

УДК 551.521.32

ИНТЕРПРЕТАЦИЯ СПУТНИКОВЫХ ИЗМЕРЕНИЙ УХОДЯЩЕГО НЕРАВНОВЕСНОГО ИК ИЗЛУЧЕНИЯ В 15 МКМ ПОЛОСЕ CO₂: 1. ОПИСАНИЕ МЕТОДА И АНАЛИЗ ЕГО ТОЧНОСТИ

© 2001 г. В. С. Косцов, Ю. М. Тимофеев

Научно-исследовательский институт физики, Санкт-Петербургского государственного университета
198904 Санкт-Петербург, Петродворец, ул. Ульяновская, 1
E-mail: vlad@trall.phys.spbu.ru
tim@trall.phys.spbu.ru

Поступила в редакцию 23.11.2000 г., после доработки 12.02.2001 г.

Описан метод одновременного восстановления кинетической температуры, давления, концентраций атмосферных газов и неравновесной населенности колебательных состояний молекул атмосферных газов (колебательных температур) по данным измерений уходящего инфракрасного излучения на касательных трассах при наличии эффекта нарушения локального термодинамического равновесия. Одной из отличительных особенностей метода является отсутствие необходимости моделирования процессов, определяющих неравновесную населенность колебательных состояний. На основе численных экспериментов и расчетов матрицы ошибок исследована применимость метода для интерпретации спектров в области 15 мкм, зарегистрированных спутниковым прибором CRISTA. Обратная задача сформулирована относительно “эффективных” колебательных температур, значения которых близки к значениям колебательных температур первых возбужденных состояний молекул CO₂ четырех наиболее распространенных изотопических разновидностей. Проведенные численные эксперименты и результаты оценок погрешностей метода, выполненные на основе расчета матрицы ошибок, показали, что применение описанного метода для обработки спектров CRISTA позволяет восстанавливать вертикальные профили кинетической температуры и колебательной температуры изотопа CO₂ 626 вплоть до высоты 120 км с погрешностями менее 9° К и 3° К соответственно. Колебательные температуры трех менее распространенных изотопов восстанавливаются с погрешностью менее 8° К до высот 95–110 км. Метод также позволяет оценивать отношение смеси CO₂ в мезосфере с погрешностью около 10%.

1. ВВЕДЕНИЕ

Исследования температурного режима мезосферы и нижней термосферы в глобальном масштабе немногочисленны. Существует сеть лидарного зондирования, которая позволяет осуществлять периодические измерения вертикальных профилей температуры до высот порядка 90 км в ночное время и в условиях безоблачной атмосферы. Еще более редки исследования средней атмосферы с помощью ракет. Исследования температурного режима и состава средней атмосферы с помощью спутниковых методов в инфракрасном (ИК) диапазоне уже длительное время уделяется большое внимание (эксперименты с аппаратурой LIMS, SAMS, ISAMS, CLAES [1]). Но до настоящего времени они были ограничены высотами 60–70 км [2]. Это связано, в частности, с тем, что традиционные методы интерпретации измерений уходящего ИК излучения основаны на предположении о выполнении локального термодинамического равновесия (ЛТР). Однако в верхних слоях атмосферы наблюдается эффект нарушения ЛТР. Высоты нарушения ЛТР в атмосфере различны для различных молекул и их колебательных со-

стояний. Для состояний молекул CO₂, которые формируют полосу 15 мкм, эффект нарушения ЛТР проявляется примерно с высот 70–90 км в зависимости от перехода и изотопа [3].

Физические основы комплексного восстановления параметров атмосферы с учетом нарушения ЛТР были описаны в работах [4–7]. В работах [5, 6] было исследовано влияние эффекта нарушения ЛТР на перенос излучения в полосе CO₂ 15 мкм и продемонстрированы возможности определения кинетической и колебательных температур нижних состояний молекул CO₂ по спутниковым измерениям уходящего излучения на касательных трассах с высоким разрешением.

В ноябре 1994 г. и августе 1997 г. были успешно проведены два эксперимента с космическим прибором CRISTA (Cryogenic Infrared Spectrometers and Telescopes for the Atmosphere) во время полетов корабля Shuttle: CRISTA-1 и CRISTA-2. Осуществлялись измерения уходящего ИК излучения на касательных трассах в диапазоне спектра от 4 до 71 мкм с разрешающей способностью ($\lambda/\Delta\lambda$) около 500 и 600 соответственно в первом и во втором эксперименте. Подробное описание

экспериментов и описание части полученных результатов дано в работах [8, 9]. Измерения осуществлялись в нескольких режимах, включая так называемый “высотный” режим с прицельными высотами от 40 до 150 км. Интерпретация данных этих экспериментов позволила получить значительное количество информации о состоянии средней атмосферы – ее температуре и газовом составе (см., например, [10]). Однако при этом не учитывались эффекты нарушения ЛТР, что может приводить к значительным погрешностям восстановления, например, кинетической температуры выше 70–80 км.

В настоящей работе рассмотрены особенности метода [5–7] применительно к интерпретации спектров, полученных прибором CRISTA в области 15 мкм (предварительные результаты были опубликованы в работах [11–13]). Основной целью исследований являлось определение кинетической температуры в средней атмосфере и исследование эффекта нарушения ЛТР для колебательных состояний v_2 различных изотопических разновидностей молекул CO_2 .

2. ОСОБЕННОСТИ АЛГОРИТМА РЕШЕНИЯ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ

Основные особенности решения прямой (расчет уходящего излучения) и обратной задачи (восстановление вертикальных профилей параметров физического состояния атмосферы) в 15 мкм полосе CO_2 подробно описаны в работах [5, 6]. Для расчетов излучения использовалась интегральная форма уравнения переноса ИК излучения:

$$I(\nu, z_t) = \int_{\Delta\nu 0}^{s_0} \int_0^s \varepsilon(\nu', s) \times \exp \left[- \int_0^s \alpha(\nu', s') ds' \right] ds \varphi(\nu - \nu') d\nu',$$

где I – интенсивность излучения на частоте ν для прицельной высоты z_t , s – координата вдоль луча, соответствующая прицельной высоте z_t , α и ε – объемные коэффициенты поглощения и излучения соответственно, φ – спектральная аппаратная функция прибора. Коэффициенты излучения и поглощения представляют собой суммы соответствующих коэффициентов для отдельных спектральных линий. Расчеты неравновесного излучения осуществлялись с помощью пакета компьютерных программ SPIRT–NLC, который был разработан одним из авторов (Косцов В.С.) специально для решения обратных задач и включает возможность вычисления вариационных производных излучения по отношению к атмосферным параметрам, в том числе описывающим неравновесные населенности колебательных состояний

молекул [14]. Расчеты объемных коэффициентов поглощения и излучения в отдельных спектральных линиях осуществлялись с использованием широко известной базы данных HITRAN [15].

