

Федеральное государственное
бюджетное научное учреждение
«Федеральный исследовательский центр
Институт прикладной физики
Российской академии наук»

на правах рукописи

Беликович Михаил Витальевич

Развитие радиофизических методов анализа данных
дистанционного зондирования для исследования и
прогноза атмосферных явлений

1.3.4 – радиофизика

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель
доктор физико-математических наук
Фейгин Александр Маркович

Нижний Новгород – 2022

Оглавление

Введение	4
1 Развитие методов обработки данных дистанционного зондирования нижней атмосферы	18
1.1 Спектрорадиометр RPG-НАТPRO	18
1.2 Валидация моделей атмосферного поглощения по данным одновременных микроволновых и радиозондовых измерений	19
1.3 Сверхкраткосрочный прогноз грозových штормов по данным микроволновых и радиозондовых измерений с помощью индексов конвективной неустойчивости атмосферы	39
1.3.1 Прогноз гроз, индексы конвективной неустойчивости атмосферы	39
1.3.2 Расчет индексов и определение их предсказательной способности	40
1.3.3 Сравнение индексов, полученных по радиозондовым и микроволновым данным	44
1.4 Выводы главы	51
2 Исследование химического /фотохимического равновесия малых примесей мезосферы – нижней термосферы	52
2.1 Введение	52
2.2 Общий подход к исследованию условия равновесия малых примесей атмосферы	55
2.3 Описание используемой глобальной 3D химико-транспортной модели МНТ	57
2.4 Исследование химического равновесия ночного озона в задаче восстановления O по данным SABER /TIMED	60
2.5 Проверка критерия химического равновесия ночного озона	64
2.6 Замечание о способе представления результатов	73
2.7 Исследование фотохимического равновесия дневного озона	74

2.7.1	Сравнительный анализ основных стоков озона по данным моделирования	74
2.7.2	Анализ влияния неучета реакции $H+O_3 \rightarrow OH+O_2$ на качество восстановления O, H, OH, HO ₂ и полной скорости химического нагрева по данным SABER/TIMED	80
2.8	Исследование совместного фотохимического равновесия дневных O ₃ , OH и HO ₂	90
2.9	Выводы главы	92
3	Модернизация метода статистической оценки качества одновременных измерений нескольких атмосферных компонент при условии их фотохимического равновесия.	93
3.1	Метод статистической оценки качества данных измерений малых примесей мезосферы, основанный на учете фотохимической связи между компонентами	94
3.2	Неоднозначность построения априорной функции распределения: парадокс Бореля – Колмогорова	97
3.3	Результаты применения различных вариантов апостериорной функции к обработке симулированных данных измерений	101
3.4	Результаты применения различных вариантов апостериорной функции к обработке данных измерений MLS/Aura	105
3.5	Выводы главы	113
	Заключение	114
	Приложения	117
A	Модели поглощения атмосферного воздуха MPM1, MPM2 и MPM2a . .	117
B	Оценка величины возможного отклонения профиля температуры в разделе 1.2	119
	Список публикаций по теме диссертации	121
	Литература	123

Введение

Актуальность работы

В настоящий момент дистанционное зондирование является важнейшим источником данных об атмосфере Земли. Происходит усовершенствование старых технологий измерений, активно разрабатываются и вводятся в строй дистанционные приборы на новых принципах, по всему миру развиваются сети станций наземных наблюдений. В особенности, следует отметить бурный рост числа спутниковых программ по исследованию атмосферы Земли. Эта деятельность приводит к стремительному росту накапливаемых объемов экспериментальной информации, поэтому получение новых знаний об атмосфере Земли требует совершенствования методов обработки данных дистанционного зондирования. Можно выделить следующие основные пути решения этой проблемы:

1. Адаптация разработанных ранее методов обработки информации для данных, получаемых новыми приборами;
2. Валидация существующих и разрабатываемых физических и физико-химических моделей различных атмосферных процессов;
3. Совершенствование существующих и разработка новых непрямых методов получения данных о неизмеряемых или плохо измеряемых характеристиках атмосферы.

Есть, по крайней мере, две области земной атмосферы, где проблема совершенствования методов обработки данных дистанционного зондирования особенно актуальна. Нижняя часть атмосферы, тропосфера (0-10 км в средних широтах), непосредственно влияет на повседневную жизнь людей. Погодные условия имеют большое значение для жизни и здоровья человека, оказывают значительное влияние на сельское хозяйство, транспорт, коммунальные службы и т.д. Измерения профилей основных характеристик тропосферы (температуры, давления и влажности) являются необходимой составляющей численного прогноза погоды, поэтому развитие методов измерения

этих характеристик, тем более дистанционных, актуально само по себе. Однако есть области, в частности, наукастинг (сверхкраткосрочный прогноз погоды с заблаговременностью до 6-12 часов) и авиационная безопасность, где дистанционные измерения характеристик тропосферы с высоким временным разрешением особенно востребованы. Успешные сверхкраткосрочные прогнозы, помимо значительного повышения авиационной безопасности (по данным ИКАО примерно 50% летных происшествий в РФ в той или иной степени связано с неблагоприятными погодными условиями [1]), способствуют существенному снижению убытков аэропортов от опасных метеоявлений. Например, по оценкам экспертов, правильный прогноз только одного предиктанта (высоты нижней границы облачности) с заблаговременностью всего 30 мин совокупно дал бы аэродромам США экономию \$500–850 млн в год [1], поэтому исследования в этих направлениях особенно актуальны.

В недавних отчетах Национального Совета по науке (США) было отмечено, что непрерывные измерения профилей характеристик тропосферы наземными приборами с высоким пространственно-временным разрешением являются наиболее удобным и экономичным методом для повышения точности локальных прогнозов погоды [2, 3]. В современных системах наукастинга (например, в CAN-Now (Канада), AWDSS (ОАЭ) и др.) широко применяются коммерческие микроволновые спектрометрические приборы MP3000A Radiometrics Corporation (США) и RPG-NATPRO Radiometer Physics GmbH (Германия). Данные приборы (единственные на рынке в настоящее время) непрерывно измеряют спектры собственного излучения атмосферы в 5 мм полосе поглощения/излучения молекулярного кислорода в диапазоне частот 51–59 ГГц. По этим данным определяются (восстанавливаются) профили температуры и влажности в диапазоне высот 0–10 км с высоким пространственным (до 10 м) и временным (1–2 мин) разрешением. Процедура восстановления подразумевает использование модели распространения излучения атмосферы в миллиметровом диапазоне длин волн (например, модель Либбе-Розенкранца [4–7]) и приближения гидростатики для профилей температуры и давления. Микроволновой мониторинг температуры применяется для прогноза туманов [8–10], погоды в аэропортах [8–10], гроз и конвективных штормов [11], а также для метеорологического обеспечения крупных международных событий, в частности, олимпиад [12].

Тем не менее, на сегодняшний день остается актуальной проблема повышения точности микроволновых измерений данных приборов, прежде всего, температуры. Недостаток точности измерений негативным образом сказывается на качестве прогноза опасных конвективных явлений [13]. Так, в работе [14] сравнение данных прибора RPG-NATPRO с данными радиозондовых наблюдений показывает, что точность измерений температуры оказывается существенно хуже (в среднем по высоте на 4–5

К) заявленной производителем. Основные составляющие бюджета ошибок измерений температуры включают как ошибки сглаживания, привнесенные процедурой восстановления, так и ошибки, связанные со спектроскопическими неопределенностями. В связи с этим актуально как развитие алгоритмов восстановления, так и уточнение спектроскопических моделей.

Другая актуальная проблема – это собственно сверхкраткосрочный прогноз. Наиболее опасные метеорологические явления, в частности, грозные штормы, представляют существенные сложности для моделей численного прогноза погоды, поскольку обычно эти явления развиваются на малых пространственных (1–10 км) и временных (1–12 часов) масштабах. Такие масштабы, как правило, являются подсеточными в моделях прогноза погоды. Один из основных методов сверхсрочного прогноза гроз основан на использовании индексов конвективной неустойчивости атмосферы [15–20], которые рассчитываются по данным измерений профилей характеристик тропосферы. Изначально, эти индексы создавались для прогноза по данным радиозондовых измерений, которые обычно осуществляется два раза в сутки (в 0 и 12 UTC). Развитие микроволнового наземного зондирования открывает новые возможности применения этих индексов в интересах наукастинга ввиду гораздо более высокого временного разрешения микроволновых данных. В частности, является актуальной задача адаптации старых индексов конвективной неустойчивости или разработки принципиально новых предиктантов, учитывающих указанные особенности результатов микроволнового зондирования тропосферы. Один из первых шагов в этом направлении – оценка предсказательных возможностей современных индексов, вычисленных по микроволновым данным – является целью данной диссертации.

Развитие дистанционных методов мониторинга физико-химических процессов на высотах мезосферы – нижней термосферы (МНТ, 50–100 км) является актуальным с фундаментальной точки зрения, поскольку МНТ остается наименее изученной областью атмосферы, но особую важность представляют практически значимые аспекты исследования области МНТ. Низкие температуры (на высотах 80–90 км достигаются самые низкие температуры в атмосфере Земли: до 100 К и ниже) и концентрации газов делают область особенно восприимчивой к процессам, проходящим в нижележащих слоях. Так, климатические изменения, мониторинг которых является особенно актуальным в настоящее время, на высотах МНТ выглядят существенно заметней, чем в нижней атмосфере. Согласно расчетам [21], удвоение концентрации метана и углекислого газа относительно уровня 1950-х гг. привело к снижению температуры мезосферы на 10 К и уменьшению концентрации воздуха в МНТ до 40%. Согласно экспериментальным данным [22], скорость уменьшения температуры мезосферы во второй половине XX века достигала 0,5–1 К/год. Напомним, что

наблюдаемые климатические измерения средней температуры поверхности Земли составляют всего 1,5–2 К за период с 1850 по 2020 год. Таким образом, нацеленное исследование характеристик протекающих в МНТ процессов является перспективным с точки зрения выявления индикаторов и/или предикторов изменений состояния всей атмосферы, вызванных как естественными, так и антропогенными факторами.

В силу вышесказанного, в последнее время на изучение МНТ области направлены значительные усилия научного сообщества. Ее химический состав, температурный режим, динамические и химические процессы, а также энергетический баланс интенсивно изучаются в последнее два десятилетия крупными научными международными объединениями (например, Network for the Detection of Mesospheric Change [23]) и спутниковыми кампаниями (SABER/TIMED, MLS/Aura, SCIAMACHY-GOMOS-MIPAS/ENVISAT, OSIRIS/ODIN, AIM и др.). При этом основным источником информации является дистанционное зондирование. Ракетные *in situ* (контактные) измерения незаменимы в исследовании данной области, но в силу чрезвычайно высокой стоимости систематические измерительные кампании осуществляются слишком редко. Дистанционные измерения характеристик МНТ, как правило, основаны на пассивном приеме излучения атмосферы в видимом, инфракрасном или микроволновом диапазоне. Поэтому они сопряжены, во-первых, с решением некорректных обратных задач ввиду того, что принимаемый сигнал является интегральным, приходящим с широкого диапазона высот, и, вообще говоря, зашумлен, во-вторых, с использованием дополнительных априорных приближений, о, например, фотохимическом и химическом равновесии некоторых малых газовых составляющих. Искажения, связанные с систематическими ошибками этих приближений или их полной некорректностью, могут существенно влиять на глобальные распределения измеряемых характеристик МНТ. В силу вышесказанного, развитие методов оценки систематических ошибок и проведение ревизии используемых приближений являются важными и актуальными задачами исследования МНТ.

