УДК 551.510

ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОНЦЕНТРАЦИЙ МАЛЫХ ГАЗОВЫХ СОСТАВЛЯЮЩИХ НА ВЫСОТАХ НИЖНЕЙ И СРЕДНЕЙ МЕЗОСФЕРЫ ПО ВРЕМЕННЫ́М РЯДАМ КОНЦЕНТРАЦИИ ОЗОНА

А. А. Нечаев*, Т. С. Ермакова, М. Ю. Куликов

Институт прикладной физики РАН, г. Нижний Новгород, Россия

Представлен статистический (байесов) подход к восстановлению концентраций наиболее важных малых газовых составляющих мезосферы на высотах 50÷75 км с помощью фотохимической модели по временным рядам концентрации озона измеренным в течение одного светового дня посредством микроволновых пассивных приборов наземного базирования. На модельных зашумлённых временны́х рядах концентрации озона с учётом реалистичной точности её измерений в мезосфере, отвечающей известным озонометрам, исследована точность восстановления неизмеряемых характеристик мезосферы в зависимости от высоты и длины временно́го ряда.

ВВЕДЕНИЕ

Озон является одной из важнейших малых газовых составляющих атмосферы, поэтому изучение его пространственно-временной эволюции традиционно считается одной из основных задач в исследовании атмосферы Земли. Во-первых, озоновый слой, расположенный в основном на высотах нижней и средней стратосферы, защищает все живые организмы на планете от воздействия ультрафиолетового излучения Солнца. Во-вторых, фотохимические процессы связывают эволюцию концентрации данной компоненты с эволюциями концентраций других малых газовых составляющих атмосферы. В-третьих, пространственно-временно́е распределение концентрации озона регулярно (и сравнительно неплохо) измеряется разнообразными дистанционными методами с помощью спутниковых приборов и с поверхности Земли. Результаты данных измерений (например, в виде пространственно-временны́х рядов концентрации озона) предоставляют возможности для восстановления неизмеряемых или плохо измеряемых характеристик атмосферы с применением методов обратного моделирования и фотохимических (в общем случае транспортнофотохимических) моделей соответствующей области атмосферы. Развитие такого подхода применительно к задаче мониторинга ключевых химических компонент мезосферы с поверхности Земли является целью данной работы.

Мезосфера расположена в диапазоне высот 50÷90 км, между вышележащей термосферой, состояние которой определяется в большей степени изменчивостью характеристик солнечного излучения, и нижележащей стратосферой. Данная область существенно поглощает наиболее активную часть солнечного излучения (в частности, практически полностью — коротковолновое ультрафиолетовое излучение), мощные высыпания энергичных частиц и потому фактически является вторым (после магнитосферы) слоем защиты среды обитания человека от губительного воздействия Солнца. С другой стороны, мезосфера является важным составным элементом переноса и трансформации излучения в системе Солнце—атмосфера—поверхность Земли, океан атмосфера—космос, поэтому эволюция параметров данной области влияет на глобальные атмосферные процессы. В верхней части мезосферы (в области мезопаузы, 80÷90 км) температура достигает своего наименьшего в земной атмосфере значения порядка 100 К [1], что делает эту

^{*} ant.a.nech@gmail.com.

область термически особенно чувствительной. По этим причинам характеристики протекающих в мезосфере физико-химических процессов являются важными индикаторами возможных изменений состояния всей атмосферы, вызванных как вариациями естественных факторов, так и искусственными воздействиями, и являются объектом исследований значительного числа научных коллабораций (например, Network for the Detection of Mesospheric Change [2]).

Одними из наиболее важных малых газовых составляющих (МГС) мезосферы, определяющих, в частности, фотохимический нагрев воздуха в ней за счёт экзотермических реакций, являются компоненты семейств нечётных соединений кислорода O_x (O, O(¹D), O₃) и водорода HO_x (H, OH, HO₂) [3]. В свою очередь, их локальная эволюция определяется, прежде всего, суточными вариациями освещённости, приводящими к соответствующей модуляции коэффициентов фотодиссоциации, и величинами параметров, среди которых наиболее изменчивым (как в пространстве, так и во времени) является концентрация водяного пара. Экспериментальное наблюдение за указанными компонентами проводится с помощью самолётов, стратостатов, ракет, спутников и с поверхности Земли [4–11]. Однако самолётные, стратостатные и ракетные измерения в силу ряда причин (прежде всего, их высокой стоимости), проводятся эпизодически. Поэтому исчерпывающие исследования являются целью специальных краткосрочных кампаний и экспедиций; именно результаты, полученные в ходе таких кампаний, позволяют выявлять детальные механизмы наблюдаемых явлений. Объектом же регулярных измерений (как наземных, так и спутниковых) является лишь небольшое число из вышеуказанных компонент (со спутников — озон и гидроксил, с поверхности Земли — только озон).