Учитывая зависимость контура спектральной линии от давления и температуры и переходя к вертикальной координате, можно рассматривать интенсивность излучения как функционал от вертикальных распределений ряда параметров:

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

где A обозначает нелинейный оператор прямой задачи, z – вертикальная координата, p – давление, g – индекс, обозначающий газ, и s – индекс, обозначающий колебательное состояние. В общем случае перекрывания полос поглощения различных газов g и s могут быть достаточно большими, что приводит к возрастанию числа неизвестных параметров. В нашем случае (ограниченная спектральная область 15 мкм полосы CO_2) неизвестными параметрами являлись кинетическая температура, давление, концентрация и колебательные температуры различных состояний CO_2 . Соответственно ставится задача восстановления их вертикальных распределений по результатам спектрально-высотных измерений излучения $I(\nu, z_t)$.

Физические основы метода диктуют критерии, определяющие “потолок” зондирования. На больших высотах может иметь место ситуация, когда поглощение во всех спектральных линиях удовлетворяет приближению оптически тонкой среды. В этом случае интенсивность регистрируемого излучения определяется только процессами излучения, другими словами, населенностью только возбужденных состояний. Поскольку колебательные температуры вводятся таким образом, что определяют отношение населенности конкретного состояния к населенности основного состояния, может возникнуть неопределенность при решении обратной задачи. Но если используется априорная информация о концентрации исследуемого газа, эта неопределенность снимается. В этом случае, однако, следует помнить, что колебательные температуры дают отношение населенности конкретных состояний к априорному значению населенности основного состояния. Отметим, что во многих случаях отношение сигнал/шум приборов при измерениях на больших прицельных высотах, где действует приближение линии оптически тонкой среды, приближается к единице. Поэтому высотные ограничения метода обусловлены не только физикой переноса излучения, но и характеристиками конкретного прибора.

Общий подход к обращению уравнения (1) основан на его линеаризации и преобразовании в векторно-матричную форму:

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

Априорная информация о восстанавливаемых параметрах

Параметр	Априорная неопределенность	Радиус корреляции
Кинетическая температура	50 К	7 км
Давление	Априорная информация задается в виде дополнительного условия гидростатического равновесия	
Отношение смеси CO ₂	20% на всех высотах за исключением 60 км, где отношение смеси полагалось известным и равным 360 ppmv	25 км
Все колебательные температуры	50 К	7 км

где \mathbf{y} – вектор, компонентами которого являются измеренные значения интенсивности излучения на определенных высотах и частотах, $\delta\mathbf{y}$ – вектор вариаций интенсивности по отношению к средним значениям \mathbf{y}_m , рассчитанным на основе средних профилей атмосферных параметров \mathbf{x}_m ($\delta\mathbf{y} = \mathbf{y} - \mathbf{y}_m$), $\delta\mathbf{x}$ – совокупный вектор вариаций параметров по отношению к их средним значениям, \mathbf{A} – линеаризованный интегральный оператор прямой задачи. Одним из широко используемых методов решения уравнения (2) является метод статистической регуляризации [16]:

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_m + \delta\mathbf{x} = \mathbf{x}_m + (\mathbf{A}^T \mathbf{S}^{-1} \mathbf{A} + \mathbf{D}^{-1})^{-1} \mathbf{A}^T \mathbf{S}^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{y}_m), \quad (3)$$

где \mathbf{S} – ковариационная матрица случайных ошибок измерений, \mathbf{D} – ковариационная матрица искомого вектора, “Т” обозначает транспонирование. Различные аспекты учета ошибок линеаризацией в алгоритме восстановления рассмотрены в работе [17], где дан расширенный вид формулы (3) для итерационного процесса, в котором минимизируются ошибки, обусловленные линеаризацией:

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_m + \delta\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_m + (\mathbf{A}_k^T \mathbf{S}^{-1} \mathbf{A}_k + \mathbf{D}^{-1})^{-1} \mathbf{A}_k^T \mathbf{S}^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{y}_k + \mathbf{A}_k \delta\mathbf{x}_k). \quad (4)$$

Здесь индекс k обозначает номер итерации ($k = 0, 1, \dots$), \mathbf{A}_k и \mathbf{y}_k – прямой оператор и значения излучения, рассчитанные на основе результатов итерации k . Именно алгоритм (4) использовался нами при решении обратной задачи.

Совокупная ковариационная матрица давления, отношения смеси газов, кинетической и колебательных температур \mathbf{D} формировалась из блоков, соответствующих каждому из рассматриваемых параметров. Для каждого конкретного параметра элементы ковариационной матрицы рассчитывались по модельной формуле:

$$\mathbf{D}_{ij} = \sigma_i \sigma_j \exp \left[-\frac{(z_i - z_j)^2}{r_c^2} \right],$$

где σ_i и σ_j – априорные неопределенности параметра на высотах z_i и z_j , а r_c – радиус корреляции.

Значения априорной неопределенности и радиуса корреляции, использованные в настоящей работе, представлены в таблице. Выбор значения априорной неопределенности отношения смеси CO₂, равного 20%, обусловлен возможностью сильных вариаций этого параметра в мезосфере и термосфере. Большое значение радиуса корреляции этого параметра (25 км) было взято с целью стабилизации решения, поскольку в этом случае решение ищется в классе очень гладких функций. Отметим, что приближение гладкости для профиля отношения смеси CO₂ является достаточно хорошим. Значение априорной неопределенности кинетической и колебательных температур было выбрано большим (50° К) с целью уменьшения влияния априорной информации на получаемое решение, а также с целью учета возможных сильных вариаций этих параметров в верхней мезосфере и термосфере. Значение радиуса корреляции 7 км было получено на основе анализа статистических данных о кинетической температуре в стратосфере и нижней мезосфере.

Для интерпретации данных эксперимента CRISTA были выбраны спектры в интервале 642–685 см⁻¹. Этот интервал содержит наиболее интенсивные линии четырех наиболее распространенных изотопических разновидностей молекул CO₂: 626, 636, 628, 627. Очевидно, что учет всех переходов в данной области, как переходов, на которые влияет эффект нарушения ЛТР, не является оптимальным в силу ряда причин. Во-первых, в этом случае число неизвестных параметров чрезвычайно возрастает, что приводит к возрастанию требований к вычислительным ресурсам и к неустойчивости решения. Во-вторых, вклад слабых переходов может быть пренебрежимо мал если учесть отношение сигнал/шум конкретного прибора. Поэтому при решении обратной задачи с учетом нарушения ЛТР особое внимание следует уделять выбору переходов, для которых действительно необходимо учитывать неравновесность, чтобы при разумном числе неизвестных параметров обеспечить достаточную точность расчетов излучения. Такой выбор был проведен нами на основе предварительных расчетов характеристик излучения и численного моделирования измерений прибором CRISTA. Колебательные переходы

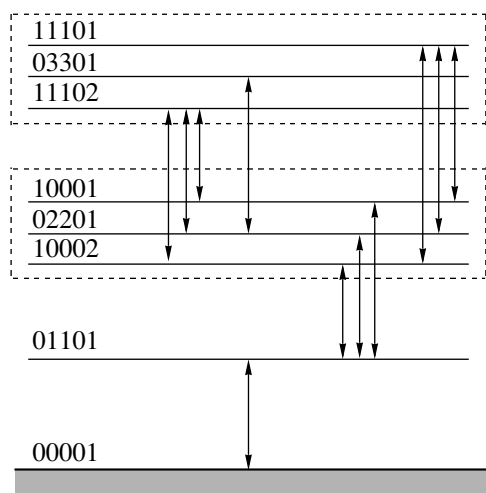


Рис. 1. Колебательные переходы и состояния молекул CO_2 , для которых учитывался эффект нарушения ЛТР. Пунктиром обведены группы состояний, находящихся во “внутреннем ЛТР”.