Следует подчеркнуть, что различные методы, предложенные и примененные в диссертации для исследования процессов, протекающих в нижней и средней атмосфере, объединяет общий *радиофизический подход*, основанный на теории распространения волн в неоднородных средах, алгоритмах решения некорректных обратных задач, байесовом подходе к оценке статистических гипотез, методах построения и анализа математических моделей нелинейно-динамических систем, адекватных исследуемой природной системе.

Цели и задачи работы

Целью данной работы является развитие методов обработки результатов дистанционного зондирования нижней и средней атмосферы. Для достижения указанных целей был поставлен и решён ряд задач:

1. Валидация ряда современных моделей атмосферного поглощения в диапазоне 20–60 ГГц по данным одновременных микроволновых и радиозондовых измерений тропосферных профилей температуры и водяного пара.
2. Оценка качества сверхкраткосрочного прогноза грозы по данным пассивных микроволновых измерений тропосферных профилей температуры и водяного пара с помощью индексов конвективной неустойчивости атмосферы. Сравнение с результатами прогноза по данным радиозондовых измерений.
3. Разработка общего подхода для исследования применимости условия химического/фотохимического равновесия малых газовых составляющих атмосферы.
4. Исследование условия равновесия озона в ночное и дневное время на высотах МНТ, которое широко используется для восстановления пространственно-временных распределений ночных концентраций О и Н по данным ракетных и спутниковых измерений. Исследование выполнимости тройного фотохимического равновесия ОН, NO₂ и O₃ в дневное время суток.
5. Усовершенствование разработанного ранее метода статистической оценки качества одновременных измерений нескольких атмосферных компонент при условии их фотохимического равновесия.

Основные результаты

1. На основании многолетних одновременных микроволновых и радиозондовых наблюдений над Нижним Новгородом, проведен анализ соответствия между наблюдаемыми микроволновыми спектрами яркостной температуры в диапазоне 20–60 ГГц и результатами расчета этих спектров с помощью ряда современных моделей поглощения микроволнового излучения в атмосфере. В случае зондирования в зенит обнаружено, что: (1) все используемые варианты модели МРМ (Microwave Propagation Model) дают существенное (до 2 К) систематическое смещение спектров яркостной температуры в диапазоне 51–54 ГГц; (2) модель поглощения атмосферного воздуха, построенная на основе формализма

ECS (Energy Corrected Sudden), наилучшим образом соответствует натурным наблюдениям в этом диапазоне: максимальное смещение между измеренными и рассчитанными спектрами яркостных температур составляет не более 0,6 К.

2. Проведен анализ прогноза грозовых событий над Нижним Новгородом в 2014–2018 гг. по 15 используемых в настоящее время прогностическим индексам конвективной неустойчивости атмосферы, определенным по данным пассивных микроволновых измерений тропосферных профилей температуры и водяного пара и по данным радиозондовых измерений этих же характеристик атмосферы на метеорологической станции Росгидромета. Для каждого индекса проведена сравнительная оценка качества прогнозирования грозы с заблаговременностью 12 часов. Установлено, что для всех индексов вероятность детектирования грозы по микроволновым данным выше, чем по радиозондовым.
3. Разработан общий подход к исследованию применимости условия химического/фотохимического равновесия малых газовых составляющих атмосферы, основанный на анализе нелинейной мультимасштабной динамики трехмерных химико-транспортных моделей. Он включает в себя: (1) определение с помощью данных моделей пространственно-временных зон, где эволюция интересующей компоненты происходит вблизи мгновенного устойчивого положения равновесия; (2) вывод приближенных аналитических соотношений, определяющих положение границы зон равновесия на основании имеющихся данных измерений и позволяющих контролировать ошибки применения условия равновесия для восстановления неизмеряемых атмосферных характеристик; (3) проверку соответствия найденных приближенных соотношений границам пространственно-временных зон равновесия с помощью трехмерного химико-транспортного моделирования.
4. С помощью трехмерного химико-транспортного моделирования области МНТ с использованием различных современных моделей: (1) определены пространственно-временные зоны равновесия озона в ночное время; (2) показано, что полученные условия равновесия хорошо (как качественно, так и количественно) воспроизводит нижнюю границу зоны равновесия, положение которой варьируется в зависимости от времени года и широты, и которая, в свою очередь, коррелирует с положением максимума объемной скорости эмиссии возбужденного гидроксила, измеряемой современными спутниковыми приборами; (3) продемонстрировано, что в дневное время условия фотохимического равновесия озона и совместного равновесия OH , HO_2 и O_3 выполняются с точностью не хуже, чем 3–4% во всей мезосфере – нижней термосфере.

5. С помощью трехмерного химико-транспортного моделирования и обработки данных многолетних спутниковых измерений SABER/TIMED проведен анализ качества восстановления дневных распределений O, N, OH, NO₂ и скорости химического нагрева на высотах МНТ с помощью используемого в настоящее время приближенного условия фотохимического равновесия дневного озона, учитывающего химический сток этой компоненты только за счет фотодиссоциации. Показано, что (1) данное приближенное условие обеспечивает восстановление высотного распределения концентрации N с точностью не хуже 10%; (2) приводит к существенному (до ~50–70%) систематическому занижению среднемесячных и среднегодовых концентраций O на высотах 75–90 км; (3) завышает (до ~50–85%) значения концентраций OH и NO₂ и занижает (до ~35–40%) скорость химического нагрева МНТ; (4) учет дополнительного стока озона за счет реакции $N+O_3 \rightarrow O_2+OH$ обеспечивает корректное восстановление как распределений концентраций всех перечисленных малых газовых составляющих, так и скорости химического нагрева области МНТ.
6. Проведено усовершенствование метода статистической оценки качества одновременных измерений нескольких атмосферных компонент при условии их фотохимического равновесия на примере данных измерений OH, NO₂ и O₃ на высотах мезосферы. Обнаружено, что в процедуре построения совместной апостериорной плотности вероятности этих величин есть неоднозначность, связанная с множественностью возможных способов предельного перехода от трехмерного вероятностного распределения к двумерному, которая существенно влияет на статистические средние и приводит к неизбежной систематической ошибке. Тестирование на искусственно зашумленных модельных данных OH, NO₂ и O₃, имитирующих идеальные (несмещенные) измерения, показало, что выбор предложенного в диссертации предельного перехода типа «одеяло» приводит к наименьшим систематическим ошибкам метода. Продемонстрировано, что вертикальные распределения концентрации NO₂, полученные в предшествующих работах на основании данных спутниковых измерений MLS/Aura с помощью условия тройного равновесия, содержат систематическое смещение, значительно превышающее погрешность данного метода, что приводит, в частности, к существенной ошибке в определении положения максимума концентрации этой компоненты на высотах мезосферы.

Научная новизна

Все вышеупомянутые результаты являются новыми. Отметим основные из них:

Впервые предложена спектроскопическая модель, которая демонстрирует сравнительно небольшое смещение между измеренными и рассчитанными яркостными температурами в 5мм полосе собственного излучения атмосферного кислорода.

Впервые проведена оценка качества прогноза опасных метеорологических явлений по данным микроволновых измерений.

Впервые определены пространственно-временные зоны равновесия ночного озона и показано, что ранее предложенный критерий равновесия хорошо (как качественно, так и количественно) воспроизводит нижнюю границу области этого равновесия. Так же впервые показано, что дневное фотохимическое равновесие озона и совместное равновесие OH , HO_2 и O_3 выполняется с точностью не хуже, чем 3-4% во всей МНТ.

Впервые показано, что неучет реакции $\text{H} + \text{O}_3 \rightarrow \text{O}_2 + \text{OH}$ в условии фотохимического равновесия дневного озона существенно проявляется в восстанавливаемых распределениях O , OH , HO_2 и скорости химического нагрева воздуха.

Впервые обнаружено, что в процедуре построения совместной апостериорной плотности вероятности нескольких атмосферных компонент при условии их равновесия есть неоднозначность, связанная с выбором способа предельного перехода от трехмерного вероятностного распределения к поверхностному. Впервые предложен предельный переход типа «одеяло», который приводит к наименьшим систематическим ошибкам метода статистической оценки качества одновременных измерений этих компонент.

Практическая значимость

Результаты валидации моделей атмосферного поглощения данными микроволновых и радиозондовых измерений указывают направление развития спектроскопических моделей, что в итоге приведет к минимизации ошибки восстановления термической структуры атмосферы.

Результаты исследования предсказательных характеристик индексов конвективной неустойчивости атмосферы позволяют расширить применение микроволновых профилометров для наукастинга опасных метеорологических явлений, что особенно актуально и экономически выгодно для работы аэропортов, организации различных социальных мероприятий и прочее. В целом, данный результат является одним из первых свидетельств того, что сравнительно дешевые, полностью автоматизированные, малогабаритные, не требующие постоянного обслуживания и расходных материалов

современные микроволновые приборы, измеряющие профили параметров атмосферы с временным разрешением несколько минут, готовы для использования в качестве сетевого прибора на метеорологических станциях, осуществляющих ежедневный мониторинг атмосферы в интересах прогноза погоды.

Предложенный подход к исследованию применимости условия химического / фотохимического равновесия малых газовых составляющих атмосферы открывает широкий спектр возможностей разработки и последующего применения методов восстановления неизмеряемых или плохо измеряемых характеристик тропосферы и стратосферы по наземным и спутниковым данным дистанционного зондирования. Многочисленные результаты предшествующих зарубежных исследований, в которых условие равновесия ночного и дневного озона на высотах МНТ использовалось некорректным образом, подлежат пересмотру.

Проведенные теоретические разработки метода статистической оценки качества одновременных измерений нескольких атмосферных компонент полезны для развития других методов статистической обработки больших объемов данных дистанционного зондирования, использующих априорные ограничения в виде локальных связей между измеряемыми величинами.

Положения выносимые на защиту

1. Модель ECS (Energy Corrected Sudden) поглощения микроволнового излучения в атмосферном воздухе наилучшим образом соответствует натурным наблюдениям спектра собственного излучения атмосферы в частотном диапазоне 50-60 ГГц.
2. Качество сверхкраткосрочного прогноза грозы по данным пассивных микроволновых измерений профилей тропосферных характеристик с помощью индексов конвективной неустойчивости атмосферы соответствует или превышает качество прогноза по данным радиозондовых измерений.
3. Получено аналитическое соотношение, определяющее положение пространственно-временной зоны равновесия ночного озона в области МНТ. Положение максимума измеряемой объемной скорости эмиссии возбужденного гидроксила можно использовать в качестве эмпирического индикатора положения нижней границы этой зоны.
4. Дневное фотохимическое равновесие озона и совместное равновесие OH , HO_2 и O_3 выполняется с точностью не хуже, чем 3-4% во всей МНТ.

5. Для корректного восстановления дневных распределений O , OH , HO_2 и скорости химического нагрева воздуха в мезосфере необходим учет реакции $H+O_3 \rightarrow O_2+OH$ в условии фотохимического равновесия дневного озона.
6. Существующий метод статистической оценки качества одновременных измерений нескольких атмосферных компонент при условии их фотохимического равновесия является неоднозначным с точки зрения выбора апостериорной плотности вероятности, что связано с парадоксом Бореля – Колмогорова. Предложенный в диссертации переход от трехмерного вероятностного распределения к двумерному приводит к наименьшим систематическим ошибкам данного метода.