В предшествующих работах [12, 13] разработан метод восстановления вертикальных распределений концентраций атомарных кислорода и водорода, гидропероксида и паров воды на высотах 50÷87 км по одновременным спутниковым измерениям концентраций озона и гидроксила в дневное время суток с помощью модели мезосферной фотохимической системы (МФХС). Его эффективность была продемонстрирована на примере данных экспериментов CRISTA-MAHRSI. Показано, что для реализации этого метода необходимо иметь по крайней мере две пары вертикальных распределений концентраций компонент О3 и ОН, измеренных в течение одного светового дня соответственно утром и днём в точках с близкими горизонтальными координатами. В силу своих особенностей спутниковое сканирование атмосферы позволяет использовать такой подход только в отдельных точках пространства, и даже в них весьма нерегулярно по времени. В отличие от спутниковых наблюдений микроволновое пассивное зондирование атмосферы с поверхности Земли в соответствующих «окнах» прозрачности позволяет, в принципе, проводить измерения практически в любой точке пространства с выбранными горизонтальными координатами и накапливать длинные временные ряды вертикальных профилей концентрации озона на мезосферных высотах, в том числе в течение каждого светового дня. В настоящее время в составе международной организации NDACC (бывшая NDSC) [14] практически в постоянном режиме работают порядка десяти озонометров. В нашей стране также проводятся регулярные озонометрические наблюдения (в Москве, Санкт-Петербурге и Нижнем Новгороде, см., например, работы [15–18]) как посредством стационарных приборов, так и их мобильных вариантов.

Метод микроволнового зондирования озона с поверхности Земли основан на наблюдениях интегральной линии собственного излучения атмосферы, формируемой одной из резонансных линий молекулы озона, имеющей вращательные спектры в диапазонах миллиметровых и субмиллиметровых волн. По сравнению с измерениями в оптическом и инфракрасном диапазонах длин волн, осуществляемыми с помощью лидаров, микроволновые измерения менее зависят от погодных условий и аэрозольной компоненты атмосферы и могут выполняться круглосуточно. Вместе с тем необходимо отметить, что восстановление вертикального профиля концентрации озона по данным радиометрического зондирования с поверхности Земли является некорректной обратной

задачей. Точность восстановления распределения концентрации данной малой газовой составляющей определяется, в первую очередь, чувствительностью аппаратуры и временем накопления соответствующих экспериментальных спектров. Более того, на мезосферных высотах абсолютная концентрация озона уменьшается с ростом высоты, что неизбежно приводит к ухудшению точности измерений его концентрации микроволновыми методами и в конечном итоге должно проявляться в увеличении неопределённости восстановления других характеристик мезосферы по этим данным с помощью фотохимической модели.

В настоящей работе представлен статистический (байесов) подход к восстановлению концентраций наиболее важных малых газовых составляющих мезосферы на высотах $50\div75$ км по временны́м рядам концентрации озона, измеряемым в течение одного светового дня посредством микроволновых пассивных приборов наземного базирования. На модельных зашумлённых временны́х рядах концентрации данной компоненты с учётом реалистичной точности ее измерений в мезосфере, отвечающей известным озонометрам, исследовано качество восстановления неизмеряемых характеристик мезосферы (концентраций атомарных кислорода и водорода, гидроксила, гидропероксида и паров воды) в зависимости от высоты и длины временно́го ряда. Показано, что использование априорной информации о распределении концентрации паров воды H_2O существенно улучшает точность восстановления концентрации озона во всём высотном диапазоне, уменьшая смещение её среднего профиля относительно «истинного» (т.е. заданного в модели).

Работа построена следующим образом. В разделе 1 представлен общий подход к восстановлению неизвестных характеристик динамической модели. В разделе 2 описана мезосферная фотохимическая система и используемая модель данной системы. В разделе 3 представлены основные результаты восстановления концентраций малых газовых составляющих мезосферы. В заключении обсуждаются дальнейшие пути развития предложенного метода и его приложений к реальным данным наблюдений.

1. СТАТИСТИЧЕСКИЙ ПОДХОД К ВОССТАНОВЛЕНИЮ НЕИЗВЕСТНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ДИНАМИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

Предлагаемый подход к восстановлению неизмеряемых малых газовых составляющих мезосферы по временны́м рядам концентрации озона основан на методе, предложенном в работе [19].

Пусть имеется система дифференциальных уравнений размерности N, правые части которой зависят от одного неизвестного параметра μ :

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{u}}{\mathrm{d}t} = \mathbf{f}(t, \mathbf{u}, \mu), \qquad \mathbf{u} \in R^N.$$
(1)

В ходе наблюдательного эксперимента получен временной ряд $X\{x_m^{(0)}, x_m^{(1)}, \ldots, x_m^{(L-1)}\}$, составленный из L последовательных значений m-й $(1 \le m \le N)$ динамической переменной, к которым добавлена случайная погрешность измерений, заданная плотностью вероятности $w(\xi^{(0)}, \xi^{(1)}, \ldots, \xi^{(L-1)})$:

$$x_m^{(i)} = u_m^{(i)} + \xi^{(i)}, \qquad u_m^{(i)} = u_m(t = t_i), \qquad i = 0, 1, \dots L - 1.$$
 (2)

Требуется по ряду X восстановить неизвестное значение параметра μ , а также временны́е эволюции $\mathbf{u}^{(i)} = \mathbf{u}(t = t_i), i = 0, 1, ..., L - 1$ всех латентных (скрытых шумом) переменных.