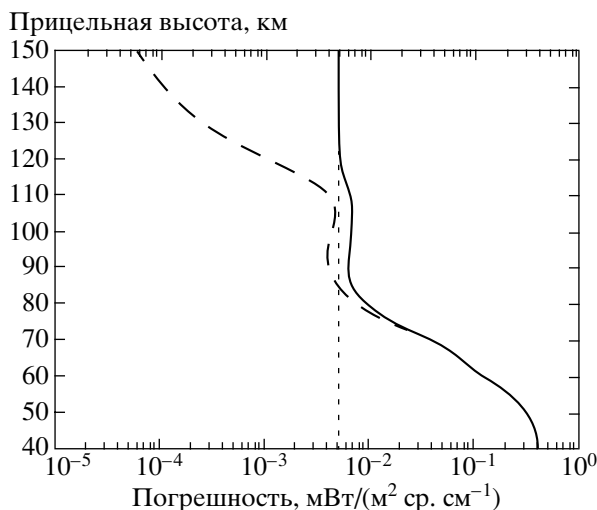


Рис. 2. Компоненты случайной погрешности, осредненные по спектру – шум детектора (короткие штрихи), остальные компоненты (длинные штрихи), суммарная погрешность (сплошная линия).

и состояния, для которых учитывался эффект нарушения ЛТР при интерпретации результатов измерений в интервале $642\text{--}685\text{ см}^{-1}$, показаны на рис. 1 (использованы обозначения базы данных HITRAN). В результате в набор неизвестных параметров первоначально вошли населенности семи колебательных состояний четырех основных изотопов CO_2 , описываемые соответствующими колебательными температурами. Однако в дальнейшем, исходя из реального информационного содержания измерений спектрометром CRISTA,

число переменных было сокращено в связи с использованием дополнительной априорной информации (см. ниже).

Важным этапом работы было исследование погрешностей измерений в спутниковом эксперименте CRISTA, что необходимо для задания матрицы S . Основными источниками погрешностей являются случайный шум (детектор и электроника), неопределенность спектральной калибровки, неопределенность прицельной высоты, доплеровский сдвиг за счет движения спутника при наблюдении вдоль трассы в обратном направлении, сдвиг шкалы частот за счет механических явлений в приборе, эффект “релаксации детектора”. Коррекция эффекта релаксации детектора и доплеровского сдвига осуществлялась на этапе предварительной обработки. Коррекция погрешностей спектральной калибровки и сдвига шкалы осуществлялась в процессе решения обратной задачи. Остаточные неопределенности, а также погрешность значения прицельной высоты включались в общую случайную компоненту погрешностей измерений.

Для оценки случайного шума измерений были проанализированы спектры на максимальных прицельных высотах. При этом использовалось приближение слабости соответствующего атмосферного излучения. Для оценки случайного шума были использованы 54 последовательных атмосферных скана. Средние и среднеквадратические значения измеренной интенсивности рассчитывались для максимальных прицельных высот в спектральном интервале $650\text{--}660\text{ см}^{-1}$, где атмосферный сигнал минимален. Среднеквадратическое значение интенсивности составило $4.81 \times 10^{-3}\text{ мВт}/(\text{м}^2\text{ ср. см}^{-1})$. За оценку случайного шума было принято округленное значение: $5.0 \times 10^{-3}\text{ мВт}/(\text{м}^2\text{ ср. см}^{-1})$.

Вертикальные профили случайных компонент погрешности, осредненные по всему спектральному интервалу, представлены на рис. 2. До высоты 80 км вклад шума детектора пренебрежимо мал, и основными компонентами являются погрешности определения прицельной высоты и остаточные погрешности спектральной калибровки после коррекции. Однако выше 120 км общая случайная погрешность обусловлена только шумом детектора.

В заключение данного раздела обратим внимание на тот факт, что при измерениях CRISTA в 15 мкм полосе до высот порядка $50\text{--}55\text{ км}$ заметную роль играет эффект интерференции спектральных линий. Данный эффект необходимо учитывать, поскольку значение нижней прицельной высоты измерений в рассматриваемом режиме составляет около 40 км . Учет эффекта интерференции спектральных линий проводился нами по известной методике [18].

3. ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ АПРИОРНАЯ ИНФОРМАЦИЯ

Ограниченное спектральное разрешение спектрометра CRISTA, ошибки измерений различного рода, неопределенности характеристик прибора и погрешности модели переноса излучения являются факторами, которые необходимо учитывать при решении обратной задачи. Для обеспечения стабильности решения обратной задачи оказалось целесообразным привлечь дополнительную физически обоснованную априорную информацию о связях между неизвестными параметрами или о специфических ограничениях. При этом в отличие, например, от работ [19, 20], мы сознательно не использовали в качестве априорной информации численные модели заселения возбужденных состояний. Введение такой “сильной” априорной информации часто неоправдано, например из-за погрешностей скоростей различных механизмов заселения [21]. Кроме того, при использовании большого объема априорной информации снижается роль самих измерений в получении решения [22].

При решении обратной задачи с учетом различных дополнительных условий ее можно сформулировать следующим образом:

$$\begin{cases} \mathbf{y} = \mathbf{y}_m + \mathbf{A}\delta\mathbf{x}, \\ \mathbf{z}_1 = \mathbf{z}_{1m} + \mathbf{C}_1\delta\mathbf{x}, \\ \dots\dots\dots \\ \mathbf{z}_N = \mathbf{z}_{Nm} + \mathbf{C}_N\delta\mathbf{x}, \end{cases}$$

где первое векторно-матричное уравнение представляет собой уравнение (2), а другие описывают дополнительные условия в линеаризованной форме, N – общее число дополнительных условий. Точность выполнения дополнительных условий задается с помощью введения соответствующих матриц ошибок.

Остановимся на описании конкретных дополнительных условий (дополнительной априорной информации), использованных нами в алгоритме интерпретации измерений с помощью спектрометра CRISTA:

1. Поскольку эффект нарушения ЛТР для колебательных состояний молекул CO_2 теоретически достаточно хорошо изучен, и высоты нарушения ЛТР известны, существует возможность явным образом учесть значения этих высот ($z_{\text{ЛТР}}$) в алгоритме восстановления. Соответствующее дополнительное условие можно записать следующим образом:

$$T_v(z) - T_k(z) = 0 \quad \text{для} \quad z \leq z_{\text{ЛТР}}.$$

Для рассматриваемых колебательных состояний с уверенностью можно положить $z_{\text{ЛТР}} = 60$ км. Это значение и было использовано в расчетах.