Методы и степень достоверности результатов

Для решения задач работы применялись методы теории распространения излучения в атмосфере, решения некорректных обратных задач, формализм анализа ошибок. Применение методов сопряжено с активным использованием математического анализа, линейной алгебры и теории вероятностей. Реализации процедур восстановления и численное трехмерное моделирование сопряжены с использованием разнообразных численных методов, упомянутых в основном тексте диссертации. Все полученные результаты обладают высокой степенью достоверности и являются обоснованными. Достоверность полученных результатов обеспечивается применением признанных методов и оригинальных подходов, взаимно дополняющих друг друга. Адекватность используемых моделей продемонстрирована в большом количестве предшествующих работ. Результаты по теме диссертации опубликованы в рецензируемых российских и зарубежных научных журналах, докладывались на международных и всероссийских конференциях, обсуждались на семинарах ИПФ РАН.

Структура диссертации

Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения и списка литературы. Список работ по теме диссертации включает 11 статей. Список литературы содержит 149 наименований. Общий объем работы составляет 141 страниц и включает 42 рисунка и 9 таблиц.

Первая глава посвящена развитию методов обработки данных микроволнового пассивного зондирования нижней атмосферы.

В разделе 1.1 приведено описание микроволнового профилометра RPG-НАТПРО производства Radiometer Physics GmbH, на основе данных которого получены результаты главы.

В разделе 1.2 производится сравнение различных моделей поглощения атмосферного воздуха на основе длительного ряда одновременных микроволновых и радиозондовых измерений. Производятся симуляции¹ микроволнового зондирования прибором НАТПРО, использующие радиозондовые профили в качестве входных данных. Результаты симуляций (яркостные температуры) сравниваются с соответствующими реальными измерениями микроволнового профилометра. Проводится тщательный анализ бюджета ошибок. По его результатам делается вывод о спектроскопической природе наблюдаемой разности между симуляциями и наблюдениями.

Раздел 1.3 посвящен вычислению индексов конвективной неустойчивости атмосферы на основе микроволновых данных НАТПРО и их последующему сравнению с аналогичными индексами на основе радиозондовых данных. Раздел начинается с короткого введения. Описывается методика оценки предсказательной способности индексов. Производится сравнение предсказательных характеристик различных индексов, вычисленных как по микроволновым, так и по радиозондовым данным.

В разделе 1.4 содержатся выводы главы 1.

Вторая глава посвящена исследованию фотохимического равновесия малых примесей мезосферы – нижней термосферы, в контексте практического использования в спутниковом зондировании. Рассматриваются дневной и ночной озон, а также тройное равновесие дневных O_3 , OH и HO_2 .

В разделе 2.1 приводится обзор использования предположения о химическом /фотохимическом равновесии компонент в спутниковом зондировании мезосферы – нижней термосферы.

В разделе 2.2 описана методика исследования фотохимического равновесия на основе трехмерного химико-транспортного моделирования, используемая в главе 2.

В разделе 2.3 содержится описание химико-транспортной модели, используемой в главе 2.

Раздел 2.4 посвящен исследованию химического равновесия ночного озона в задаче восстановления O по данным SABER /TIMED. Приведено развернутое описание методики определения ночного атомарного кислорода по данным прибора SABER, химическое равновесие озона для которого является одним из основных предположений. Определена граница применимости этого предположения по результатам

¹Здесь и далее будем называть вычисления спектров собственного излучения атмосферы с помощью модели переноса излучения, включающую модель поглощения атмосферного воздуха, симуляциями.

химико-транспортного моделирования с использованием различных моделей.

В разделе 2.5 изложены результаты по проверке критерия химического равновесия ночного озона. На результатах численного моделирования показано, что граница равновесности ночного озона коррелирует с положением максимума возбужденного гидроксила. С помощью трехмерного моделирования была продемонстрирована эффективность аналитического критерия.

В разделе 2.6 указано, что способ представления результатов в виде зональных средних, используемый во второй главе, обладает определенными недостатками.

Раздел 2.7 посвящен исследованию фотохимического равновесия дневного озона. На основе численного моделирования определяется точность выполнения фотохимического равновесия. Обсуждается вклад в равновесие основных стоков дневного озона. С помощью моделирования показано, что вклад реакции с Н значителен и сравним со вкладом процессов фотодиссоциации (достигает 70% от последней). Проводится оценка влияния отсутствия учета этой реакции в процедуре определения дневных О, Н, ОН, НО₂ и на скорость химического нагрева по данным SABER/TIMED.

В разделе 2.8 проведено исследование совместного фотохимического равновесия дневных О₃, ОН и НО₂ на основе трехмерного химико-транспортного моделирования.

В разделе 2.9 содержатся выводы главы 2.

Третья глава посвящена развитию метода статистической оценки качества одновременных измерений нескольких атмосферных компонент при условии их фотохимического равновесия. Анализируются математические основы метода и предлагаются практические рекомендации, нивелирующие недостатки метода.

В разделе 3.1 описан метод статистической оценки качества данных измерений О₃, ОН и НО₂, основанный на учете фотохимической связи между компонентами, которая исследуется в разделе 2.8.

В разделе 3.2 описана неоднозначность в методе, связанная со способом построения условной плотности вероятности на множестве меры нуль. Приводятся альтернативные способы определения апостериорной плотности вероятности в методе, описанном в разделе 3.1, и показана их неэквивалентность. Найденная неоднозначность связана с различными способами введения условной вероятности на множестве меры нуль (парадокс Бореля – Колмогорова). Каждый способ соответствует определенному предельному переходу от трехмерной плотности вероятности к распределению на двухмерной поверхности. Предложен альтернативный способ, соответствующий переходу, названному «одеяло».

В разделе 3.3 на симулированных данных произведена оценка систематической ошибки метода для описанных в разделе 3.2 способов построения апостериорной плотности вероятности.

В разделе 3.4 произведена статистическая оценка качества одновременных спутниковых измерений O_3 , OH и HO_2 прибором MLS на спутнике Ауга с использованием различных способов построения апостериорной плотности вероятности. Выявлены значительные систематические ошибки в измерениях HO_2 на уровнях давления близких к 0,1 мБар.

В разделе 3.5 содержатся выводы главы 3.

Апробация результатов

Данная работа выполнена в Институте прикладной физики РАН. Ее результаты опубликованы в 11 ведущих рецензируемых российских и зарубежных журналах [A1–A11], обсуждались на семинарах ИПФ РАН, докладывались на многочисленных российских и международных конференциях: Генеральной Ассамблее Европейского союза наук о Земле (2014, 2016 гг., Вена, Австрия), 26-й Генеральной Ассамблее Международного Союза геодезии и геофизики IUGG (2015 г., Прага), 32-й IUGG Конференции по математической геофизике (2018 г., Нижний Новгород), Всероссийской школе-конференции молодых ученых «Состав атмосферы. Атмосферное электричество. Климатические процессы» (2011 г., Борок; 2012 г., Звенигород; 2013 г., Нижний Новгород; 2014 г., Борок; 2015 г., Шепси; 2016 г., Кстово; 2017 г., Борок), Научной школе «Нелинейные Волны» (2012, 2016, 2018 гг., Нижний Новгород), Всероссийской Открытой конференции «Современные проблемы дистанционного зондирования земли из космоса» (2018, 2019, 2020 и 2021 гг., Москва), 10-го Всероссийского семинара по радиофизике миллиметровых и субмиллиметровых волн (2016 г., Нижний Новгород), конференции молодых специалистов по проблемам гидрометеорологии и мониторинга окружающей среды (2013 г., Обнинск) и др.

Личный вклад автора

Все приведенные в диссертации результаты получены либо лично автором, либо при его непосредственном участии. Автор непосредственно занимался обработкой данных наземного и спутникового дистанционного зондирования, проводил численное и аналитическое исследование статистических методов обработки, осуществлял 3х мерное химико-транспортное моделирование и обрабатывал полученные результаты. В статьях [A2, A5, A8] вклад диссертанта был определяющим. В работах [A1, A3, A4, A9] вклад диссертанта заключался в результатах химико-транспортного моделирования и их обработке. В работах [A6, A10, A11] вклад диссертанта был равным с вкладом

первого автора работ. В работе [А7] диссертант осуществлял обработку микроволновых и радиозондовых данных, вычисление индексов и препроцессинг для определения качества прогноза гроз.

Благодарности

Диссертант сердечно благодарит всех коллег, родственников и друзей, которые помогали ему на этом долгом пути от начала научной работы до момента представления диссертации. Сложно перечислить всех по именам и адекватно описать вклад каждого из этих людей, поэтому приведенный ниже список благодарностей будет заведомо неполон. В первую очередь автор благодарит Куликова Михаила Юрьевича, который стал для автора старшим товарищем и наставником. Творческий союз с ним оказался наиболее плодотворным как в плане научных результатов, так и публикаций. Без его активного участия не обошлась публикация ни одной работы. Автор выражает признательность Александру Марковичу Фейгину за чуткое руководство и проявленное терпение, особенно в начале работы диссертанта. Также автор благодарит Михайло Григалашвили, открывшего для диссертанта тематику трехмерного химико-транспортного моделирования.

Глава 1

Развитие методов обработки данных дистанционного зондирования нижней атмосферы

1.1 Спектрорадиометр RPG-НАТPRO

Начиная с 2013 года, в ИПФ РАН проводится непрерывная экспериментальная кампания по дистанционному пассивному зондированию основных характеристик тропосферы посредством коммерческого спектрорадиометра НАТPRO-G3 (приставка G3 обозначает 3-е поколение прибора) производства Radiometer Physics GmbH. Прибор заключен во всепогодный корпус и установлен на открытой, специально для него сконструированной наблюдательной площадке института (см. рис. 1.1). Он



Рис. 1.1: Спектрорадиометр RPG-НАТPRO.

представляет собой два приемника, использующих одну антенную систему с возмож-

ностью сканирования по углу. Приемники построены по схеме прямого усиления [24]. Измеренный спектр излучения атмосферы в диапазоне 22–32 ГГц используется далее для извлечения информации о вертикальном распределении в тропосфере содержания водяного пара, а в диапазоне 51–59 ГГц – для восстановления вертикального профиля температуры (метод восстановления описан ниже по тексту). Спектр излучения анализируется в 7 спектральных каналах в каждом из диапазонов (см. табл. 1.1). Заявленная точность измерений (ее можно отождествить с шумом измерений) [25] составляет 0,1 К в диапазоне 22–32 ГГц и 0,2 К в диапазоне 51–60 ГГц, в то время как абсолютная точность (связанная, очевидно, с калибровкой) составляет 0,5 К. На рис. 1.2 показано расположение спектральных каналов этого прибора на смоделированном спектре собственного излучения атмосферы. Ширина диаграммы направленности антенны (по половине мощности) составляет $3,7^\circ$ в диапазоне 22–32 ГГц и $2,2^\circ$ в диапазоне 51–60 ГГц. Прибор также оснащен собственной метеостанцией.

Прибор обладает собственной процедурой восстановления атмосферных характеристик по радиометрическим данным (см. [26, 27]). Создание процедуры сводится к следующему. На основе имеющейся (за последние 10 лет) статистики радиозондовых измерений для конкретной местности производятся вычисления (симуляции) яркостных температур неба посредством модели переноса излучения. При этом значительное внимание уделяется аппроксимации структуры облачности (необходимой для симуляций) по радиозондовым данным. Полностью детали симуляций не раскрываются. Далее производится построение регрессионной модели (линейной или нелинейной) интересующей атмосферной характеристики (например, профиля температуры) от яркостных температур с учетом шума измерений. Конечному пользователю Radiometer Physics предоставляет набор готовых регрессионных моделей. Определение (восстановление) атмосферных профилей (температуры и водяного пара) и прочих характеристик производится путем применения соответствующих регрессионных моделей к радиометрическим данным (к яркостным температурам).

