x \\ \delta z_1 = C_1 \delta x \\ \delta z_2 = C_2 \delta x \\ \dots \end{cases}, \quad (3)$$

где  $z_i$  и  $C_i$  – векторы и матрицы соответственно, полученные при линеаризации выражений, определяющих накладываемые дополнительные условия. Подчеркнем, что если мы будем рассматривать векторы  $z$  как векторы дополнительных “псевдоизмерений”, то погрешность выполнения накладываемых условий можно явно задать с помощью соответствующих матриц. Решение данной системы методом статистической регуляризации записывается следующей итерационной формулой:

$$\begin{aligned} x_{k+1} = & x_m + \left( A_k^T S^{-1} A_k + D^{-1} + \sum_{n=1}^N C_n^T E_n^{-1} C_n \right)^{-1} \times \\ & \times \left[ A_k^T S^{-1} (y - y_k + A_k \delta x_k) + \right. \\ & \left. + \sum_{n=1}^N C_n^T E_n^{-1} (z_n - z_{nk} + C_{nk} \delta x_k) \right], \end{aligned} \quad (4)$$

где  $k$  – номер итерации,  $n$  – номер условия (ограничения),  $N$  – общее число дополнительных условий,  $T$  – символ транспонирования,  $S$  – матрица ошибок спектральных измерений,  $E_n$  – матрицы ошибок “псевдоизмерений”, определяющие точность, с которой должны удовлетворяться дополнительные условия,  $y_k$  – значения интенсивности излучения, рассчитанные с использованием результатов восстановления профилей на  $k$ -й итерации,  $D$  – ковариационная матрица искомым профилей. Очевидно, что при отсутствии дополнительно накладываемых условий на решение, формула (4) переходит в стандартную формулу статистической регуляризации.

В заключение данного раздела отметим, что остановка итерационного процесса осуществлялась, когда изменение решения в результате очередной итерации не превышало заданного значения. В качестве объективной характеристики качества решения обратной задачи использовались значения спектральной невязки – разности между измеренными значениями излучения и значениями, рассчитанными по восстановленным профилям.

### 3. ДЕТАЛИ РАСЧЕТОВ

#### 3.1. Модель переноса излучения и основная априорная информация

Для расчетов уходящего излучения горизонта Земли использовались параметры спектральных линий из базы данных HITRAN-96 [21]. Колебательные состояния молекул озона и углекислого газа, для которых учитывался эффект нарушения ЛТР, перечислены в предыдущем разделе. Переходы, обусловленные другими колебательными состояниями, учитывались в приближении ЛТР. Помимо спектральных линий озона и углекислого газа, учитывались линии водяного пара. Расчеты проводились на высотной сетке с шагом 2.5 км при значении верхней границы атмосферы 120 км.

При обработке измерений для дневных и ночных условий использовалась одна и та же априорная информация. В качестве среднего профиля озона был взят профиль из модели AFGL-86 [22], модифицированный на высотах более 80 км, где значения содержания озона были увеличены. Модифицирование было проведено на основе анализа результатов предварительной обработки спектров. Необходимость такого шага обусловлена значительными вариациями содержания озона на указанных высотах. Средние профили колебательных температур состояний молекул озона и углекислого газа были скомпонованы на основе модельных данных о неравновесных населенностях, которые использовались в рамках международного сравнения компьютерных программ расчета неравновесного излучения [23]. Для колебательных температур молекул озона в качестве

средних профилей были взяты среднесуточные по моделям “средние широты, день” и “средние широты, ночь”. Для колебательной температуры, соответствующей состоянию 00011 углекислого газа, в качестве среднего было взято значение 275 К. Численные эксперименты показали очень малое влияние вариаций среднего профиля этого параметра на результаты восстановления.

В качестве ковариационных матриц восстанавливаемых параметров использовались модельные матрицы аналогично [19], задаваемые двумя параметрами – априорной неопределенностью и радиусом корреляции. Априорная неопределенность для значений отношения смеси озона была принята равной 100%, а для значений колебательных температур – 50 К. Радиус корреляции равен 7 км.

#### 3.2. Дополнительная априорная информация

Наряду с дополнительными условиями “внутреннего ЛТР” и описанными выше приближениями равенства колебательных температур молекул различных изотопов, мы приняли также ряд допущений. Одно из них – выполнение ЛТР в соответствующем высотном диапазоне для конкретных колебательных состояний. По многочисленным результатам численного моделирования (см., например, [10]) известны с хорошей точностью значения высот, до которых, как правило, выполняется ЛТР для колебательных состояний молекул озона и углекислого газа. Нами были приняты следующие значения: 60 км (001, 100), 50 км (011, 110), 45 км (002, 101, 200) и 40 км для всех остальных состояний. Известно, что для молекул озона в дневное время ЛТР для состояний с большими значениями энергии может нарушаться уже с высот порядка 20 км. В том, что мы приняли в качестве верхней границы выполнения ЛТР для этих состояний значение высоты 40 км, нет противоречия. Как показали результаты численных экспериментов, колебательные температуры групп состояний (021, 120), (012, 111, 210) и (003, 102, 201) не восстанавливаются днем на высотах ниже 55 км. Значение 40 км, не влияя на результаты восстановления выше 55 км, тем не менее играет регуляризационную роль и позволяет избежать осциллирующих с большой амплитудой решений в верхней стратосфере для профилей колебательных температур состояний этих трех групп. Для состояния 00011 молекул углекислого газа значение верхней границы выполнимости ЛТР равнялось 45 км.

Подчеркнем, что при формулировании дополнительных условий “внутреннего ЛТР” и условий равенства колебательных температур изотопов, а также при задании высоты верхней границы выполнения ЛТР для различных колебательных состояний, в каждом конкретном случае решалась



**Рис. 1.** Примеры зарегистрированных спектров в области 10 мкм: 1 – день, 2 – ночь. Прицельная высота – 72.3 км.

задача выбора точности выполнения данных условий.