Отметим, что данная задача является математически некорректной: малые погрешности в исходных данных могут приводить к существенным ошибкам значений восстановленных характеристик. Один из способов преодолеть эту трудность — использование байесова метода решения обратных задач, учитывающего статистику случайной компоненты измерений. Основная идея

его состоит в том, чтобы построить плотность вероятности неизвестного параметра $P(\mu \mid X)$ при условии, что наблюдается конкретный временной ряд X. Моменты этого распределения позволят с заданной вероятностью определить значения неизвестного параметра по зашумлённым данным. Значения динамических переменных в разные моменты времени связаны друг с другом через отображение потока, порождаемого дифференциальным уравнением (1):

$$\mathbf{u}^{(i)} = \mathbf{G}(t_i, \mathbf{u}^{(0)}, \mu) \qquad i = 0, 1, \dots L - 1.$$
 (3)

Это позволяет написать простое выражение для условной плотности распределения латентных переменных

$$P(\mathbf{u}^{(1)},\dots,\mathbf{u}^{(L-1)} \mid \mathbf{u}^{(0)},\mu) = \prod_{i=1}^{L-1} \delta[\mathbf{u}^{(i)} - \mathbf{G}(t_i,\mathbf{u}^{(0)},\mu)].$$
(4)

в котором $\delta(y)$ — дельта-функция Дирака.

Будем предполагать, что компоненты шума в разные моменты времени взаимно независимы, что вполне естественно для озонометрических наблюдений:

$$w(\xi^{(0)},\xi^{(1)},\ldots,\xi^{(L-1)}) = \prod_{i=0}^{L-1} w(\xi^{(i)})$$
(5)

и найдём плотность распределения вероятностей наблюдать ряд X при условии заданных значений латентных переменных и параметра μ :

$$P(X \mid \mathbf{u}^{(0)}, \dots, \mathbf{u}^{(L-1)}, \mu) = \prod_{i=0}^{L-1} w^{(i)} (x_m^{(i)} - u_m^{(i)}).$$
(6)

Выполняя свёртку двух плотностей вероятности, получим, с учётом тождества $\mathbf{G}(t_0,...) \equiv \mathbf{u}^{(0)}$, функцию правдоподобия модели:

$$P(X \mid \mathbf{u}^{(0)}, \mu) = \iiint \cdots \prod P(X \mid \mathbf{u}^{(0)}, \dots, \mathbf{u}^{(L-1)}, \mu) P(\mathbf{u}^{(1)}, \dots, \mathbf{u}^{(L-1)} \mid \mathbf{u}^{(0)}, \mu) \, \mathrm{d}\mathbf{u}^{(1)} \dots \, \mathrm{d}\mathbf{u}^{(L-1)} = \prod_{i=1}^{L-1} w^{(i)} [x_m^{(i)} - G_m(t_i, \mathbf{u}^{(0)}, \mu)].$$
(7)

Используя теперь теорему Байеса, с точностью до нормировочного коэффициента напишем выражение для апостериорной плотности вероятности ненаблюдаемых величин $\mathbf{u}^{(0)}$ и μ :

$$P(\mathbf{u}^{(0)}, \mu \mid X) \propto P(X \mid \mathbf{u}^{(0)}, \mu) P(\mathbf{u}^{(0)}, \mu) = P(\mathbf{u}^{(0)}, \mu) \prod_{i=0}^{L-1} w^{(i)} [x_m^{(i)} - G_m(t_i, \mathbf{u}^{(0)}, \mu)],$$
(8)

в котором плотность вероятности $P(\mathbf{u}^{(0)}, \mu)$ выражает априорные представления о возможных значениях неизвестных характеристик. Они могут основаны на статистике их многолетних измерений для конкретного времени и места или же являться следствием «физических» ограничений на область определения (8): например, отражать тот факт, что концентрации химических компонент не могут быть отрицательными. Как показано в разделе 3, в нашем случае использование информативной априорной функции $P(\mathbf{u}^{(0)}, \mu)$, приводящей к локализации распределения (8), может существенно повысить точность восстановления параметра μ .

Искомая плотность вероятности неизвестного параметра $P(\mu \mid X)$ находится N-кратным интегрированием выражения (8) по латентным переменным в начальный момент времени:

$$P(\mu \mid X) = \iint \dots \int P(\mathbf{u}^{(0)}, \mu \mid X) \,\mathrm{d}\mathbf{u}^{(0)}.$$
(9)

Распределение вероятности *j*-й латентной переменной в *i*-й момент времени определяется выражениями

$$P(\mathbf{u}^{(i)}, \mu \mid X) = P[\mathbf{G}^{-1}(t_i, \mathbf{u}^{(i)}, \mu), \mu \mid X] |J_G(\mathbf{u}^{(i)}, \mu)|^{-1},$$
(10)

$$P(\mathbf{u}_{j}^{(i)} \mid X) = \iint \dots \int P(\mathbf{u}^{(i)}, \mu \mid X) \,\mathrm{d}\mathbf{u}_{1}^{(i)} \dots \,\mathrm{d}\mathbf{u}_{j-1}^{(i)} \,\mathrm{d}\mathbf{u}_{j+1}^{(i)} \dots \,\mathrm{d}\mathbf{u}_{N}^{(i)} \,\mathrm{d}\mu, \tag{11}$$

в которых $J_G(\mathbf{u}^{(i)}, \mu)$ — якобиан преобразования (3).