1.2 Валидация моделей атмосферного поглощения по данным одновременных микроволновых и радиозондовых измерений

В тропосферных измерениях посредством наземных микроволновых радиометров значительный вклад в дефект модели вносит так называемая спектроскопическая ошибка. Это систематическая (как и большинство ошибок, связанных с дефектом модели) ошибка, связанная с неточностью модели поглощения атмосферного воздуха.

Таблица 1.1: Частотные каналы НАТPRO-G3 производства Radiometer Physics GmbH

Центральная частота, ГГц	22,04	23,04	23,84	25,44	26,24	27,84	31,4
Ширина канала, ГГц	0,23	0,23	0,23	0,23	0,23	0,23	0,23
Центральная частота, ГГц	51,26	52,28	53,86	54,94	56,66	57,3	58
Центральная частота, ГГц	0,23	0,23	0,23	0,23	0.6	1	2

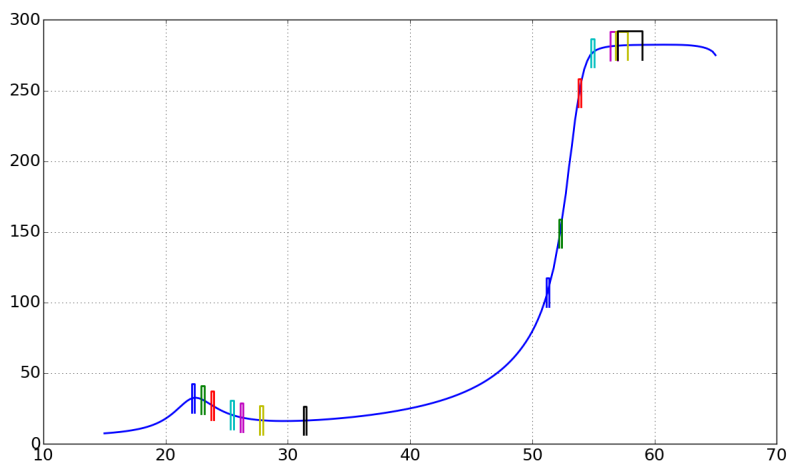


Рис. 1.2: Расположение спектральных каналов прибора НАТPRO-G3 на смоделированном спектре собственного излучения атмосферы.

Несмотря на то, что поглощение воздуха в микроволновом диапазоне исследовалось с начала XX века, современные модели не удовлетворяют точностям, необходимым в дистанционном зондировании. Критика существующих моделей идет как со стороны спектроскопического сообщества, так и со стороны ученых, занимающихся дистанционным зондированием. В частности, в ряде работ [28–33] производилось статистическое сравнение наблюдаемых спектров собственного излучения атмосферы с соответствующими симуляциями. Они (симуляции) производились посредством модели переноса излучения с использованием профилей температуры и влажности, полученных из радиозондовых данных или из моделей численного прогноза погоды (по сути из реанализа). Результаты сравнения, полученные в условиях различных географических пунктов, выявляют систематические различия, величина которых достигает нескольких кельвин на частоте 52 ГГц при зондировании в зенит. В то же время в работе [34], исходя из неопределенности спектроскопических параметров по состоянию на 2018 год, оценена возможная ошибка симуляций в диапазоне 20–60 ГГц. Ошибка имеет сильную частотную зависимость и достигает 3 К на частотах 51–52 ГГц. Следует отметить, что частоты 51–52 ГГц используются в пассивном микроволновом зондировании тропосферы, в частности, в микроволновом профилометре НАТПРО (см. подраздел 1.1).

Таким образом, проблема уточнения модели поглощения кислорода является актуальной и практически значимой задачей. Совместно со спектроскопической группой ИПФ РАН (в лице Серова Е.А., Макарова Д.С. и Третьякова М.Ю.) было принято решение исследовать систематическую разницу между симуляциями и наблюдениями в зависимости от применяемой модели поглощения. Исследования проводились на многолетнем массиве данных одновременных измерений посредством радиозондов и НАТПРО и, самое главное, с использованием различных моделей поглощения. Большая работа проведена для оценки влияния различных факторов помимо спектроскопической ошибки. Подобные оценки используются в анализе ошибок процедуры восстановления. По результатам исследований была опубликована статья [A8].

Рассматриваемый период наблюдений длился с осени 2013 до конца 2018 года. Измерения посредством НАТПРО проводились круглосуточно со специально оборудованной площадки в наблюдательном пункте ИПФ РАН, однако в силу ряда причин в измерениях есть некоторые пропуски. Каждые 20 минут проводились измерения в режиме сканирования по углу возвышения: 90° , 42° , 30° , $19,2^\circ$, $10,2^\circ$, и $5,4^\circ$, что соответствует зенитным углам 0° , 48° , 60° , $70,8^\circ$, $79,8^\circ$ и $84,6^\circ$. В остальное время проводились измерения в зенит каждые несколько секунд. Подробнее о приборе и его функционировании см. подраздел 1.1 и [25, 35]. Ближайшая аэрологическая станция Нижний Новгород (№27459, $56,26^\circ$ с.ш., 44° в.д) находится в 7 км от наблюдатель-

ного пункта ИПФ РАН. Радиозонды запускаются дважды в сутки: в 00 и 12 UTC (всемирное координированное время). По имеющейся информации для зондирования используются зонды АК2-02м [36], точность которых составляет 1 К по температуре и 7–15% по влажности. (Данные доступны на [37].) Разрешение по высоте варьируется в диапазоне 200–700 м.

В итоге был получен ансамбль одновременных измерений двумя методами. Результаты зондирования NATPRO в зенит усреднялись по 12-минутному интервалу, содержащему запуск радиозонда (6 минут до и после пуска). Одновременным результатом сканирования по углу прибора HARDPRO считался наиболее близкий к запуску радиозонда.

Симуляции проводились посредством вычисления следующего выражения, являющегося решением уравнения распространения излучения по лучу:

$$F(\nu, \xi) = T_{b0}(\nu) \exp(-\tau(z_\infty, \nu, \xi)) + \int_{z_0}^{z_\infty} \frac{\alpha(\nu, z)}{\sin \xi} \cdot T(z) \cdot \exp(-\tau(z, \nu, \xi)) dz, \quad (1.2.1)$$

$$\tau(z, \nu, \xi) = \int_{z_0}^z \frac{\alpha(\nu, z')}{\sin \xi} dz', \quad (1.2.2)$$

где $T_{b0}(\nu)$ – эффективная яркостная температура микроволнового фонового излучения (см. далее по тексту), ξ – угол возвышения, α – коэффициент поглощения атмосферного воздуха, он зависит от атмосферных характеристик: температуры, давления и состава воздуха. В данном случае мы рассматриваем только поглощение кислородом, азотом и водяным паром. Поскольку соотношение азота к кислороду можно считать постоянным до высоты порядка 80 км, в нашем случае будем считать α функцией температуры, давления и абсолютной влажности. О различных моделях для вычисления α речь пойдет ниже. В (1.2.1) T_{b0} – эффективная яркостная температура микроволнового фонового излучения, определяемая формулой

$$T_{b0}(\nu) = \frac{h\nu}{2k} \left(\frac{\exp(h\nu/kT_0) + 1}{\exp(h\nu/kT_0) - 1} \right), \quad (1.2.3)$$

где k – постоянная Больцмана; h – постоянная Планка; $T_0 = 2,725\text{K}$ температура космического фонового микроволнового излучения. Использование (1.2.3) связано с применением приближения Рэля – Джинса ($h\nu \ll kT$) и соответствующих поправок при калибровке. Подробнее этот вопрос рассмотрен в разделе 1.2.4 работы [38]. Наличие в (1.2.3) члена, похожего на выражение для нулевых колебаний вакуума, является результатом использования математического приближения и не несет в себе дополнительного физического смысла.

Яркостные температуры, измеряемые в диапазоне 50–60 ГГц, определяются в основном состоянием тропосферы. Однако сразу возникает вопрос, что считать верхним

пределом интегрирования в (1.2.1). Поскольку речь о значениях спектроскопической ошибки порядка Кельвина, необходимая точность симуляции составляет величину на порядок меньше, то есть десятые доли кельвина. В силу этого в симуляциях необходимо учитывать вклад вышележащих над тропосферой слоев атмосферы. Эти вопросы имеют большое значение для рассматриваемого исследования, поскольку они определяют критерий фильтрации по высоте зондовых данных. Чем выше высота, которую должен достигать радиозонд, тем меньше в нашем распоряжении данных радиозондирования. Для ответа на эти вопросы были проведены предварительные оценки с использованием зондовых профилей, достигающих 25 км. Меняя верхний предел интегрирования z_{∞} в (1.2.1), мы оценивали вклад вышележащей атмосферы, находя разность относительно случая $z_{\infty} = 25$ км. Наши оценки показали, что вклад атмосферы выше 15 км в среднем составляет 1 К, с изменчивостью (среднеквадратичное отклонение) менее 0,15 К. Таким образом, необходимо учитывать влияние атмосферы даже на высотах более 15 км. Однако, ввиду малой изменчивости, этот вклад можно параметризовать, либо для высот более 15 км в вычислении (1.2.1) воспользоваться модельным атмосферным профилем, например из модели NRLMSISE-00 [39]. Вклад атмосферы выше 10 км составляет в среднем 5 К, но его изменчивость достигает 1,2К. Очевидно, это определяется изменчивостью атмосферных профилей в эшелоне 10–15км, поэтому для точных симуляций необходимо использовать зондовые данные, достигающие 15 км. В результате в симуляциях до 15 км используются зондовые данные, а на высотах 18–80 км профили NRLMSISE-00 для соответствующего дня года, промежуток 15–18 км является переходным, где атмосферные профили сращиваются посредством косинусоидальной функции. Верхний предел интегрирования (1.2.1) $z_{\infty}=80$ км выбран сравнительно высоким для определения влияния средней атмосферы на симуляции в зависимости от положения спектральных каналов (см. далее). Интегрирование в (1.2.1) производится численно на фиксированной сетке с меняющимся по высоте разрешением, высоким разрешением в тропосфере и более низким в средней атмосфере. Точность численного интегрирования – выше 0,01 К, что позволяет не принимать ее во внимание в рассмотрении бюджета ошибок.

Коэффициент поглощения влажного воздуха рассчитывался с помощью четырех моделей поглощения. Первые три из них – это варианты модели MPM (Microwave Propagation model). Пользуясь аббревиатурами, введенными в [40], мы будем обозначать эти модели MPM1, MPM2, MPM2a. Модели различаются исключительно поглощением кислорода. Модель MPM1 является основной версией (версия 2018 года) модели MPM, разработанной Ф. Розенкранцем и Г. Либэ, доступной по адресу [6, 7]. Модель MPM2, опубликованная в [41], не только основана на более новых спектроскопических измерениях, но и имеет принципиальные отличия: она учиты-

вает столкновительное смешивание (collisional coupling) с поправками до второго порядка. В свою очередь модель MPM2a отличается от MPM2 только наличием множителя 1,00433 перед коэффициентом поглощения кислорода. Более развернуто о различии между этими моделями написано в приложении А. Четвертая модель – ECS [42] (Energy Corrected Sudden) существенно отличается от MPM как в учете столкновительного смешивания (в определении элементов матрицы столкновительно-релаксационного оператора), так и в приближениях, используемых в вычислениях (вычисление обратных матриц напрямую). Следует отметить, что вычислительная сложность рассматриваемых моделей сильно отличается: MPM2 требует примерно в 40 раз больше машинного времени, нежели MPM1, а ECS – более чем в 10^5 раз.