#### 4. ОЦЕНКИ ПОГРЕШНОСТИ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПАРАМЕТРОВ

Оценки погрешностей определения параметров были выполнены отдельно для дневных и ночных условий. Необходимость такого разделения обусловлена существенными суточными вариациями значений содержания озона и населенности колебательных состояний (колебательных температур). Следствием этих вариаций является, в первую очередь, различное отношение сигнал/шум в различных участках спектра и на разных высотах в дневное и ночное время. В качестве иллюстрации рассмотрим рис. 1, где показаны примеры спектров, зарегистрированных в дневное и ночное время на прицельной высоте 72.3 км. На указанной прицельной высоте интенсивность излучения в ночное время существенно превышает интенсивность излучения днем в широкой спектральной области 1000–1065  $\text{см}^{-1}$ . Обратная ситуация имеет место в области “лазерной” полосы углекислого газа 00011–10002, центрированной при 1063.7  $\text{см}^{-1}$ . В области 980–1000  $\text{см}^{-1}$  дневные и ночные значения интенсивности сравнимы по величине, при этом дневные значения несколько выше ночных. В полосах озона интенсивность излучения определяется содержанием озона и эффектом нарушения ЛТР (значениями неравновесной населенности) для конкретных колебательных состояний. Эти два фактора, имеющие

суточный ход, определяют форму спектра. В “лазерной” полосе углекислого газа определяющую роль играет населенность состояния 00011, поскольку содержание углекислого газа практически постоянно, а населенность состояния 00011 днем существенно выше, чем ночью. В полосах озона, как видно из рисунка, несмотря на уменьшение населенности колебательных состояний в ночное время, ночные значения излучения превышают дневные, что обусловлено значительным увеличением концентрации озона. Отмеченные различия в формировании излучения днем и ночью должны приводить к различным значениям погрешности определения параметров, как будет показано ниже.

При анализе точности определения параметров учитывались различные составляющие общей погрешности:

- 1) случайный шум детектора;
- 2) погрешности спектральной привязки;
- 3) погрешности абсолютной калибровки;
- 4) остаточная неопределенность спектральной аппаратной функции;
- 5) остаточная неопределенность угловой аппаратной функции;
- 6) погрешности определения прицельной высоты;
- 7) неадекватность используемой модели переноса излучения и погрешность расчетов;
- 8) погрешности определения профилей давления, температуры и содержания углекислого газа (по измерениям в 15 мкм полосе  $\text{CO}_2$ );
- 9) влияние априорной информации: неопределенность в задании средних профилей и параметров модельных ковариационных матриц;
- 10) влияние априорной информации: неопределенность в задании точности выполнения внутреннего ЛТР и высотных областей выполнения ЛТР для отдельных состояний.

Составляющие 1 и 6 и составляющие 3, 4, 5, 7 и 10 дают вклад в случайную и систематическую компоненты полной погрешности соответственно, а составляющие 2, 8 и 9 – в обе компоненты полной погрешности.

Случайная погрешность оценивалась нами на основе расчетов матрицы ошибок и на основе результатов численных экспериментов, систематическая – на основе численных экспериментов. При расчетах матрицы ошибок различные составляющие погрешностей учитывались в виде “эффективного шума” измерений, добавляемого к случайному шуму детектора. В численных экспериментах погрешности восстановления параметров оценивались по вариациям решения, обусловленным вариациями параметров, характеризующих различные составляющие погрешностей. Расчеты показали, что случайная компонента пол-

**Таблица 1.** Погрешности восстановления профилей отношения смеси озона

z, км	День			Ночь		
	случайная, %	систематическое, %	полная, % (млн <sup>-1</sup> )	случайная, %	систематическое, %	полная, % (млн <sup>-1</sup> )
40	3.31	1.90	3.81 (0.20)	3.32	2.53	4.17 (0.21)
45	2.14	3.05	3.72 (0.11)	2.06	4.40	4.85 (0.14)
50	2.00	3.97	4.44 (0.10)	2.02	6.34	6.65 (0.13)
55	2.00	4.50	4.92 (0.09)	1.96	7.36	7.61 (0.14)
60	3.24	6.61	7.36 (0.07)	2.98	9.38	9.84 (0.15)
65	8.91	12.9	15.6 (0.07)	4.32	11.2	12.0 (0.14)
70	15.3	15.8	21.9 (0.08)	5.37	11.5	12.6 (0.13)
75	20.7	23.1	31.0 (0.08)	10.4	22.0	24.3 (0.12)
80	29.8	35.8	46.5 (0.13)	20.2	17.7	26.8 (0.18)
85	34.8	26.3	43.6 (0.38)	12.6	11.2	16.8 (0.54)
90	41.0	22.5	46.7 (1.00)	9.09	18.3	20.4 (1.72)

ной погрешности восстановления определяется главным образом случайным шумом детектора и погрешностью высотной привязки, а систематическая компонента – априорной информацией и остаточной неопределенностью спектральной калибровки.

В табл. 1 представлены значения случайной, систематической и полной погрешности восстановления значений отношения смеси озона на различных высотах. Погрешности рассчитаны в процентах по отношению к средним профилям для дневных и ночных условий по всем результатам обработки экспериментальных данных. Полные погрешности даны также и в абсолютных единицах (млн<sup>-1</sup>). Проанализируем, в первую очередь, относительные погрешности. До высоты 60 км случайные погрешности определения профилей озона практически одинаковы для дневных и ночных условий и составляют 2–3%. Выше 60 км случайные погрешности для ночных условий заметно ниже и составляют от 4 до 20%, в то время как для дневных условий они находятся в диапазоне 12–35%. Значения систематической компоненты погрешности существенно различны для дневных и ночных условий во всем рассматриваемом диапазоне высот. До высот порядка 65 км величина систематической погрешности ночью больше, чем днем; выше 65 км ситуация меняется на противоположную. Сравнение случайной и систематической компонент показывает, что они примерно сопоставимы по величине для дневных условий во всем диапазоне высот. Для ночных условий в диапазоне высот 45–75 км систематическая погрешность заметно больше случайной. Полная относительная погрешность, как видно из таблицы, в диапазоне высот 40–60 км ночью незначительно превышает дневные значения. Выше 65 км полная относительная погрешность ночью

составляет 12–27%, что существенно меньше дневных значений в этом диапазоне высот: 15–47%.