2. МЕЗОСФЕРНАЯ ФОТОХИМИЧЕСКАЯ СИСТЕМА

Мезосферная фотохимическая система (MФХС) описывает важнейшие фотохимические процессы, протекающие на высотах $50 \div 90$ км. В её состав принято включать 20 наиболее существенных реакций с участием компонент семейств нечётных соединений кислорода O_x (O, O(¹D), O₃) и водорода HO_x (H, OH, HO₂), концентрации которых на высотах нижней и средней мезосферы изменяются с характерным временны́м масштабом $10^4 \div 10^5$ с:

1) $O + OH + M \rightarrow HO_2 + M$,	$2) H + HO_2 \rightarrow O_2 + H_2,$	3) $OH + HO_2 \rightarrow O_2 + H_2O$,
4) $O + OH \rightarrow O_2 + H$,	5) $O + HO_2 \rightarrow O_2 + OH$,	$6) O_2 + H + M \rightarrow HO_2 + M,$
7) $H_2O + h\nu \rightarrow H + OH$,	8) $O_2 + h\nu \rightarrow 2O$,	9) $O + O_2 + M \rightarrow O_3 + M$,
$10) O + O_3 \rightarrow 2O_2,$	$11) O + O + M \rightarrow O_2 + M,$	12) $O_3 + H \rightarrow O_2 + OH$,
$13) O_3 + OH \rightarrow O_2 + HO_2,$	14) $H + HO_2 \rightarrow 2OH$,	15) $OH + OH \rightarrow O + H_2O$,
16) $O_3 + h\nu \rightarrow O_2 + O$,	17) $OH + H + M \rightarrow H_2O + M$,	18) $H + HO_2 \rightarrow O + H_2O$,
19) $O(^{1}D) + M \rightarrow O + M$,	20) $H_2O + O(^1D) \rightarrow 2OH.$	

Эта система подвержена внешнему воздействию с периодом в 1 сутки, связанному с вращением Земли и проявляющемуся в периодической модуляции коэффициентов фотодиссоциации молекул озона, водяного пара и молекулярного кислорода (реакции 16, 7 и 8 соответственно). Ключевыми параметрами являются температура T, от которой зависят скорости протекания большинства приведённых реакций, концентрации молекул воздуха M и водяного пара, а также зенитный угол Солнца и высота, от которых существенно зависят скорости указанных процессов фотолиза.

Известно, что в реальных условиях мезосферы на эволюцию концентраций малых газовых составляющих могут существенно влиять процессы переноса (молекулярная и турбулентная диффузия, горизонтальный и вертикальный ветры, планетарные и внутренние гравитационные волны). Ниже мы ограничимся рассмотрением диапазона высот $50\div75$ км, где «индивидуальные» характерные времена каждого из указанных типов переноса существенно превышают (более, чем на один порядок) временной масштаб эволюции МФХС, и потому можно использовать нульмерную модель этой системы. Кроме того, составляющая $O(^{1}D)$ обладает очень малым временем жизни в мезосфере (около $10^{-3}\div10^{-6}$ с), поэтому данную компоненту можно исключить из числа динамических переменных, а её концентрацию определять из условия мгновенного устойчивого равновесия.

Коэффициенты реакций 16, 7 и 8 для конкретных значений широты, долготы и номера дня в году рассчитываются с помощью соответствующих моделей переноса ультрафиолетового солнечного излучения сквозь атмосферу, а распределения T(z) и M(z) на мезосферных высотах





Рис. 1. Зависимости коэффициентов фотодиссоциации воды R_7 (*a*), кислорода R_8 (δ) и озона R_{16} (ϵ) от высоты и времени суток

хорошо измеряются спутниковыми средствами зондирования и неплохо воспроизводятся современными метеорологическими моделями средней атмосферы. В данной работе для определённости использовались профили T(z) и M(z), соответствующие середине августа и диапазону широт $55\div60^{\circ}$ с. ш., зависимости коэффициентов фотодиссоциации от высоты и локального времени суток (см. рис. 1) были рассчитаны в рамках модели СОММА—IAP [20].

Таким образом, исходная модель МФХС представляет собой систему пяти дифференциальных уравнений первого порядка по времени на концентрации составляющих O, O₃ и H, OH и HO₂. При фиксированных T(z), M(z) и зависимостях коэффициентов фотодиссоциации от высоты и времени суток её динамика определяется распределением только одного параметра — концентрации паров воды, обладающей много большей пространственно-временной изменчивостью, чем температура и концентрация воздуха. В связи с этим для решения прямой задачи ниже использовался высотный профиль концентрации паров воды, полученный усреднением данных спутникового зондирования MLS Aura, полученных 14–15 августа в диапазоне широт $55\div60^{\circ}$ с. ш. Определённые в результате расчёта в рамках модели МФХС временные ряды концентрации озона далее зашумлялись и использовались для решения обратной задачи в соответствии с представленным в разделе 1 подходом, после чего результаты восстановления параметра и динамических переменных МФХС сравнивались с их правильными значениями. Качество восстановления этих характеристик, очевидно, зависит от высоты, длины исходного временного ряда концентрации озона и величины шума её измерений. В данной работе характеристики «шумовой» плотности вероятности соответствовали двум известным озонометрам OZORAM [21] и GROMOS [22], шум