В дополнение к выше означенному требованию к зондовым данным (достижения высоты 15 км) необходимо ограничиться случаями ясного неба. На самом деле нет никакой принципиальной сложности включить в (1.2.1) учет воды в жидкой фазе. Более того, в промежуточных исследованиях, не вошедших в публикацию [40], это было сделано в попытке расширить приемлемую для симуляций базу данных. Проблема заключается в отсутствии данных о структуре облачности на луче прибора, а именно о содержании жидкой воды на определенной высоте (liquid water content – LWC). Даже если радиозонд позволял бы измерять структуру облачности, эти данные были бы мало актуальны ввиду удаленности зонда от прибора. Наличие облачности на луче прибора достаточно эффективно контролируются по показаниям NATPRO. Значение интегрального содержания воды в жидкой фазе в атмосфере LWP (Liquid water path – интеграл по высоте от LWC) измеряется путем анализа яркостных температур диапазона 22-32 ГГц. Считаем, что облачность отсутствует, если значение LWP менее 25 г/м^2 . Следуя [43], наличие облачности также контролировалось по стандартному отклонению яркостной температуры в канале 31,4 ГГц. Отсутствие облачности соответствовало стандартному отклонению менее 0,5 К на временном интервале 1 минута. В результате из 2235 случаев одновременных измерений посредством радиозондов и NATPRO случаю ясного неба и достаточной высоты подъема радиозонда соответствуют значительно меньшее число одновременных измерений. Кроме того, из полученного массива данных, следуя [33], были удалены случаи, соответствующие большим выбросам в разности между модельным и измеренными спектрами. Такие выбросы могут соответствовать закрытию луча обзора прибора или наличию влаги на микроволновом окне прибора. Удалялись выбросы, превышающие 3 стандартных отклонения разности между симуляциями и измерениями. В результате для исследования были отобраны 644 случая одновременного зондирования.

О том, как соотносятся симуляции посредством моделей MPM1, MPM2a с измеренными спектрами в случае зондирования в зенит, можно судить по точечной

диаграмме, представленной на рис. 1.3.

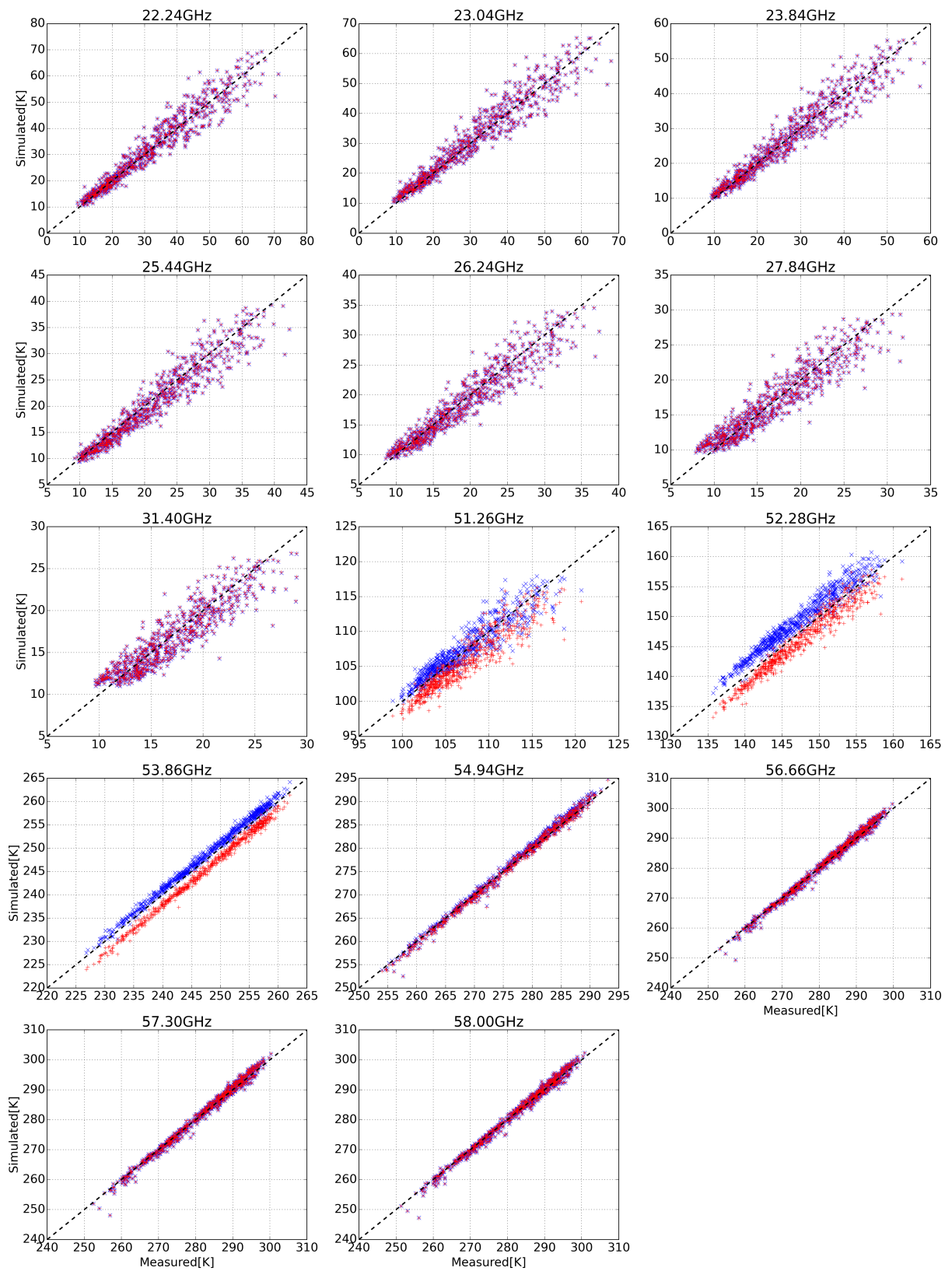


Рис. 1.3: Точечная диаграмма измеренных и смоделированных яркостных температур. Каждый маркер соответствует конкретному случаю ясного неба. Синие x-маркеры обозначают симуляции посредством MPM1, красные +-маркеры – симуляции MPM2a.

Рис. 1.4 и 1.5 количественно характеризуют результаты, представленные на рис. 1.3 (добавлены результаты MPM2), а именно разность между измеренными и симулированными яркостными температурами. Рис. 1.4 изображает среднюю разность (СР) между измерениями и симуляциями, а рис. 1.5 – среднеквадратичное отклонение разности (СКР). Рис. 1.3 наглядно иллюстрирует диапазон значения яркостной

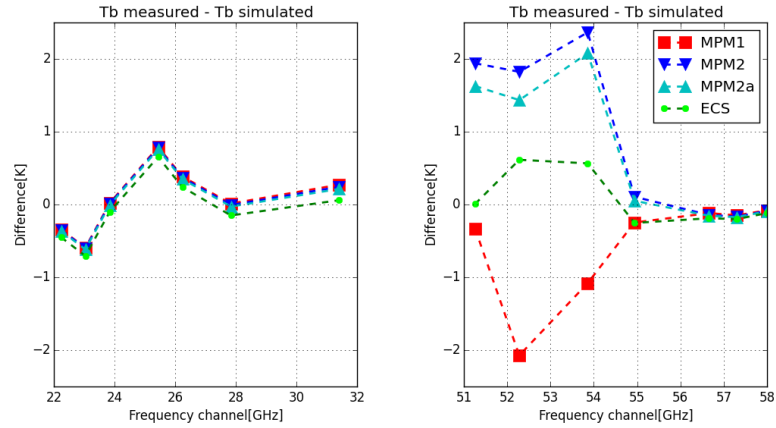


Рис. 1.4: Средняя разность между измеренными и симулированными яркостными температурами в условиях ясного неба. Симуляции используют различные модели поглощения: MPM1, MPM2, MPM2a и ECS

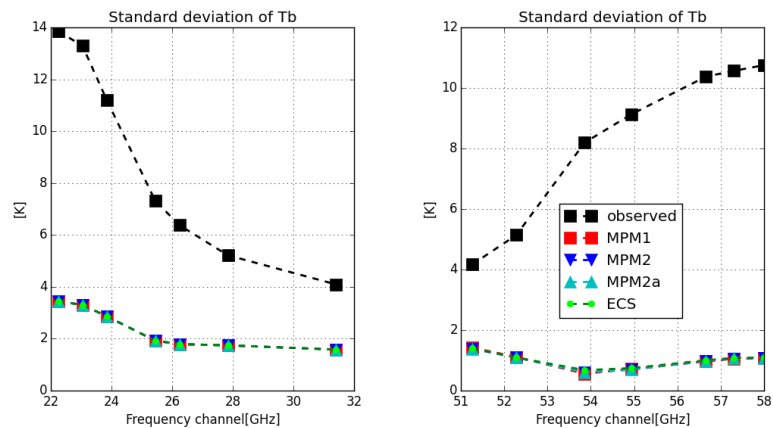


Рис. 1.5: Среднеквадратичное отклонение разности между измеренными и симулированными яркостными температурами в условиях ясного неба. Черные квадраты показывают среднеквадратичное от измеренных яркостных температур (изменчивость измерений).

температуры в различных каналах и степень соответствия между симуляциями и

измерениями. Из него следует, что различие между моделями не зависит (по крайней мере визуально) от условий наблюдения: в отдельно взятом канале результаты МРМ2а на диаграмме 1.3 смещены на постоянную величину от МРМ1. Этот факт также заметен на правой части рис. 1.5, где разница между моделями отсутствует. Левые части рис. 1.4 и 1.5 не демонстрируют различий между МРМ моделями, поскольку диапазон 22–32 ГГц определяется водяным поглощением, которое в моделях одинаково. Малые отличия (менее 0,2К) ECS в СР от МРМ моделей вызваны тем, что она не оптимизирована для работы на данных частотах. В этом диапазоне СР составляет от -0,6 до 0,8 К. Значения СР в каналах 55–60 ГГц имеют амплитуду менее 0,2 К, что объясняется высоким поглощением атмосферы на этих частотах, этот эффект будет объяснен позже при рассмотрении возможных причин наблюдаемых разностей. Различие между моделями проявляется в основном в первых трех каналах диапазона 51–60 ГГц (51,26, 52,28 и 53,86 ГГц). Амплитуда значений СР для рассматриваемых моделей в этих каналах превосходит соответствующие СКР на рис. 1.5. Это позволяет заключить, что модели переоценивают (МРМ1) или недооценивают (МРМ2, МРМ2а и ECS) реальную яркостную температуру и соответственно поглощение воздуха атмосферы. При этом модель ECS демонстрирует наименьшие (менее 1 К) по модулю СР в данном диапазоне. Следует отметить, что значения СКР значительно меньше (в худшем случае 2,5–3 раза), чем среднеквадратичное отклонение измеренной (и соответственно симулированной) яркостной температуры. Это говорит в пользу состоятельности результатов симуляции. Показательно также, что полученные СР, а тем более разность между моделями, значительно превышают абсолютную точность прибора в 0,5 К [25]. На рис. 1.6 представлены СР для результатов сканирования по углу возвышения. Поскольку модель ECS требует больших вычислительных ресурсов, симуляции углового зондирования для нее не проводились. Угол возвышения 5,4° (зенитный 84,6°) исключен из рассмотрения ввиду наличия аномальных данных на этом угле. Результаты МРМ2 не показаны на рисунке, поскольку они очень близки к результатам МРМ2а. СР на рис. 1.6, соответствующие углу сканирования в зенит (угол возвышения 90°, синие маркеры), практически совпадают с результатами зенитных наблюдений, что указывает на согласованность измерений в режиме зенитного зондирования и в режиме сканирования. С уменьшением угла возвышения (увеличением зенитного угла) модели недооценивают значения яркостных температур в диапазоне 22–32 ГГц. Похожая тенденция наблюдается и в диапазоне 51–60 ГГц, но картина в целом здесь сложнее. Значения СР в каналах с высоким поглощением (55–60 ГГц) мало меняются в зависимости от угла сканирования. Абсолютное значение СР в канале 53,86 ГГц уменьшается с уменьшением угла возвышения, в то время как знак значения остается неизменным. Создается впечатление, что при уменьшении