Для колебательных температур состояний молекул озона и углекислого газа ограничимся анализом полных погрешностей, которые представлены в табл. 2 (день) и табл. 3 (ночь). Прочерки в таблицах соответствуют высотам, на которых априори выполняется ЛТР, а также высотам, на которых восстановление невозможно. Для состояния 001 молекул озона колебательная температура определяется с наименьшей погрешностью, причем ночью точность восстановления выше. Погрешности определения колебательной температуры состояния 011 практически одинаковы днем и ночью; в области максимального эффекта нарушения ЛТР на высотах 75–90 км они состав-

**Таблица 2.** Погрешности восстановления дневных колебательных температур (К) молекул озона и углекислого газа

z, км	Колебательное состояние						
	001	011	002	021	012	003	00011
40	–	–	–	–	–	–	–
45	–	–	0.9	–	–	–	1.1
50	–	1.3	2.5	–	–	–	1.8
55	–	2.9	3.8	12.7	15.9	13.7	1.7
60	1.0	5.1	5.8	13.5	17.4	14.4	1.8
65	2.7	8.1	8.2	15.2	19.8	17.0	2.0
70	5.9	11.6	10.1	19.4	24.2	21.9	2.1
75	9.2	15.2	15.7	21.7	27.8	23.8	2.3
80	12.1	18.9	19.1	23.2	28.1	24.1	3.1
85	12.2	17.8	19.7	28.9	27.8	25.5	4.8
90	16.3	19.4	26.1	33.6	27.9	32.3	8.7

**Таблица 3.** Погрешности восстановления ночных колебательных температур (К) молекул озона и углекислого газа

z, км	Колебательное состояние						
	001	011	002	021	012	003	00011
40	–	–	–	–	–	–	–
45	–	–	2.0	–	–	–	1.3
50	–	1.7	3.8	–	–	–	2.3
55	–	3.3	5.8	–	–	–	2.6
60	1.6	4.7	8.1	–	–	–	3.1
65	2.5	7.5	13.4	–	–	–	5.9
70	3.5	10.4	22.9	–	–	–	10.5
75	5.5	18.5	32.2	28.5	28.3	34.2	16.9
80	8.3	19.0	20.8	24.4	22.4	26.3	27.9
85	9.6	17.5	15.7	23.2	18.7	23.8	33.7
90	14.3	21.4	16.1	25.0	18.7	26.5	38.4

ляют от 15 К до 20 К. Для состояния 002 погрешности днем заметно ниже, чем ночью до высоты 75 км, они сопоставимы с ночными значениями выше 80 км и превышают их на высоте 90 км.

Предварительная обработка экспериментальных данных показала, что восстановление дневных и ночных профилей колебательных температур состояний 021, 012 и 003 невозможно для высот ниже 55 и 75 км соответственно. Это обусловлено двумя причинами. Во-первых, степень нарушения ЛТР в верхней стратосфере и нижней мезосфере намного меньше, чем в верхней мезосфере. Как следствие, интенсивность излучения, обусловленного переходами с этих уровней, невелика, что затрудняет “разделение переменных” задачи. Во-вторых, погрешность измерений спектрометра CRISTA-1, по-видимому, содержит неконтролируемые составляющие, которые существенно влияют на восстановление колебательных температур этих состояний из-за малой величины “полезного сигнала”, т.е. излучения соответствующих полос. Учитывая данные обстоятельства, мы рассматриваем результаты восстановления колебательных температур состояний 021, 012 и 003 только в диапазонах высот 55–90 км днем (диапазон значений погрешности 13–34 К) и 75–90 км ночью (погрешности 18–34 К). Отметим, что невозможность определения колебательных температур верхних состояний вне указанных высотных интервалов не оказывает влияния на результаты определения профилей озона и колебательных температур состояний 001, 011 и 002.

Профиль колебательной температуры состояния 00011 молекул углекислого газа днем восстанавливается с высокой точностью: погрешности составляют 1–3 К до высоты 80 км и возрастают

до 9 К на высоте 90 км. Такая высокая точность является следствием отсутствия перекрывания полосы углекислого газа 00011–10002 и интенсивных линий озона. Ночью, по сравнению с днем, значения колебательной температуры состояния 00011 существенно меньше, отношение сигнал/шум в области полосы 00011–10002 ниже, и погрешности заметно выше (до 28–39 К на высотах 80–90 км).

В заключение данного раздела подчеркнем, что погрешности определения профилей колебательных температур существенно меньше величины эффекта нарушения ЛТР, характеризуемого разностью между колебательной и кинетической температурой. Как показывают модельные расчеты, максимальная величина эффекта нарушения ЛТР для верхних колебательных состояний может достигать нескольких сотен градусов [10], в то время как погрешности не превышают 30–40 К.

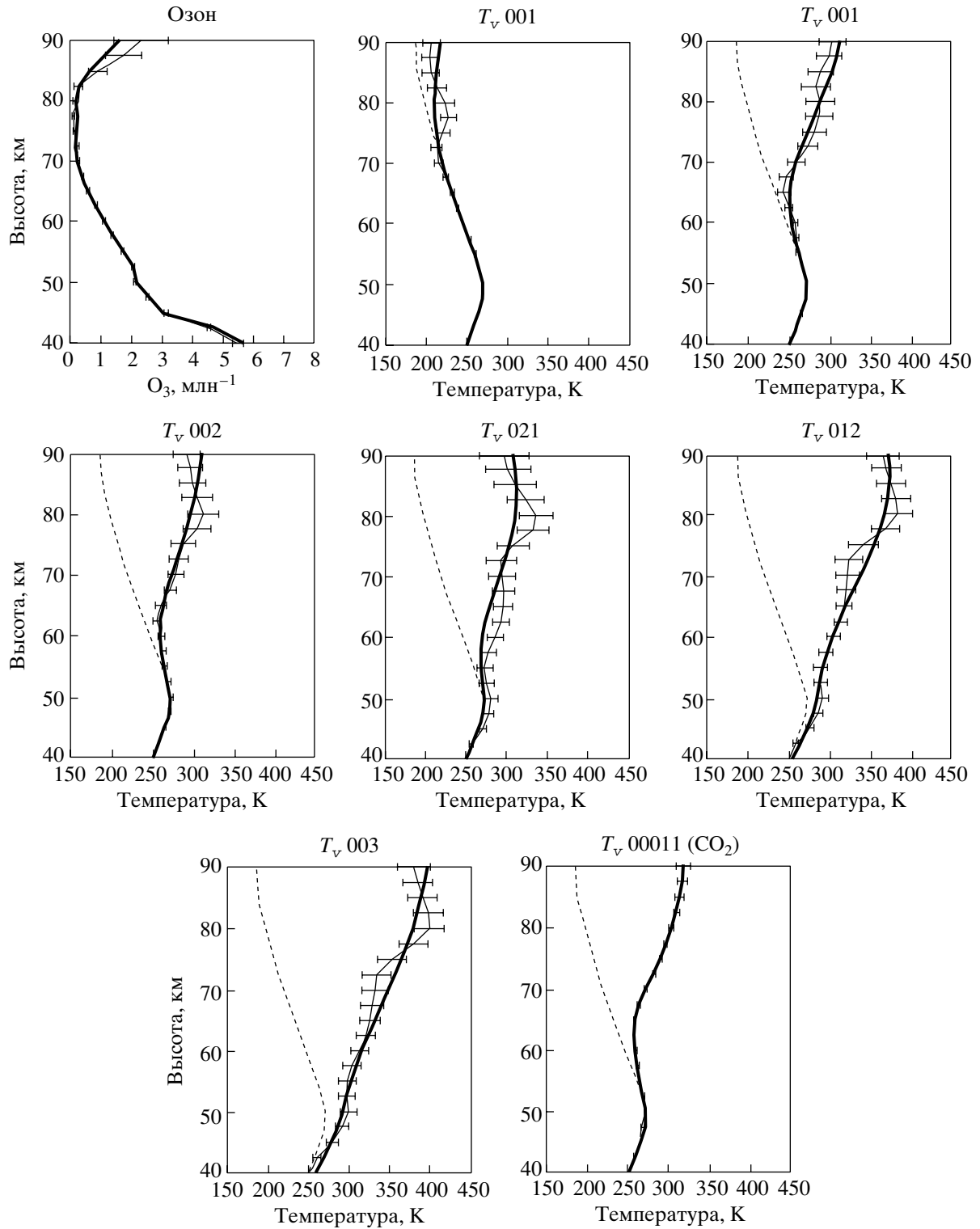
## 5. ПРИМЕРЫ РЕЗУЛЬТАТОВ ЧИСЛЕННЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ И ИНТЕРПРЕТАЦИИ ИЗМЕРЕНИЙ