2. Как мы упоминали выше, первоначально в число неизвестных функций были включены семь колебательных температур состояний молекулы CO_2 (см. рис. 1). Однако можно сократить число неизвестных, если использовать дополнительное условие так называемого “внутреннего ЛТР”, которое означает, что населенности близких (с точки зрения энергии) колебательных состояний соотносятся друг с другом в соответствии с законом Больцмана. Это дополнительное условие записывается следующим образом:

$$\frac{E'_v - E_v}{T_k} = \frac{E'_v}{T'_v} - \frac{E_v}{T_v},$$

где значения, соответствующие верхнему состоянию, обозначены штрихом. Группы колебательных состояний, связанные условием “внутреннего ЛТР”, выделены на рис. 1 пунктиром.

3. Еще одно дополнительное условие обусловлено характеристиками прибора и особенностями экспериментов. Спектрометр CRISTA имеет в рассматриваемом спектральном интервале разрешение около 1.2 см^{-1} (значение разрешающей способности $\lambda/\Delta\lambda$ в эксперименте CRISTA-1 было равно, согласно оценкам, 554). Анализ показывает, что такое спектральное разрешение является недостаточно для того, чтобы разделить в спектре излучения Q-ветви, соответствующие переходам между состояниями 01101, 02201 и 03301 для всех рассматриваемых изотопов. Для каждого изотопа эти Q-ветви проявляются в виде одного общего максимума. Вследствие этого разделение переменных $T_{v(01101)}$, $T_{v(02201)}$ и $T_{v(03301)}$ является проблематичным. Численные эксперименты показали, что в принципе возможно получение независимой информации об этих параметрах, которая определяется формой максимумов. Однако по причине того, что на практике спектральная аппаратная функция прибора определяется с конечной точностью, эта возможность не реализуется. Неопределенность в значении аппаратной функции вносит существенные ошибки в результаты восстановления. Для того чтобы стабилизировать решение, целесообразно использовать следующее дополнительное условие:

$$T_{v(01101)}(z) = T_{v(02201)}(z) = T_{v(03301)}(z). \quad (5)$$

Это условие определяет равенство колебательных температур указанных состояний. Подчеркнем, что по данным теоретических исследований эффекта нарушения ЛТР для колебательных состояний молекул CO_2 колебательные температуры указанных состояний различаются незначительно и, таким образом, использование условия (5) для стабилизации решения допустимо.

Учитывая описанные выше дополнительные условия, мы имеем всего лишь четыре неизвестных параметра (как функции высоты), описыва-

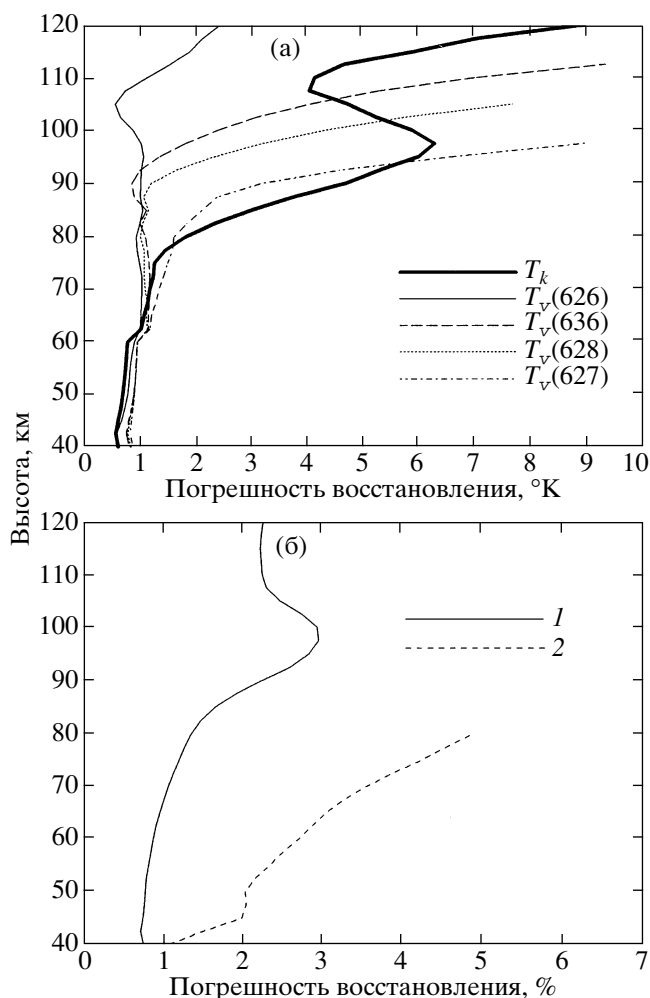


Рис. 3. Оценки погрешностей восстановления кинетической и колебательных температур (а), давления и отношения смеси CO_2 (б, кривые 1 и 2, соответственно), полученные на основе расчета матрицы ошибок.

ющие неравновесную населенность. Эти параметры будем называть эффективными колебательными температурами для четырех изотопов: T_{v626} , T_{v636} , T_{v628} и T_{v627} . Ниже мы будем опускать определение “эффективные”. Колебательные температуры отдельных состояний будут оговариваться особо.

4. В алгоритме решения обратной задачи использовалось также уравнение гидростатического равновесия в виде дополнительного условия. Это условие формулировалось как уравнение связи между значениями давления на соседних уровнях используемой высотной сетки:

$$p(z_{i+1}) = p(z_i) \exp \left[- \int_{z_i}^{z_{i+1}} \frac{\mu(z')g(z')}{RT_k(z')} dz' \right],$$

где μ – молекулярная масса воздуха, g – ускорение свободного падения, R – универсальная газовая постоянная. Подчеркнем, что условие гидростатического равновесия, записанное в такой форме, позволяет неявно учитывать отклонения от гидростатического равновесия, вызванные различным географическим положением точек, соответствующих измерениям на различных прицельных высотах во время движения спутника.

5. В качестве еще одного дополнительного условия использовалась связь между счетной концентрацией и отношением смеси CO_2 . Содержание атмосферных газов задается в прямой и обратной задачах профилями счетной концентрации. Тем не менее, удобнее иметь дело с профилями отношения смеси, так как, например, для CO_2 в нижних слоях атмосферы профиль отношения смеси известен априори с высокой точностью, и такого рода информацию необходимо учитывать в алгоритме восстановления.