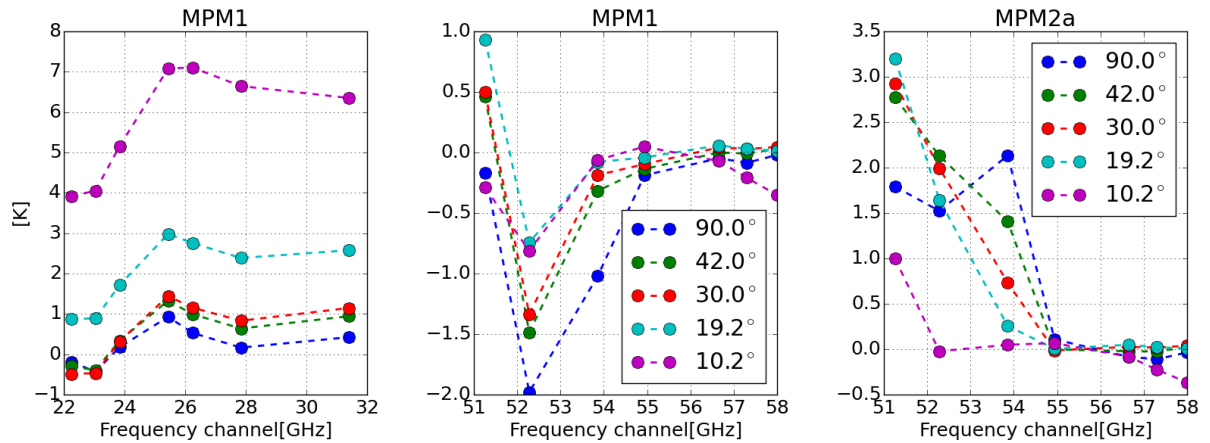


Рис. 1.6: Средняя разность между измеренными и смоделированными яркостными температурами для результатов сканирования по углу возвышения (в условиях ясного неба). Симуляции используют различные модели поглощения.

угла ξ график загибается вверх в области 51,26 и 52,28 ГГц. Так результаты MPM1 становятся менее переоцененными, а значения на 51,26 ГГц становятся переоцененными на малых углах возвышения. Результаты MPM2a демонстрируют сложную картину поведения, в которой невозможно обозначить явных тенденций.

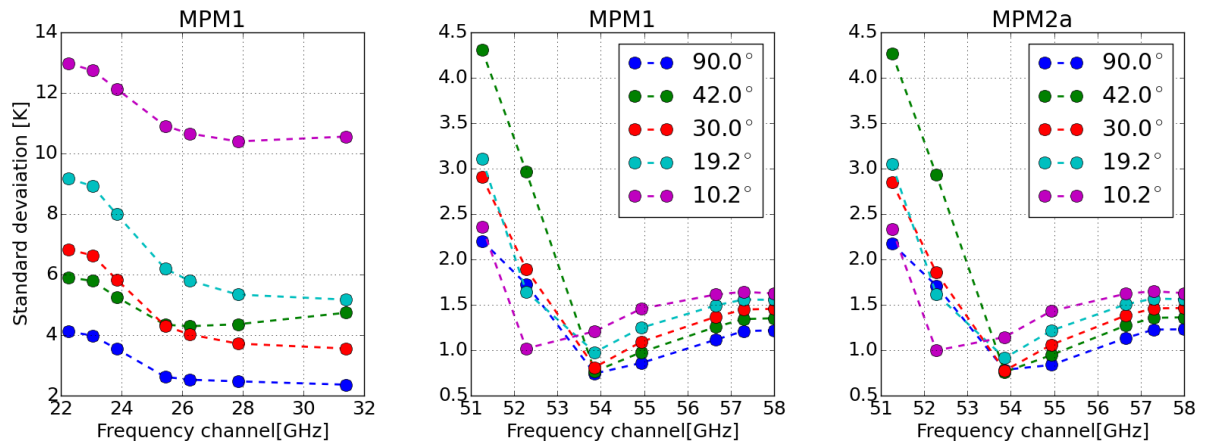


Рис. 1.7: Среднеквадратичное отклонение разности между измеренными и смоделированными яркостными температурами для результатов сканирования по углу возвышения (в условиях ясного неба). Симуляции используют различные модели поглощения.

На рис. 1.7 представлены соответствующие (рис. 1.6) СКР для результатов сканирования по углу возвышения. Аналогично рис. 1.5 различия в СКР между моделями

малы. Следует отметить, что зависимость СКР от частоты в диапазоне 22–32 ГГц похожа на линию водяного пара, имеющую центр в районе 22 ГГц. В диапазоне 22–32 ГГц уменьшение угла ξ приводит к увеличению СКР. В диапазоне 51–60 ГГц тенденция сохраняется, кроме первых двух каналов (51,26 и 52,28 ГГц), но величина относительного увеличения СКР с уменьшением угла значительно меньше. В каналах 51,26 и 52,28 ГГц СКР в разы больше, чем в остальных каналах диапазона 51–60 ГГц. Высокие значения СКР в обоих диапазонах и тенденции на рис. 1.6 позволяют заключить, что симуляции сканирования по углу значительно хуже совпадают с измерениями, чем в случае зенитного зондирования.

Полученные результаты еще рано идентифицировать со спектроскопической ошибкой. Разница между симуляциями и измерениями может быть вызвана различными факторами, некоторые из которых мы не можем исключить до конца. Однако тщательная оценка величин этих эффектов позволяет утверждать, что наблюдаемые СР вызваны спектроскопической ошибкой с высокой степенью уверенности.

Начнем с наиболее значимого фактора, который, казалось бы, делает наши усилия бессмысленными. Разность между наблюдениями и симуляциями может быть вызвана несоответствием атмосферных профилей, выдаваемых радио зондом, с состоянием атмосферы на луче прибора. Даже если пренебречь неидеальностью зондовых измерений, это несоответствие может существовать в силу удаленности (7 км) между НАТПРО и аэрологической станцией и существования объективной разницы между состоянием атмосферы, измеряемым зондом и (измеряемым) микроволновым прибором. Эта объективная разница может иметь систематическую составляющую, которая соответствующим образом отразится на рис. 1.4 и 1.6. С другой стороны, интуитивно понятно, что СР диапазона 51–60 ГГц на рис. 1.4 не могут быть полностью обусловлены неверным температурным профилем. Для определенности будем рассматривать результаты МРМ1. Следует ожидать, что изменения в спектре должны быть похожи на склон полосы поглощения в целом. Спектральная форма СР имеет особенности (канал 52,28 ГГц), которых лишена полоса в целом. Справедливость этих умозрительных рассуждений можно показать, прибегнув к количественному анализу поведения (1.2.1). Для простоты будем рассматривать исключительно несоответствие в профиле температуры: коэффициент поглощения водяного пара слабо зависит от частоты на этих высотах, но при желании возможно проделать анализ температуры и водяного пара совместно.

Проиллюстрируем, что возмущениями профиля температуры невозможно получить наблюдаемую спектральную зависимость СР, показанную на рис. 1.4. Будем рассматривать (1.2.1) как функцию от профиля температуры, подобно тому как это делается при решении обратной задачи. Параметризуем профиль кусочно-линейной

функцией так, что значения в узлах определяют профиль. Вектор состояния \mathbf{x} полностью определяет профиль температуры $T(\mathbf{x}, z)$. Для определенности используем сетку высот, на которой выдаются продукты восстановления НАТПРО с добавлением 5 узлов с шагом 1 км для участка от 10 км до 15 км. В результате в сетке 44 узла. (В принципе, можно взять любую другую сетку, которая может адекватно отображать профиль. В данном случае нам необходимо, чтобы количество узлов сетки не было слишком большим, иначе математический аппарат, необходимый для изложения, сильно усложнится.) Возьмем средний температурный профиль (и соответственно средний профиль атмосферной влажности) и линеаризуем задачу (1.2.1) вблизи него. При этом будем считать, что выполняется условие гидростатического равновесия, связывающее профили температуры и давления, что действительно имеет место в атмосфере:

$$P(\mathbf{x}, z) = P_0 \cdot \exp\left(-\int_{z_0}^z \frac{Mg}{RT(\mathbf{x}, z)} dz'\right), \quad (1.2.4)$$

где P_0 – (среднее) давление в приземном слое; $M=28.9644$ г/моль – средняя молярная масса воздуха; $g=9.8$ м/с² – ускорение свободного падения; $R=8.314$ Дж/(моль К) – универсальная газовая постоянная. В результате производные (1.2.1) при зондировании в зенит:

$$K_{ij} \equiv \frac{\partial F_i(\mathbf{x})}{\partial x_j} = Tb_0 \cdot \exp(-\tau(z_\infty, \nu_i)) \cdot \left(-\int_{z_0}^{z_\infty} \frac{\partial \alpha_i}{\partial x_j} \cdot dz\right) + \int_{z_0}^{z_\infty} \exp(-\tau(z, \nu)) \cdot \left(\frac{\partial \alpha_i}{\partial x_j} T + \alpha_i \frac{\partial T}{\partial x_j} - \alpha_i T \int_{z_0}^z \frac{\partial \alpha_i}{\partial x_j} dz'\right) dz, \quad (1.2.5)$$

где $F_i(\mathbf{x}) \equiv F(\nu = \nu_i, \xi = \pi/2)$, а ν_i – центральные частоты каналов. Соответствующие производные от коэффициента поглощения по профилю

$$\frac{\partial \alpha_i}{\partial x_j}(\mathbf{x}, z) \equiv \frac{\partial \alpha(T(\mathbf{x}), P(T(\mathbf{x})), \dots, \nu_i)}{\partial x_j} = \left(\frac{\alpha(\dots, \nu_i)}{\partial T} \frac{\partial T(\mathbf{x})}{\partial x_j} + \frac{\alpha(\dots, \nu_i)}{\partial P} \frac{\partial P(\mathbf{x})}{\partial x_j}\right), \quad (1.2.6)$$

$$\frac{\partial P}{\partial x_j}(\mathbf{x}, z) = P(\mathbf{x}, z) \cdot \int_{z_0}^{z_\infty} \frac{Mg}{RT^2(\mathbf{x}, z)} \cdot \frac{\partial T(\mathbf{x}, z)}{\partial x_j} dz. \quad (1.2.7)$$

Производные от коэффициента поглощения, используемые в (1.2.6), отсутствуют в кодах МРМ, программирование и отладка аналитических производных – трудоемкий процесс, поэтому в данном случае они были взяты численно.