А. А. Нечаев, Т. С. Ермакова, М. Ю. Куликов

полагался гауссовым с дисперсией, зависящей от высоты:

$$w^{(i)}(\xi^{(i)}) \propto \exp\left\{-\frac{1}{2}\left[\frac{\xi^{(i)}}{\sigma_{O_3}^{(i)}(z)}\right]^2\right\}.$$
 (12)

Отметим, что дифференциальные уравнения модели МФХС являются нелинейными, поэтому найти функции $\mathbf{G}(t_i, \mathbf{u}^{(0)}, \mu)$ отображения (3) и проинтегрировать апостериорную плотность вероятности латентных переменных и параметра $P(\mathcal{O}^{(0)}, \mathcal{O}_3^{(0)}, \mathcal{H}^{(0)}, \mathcal{OH}^{(0)}, \mathcal{HO}_2^{(0)}, \mathcal{H}_2\mathcal{O}|X)$ (X — исходный временной ряд концентрации озона) аналитически не представляется возможным. Здесь и далее O_x , H, OH, H O_x , H₂O — концентрации соответствующих компонент. Для численного интегрирования этой функции целесообразно применить метод Монте-Карло, построенный на основе алгоритма Метрополиса—Гастингса [23]. Он позволяет эффективно генерировать исчерпывающий ансамбль ненаблюдаемых величин O⁽⁰⁾, O⁽⁰⁾₃, H⁽⁰⁾, OH⁽⁰⁾, HO⁽⁰⁾₂ и H₂O, включающий в себя порядка десяти тысяч комбинаций их значений и распределённый с нормированной плотностью (8). Приравняв нулю координаты точек шестимерного пространства, соответствующие значениям латентных переменных, т.е. спроецировав построенное множество на одномерное подпространство, мы получим ансамбль, распределённый с целевой плотностью $P(H_2O|X)$. Статистические моменты этой функции находятся суммированием по элементам ансамбля. Заметим ещё, что при таком подходе распределение вероятности *j*-й латентной переменной в *i*-й момент времени $P(u_i^{(i)}|X)$ определяется непосредственно в процессе вычислений $P(O^{(0)}, O_3^{(0)}, H^{(0)}, OH^{(0)}, HO_2^{(0)}, H_2O|X)$ пу-тём построения гистограммы значений функции $G_j(t_j, O^{(0)}, O_3^{(0)}, H^{(0)}, OH^{(0)}, HO_2^{(0)}, H_2O|X)$ на ансамбле ненаблюдаемых величин, генерируемом алгоритмом Метрополиса-Гастингса.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ВОССТАНОВЛЕНИЯ КОНЦЕНТРАЦИЙ МАЛЫХ ГАЗОВЫХ СОСТАВЛЯЮЩИХ МЕЗОСФЕРЫ

В ходе исследования описанный во введении подход применялся для разных высот z и длин временно́го ряда L как без априорной информации, так и с добавлением в апостериорную функцию (8) информативной априорной части

$$P(\mathbf{u}^{(0)}, \mathbf{H}_2 \mathbf{O}) \propto \exp\left\{-\frac{1}{2} \left[\frac{\mathbf{H}_2 \mathbf{O} - \langle \mathbf{H}_2 \mathbf{O} \rangle_{\mathrm{apr}}(z)}{\sigma_{\mathrm{apr}}(z)}\right]^2\right\}.$$
(13)

Здесь средний профиль $\langle H_2 O \rangle_{apr}(z)$ и дисперсия $\sigma^2_{apr}(z)$ получены усреднением профилей концентрации водяного пара, измеренных MLS Aura в дневное время в период с 1 по 31 августа 2009–2014 годов в диапазоне широт $55 \div 65^{\circ}$ с. ш.

В первом случае выбор функции $P(\mathbf{u}^{(0)}, \mu)$ учитывал только естественное требование неотрицательности концентраций малых газовых составляющих:

$$P(\mathbf{u}^{(0)}, \mu) = \begin{cases} 1, & \text{если для всех } j \ \{u_j^{(0)}, \mu\} \ge 0; \\ 0, & \text{в противном случае.} \end{cases}$$
(14)

Полученная в результате вычислений с использованием условия (14) плотность вероятности концентрации паров воды $P(H_2O \mid X)$ является унимодальной для всех значений высот. При сравнительно небольших длинах исходного временно́го ряда концентрации озона, например при L = 3(см. рис. 2*a*), она близка к логнормальному распределению, которое при увеличении *L* стремится



Рис. 2. Плотность вероятности концентрации паров воды при z = 50 км, восстановленная по нескольким значениям концентрации озона с дисперсией шума 11 %. Пунктирной линией показано «истинное» значение параметра $H_2O = 8,04$ ppmv, использованное при расчёте. На панели a L = 3, соответствующие моменты времени 8, 13 и 18 ч, $H_2O = 8,04$ ppmv, $\sigma_{H_2O} = 4,73$ ppmv; на панели $\delta L = 11$, моменты времени 8, 9,.., 18 ч, $\langle H_2O \rangle = 10,41$, $\sigma_{H_2O} = 2,13$ ppmv

трансформироваться в нормальное (см. рис. 26). Поэтому в последующем анализе мы ограничились рассмотрением двух моментов этих распределений — медианы $\langle H_2 O \rangle_{med}$ и дисперсии $\sigma_{H_2O}^2$.