Подчеркнем в заключение раздела, что использованная в нашей методике дополнительная априорная информация, в отличие от методик интерпретации неравновесного излучения с использованием численных моделей заселения возбужденных состояний, имеет достаточно общий характер. Поэтому наша методика свободна от влияния неопределенностей, связанных с недостаточным знанием физики процессов заселения и значений численных параметров, описывающих эти процессы.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ АНАЛИЗА ПОГРЕШНОСТЕЙ ВОССТАНОВЛЕНИЯ ПАРАМЕТРОВ АТМОСФЕРЫ

Вертикальные профили погрешностей восстановления кинетической и колебательных температур, полученные на основе расчета матрицы ошибок, представлены на рис. 3а. Ниже 60 км погрешности определения кинетической и колебательных температур практически совпадают и составляют менее 1°K (это область, где справедливо дополнительное условие, определяющее уровень нарушения ЛТР и выполнимость ЛТР в нижележащих слоях). В верхних слоях наименьшая погрешность восстановления соответствует колебательной температуре основного изотопа. Примерно до высоты 115 км профиль T_{v626} определяется с погрешностью менее 2°K . Профили T_{v636} , T_{v628} и T_{v627} определяются с погрешностью менее 2°K примерно до высот 100 км, 95 км и 85 км соответственно. Начиная с указанных высот, погрешности резко возрастают с ростом высоты. Уменьшение погрешности определения кинетической температуры с ростом высоты в области 97–107 км обусловлено возрастанием кинетической температуры в термосфере. В термосфере две причины влияют на величину погрешности. Первая вызывает возрастание погрешности из-за уменьшения

счетной концентрации CO_2 , вторая ведет к уменьшению погрешности благодаря увеличению кинетической температуры. В области высот 97–107 км вторая причина является определяющей.

Погрешности восстановления давления и отношения смеси CO_2 представлены на рис. 3б. Погрешность определения отношения смеси CO_2 получена по погрешностям определения счетной концентрации CO_2 , давления и кинетической температуры. Как следует из рис. 3б, профиль давления восстанавливается с высокой точностью, что является результатом использования дополнительного условия в виде уравнения гидростатического равновесия: погрешности не превышают 2% ниже высоты 90 км и 3% ниже высоты 120 км. Погрешность определения отношения смеси CO_2 на высотах 40–80 км не превышает 5%.

Оценки погрешностей, полученные на основе расчетов матрицы ошибок, были подтверждены численными экспериментами. Рассматривались две модели атмосферы, одна из которых описывала “среднее”, а другая “истинное” состояние атмосферы. Экспериментальные данные CRISTA моделировались путем расчета характеристик излучения для “истинной” модели. В численных экспериментах моделировались также погрешности измерений прибором CRISTA.

Прежде чем перейти к анализу результатов численных экспериментов, необходимо уделить внимание проблеме сравнения истинных и восстановленных профилей. Причиной проблемы является то, что алгоритм предназначен для восстановления эффективных колебательных температур, а не колебательных температур, соответствующих конкретным колебательным состояниям. Для того чтобы сравнить восстановленные эффективные колебательные температуры со значениями, полученными в численных экспериментах (или с результатами независимого моделирования при обработке экспериментальных данных), колебательные температуры отдельных состояний необходимо преобразовать в эффективные температуры. Для этого нами использовалось следующее выражение:

$$T_v(z) = W_{01101}(z)T_{v01101}(z) + W_{02201}(z)T_{v02201} + W_{03301}(z)T_{v03301}, \quad (6)$$

где W – весовые коэффициенты. Весовые коэффициенты умножаются на истинные (или модельные) значения колебательных температур, соответствующих отдельным состояниям. Профили весовых коэффициентов определяются по значениям оценок погрешностей восстановления, по-

лученных из расчетов матрицы ошибок, следующим образом:

$$W_s(z) = \frac{\sigma_s^{-2}(z)}{\sum_{s=1} \sigma_s^{-2}(z)},$$

где s обозначает колебательное состояние, $\sigma_s(z)$ – профили погрешностей восстановления, полученные из расчетов матрицы ошибок для колебательных температур отдельных состояний, т.е. без дополнительного условия, связывающего между собой значения колебательных температур состояний 01101, 02201 и 03301. Очевидно, что если на какой-либо высоте погрешность определения колебательной температуры конкретного состояния намного меньше, чем погрешности определения колебательных температур других состояний, соответствующий весовой коэффициент будет близок к единице. Это значит, что в измерениях содержится главным образом информация об этом конкретном состоянии.

Рассмотрим применимость концепции весовых коэффициентов и эффективность рассмотренного алгоритма решения обратной задачи, используя результаты одного из численных экспериментов. “Истинные” профили колебательных температур для численного эксперимента были рассчитаны В.П. Огибаловым. Прежде всего, проанализируем поведение профилей весовых коэффициентов, которые представлены на рис. 4. Как видно из рисунка, весовые коэффициенты различны для различных изотопов. Данный факт отражает изменчивость информационного содержания измерений в зависимости от колебательных температур различных изотопов. Для молекул $\text{CO}_2(626)$ в высотном диапазоне 60–70 км все весовые коэффициенты близки по значению. В области высот 75–95 км весовой коэффициент, относящийся к состоянию 02201, заметно больше других, что свидетельствует о том, что в этой области эффективная колебательная температура близка к колебательной температуре состояния 02201. Однако следует ожидать, что выше 100 км эффективная колебательная температура будет близка к колебательной температуре состояния 01101, поскольку соответствующий весовой коэффициент превышает 0.8. Для изотопа $\text{CO}_2(636)$ весовые коэффициенты сравнимы между собой по значению только в небольшой окрестности высоты 60 км. До высоты 70 км доминирует весовой коэффициент, относящийся к состоянию 02201. Начиная примерно с высоты 80 км, весовой коэффициент, относящийся к состоянию 01101, для этого изотопа близок к единице, и, следовательно, эффективная колебательная температура для этого изотопа на самом деле представляет собой колебательную температуру состояния 01101. Аналогичная ситу-