Проведение численных экспериментов является необходимым этапом, предшествующим массовой обработке экспериментальных данных. Данный этап особенно важен при решении комплексной задачи восстановления совокупности профилей с большим количеством дополнительных условий. В частности, выбор параметров, определяющих точность выполнения дополнительных условий, возможен исключительно на основе результатов численных экспериментов. Численные эксперименты позволяют оценить степень “разделения параметров” в задаче, уточнить высотный диапазон восстановления, оценить скорость сходимости итерационного процесса и проверить адекватность используемой априорной информации различного рода.

Численные эксперименты по замкнутой схеме (задание конкретного состояния атмосферы – расчет излучения – решение обратной задачи) требуют выбора так называемых “истинных” профилей параметров, которые определяют конкретное состояние атмосферы и которые должны быть восстановлены в результате решения обратной задачи. За основу при таком выборе нами были взяты:

- средние профили озона, полученные для дневных и ночных условий в результате предварительной обработки ограниченного числа экспериментальных данных CRISTA;

- две модели неравновесной населенности колебательных состояний молекул озона и углекислого газа – “средние широты, день” и “средние широты, ночь”, которые использовались в качестве исходных данных при международном срав-



**Рис. 2.** Результаты численного эксперимента по восстановлению дневных профилей содержания озона и колебательных температур: профили, выбранные в качестве “истинных” (сплошные толстые линии); восстановленные профили (сплошные тонкие линии) и профиль кинетической температуры (пунктир).

нении различных компьютерных программ расчета уходящего неравновесного излучения горизонта [23].

В качестве иллюстрации приведем рис. 2 и 3, на которых представлены результаты восстановления дневных и ночных профилей содержания