Производные (1.2.5) составляют матрицу 7x44 (7 – число каналов НАТПРО кислородной части спектра). Рассмотрим свойства результата линеаризации (1.2.5) с помощью сингулярного разложения [44]:

$$K = U\Sigma V^T, \quad (1.2.8)$$

где матрицы U (7×7) и V (44×44) ортогональные, а матрица Σ прямоугольно диагональная. Ненулевые элементы прямоугольной матрицы Σ называются сингулярными числами и располагаются на главной диагонали. Столбцы U составляют левые сингулярные векторы и столбцы V – правые сингулярные векторы. Разложение (1.2.8) позволяет понять, спектральные возмущения какого вида (левые сингулярные векторы) и в какой мере создаются определенными возмущениями температурного профиля (правые сингулярные векторы). Сингулярные числа матрицы K приведены в табл. 1.2. Можно заметить, что от наибольшего к наименьшему сингулярные числа меняются более чем на 3 порядка. Разложим результаты МРМ1 на рис. 1.4 по базису левых сингулярных векторов. Коэффициенты разложения указаны в табл. 1.2. Видно, что проекция на векторы, отвечающие малым сингулярным числам, существенна. Левые сингулярные векторы, отвечающие малым сингулярным числам, это как раз те возмущения спектра, которые (1.2.1) не могут (с практической точки зрения) быть вызваны изменением температурного профиля. В самом деле, чтобы произвести возмущение с проекцией $0,39 \text{ К}$ (см. табл. 1.2), необходимо, чтобы проекция на соответствующий правый сингулярный вектор составила $0,39/1,60 \times 10^{-4} = 2437,5 \text{ }^\circ\text{C}$. Используя свойства ортогональных преобразований (см. Приложение Б), можно заключить, что для того, чтобы создать такую проекцию, необходимо изменение температуры как минимум $2437,5 \text{ }^\circ\text{C}/\sqrt{44} = 367,4 \text{ }^\circ\text{C}$, что многократно превосходит любые разумные оценки колебаний температуры на Земле, не говоря о разности в тропосферных температурах в географических пунктах на расстоянии 7 км друг от друга. Таким образом, можем заключить, что систематическая разница между атмосферными профилями на луче прибора хоть и влияет на результаты, она никак не может привести к СР, наблюдаемым на рисунке 1.4.

Таблица 1.2: Сингулярные числа матрицы K в порядке убывания и соответствующие им коэффициенты разложения спектральных разностей МРМ1 (рис. 1.4) по базису левых сингулярных векторов

Индекс	1	2	3	4	5	6	7
Сингулярные числа $[\text{К}/^\circ\text{C}]$	0.43	0.14	0.04	0.01	4.41×10^{-3}	6.87×10^{-4}	1.6×10^{-4}
МРМ1 СР в базисе левых сингулярных векторов $[\text{К}]$	0.63	-1.21	-0.86	-0.087	-1.61	0.58	0.39

Рассмотрим другие факторы, влияющие на полученные СР, а именно неточности моделирования, связанные с различными приближениями (1.2.1): отсутствие учета ширины спектрального канала и ширины луча зондирования. Эти вопросы, как и некоторые другие приближения, хорошо разобраны в работе [45]. В ней приведены оценки влияния этих факторов в зависимости от угла возвышения, ширины луча и ширины каналов. Однако результаты в работе [45] даны в виде цветовых диаграмм, нацеленных на изображение экстремальных случаев. В результате оценки, соответствующие конфигурации НАТPRO, оказались не читаемы, поскольку находились в «зеленой» зоне, поэтому они были повторены диссертантом независимо от авторов [45]. Оценки проводились с использованием модели поглощения МРМ1, ввиду того что она позволяла проводить необходимые симуляции достаточно быстро с использованием только 20-ядерной рабочей станции.

Ширина диаграммы направленности антенны (по половине мощности, half power beamwidth – HPBW) составляет $3,7^\circ$ в диапазоне 22–32 ГГц и $2,2^\circ$ в диапазоне 51–60 ГГц (см. [25]). Известно, что эта характеристика должна приниматься во внимание при зондировании на очень малых углах возвышения [45]. Чтобы определить влияние отсутствия учета ширины луча, оценим разность между нашей моделью (1.2.1) и моделью, учитывающей ширину диаграммы как:

$$Tb(\nu, \xi) - \int Tb(\nu, \xi) \psi(\xi) d\xi \approx -\frac{\partial^2 Tb}{\partial \xi^2} \frac{\Delta \xi^2}{16 \ln 2}. \quad (1.2.9)$$

где $\frac{\partial^2 Tb}{\partial \xi^2}$ – вторая производная от (1.2.1) по углу возвышения и $\Delta \xi$ – это ширина диаграммы направленности антенны по половине уровня мощности. При выводе (1.2.9) рассматривалось взятие интеграла от произведения (1.2.1) на диаграмму направленности антенны ψ . При этом (1.2.1) аппроксимировалось полиномом Тейлора второй степени (по углу ξ), в то время как ψ считалась гауссовой функцией со стандартным отклонением $\Delta \xi / \sqrt{8 \ln 2}$. На рис. 1.8 представлены средние и средне-квадратичные от оценки (1.2.9), вычисленные по используемой в исследовании базе данных. Видно, что на угле возвышения $10,2^\circ$ отсутствие учета ширины луча ведет к значительной, до 1,4 К, недооцененности в диапазоне 22–32 ГГц на рис. 1.6. В то же время уже на 19° эффект составляет всего 0,4 К. В интересующем нас диапазоне 51–60 ГГц величина дефекта не превышает 0,14 К на всех углах зондирования.

Влияние ширины приемных каналов проверяется путем численного интегрирования по частоте. Ввиду отсутствия информации о форме спектральных каналов, считаем их «прямоугольными». Наши оценки показывают, что благодаря продуманному расположению спектральных каналов НАТPRO, ошибка монохроматических симуляций составляет всего 0,15 К. Расположение каналов особенно важно в диапазоне 51–60 ГГц, ввиду наличия большого количества малых спектральных линий в

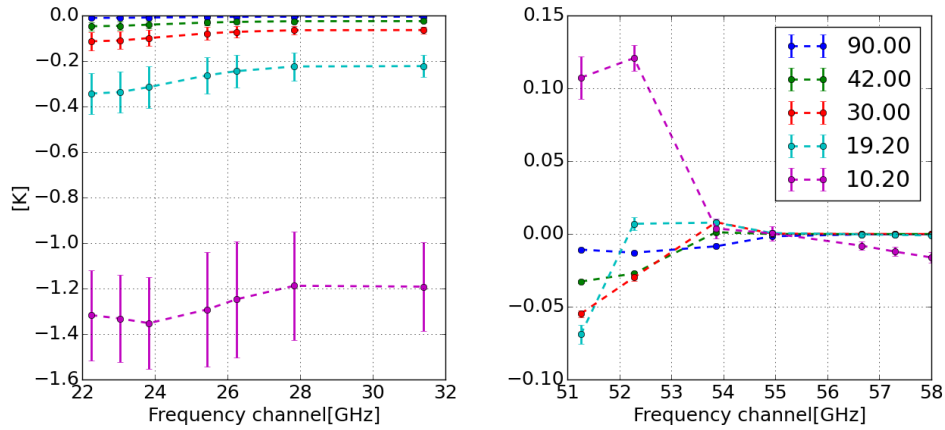


Рис. 1.8: Средние и среднеквадратичные от оценки (1.2.9) в зависимости от угла возвышения (в условиях ясного неба). Оценки произведены с использованием модели MPM1.

этом диапазоне. На рис. 1.9 изображены средние и среднеквадратичные от разницы (определенной, следуя [45]) между монохроматической моделью и моделью, учитывающей ширину каналов. Таким образом, оцененные нами ошибки не могут объяснить

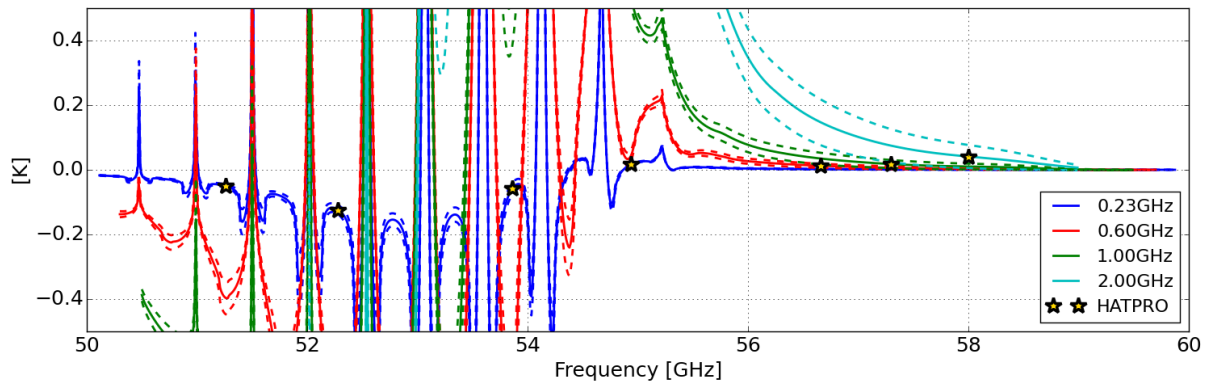


Рис. 1.9: Средние и среднеквадратичные от разности (определенной, следуя [45]) между монохроматической симуляцией и симуляцией с учетом ширины спектрального канала (в условиях ясного неба). Оценка проведена с использованием модели MPM1. Звезды обозначают расположение каналов HATPRO.

CP на рис. 1.4. В отсутствие характеристик других причин будем считать, что рис. 1.4 и 1.6 демонстрируют влияние спектроскопической ошибки. То, что результаты по различным моделям имеют разный знак разности с наблюдениями, также говорит в пользу существования спектроскопической ошибки. По крайней мере, очевидно,

что разница между моделями существенна с практической точки зрения, и поиск наиболее адекватной реальности модели поглощения является особенно актуальной задачей для микроволнового дистанционного зондирования тропосферы.

Рассмотрим, насколько наши результаты сравнения измерений с симуляциями соответствуют наличию спектроскопической ошибки в моделях. На рис. 1.4 и 1.6 СР

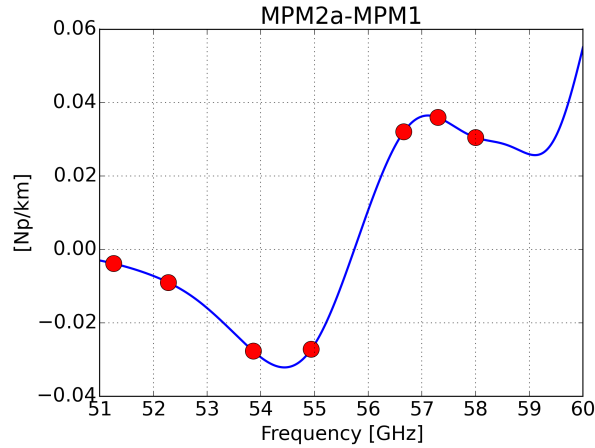


Рис. 1.10: Разность между коэффициентами поглощения моделей MPM2a и MPM1 при давлении 1000 мБар. Красные кружки обозначают положение каналов НАТПРО.