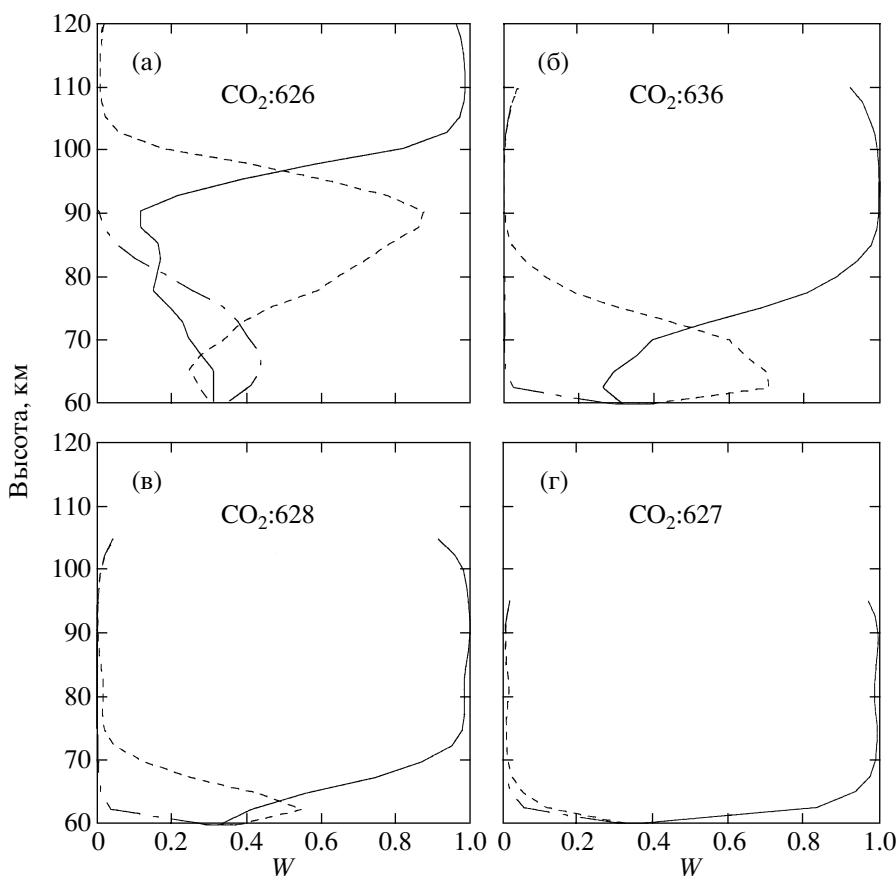


Рис. 4. Весовые коэффициенты преобразования от колебательных температур, соответствующих отдельным состояниям, к значениям эффективной колебательной температуры в формуле (6) для изотопов CO_2 626 (а), 636 (б), 628 (в) и 627 (г). Сплошная, пунктирная и штрих-пунктирная линии отвечают весовым коэффициентам, относящимся к колебательным температурам состояний 01101, 02201 и 03301 соответственно.

ация характерна также для молекул изотопа CO_2 628. Однако для него эффективная колебательная температура практически становится равной колебательной температуре состояния 01101, уже начиная с высоты около 70 км. И, наконец, как можно видеть из рис. 4г, эффективная колебательная температура для молекул CO_2 (627) может быть соотнесена с температурой состояния 01101 во всем высотном диапазоне, где учитывается эффект нарушения ЛТР. Это отражает тот факт, что отношение сигнал/шум недостаточно для определения населенностей второго и третьего возбужденных состояний даже на небольших высотах.

Результаты восстановления различных параметров в численных экспериментах представлены на рисунках 5–7. Рис. 5а представляет совокупность истинных и средних профилей кинетической и колебательных температур, использованных в численном эксперименте, и демонстрирует величину эффекта нарушения ЛТР. Как можно видеть, профиль кинетической температуры имеет две особенности – очень сильную инверсию в области

80 км и изменение градиента в окрестности 110 км. Эффект нарушения ЛТР проявляется, начиная с 70 км, и является весьма существенным. До высоты 100 км отклонения колебательной температуры изотопа 626 от кинетической температуры могут достигать 15–20° К (на высоте 83 км). Для колебательной температуры изотопа 637 отклонения могут достигать 30–35° К (на высоте 95 км). Выше 100 км отклонения возрастают. На рис. 5б показаны восстановленные профили кинетической и колебательных температур. Расчеты воспроизводят все особенности температурных профилей с высокой точностью. Ниже результаты восстановления будут проанализированы для каждого параметра в отдельности.

Рис. 6 служит для сравнения истинного и восстановленного профилей кинетической температуры. Отметим, что с учетом погрешностей профили согласуются очень хорошо. Точно воспроизводятся упомянутые выше особенности, даже на высоте 110 км. Следует обратить внимание на то, что даже в верхних слоях (110–120 км) профиль восстанавливается с высокой точностью, несмотря

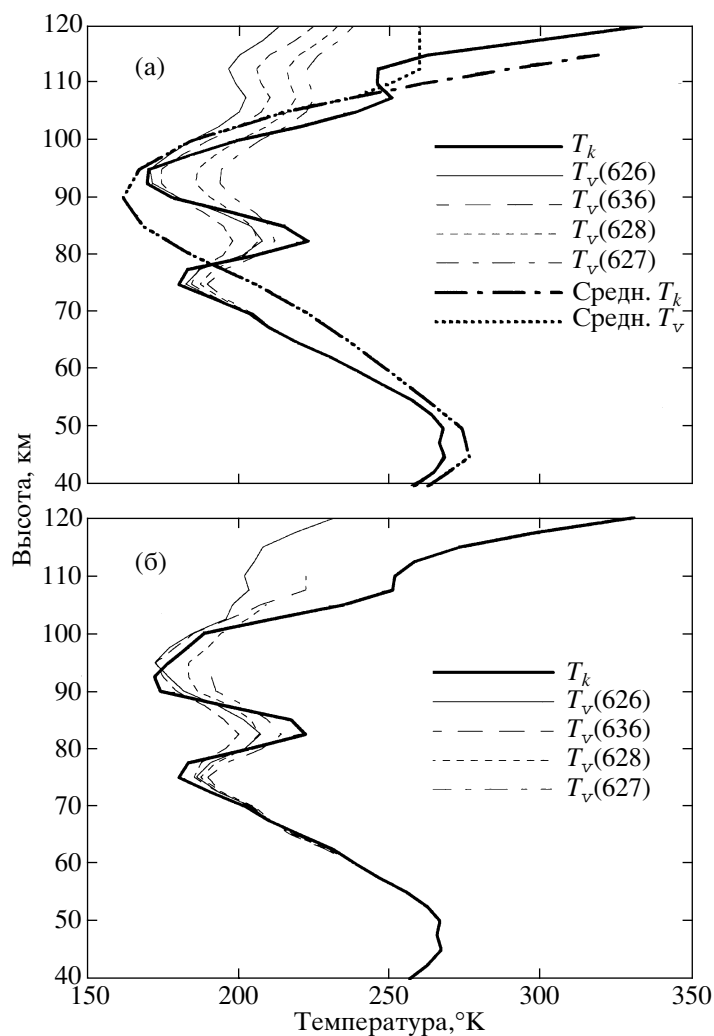


Рис. 5. Восстановленные в численном эксперименте кинетическая и колебательные температуры: истинные и средние профили кинетической и колебательных температур состояния 01101 (а) и восстановленные профили кинетической и эффективных колебательных температур (б).

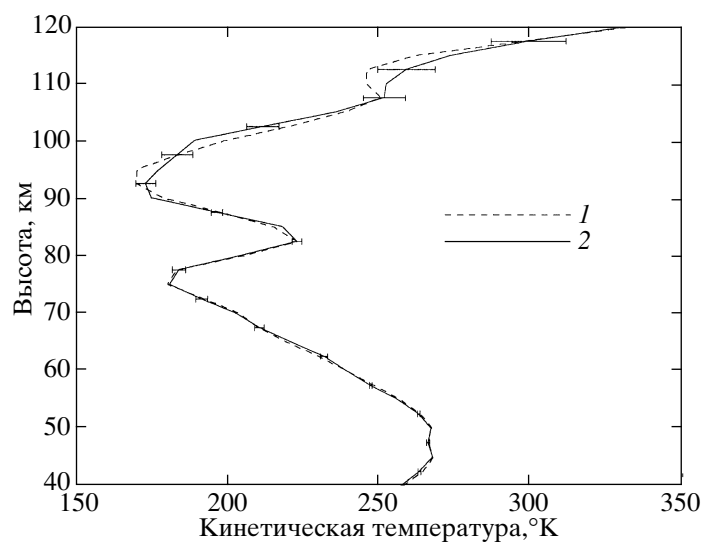


Рис. 6. 1 – истинный профиль, 2 – восстановленный профиль кинетической температуры (численный эксперимент).