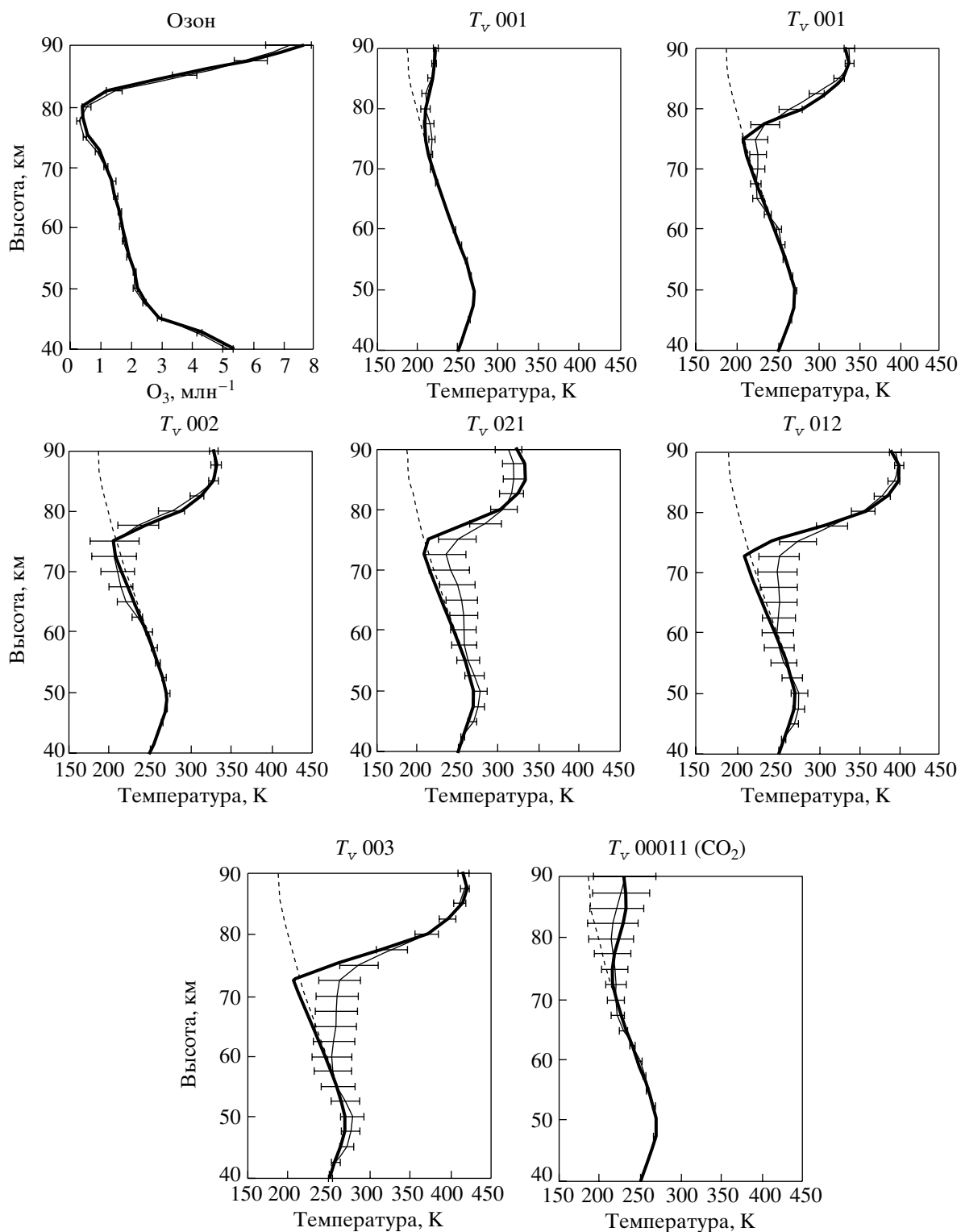


Рис. 3. То же, что и на рис. 2, но для ночных профилей.

озона и колебательных температур в численных экспериментах. Моделировались только составляющие случайной погрешности. Горизонтальными отрезками показаны коридоры случайных

погрешностей восстановления параметров (значения получены по расчетам матрицы ошибок). Укажем, что для дневных и ночных условий средние профили колебательных температур существ-

венно отличаются от истинных до высоты около 80 км и близки к ним в диапазоне высот 80–90 км.

Рассмотрим результаты, полученные для дневных условий, характерными особенностями которых являются низкое содержание озона (по сравнению с ночными значениями) и нарушение ЛТР с малых высот. Профиль содержания озона восстанавливается с высокой точностью до высоты 85 км. Выше восстановленный профиль стремится к среднему профилю, но совпадает с истинным профилем в пределах коридора погрешности. Колебательные температуры всех рассматриваемых состояний молекул озона восстанавливаются во всем диапазоне высот 40–90 км. Отметим, что для восстановленных профилей колебательных температур состояний 021, 012 и 003 характерно заметное локальное уменьшение температуры на высоте 75 км по сравнению с ее значениями на высоте 80 км. Мы считаем, что это является следствием влияния априорной информации, т.к. на априорных профилях, которые получены усреднением дневных и ночных профилей, эта особенность выражена очень резко. Отметим высокую точность восстановления профиля колебательной температуры состояния 00011 молекул углекислого газа.

Для ночных условий для всех рассмотренных колебательных состояний характерны высокие концентрации озона, особенно на высотах более 80 км и выполнение ЛТР до высоты около 75 км. Основные особенности результатов численных экспериментов для ночных условий следующие:

а) Профиль озона определяется с высокой точностью вплоть до высоты 90 км.

б) Колебательные температуры состояний 001, 011 и 002 молекул озона восстанавливаются с высокой точностью.

в) Колебательные температуры состояний 021, 012 и 003 не восстанавливаются в диапазоне высот от 55–60 км до 75 км и хорошо восстанавливаются вне этого диапазона.

г) Профиль колебательной температуры состояния 00011 молекул углекислого газа хорошо восстанавливается, хотя для высот более 75 км погрешности значительно возрастают.

Таким образом, численные эксперименты по интерпретации измерений, выполненных аппаратурой CRISTA в спектральной области 10 мкм, демонстрируют эффективность разработанного комплексного метода. Приведем примеры обработки двух атмосферных сканов (для дневных и ночных условий). На рис. 4 показаны профили, восстановленные по результатам спектральных измерений в дневное время 5 ноября 1994 г. в пункте с координатами на 4.7°N, 157.0°E при зенитном угле солнца 36.7°, скан 217. На высоте 90 км, т.е. в области мезосферного максимума, содержание озона составляет 1.9 млн<sup>-1</sup>. Колебательная температура

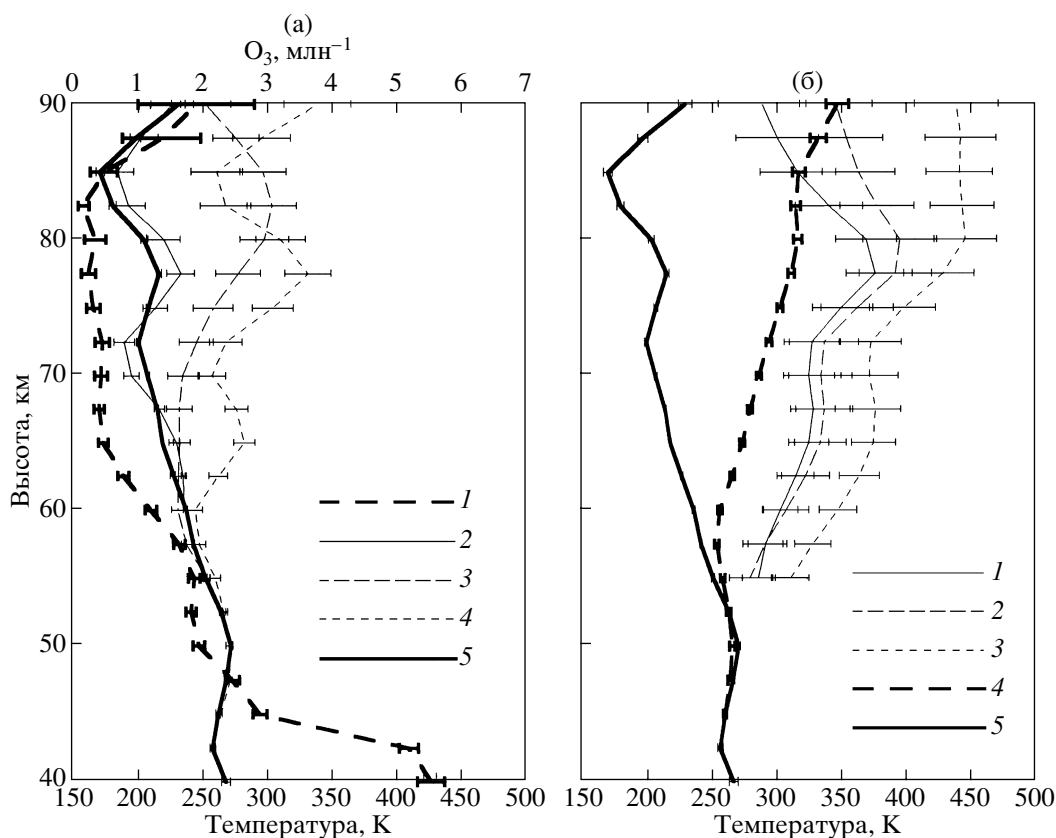
состояния 001 молекул озона совпадает с кинетической температурой в пределах погрешностей во всем диапазоне высот, что свидетельствует о выполнении ЛТР для этого состояния в данном конкретном случае. Отличие колебательных температур других состояний от кинетической температуры значительно. ЛТР для состояний 011 и 002 нарушается на высотах около 65 и 60 км соответственно. Отметим, что профили колебательной температуры состояния 002, кинетической температуры и колебательной температуры состояния 001 качественно совпадают и имеют локальные максимумы. Колебательные температуры состояний 011, 021, 012 и 003 возрастают до высоты 80–85 км. Состояние 003 характеризуется самой высокой колебательной температурой, достигающей 450 К. Для состояний 021, 012 и 003 ЛТР нарушается на высотах менее 55 км. Для состояния 00011 молекул углекислого газа ЛТР начинает нарушаться на высоте 55 км, а колебательная температура монотонно возрастает до высоты 90 км, достигая 350 К.