На рис. За, б представлены результаты восстановления концентрации паров воды по модельным зашумлённым рядам измерений концентрации озона с длиной L = 11, отвечающим моментам локального времени 8, 9,..., 18 ч. Величины измерительных шумов соответствовали точности измерений концентрации озона приборами OZORAM и GROMOS при времени накопления и усреднения микроволновых спектров собственного излучения атмосферы 1 час. Можно видеть, что в диапазоне высот приблизительно от 60 до 70 км (до 75 км для GROMOS) относительная дисперсия $\sigma_{\rm H_2O}/{\rm H_2O}$ оказывается меньше, чем неопределённости исходных временны́х рядов $\sigma_{\rm OZORAM}$ и σ_{GROMOS} . В то же время на некоторых высотах (например, 50÷55 км и 70 км для прибора GROMOS) смещение медианы (H₂O)_{med} относительно истинного значения H₂O больше среднеквадратичного отклонения $\sigma_{\rm H_2O}$. Как показывают повторные расчёты, положение медианы распределения, а значит и величина смещённости, сильно зависит от конкретного используемого зашумлённого профиля концентрации озона, в то время как $\sigma_{\rm H_2O}$ на высотах до 75 км почти неизменна. На высоте 75 км повторные запуски алгоритма с параметрами прибора OZORAM $(\sigma_{\text{OZORAM}}(75 \text{ км}) \approx 41 \%)$ даже при одном и том же входном профиле $O_3(z)$ дают результаты, отличающиеся друг от друга на величину до 10 %. Последнее обстоятельство не удаётся устранить изменением параметров алгоритма Метрополиса.

Включение априорной информации в апостериорную функцию улучшает ситуацию. Локализация распределения с помощью (13) позволяет получить воспроизводимый результат восстановления даже при очень большой неопределённости входных данных на разумном количестве точек генерируемых ансамблей. Относительная погрешность восстановления на всех высотах значительно уменьшается (см. рис. 3*e*, *e*). Смещение медиан распределений также оказывается меньше, чем в предыдущем случае, при восстановлении по тем же зашумлённым рядам измерений. Несмотря на то, что по-прежнему средние характеристики распределений в принципе могут сильно меняться при смене входного профиля концентрации озона, смещённость возникает редко.

Ниже для краткости мы остановимся на более подробном анализе результатов восстановления неизмеряемых характеристик мезосферных фотохимических процессов применительно к первому озонометру. Рисунок 4 демонстрирует точность восстановления концентрации паров воды на разных высотах в зависимости от длины исходного временного ряда концентрации озона при

А. А. Нечаев, Т. С. Ермакова, М. Ю. Куликов



Рис. 3. Статистические моменты распределения концентрации паров воды, восстановленного по запумлённым временны́м рядам концентрации озона с длиной L = 11; величины шума отвечали точностям измерений концентрации озона приборами OZORAM (*a*, *s*) и GROMOS (*б*, *г*) соответственно. На панелях *s*, *г* распределения получены с использованием информативной априорной функции. Кривые 1 соответствуют $|\langle H_2 O \rangle_{med} - H_2 O |/H_2 O, 2 - \sigma_{O_3}/H_2 O, 3 - \sigma_{H_2 O}/H_2 O, 4 - |\langle H_2 O \rangle_{apr} - H_2 O |/H_2 O, 5 - \sigma_{apr}/H_2 O$

фиксированной величине всего рассматриваемого диапазона времён от 8 до 18 ч. Можно видеть, что практически во всех случаях, за исключением L = 9 на высоте 60 км и L = 11 на высоте 75 км, «истинное» значение концентрации паров воды H₂O лежит внутри границ $\langle H_2O \rangle_{med} \pm \sigma_{H_2O}$. Как и следовало ожидать, увеличение длины ряда приводит к уменьшению относительной неопределённости σ_{H_2O}/H_2O .

На рис. 5–9 представлены результаты восстановления временной эволюции основных динамических переменных МФХС при длине временно́го ряда исходных данных, равной 11. Можно видеть, во-первых, что в диапазоне высот 50÷70 км метод адекватно (как качественно, так и количественно) позволяет определять локальные концентрации данных компонент. Во-вторых, точность восстановления данных характеристик мезосферы, в том числе концентрации озона, оказывается в среднем заметно лучше (в несколько раз и более), чем шум измерений исходного временно́го ряда. В частности, величина относительной неопределённости $\sigma/\langle H \rangle$ выше 65 км может достигать 1 %. Очевидно, что такое рекордное качество восстановления динамических переменных МФХС является следствием того, что используемая фотохимическая модель существенно фильтрует исходные зашумлённые данные концентрации озона. Так, величина относительной неопределённости $\sigma/\langle O_3 \rangle$ на высотах нижней мезосферы варьируется от 2 % до 5 %,