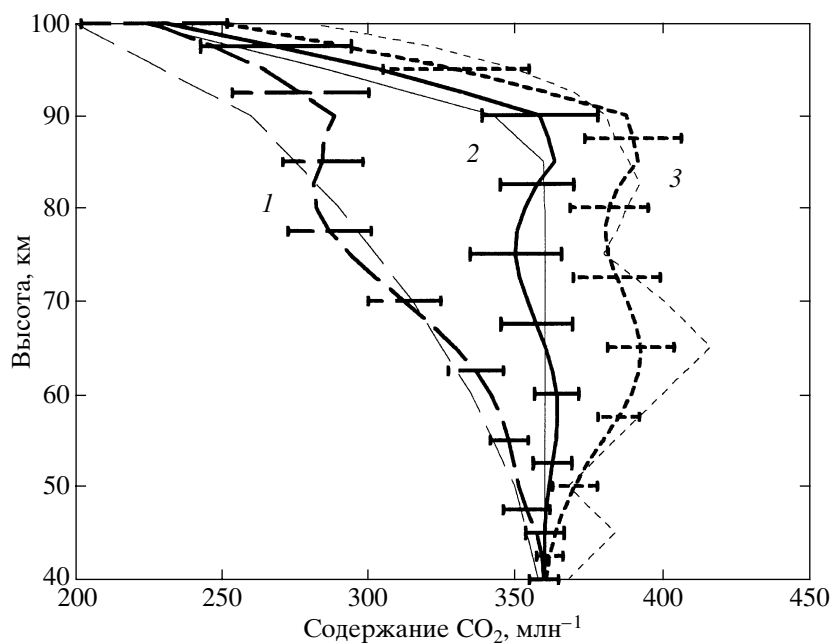


Рис. 7. Сравнение истинных (тонкие линии) и восстановленных (толстые линии) профилей отношения смеси CO_2 в численном эксперименте. Цифрами обозначены различные типы модельных профилей, см. текст.

на уменьшение отношения сигнал/шум на этих высотах. Данный факт является результатом использования измерений в относительно широкой спектральной области – случайные погрешности подавляются при использовании большого числа спектральных каналов.

Сравнение истинных и восстановленных профилей колебательных температур для всех рассмотренных изотопов показало следующее.

1. Восстановление T_{v626} характеризуется высокой точностью вплоть до высоты 110 км (профили согласуются в пределах погрешностей практически во всем высотном диапазоне). Расхождения увеличиваются в окрестности 95 км и выше 110 км, где имеет место существенное изменение градиента температуры.

2. Высокая точность восстановления колебательной температуры для изотопа 636 наблюдается до высоты 105 км, выше расхождения возрастают.

3. Хорошее восстановление значений T_{v628} и T_{v627} имеет место вплоть до соответствующих верхних границ восстановления, оцененных на основе описанных выше критериев. Восстановленные и истинные профили в целом согласуются в пределах оценок погрешностей. Аналогично случаю с T_{v626} , некоторое возрастание ошибок восстановления наблюдается в области резкого изменения градиентов температур.

Результаты восстановления профиля отношения смеси CO_2 в численных экспериментах представлены на рис.7. Для экспериментов были выбра-

ны три различных модельных профиля, характеризующихся низкими 1, средними 2 и высокими 3 значениями отношения смеси CO_2 . Как видно из рисунка, профиль 1 хорошо воспроизводится до высоты 90 км, профили 2 и (3) – до высоты 100 км. Истинный и восстановленный профили в случаях 2 и 3 согласуются в пределах погрешности. Особенности профиля 3 (локальные максимум и минимум) не воспроизводятся по причине использования априорной информации о CO_2 , ограничивающей класс искомых профилей требованием их существенной гладкости (радиус корреляции 25 км). Другие численные эксперименты показали, что уменьшение радиуса корреляции дает возможность воспроизводить особенности профиля в нижних слоях, но при этом заметно возрастают ошибки восстановления в верхних слоях.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе описан метод комплексного восстановления профилей кинетической температуры, давления, концентрации атмосферных газов и неравновесной населенности колебательных состояний молекул (колебательных температур) в средней атмосфере по данным измерений уходящего ИК излучения на касательных трассах. Исследованы возможности применения метода для интерпретации данных, полученных в космическом эксперименте с аппаратурой CRISTA для спектральной области 15 мкм полосы CO_2 . Отличительной особенностью метода является отсутствие не-

обходимости моделирования процессов, определяющих неравновесное состояние атмосферы.

На основе физического анализа поставленной обратной задачи, расчетов матрицы ошибок и численного моделирования эксперимента CRISTA получены следующие результаты и выводы.

1. Измерения, проведенные с помощью спектрометра CRISTA в 15 мкм полосе CO_2 , дают возможность извлекать информацию о профилях кинетической температуры, давления, отношения смеси CO_2 , а также о неравновесных населенностях колебательных состояний молекул CO_2 (колебательных температурах) для четырех наиболее распространенных изотопов CO_2 (626, 636, 627 и 628) в мезосфере и нижней термосфере.

2. Спектральное разрешение измерений недостаточно для восстановления профилей колебательных температур отдельных колебательных состояний. Поэтому обратная задача была сформулирована по отношению к так называемым эффективным колебательным температурам. Однако анализ показал, что эффективные колебательные температуры близки к колебательным температурам отдельных состояний в конкретных диапазонах высот. Например, эффективные колебательные температуры молекул изотопов CO_2 627 и 628 представляют собой колебательные температуры состояния 01101 практически во всей высотной области восстановления. Эффективные колебательные температуры изотопов 626 и 636 представляют собой колебательные температуры состояния 01101, начиная с высот соответственно 100 и 85 км. В нижележащих слоях эффективные температуры могут быть представлены как линейные комбинации колебательных температур отдельных состояний.

3. Алгоритм решения обратной задачи учитывает ряд дополнительных условий, которые имеют конкретное физическое обоснование (например, условие гидростатического равновесия, "внутреннего ЛТР" и т.п.).

4. Оценки погрешностей восстановления были получены на основе расчета матрицы ошибок и проведения численных экспериментов. Погрешности восстановления различны для различных высот; как правило они возрастают с высотой, однако возможно наличие локальных высотных минимумов. Оценки погрешностей и численные эксперименты показали, что использование предложенного метода для интерпретации данных эксперимента CRISTA позволит получать профили кинетической температуры и колебательной температуры изотопа 626 до высоты 120 км с погрешностями менее 9°K и 3°K соответственно. Колебательные температуры для трех менее распространенных изотопов (636, 628, и 627) могут быть получены с погрешностью менее 8°K до высот 110, 105 и 95 км соответственно. Метод позволяет также оценивать

отношение смеси CO_2 в мезосфере с погрешностью около 10% в высотном диапазоне 40–90 км. Погрешности восстановления профиля давления не превышают 3%.