На рис. 5 показаны профили, восстановленные по результатам спектральных измерений в ночное время 5 ноября 1994 г. в пункте с координатами 10.7°N, 31.3°W при зенитном угле солнца 151.6°, скан 265. На высоте 90 км, т.е. в области мезосферного максимума, содержание озона достигает 15 млн<sup>-1</sup>. Высота нарушения ЛТР для состояний 001, 011 и 002 равна 70 км. Высота нарушения ЛТР для состояний 012, 021 и 003 не может быть определена, так как находится в высотной области, где восстановление профилей невозможно в данном эксперименте и данным методом. Тем не менее экстраполяция полученных профилей в область ниже 75 км показывает, что и для этих состояний ЛТР начинает нарушаться на высоте 70 км. Колебательные температуры состояний 001, 011 и 002 имеют локальные максимумы на высотах 75 и 85 км. Колебательные температуры состояний 021, 012 и 003 имеют максимумы на высотах 82.5–85 км. Значения этих колебательных температур существенно меньше (на величину порядка 100 К), чем днем. Для состояния 00011 молекул углекислого газа ЛТР начинает нарушаться на высоте 67.5 км, и на высотах 70–90 км значения соответствующей колебательной температуры составляют от 240 К до 270 К.

Отметим, что основные особенности вертикальных профилей всех колебательных температур, полученных как днем, так и ночью, качественно согласуются с результатами численного моделирования [10].

## 6. ВАЛИДАЦИЯ ПОЛУЧЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ

В период проведения эксперимента CRISTA-1 (ноябрь 1994 г.) осуществлялись измерения содер-



**Рис. 4.** Результаты интерпретации уходящего излучения, измеренного днем аппаратурой CRISTA в спектральной области 10 мкм: а – профили отношения смеси озона (1) и колебательных температур состояний молекул озона 001 (2), 011 (3) и 002 (4). б – профили колебательных температур состояний молекул озона 021 (1), 012 (2) и 003 (3) и состояния молекул углекислого газа 00011 (4); а и б – профиль кинетической температуры (5), рассчитанный на основе измерений в спектральной области 15 мкм.

жания озона в мезосфере в эксперименте HALOE [24]. Эти измерения были использованы нами для валидации профилей содержания озона, полученных по данным эксперимента CRISTA-1. Анализ пространственно-временных рассогласований между измерениями, выполненными аппаратурой CRISTA и HALOE, показал, что рассогласования очень велики и валидация на основе сравнения единичных профилей нецелесообразна. Поэтому мы проводили сравнение средних профилей содержания озона, полученных в двух указанных экспериментах. Исходный массив данных, полученных в эксперименте HALOE, состоял из 149 профилей содержания озона, измеренных на заходе Солнца (широтный диапазон  $10^{\circ}\text{N} - 46^{\circ}\text{N}$ ), и 150 профилей, измеренных на восходе ( $23^{\circ}\text{S} - 31^{\circ}\text{N}$ ). Массив данных, полученных в эксперименте CRISTA, использованный для сравнения, состоял из 30 профилей, измеренных при значениях зенитного угла Солнца  $88^{\circ} - 92^{\circ}$ . Эти профили были измерены в двух узких широтных поясах ( $36^{\circ}\text{S} - 52^{\circ}\text{S}$  и  $55^{\circ}\text{N} - 62^{\circ}\text{N}$ ). Все сравниваемые измерения выполнены в течение 10 дней с 4 по 13 ноября 1994 г.

На рис. 6а показаны средние профили содержания озона в высотном диапазоне 40–90 км. Максимальное расхождение  $1.8 \text{ млн}^{-1}$  наблюдается на высоте 40 км (см. рис. 6б). С дальнейшим ростом высоты оно уменьшается, и в диапазоне 52.5–90 км профили очень хорошо согласуются между собой (в пределах удвоенного значения суммарной погрешности). Отметим, что расхождение имеет локальные максимумы в окрестностях 57.5 км, 72.5 км и 90 км.

Учитывая значимые пространственно-временные рассогласования между измерениями CRISTA-1 и HALOE, можно сделать вывод о достоверности результатов, получаемых описанным комплексным методом, и об адекватности наших оценок погрешностей восстановления профилей из результатов измерений неравновесного излучения горизонта в эксперименте CRISTA-1 в высотном диапазоне 52.5–90 км. Заметные расхождения в области 40–52.5 км указывают на необходимость привлечения дополнительных данных для валидации результатов на этих высотах. Поэтому дополнительно мы использовали профили озона, полученные в эксперименте CRISTA-1 независимо со-