Рис. 4. Зависимости характеристик дисперсии и медианы найденных функций плотности вероятности концентрации паров воды на разных высотах от длины исходного временного ряда концентрации озона. Кривые 1 соответствуют высоте 50 км, 2-55 км, 3-60 км, 4-65 км, 5-70 км, 6-75 км





Рис. 5. Восстановленная с использованием априорной информации временная эволюция концентрации атомарного кислорода на разных высотах. Штрихпунктирной линией показана «истинная» динамика данной компоненты, пунктирной линией с маркерами — $\langle O \rangle_{med}$, сплошные линии с маркерами обозначают границы коридора $\langle O \rangle_{med} \pm \sigma$

несмотря на то, что исходные данные этой компоненты были зашумлены с дисперсией 11÷16 %.

Выше 70 км качество восстановления постепенно ухудшается, и на 75 км локальные значения динамических переменных МФХС в первой половине светового дня могут заметно не соответствовать их истинным величинам, которые выпадают из интервала 2σ в окрестности среднего значения. Можно видеть, что при таких уровнях шума исходных данных результатам восстановления можно доверять только после примерно 12 часов локального времени.

А. А. Нечаев, Т. С. Ермакова, М. Ю. Куликов



Рис. 6. Восстановленная с использованием априорной информации временна́я эволюция концентрации озона O₃ на разных высотах. Штрихпунктирной линией показана «истинная» динамика данной компоненты, пунктирной линией с маркерами — $\langle O_3 \rangle_{med}$, сплошные линии с маркерами обозначают границы коридора $\langle O_3 \rangle_{med} \pm \sigma$



4. ОБСУЖДЕНИЕ И ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе представлен метод восстановления пространственно-временной эволюции концентраций малых примесей нижней и средней мезосферы по зашумлённым временным рядам концентрации озона, измеряемым наземными озонометрическими приборами, с помощью фотохимической модели данной области атмосферы. Результаты, показанные на рис. 2–9, позволяют сделать выводы о возможностях метода в случае использования реальных данных наблюдений. Во-первых, как было показано на модельных примерах, точность восстановления концентрации паров воды, рассчитанная на основе характеристик типичных озонометрических приборов и с использованием априорной информации, составляет (в случае длинных временны́х рядов измерений концентрации озона) примерно 1÷30 % в зависимости от высоты, что неплохо соответствует ошибкам непосредственных измерений этой компоненты (например, наземными микроволновыми приборами, измеряющими собственное излучение атмосферы в линиях паров воды 22 и 183 ГГц [14]). Следует отметить, что на станциях международной сети NDACC [14] осуществляются одновременные микроволновые измерения вертикальных профилей концентрации компонент О₃ и Н₂О в мезосфере. Использование таких данных в дальнейшем позволит экспериментально проверить точность предложенного метода путём сравнения восстановленных значений концентрации H₂O с результатами прямых измерений. Во-вторых, метод позволяет получить очень высокую точность восстановления концентраций атомарных кислорода и водорода, гидроксила и гидропероксида. Напомним, что с поверхности Земли данные компоненты на высотах мезосферы вообще не измеряются, а спутниковым приборам в настоящее время для измерений доступен лишь гидроксил. В-третьих, предлагаемый подход фактически позволяет проводить фильтрацию шума

А. А. Нечаев, Т. С. Ермакова, М. Ю. Куликов





Рис. 7. Восстановленная с использованием априорной информации временная эволюция концентрации атомарного водорода на разных высотах. Штрихпунктирной линией показана «истинная» динамика данной компоненты, пунктирной линией с маркерами — $\langle H \rangle_{med}$, сплошные линии с маркерами обозначают границы коридора $\langle H \rangle_{med} \pm \sigma$



Рис. 8. Восстановленная с использованием априорной информации временная эволюция концентрации гидроксила на разных высотах. Штрихпунктирной линией показана «истинная» динамика данной компоненты, пунктирной линией с маркерами — $\langle OH \rangle_{med}$, сплошные линии с маркерами обозначают границы коридора $\langle OH \rangle_{med} \pm \sigma$





Рис. 9. Относительная точность восстановления динамических переменных МФХС в зависимости от локального времени. Обозначения кривых такие же, как на рис. 4

микроволновых измерений концентрации озона на мезосферных высотах. В-четвёртых, обработка длинных (многосуточных) рядов концентрации озона в предположении неизменности профиля концентрации паров воды в течение каждых суток делает возможным восстановление медленной пространственно-временной эволюции концентрации паров воды.