Авторы выражают благодарность В.П. Огибалову за расчеты колебательных температур, которые использовались в модели атмосферы в численных экспериментах. Существенная часть работы была выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранта 00–05–65223).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Тимофеев Ю.М. Спутниковые методы исследования газового состава атмосферы. (Обзор). // Изв. АН СССР. Физика атмосферы и океана. 1989. Т. 25. № 5. С. 451–472.
2. Кондратьев К.Я., Тимофеев Ю.М. Метеорологическое зондирование атмосферы из космоса. Л.: Гидрометеоздат, 1978. 280 с.
3. Ogibalov V.P., Kutepov A.A., Shved G.M. Non-local thermodynamic equilibrium in CO_2 in the middle atmosphere. II. Populations in the $\nu_1\nu_2$ mode manifold states // J. of Atmos. Solar-Terrest. Phys. 1998. V. 60. N 3. P. 315–329.
4. Zachor A.S., Sharma R.D. Retrieval of non-LTE vertical structure from a spectrally resolved infrared limb radiance profile // J. Geophys. Res. 1985. V. 90. N A1. P. 467–475.
5. Косцов В.С., Розанов В.В., Тимофеев Ю.М., Грассл Х., Куменов А.А. Спектральная структура неравновесного уходящего излучения горизонта в полосе поглощения CO_2 15 мкм // Изв. АН. Физика атмосферы и океана. 1992. Т. 28. N 3. С. 283–293.
6. Косцов В.С., Тимофеев Ю.М., Грассл Х. Возможности определения профилей колебательных температур 15-мкм полосы CO_2 по измерениям излучения лимба Земли // Изв. АН. Физика атмосферы и океана. 1992. Т. 28. N 6. С. 604–614.
7. Timofeyev Yu.M., Kostsov V.S., Grassl H. Numerical investigations of the accuracy of the remote sensing of non-LTE atmosphere by space-borne spectral measurements of limb IR radiation: 15 μm CO_2 bands, 9.6 μm O_3 bands and 10 μm CO_2 laser bands // J. Quant. Spectrosc. Transfer. 1995. V. 53. N 6. P. 613–632.
8. Riese M., Spang R., Preusse P., Ern M., Jarisch M., Offermann D., Grossmann K. Cryogenic Infrared Spectrometers and Telescopes for the Atmosphere (CRISTA) data processing and atmospheric temperature and trace gas retrieval // J. Geophys. Res. 1999. V. 104. N D13. P. 16349–16367.
9. Offermann D., Grossmann K.U., Barthol P., Knieling P., Riese M., Trant R. The Cryogenic Infrared Spectrometers and Telescopes for the Atmosphere (CRISTA) experiment and middle atmosphere variability // J. Geophys. Res. 1999. V. 104. N. D13. P. 16311–16325.
10. Ward W.E., Oberheide J., Riese M., Preusse P., Offermann D. Tidal signatures in temperature data from CRISTA I mission // J. Geophys. Res. 1999. V. 104. N. D13. P. 16391–16403.

11. *Kostsov V.S., Timofeyev Yu.M., Vollmann K., Grossmann K.* Preliminary results of the retrieval of the CO₂ vibrational state populations from the 15 μm limb radiance spectra measured by CRISTA / Proc. XXV Ann. Europ. Meet on Atmospheric Studies by Optical Methods, 21–25 September 1998, Granada, Spain, Editorial Committee: M.J.Lopez-Gonzalez, et al., Instituto de Astrofísica de Andalucía, Granada, Spain, 1998. P. 131–134.
12. *Kostsov V.S., Timofeyev Yu.M., Grossmann K., Vollmann K., Fischer H.* Interpretation of the limb radiance measurements accounting for the non-LTE conditions // ESAMS'99 – European Symposium on Atmospheric Measurements from Space, ESTEC, Noordwijk, The Netherlands, 18–22 January 1999, V. I. P. 251–256.
13. *Kostsov V.S., Timofeyev Yu.M., Grossmann K.* Interpretation of the limb radiance measurements in the CO₂ 15 μm band by the CRISTA instrument accounting for the non-LTE conditions / IRS-2000: Current Problems in Atmospheric Radiation, A. Deepak Publishing, Hampton, Virginia, 2000. In print
14. *Hollweg H.-D., Kostsov V.S., Schlüssel G., Schlüssel P., Timofeyev Yu.M., Tonkov M.V., Polyakov A.V., Filipov N.N.* Interaction at mm and optical frequencies. Pt II: Specific atmospheric absorption and emission features: Investigation and modeling. Final report. ESA ESTEC Contract No. 10603/93/NL/NB. Zentrum für Meeres- und Klimaforschung der Universität Hamburg, Meteorologisches Institut, 1995.
15. *Rothman L.S., Gamache R.R., Tipping R.H., Rinsland C.P., Smith M.A.H., Chris Benner D., Malathy Devi V., Flaud J.-M., Camy-Peyret C., Perrin A., Goldman A., Massie S.T., Brown L.R., Toth R.A.* The HITRAN molecular database: editions of 1991 and 1992 // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 1992. V. 48. N. 5/6. P. 469–507.
16. *Покровский О.М., Тимофеев Ю.М.* Общий статистический подход к решению обратных задач атмосферной оптики // Метеорология и гидрология. 1972. №1. С. 52.
17. *Поляков А.В.* К вопросу об использовании априорной статистической информации при решении нелинейных обратных задач атмосферной оптики // Исследование Земли из космоса. 1996. № 3. С. 11–17.
18. *Rozenkrantz P.W.* Shape of the 5 mm oxygen band in the atmosphere // IEEE Trans. Antennas Propag. 1975. V. AP-23. P. 498–506.
19. *Lopez-Puertas M. et al.* Non-local thermodynamic equilibrium limb radiances for the MIPAS instrument on ENVISAT-1 // J. Quant. Spectrosc. Radiat Transfer. 1998. V. 59. N 3–5. P. 377–403.
20. *Zhou D.K., Mlynczak M.G., Bingham G.E., Wise J.O., Nadile R.M.* CIRRS-1A limb spectral measurements of mesospheric 9.6-μm airglow and ozone // Geoph. Res. Lett. 1998. V. 25. N 5. P. 643–646.
21. *Mlynczak M., Zhou D.K.* Kinetic and spectroscopic requirements for the measurement of mesospheric ozone at 9.6 μm under non-LTE conditions // Geoph. Res. Lett. 1998. V. 25. N. 5. P. 639–642.
22. *Timofeyev Yu.M.* Satellite IR sounding of the non-LTE middle atmosphere // IRS-2000: Current Problems in Atmospheric Radiation, A. Deepak Publishing, Hampton, Virginia, 2000. in print.