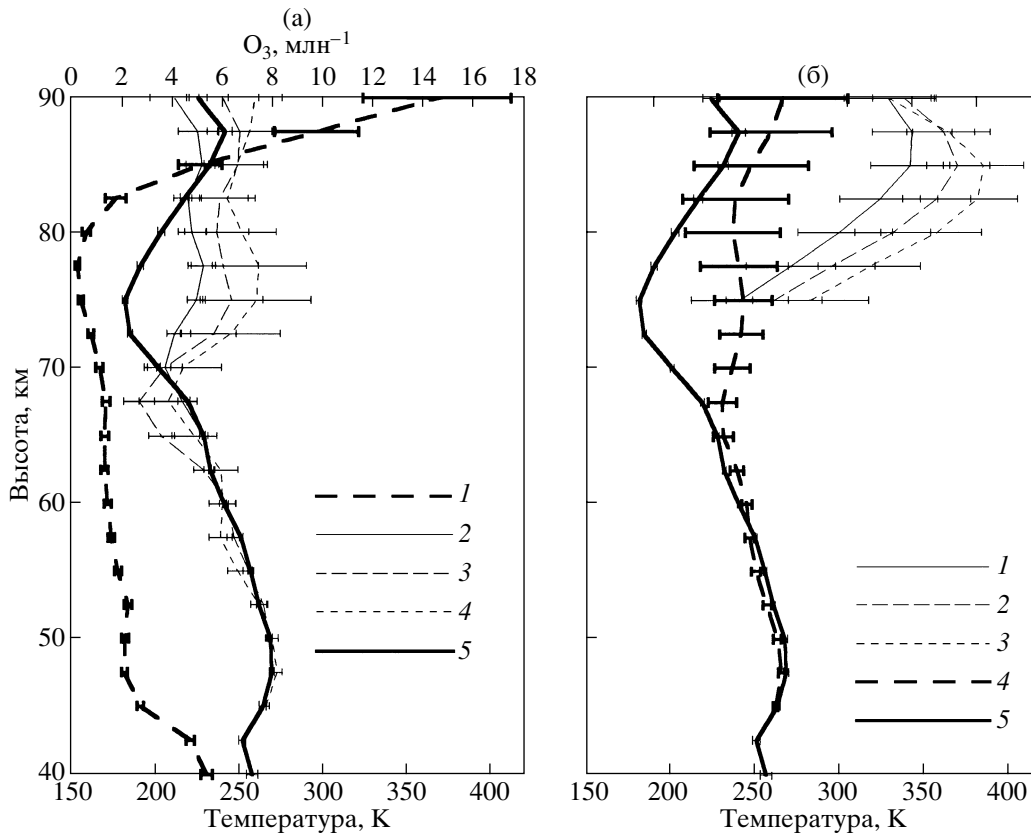


Рис. 5. Результаты интерпретации уходящего излучения, измеренного ночью аппаратурой CRISTA в спектральной области 10 мкм (см. подпись к рис. 4).

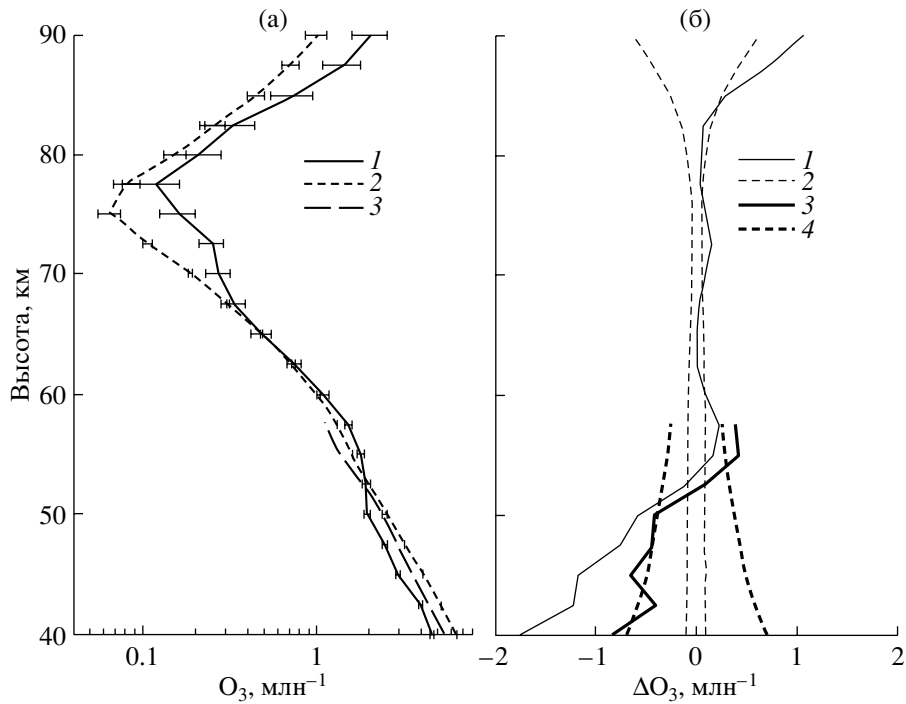


Рис. 6. Сравнение результатов восстановления профилей отношения смеси озона по данным экспериментов CRISTA-1 и HALOE: а – средние профили, полученные по данным CRISTA-1 (1), HALOE (2) и CR1/SM (3). б – разность средних профилей CRISTA-1–HALOE (1), CRISTA-1–CR1/SM (3) и соответствующие коридоры суммарной погрешности (2, 4).

трудниками университета в Вуппертале (ФРГ) из измерений в режиме сканирования стратосферы без учета эффекта нарушения ЛТР (данные CR1/SM – CRISTA-1/Stratospheric Mode). Подчеркнем, что при использовании этих данных пространственно-временное рассогласование измерений тоже существует, но оно существенно меньше, чем при сопоставления с результатами HALOE. Как видно из рис. 6б, средние профили в данном случае полностью согласуются в пределах декларируемой суммарной погрешности. Укажем, что систематическая погрешность данных CR1/SM в рассматриваемом диапазоне высот составляет 10–16%.

## 7. ОСНОВНЫЕ ВЫВОДЫ

Описан метод комплексного восстановления профилей содержания озона и населенностей возбужденных состояний молекул озона и CO<sub>2</sub> из измерений интенсивности уходящего излучения горизонта в спектральной области 10 мкм, выполненной аппаратурой CRISTA в эксперименте, проводившемся в ноябре 1994 г.