Сравнительно недавно в ИПФ РАН создан уникальный спектрорадиометр — мобильный озонометр с цифровым анализатором спектра [17]. Текущие основные характеристики данного прибора: центральная частота 110,83604 ГГц, полоса анализа 1 ГГц, спектральное разрешение 61 кГц, число спектральных каналов 16 384, суммарный вес порядка 15 кг, типичное время накопления одного спектра, по которому далее проводится восстановление одного профиля концентрации озона, составляет примерно 15÷30 мин, полное энергопотребление не более 100 Вт. Он доведён до уровня экспедиционного, полностью автоматизированного прибора с уникальной системой ка-

либровки измеряемого сигнала по внутреннему, электрически управляемому эталону. В настоящее время проводятся работы по существенному снижению интегральной шумовой температуры, прежде всего за счёт использования новой антенной системы в виде конического гофрированного рупора с низким уровнем боковых лепестков и предусилителя на базе HEMT-микросхемы. Ожидается, что данный прибор позволит восстанавливать вертикальные профили концентрации озона с точностями, как минимум, на уровне прибора OZORAM. В дальнейшем для улучшения качества восстановления концентраций малых газовых составляющих планируется рассмотреть в рамках единой статистической процедуры описанный метод и задачу нахождения профилей концентрации озона по радиометрическим данным, когда исходной экспериментальной информацией служат непосредственно спектры собственного излучения атмосферы.

Работа выполнена при поддержке РНФ (соглашение 15–17–10024 от 4 июня 2015 года).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. Schmidlin F. J. // Geophys. Res. Lett. 1992. V. 19, No. 16. P. 1643.
- 2. http://andromeda.caf.dlr.de/ndmc.
- 3. Брасье Г., Соломон С. Аэрономия средней атмосферы. Л.: Гидрометеоиздат, 1987. 412 с.
- 4. Sandor B. J., Clancy R. T. // J. Geophys. Res. D. 1998. V. 103, No. D11. P. 13337.
- Takahashi H., Melo S. M. L., Clemesha B. R., et al. // J. Geophys. Res. D. 1996. V. 101, No. D14. P. 4033.
- 6. Gumbel J., Murtagh D. P., Espy P. J., et al. // J. Geophys. Res. A. 1998. V. 103, No. A10. P. 23 399.
- 7. Jucks K. W., Johnson D. G., Chance K. V., et al. // Geoph. Res. Lett. 1998. V. 25, No. 2. P. 3935.
- Grossmann K. U., Offermann D., Gusev O., et al. // J. Geophys. Res. 2002. V. 107, No. D23. P. 8173.
- Conway R. R., Summers M. E., Stevens M. H., et al. // Geophys. Res. Lett. 2000. V. 27, No. 17. P. 2613.
- 10. http://mls.jpl.nasa.gov.

- 11. http://saber.gats-inc.com/index.php.
- Куликов М. Ю., Фейгин А. М., Зоннеманн Г. Р. // Изв. вузов. Радиофизика. 2006. Т. 49, № 9. С. 760.
- 13. Kulikov M. Yu., Feigin A. M., Sonnemann G. R. // Atm. Chem. Phys. 2009. V. 9, No. 21. P. 8199.
- 14. http://www.ndsc.ncep.noaa.gov.
- Соломонов С. В., Гайкович К. П., Кропоткина Е. П. и др. // Изв. вузов. Радиофизика. 2011. Т. 54, №2. С. 113.
- 16. Тимофеев Ю. М., Косцов В. С., Поберовский А. В. и др. // Вестник СПбГУ. Серия 4. Физика и химия. 2008. № 4. С. 44.
- 17. Красильников А. А., Куликов М. Ю., Кукин Л. М. и др. // Изв. вузов. Радиофизика. 2013. Т. 56, № 8–9. С. 699.
- Куликов М. Ю., Красильников А. А., Швецов А. А. и др. // Изв. вузов. Радиофизика 2015. Т. 58, №6. С. 454.
- 19. Куликов М.Ю., Мухин Д.Н., Фейгин А.М. // Изв. вузов. Радиофизика. 2009. Т.52, №9. С. 742.
- 20. Sonnemann G., Kremp C., Ebel A., Berger U. // Atmos. Env. 1998. V. 32, No. 18. P. 3157.
- 21. Palm M., Hoffmann C. G., Golchert S. H. W., et al. // Atmos. Meas. Tech. 2010. V. 3, No. 6. P. 1533.
- 22. Studer S., Hocke K., Schanz A., et al. // Atmos. Chem. Phys. 2014. V. 14, No. 12. P. 5905.

- 23. Tarantola A. Inverse problem theory: methods for data fitting and model parameter estimation. Amsterdam: Elsevier, 1987. 613 p.
- 24. http://www.ndsc.ncep.noaa.gov.

Поступила в редакцию 22 июня 2015 г.; принята в печать 25 ноября 2015 г.

DETERMINATION OF THE TRACE-GAS CONCENTRATIONS FROM THE TIME SERIES OF OZONE CONCENTRATION AT THE ALTITUDES OF THE LOWER AND MIDDLE MESOSPHERE

A. A. Nechaev, T. S. Ermakova, and M. Yu. Kulikov

We present a statistical (Bayesian) procedure for retrieving the concentrations of the most important mesospheric trace gases at the altitudes 50–75 km using a photochemical model on the basis of the time series of ozone concentration, which were measured during the daylight hours using the ground-based passive microwave devices. Using the model noisy time series of ozone concentration with allowance for the realistic accuracy of its measurements in mesosphere, which is ensured by the available ozonometers, the accuracy of retrieving the non-measurable of mesosphere is studied depending on the time-series altitude and length.