Высотные диапазоны и погрешности определения параметров оценивались на основе численных экспериментов и расчетов матрицы ошибок. Метод позволяет восстанавливать вертикальные профили содержания озона в диапазоне высот 40–90 км. Для дневных условий погрешности восстановления профилей на высотах до 65 км и 70–90 км составляют 3–15% и 20–47% соответственно. Для ночных условий погрешности составляют 4–13% и 17–24% соответственно на высотах до 70 км и в вышележащих слоях. Колебательные температуры состояний 001, 011 и 002 молекул озона могут быть определены в диапазоне высот 40–90 км. Колебательные температуры состояний 021, 012 и 003 могут быть определены днем в высотной области 55–90 км и ночью в высотной области 75–90 км.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований в рамках гранта 03-05-64830 и Министерства образования России в рамках гранта ур. 01.01.044 научной программы “Университеты России”. Авторы выражают благодарность коллегам из Вуппертальского университета за предоставленные результаты измерений уходящего ИК излучения аппаратурой CRISTA-1.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Кароль И.Л., Розанов В.В., Тимофеев Ю.М. Газовые примеси в атмосфере. Л.: Гидрометеиздат, 1983. 192 с.
2. Тимофеев Ю.М. Спутниковые методы исследования газового состава атмосферы // Изв. РАН. Физика атмосферы и океана. 1989. Т. 25. № 5. С. 451–472.
3. Ozone Measuring Instruments for the Stratosphere, V. 1 // Collected Works in Optics (Optical Society of America, Washington, D.C.) / Ed. Grant W.B. 1989.
4. WMO, Scientific Assessment of Ozone Depletion: 1998, Global Ozone Research and Monitoring project – Report № 44. Geneva, Switzerland. 1999. 507 p.
5. WMO, Scientific Assessment of Ozone Depletion: 2002, Global Ozone Research and Monitoring project – Report № 47. Geneva, Switzerland. 2003. 498 p.
6. Поберовский А.В., Поляков А.В., Тимофеев Ю.М. и др. Определение вертикальных профилей содержания озона методом затменного зондирования с ДЭС “Мир” 1. Описание прибора и методики обработки данных. Примеры результатов // Изв. РАН. Физика атмосферы и океана. 1999. Т. 35. № 3. С. 312–321.
7. Rawlins W.T. Chemistry of vibrationally excited ozone in the upper atmosphere // J. Geophys. Res. 1985. V. 90. № A12. P. 12283–12292.
8. Mlynyczak M.G., Drayson S.R. Calculation of infrared limb emission by ozone in the terrestrial middle atmosphere. 1. Source functions // J. Geophys. Res. 1990. V. 95. № D10. P. 16497–16511.
9. Mlynyczak M.G., Drayson S.R. Calculation of infrared limb emission by ozone in the terrestrial middle atmosphere. 2. Emission calculations // J. Geophys. Res. 1990. V. 95. № D10. P. 16513–16521.
10. Manuilova R.O., Shved G.M. The 4.8 and 9.6  $\mu\text{m}$  O<sub>3</sub> band emissions in the middle atmosphere // J. Atmos. Terr. Phys. 1992. V. 54. № 9. P. 1149–1168.
11. Kutepov A.A., Gusev O.A., Ogibalov V.P. Solution of the non-LTE problem for molecular gas in planetary atmospheres: superiority of accelerated lambda iteration // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 1998. V. 60. № 2. P. 199–220.
12. Lopez-Puertas M., Taylor F.W. Non-LTE radiative transfer in the atmosphere // Series on Atmospheric, Oceanic and Planetary Physics. 2001. V. 3. 504 p.
13. Solomon S., Kiehl J.T., Kerridge B.J. et al. Evidence for nonlocal thermodynamic equilibrium in the  $\nu_3$  mode of mesospheric ozone // J. Geophys. Res. 1986. V. 91. № D9. P. 9865–9876.
14. Zhou D.K., Mlynyczak M.G., Bingham G.E. et al. CIRRIS-1A limb spectral measurements of mesospheric 9.6- $\mu\text{m}$  airglow and ozone // Geophys. Res. Lett. 1998. V. 25. № 5. P. 643–646.
15. Kaufmann M., Gusev O.A., Grossmann K.U. et al. Satellite observations of daytime and nighttime ozone in the mesosphere and lower thermosphere // J. Geophys. Res. V. 108. № D9. 2003. doi: 0.1029/2002JD002800.
16. Timofeyev Y.M. Satellite IR sounding of the non-LTE atmosphere // IRS-2000: Current Problems in Atmospheric Radiation. Proc. of the International Radiation Symposium. St. Petersburg, Russia, 24–29 July 2000 // Eds W. Smith and Yu. Timofeyev. Hampton Virginia: Deepak Publishing, 2001. P. 757–760.
17. Косцов В.С., Тимофеев Ю.М., Гроссманн К., Кауфманн М., Оберхайде Й. Интерпретация спутниковых измерений уходящего неравновесного ИК излучения в 15 мкм полосе CO<sub>2</sub>: 2. Примеры обработки данных эксперимента CRISTA // Изв. РАН.

- Физика атмосферы и океана. 2001. Т. 37. № 6. С. 801–810.
18. *Косцов В.С., Тимофеев Ю.М.* Содержание углекислого газа в мезосфере по результатам интерпретации данных эксперимента CRISTA-1 // Изв. РАН. Физика атмосферы и океана. 2003. Т. 39. № 3. С. 359–370.
19. *Косцов В.С., Тимофеев Ю.М.* Интерпретация спутниковых измерений уходящего неравновесного ИК излучения в 15 мкм полосе CO<sub>2</sub>: 1. Описание метода и анализ точности // Изв. РАН. Физика атмосферы и океана. 2001. Т. 37. № 6. С. 789–800.
20. *Косцов В.С., Мануйлова Р.О.* Спектральная структура неравновесного излучения лимба Земли в полосе озона 9.6 мкм // Изв. РАН. Физика атмосферы и океана. 1997. Т. 33. № 4. С. 339–347.
21. *Rothman L.S., Rinsland C.P., Goldman A. et al.* The HITRAN molecular spectroscopic database and HAWKS (HITRAN Atmospheric Workstation): 1996 edition // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 1998. V. 60. № 5. P. 665–710.
22. *Anderson G.P., Clough S.A., Kneizys F.X. et al.* AFGL Atmospheric Constituent Profiles (0–120 km). AFGL-TR-86-0110. Environmental research papers. 1986. № 954. 43 p.
23. *Clarmann T.V., Dudhia A., Edwards D.P. et al.* Intercomparison of radiative transfer codes under non-local thermodynamic equilibrium conditions // J. Geophys. Res. 2002. V. 107. № D22. 4631. doi: 10.1029/2001JD001551.
24. *Russell J.M. III, Gordley L.L., Park J.H.* // The Halogen Occultation Experiment // J. Geophys. Res. 1993. V. 98. № D6. P. 10777–10797.