в диапазоне 54–60 ГГц малы (менее 0,4 К). Однако неправильным будет утверждать, что в этом диапазоне нет возможной ошибки в коэффициенте поглощения. Так, например, средняя разность между моделями MPM1 и MPM2a на рис. 1.4 составляет менее 0,3К в канале 54,94ГГц, в то время как разность между приземными (1000 мБар) коэффициентами поглощения воздуха, изображенная на рис. 1.10, в разы больше, чем разность в канале 52,28 ГГц. В свою очередь, разность на рис. 1.10 в диапазоне 56–60 ГГц еще больше. Основное отличие диапазона 54–60 ГГц состоит в высоком поглощении на этих частотах. Малые СР в этом диапазоне на рис. 1.4 и 1.6 объясняются фундаментальными свойствами решения уравнения распространения по лучу (1.2.1). Из базовых свойств интегрирования следует математический факт:

$$\int_{z_0}^{z_\infty} \frac{\alpha}{\sin \xi} \cdot T(z) \cdot \exp(-\tau(z, \xi)) dz = T^* \cdot \int_{z_0}^{z_\infty} \frac{\alpha}{\sin \xi} \cdot \exp(-\tau(z, \xi)) dz = \quad (1.2.10)$$

$$= T^* \cdot [1 - \exp(-\tau(z_\infty, \xi))] ,$$

где T^* – значение профиля температуры на какой-то высоте, т. е. $T^* = T(z^*)$, где $z^* \in [z_0, z_\infty]$. Для каналов с высоким поглощением экспонента в правой части (1.2.10) почти равна нулю, поэтому для таких каналов (1.2.1) эквивалентно некоему усреднению атмосферного профиля. Наибольший вклад во второе слагаемое (1.2.1)

вносит слой атмосферы, общее поглощение которого (1.2.2) порядка 1, поэтому (1.2.1) для каналов с высоким поглощением эквивалентно усреднению в слое, близком к поверхности Земли.

Изменение коэффициента поглощения проявляется в спектре (в яркостной температуре), только если есть зависимость температуры от высоты, что, как правило, выполняется в атмосфере Земли. Чем выше поглощение в канале, тем менее он чувствителен к изменениям коэффициента поглощения. Объяснить это можно следующим образом. Малое относительное изменение коэффициента поглощения приводит к малому относительному изменению высоты характерного слоя. Однако то, что слой тонкий, приводит к тому, что изменения в яркостной температуре еще меньше, поскольку изменение температуры в этом слое мало. Эту ситуацию можно проиллюстрировать на чисто искусственном примере, когда коэффициент не зависит от высоты, а температура убывает по высоте с постоянной скоростью. В этом случае (1.2.1) принимает вид (случай зенитного зондирования):

$$F(\nu, \xi = \pi/2) = \int_0^{z_\infty} \alpha \cdot (T_s - \gamma \cdot z) \cdot \exp(-\alpha z) dz \approx T_s - \frac{\gamma}{\alpha}, \quad (1.2.11)$$

где T_s – приземная температура; γ – скорость уменьшения температуры с высотой. Все экспоненты в (1.2.11) с полным поглощением всей атмосферы принимались равными нулю ($\exp(-\alpha z_\infty) \rightarrow 0$). Таким образом, малое изменение поглощения $\Delta\alpha$ приведет к изменениям в яркостной температуре $-\Delta\alpha \cdot \gamma/\alpha^2$. Тем самым каналы с большим поглощением демонстрируют меньшие значения СР на рис. 1.4 и 1.6.

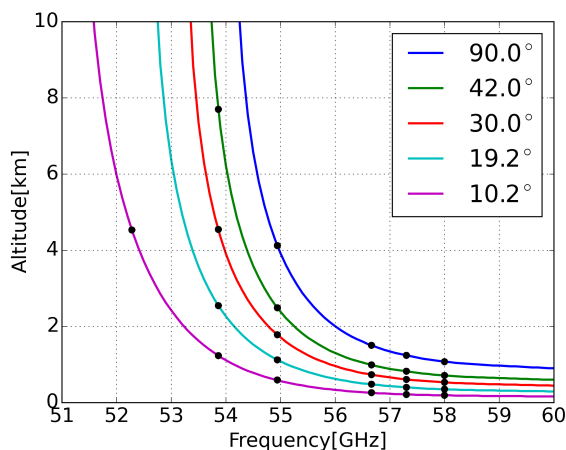


Рис. 1.11: Высоты соответствующие (в средних условиях) поглощению в 3 Нп в зависимости от угла возвышения и частоты. Черные точки обозначают положение каналов NATPRO

Именно этим эффектом отчасти объясняется поведение результатов на рис. 1.6 и

1.7. В зависимости от угла возвышения поглощение в каналах значительно меняется. Чтобы не быть голословными, сделаем оценку высоты, на которой достигается поглощение, равное 3Нп (см. рис. 1.11). Такое поглощение соответствует ослаблению примерно в 20 раз. Оценка проведена посредством модели МРМ1 с использованием средних атмосферных профилей. Из рисунка видно, что каналы в диапазоне 54–60 ГГц, как и ожидалось, имеют высокое поглощение при всех углах возвышения. Эти каналы демонстрируют малые СР на рис. 1.4, 1.6. В канале 53,86 ГГц поглощение 3Нп достигается на всех углах возвышения, кроме 90° (зенит). Именно зенитный случай в этом канале для результатов МРМ1 выделяется на рис. 1.6 (средняя панель). В канале 52,28 ГГц высокое поглощение достигается только на самом низком угле возвышения (10°), чему соответствует уменьшение СКР на рисунке 1.7. Исходя из вышесказанного, увеличение поглощения, (при уменьшении угла возвышения) приводит к уменьшению СР, это наблюдается в канале 53,86 ГГц и отчасти описывает поведение в канале 52,28 ГГц.

Однако не все поведение на рис. 1.6 и 1.7 может быть объяснено изменением поглощения с углом. Более того, СР в каналах 51,26 и 52,28 ГГц кажутся смещенными в область недооценивания. Это поведение объясняется влиянием облачности. Описанный ранее метод контроля ясности (неба) на основе показаний самого прибора применим только для зондирования в зенит. Влияние облачности сложно характеризовать количественно. Нельзя говорить о какой-то связи между углом наблюдения и количеством случаев облачности (исключая зенитный случай). Однако облачность вызывает сдвиг СР только в сторону недооцененности: облачность увеличивает поглощение и соответственно результирующую яркостную температуру, и это не учитывается в симуляции. На рис. 1.12 показана разность между симуляцией с облаком и без. При этом облако соответствовало $\text{LWP}=50\text{ г/м}^2$.

Таким образом, ввиду наличия влияния облачности результаты сканирования сложно использовать для оценки спектроскопической ошибки. Однако согласованность поведения СР и СКР при сканировании с предположением о наличии спектроскопической ошибки подкрепляет результаты зенитного зондирования.

Как обсуждалось ранее, систематическое несоответствие зондовых профилей с состоянием атмосферы на луче прибора может искажать результаты на рис. 1.4 и 1.6. Разумно полагать, что несоответствие будет больше проявляться на малых высотах. Значения СР в каналах с высоким поглощением должны указывать на расхождение в температурах на малых высотах. Однако СР в канале 58 ГГц составляет всего 0,3 К, что меньше абсолютной точности НАТПРО, поэтому систематическая ошибка в профиле температуры вряд ли превышает это значение. Случайная же ошибка находит свое отражение на рис. 1.5 и 1.7. И рост с уменьшением угла ξ указывает на

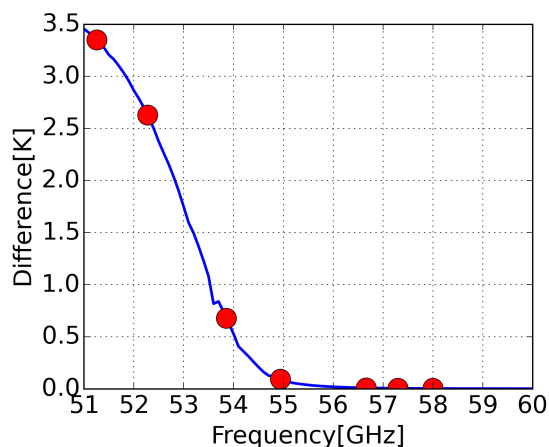


Рис. 1.12: Разность между симуляциями с облаком и без него. Красные кружки обозначают положение каналов НАТПРО.

ее локализацию ближе к поверхности Земли.

Практическая важность проведенных исследований заключается не только в результате для конкретных моделей (МРМ1, МРМ2, МРМ2а, ECS), но и в создании программного обеспечения, в проведенном анализе возможных причин появления разницы между симуляциями и измерениями. Таким образом, подобные исследования могут быть повторены для любого другого набора моделей поглощения.

В результате анализа разности между измерениями яркостной температуры и симуляциями была выявлена систематическая разность в зависимости от модели, достигающая 2 К. Анализ проводился на основе многолетних измерений в Нижнем Новгороде посредством микроволнового профилометра НАТПРО и данных аэрологического зондирования за соответствующий период (с осени 2013 года до конца 2018 года). Знак систематической разности зависит от используемой в симуляциях модели поглощения воздуха. В целом наилучшее соответствие измерениям показали симуляции с использованием модели ECS. Тщательный анализ возможных причин систематической разности указывает на спектроскопическую ошибку как ее причину. Важно понимать, что не ошибка в модели поглощения локализована в диапазоне частот 51–54 ГГц, а только ее проявление в измеряемых яркостных температурах.

Результаты сканирования по углу возвышения не позволяют делать оценку спектроскопической ошибки ввиду того, что отсутствие облачности не может быть проконтролировано в режиме сканирования. Однако поведение разностей между наблюдениями и симуляциями при уменьшении угла возвышения хорошо согласуется с базовыми свойствами решения уравнения распространения излучения по лучу и предположением о ключевой роли спектроскопической ошибки.

1.3 **Сверхкраткосрочный прогноз грозовых штормов по данным микроволновых и радиозондовых измерений с помощью индексов конвективной неустойчивости атмосферы**

1.3.1 **Прогноз гроз, индексы конвективной неустойчивости атмосферы**

Предсказание гроз все еще представляет сложность для прогноза погоды. Облака глубокой конвекции развиваются на довольно малых пространственно временных масштабах: 1–10 км, 0–12 часов. Это вызвано недостаточным разрешением моделей и отсутствием достаточной детализации начальных условий – трехмерных полей атмосферных характеристик (в первую очередь ветра, температуры и влажности). Сложности в моделях численного прогноза погоды возникают не только с определением места и времени, но и типа и интенсивности грозы. С другой стороны, условия, предшествующие конвекции, хорошо известны:

- неустойчивость атмосферы в достаточно широком (по высоте) слое;
- наличие достаточной влажности на нижних уровнях;
- наличие механизма, запускающего конвекцию.

Индексы конвективной неустойчивости количественно характеризуют первые два условия. Они используются для предсказания гроз [15–20] и, несмотря на свою простоту, могут работать лучше численного прогноза погоды [20, 46]. (Терминологически в литературе иногда различают индексы предсказания гроз и индексы конвективной неустойчивости. Последние могут являться функцией первых. Здесь мы будем считать эти термины взаимозаменяемыми.) Первые индексы появились еще в середине XX века, и их аппарат постоянно развивается: модифицируются старые индексы, предлагаются новые [47]. Индекс конвективной неустойчивости в общем случае представляет собой функционал от атмосферных профилей (как правило, температуры и влажности). Обычно это алгебраическая комбинация следующих характеристик: температура, влажность и температура точки росы на определенных уровнях давления (ОУД), в особенности 850, 700, и 500 мБар; температура ячейки воздуха, адиабатически поднятой до ОУД; потенциальная температура, эквивалентная потенциальная температура на ОУД и т.д. То, что индекс становится выше (ниже) определенного

порогового значения, указывает на возможную грозу. Значение же порога выбирается из эмпирических соображений на основе предыдущего опыта.

Индексы создавались для прогноза на основе результатов радио зондирования. Развитие микроволнового наземного зондирования открывает новые возможности ввиду значительно более высокого временного разрешения измерений, что, как указывалось во Введении, делает его особенно перспективным в наукастинге. Скорее всего, в будущем оптимальным будет гибридный подход, уточняющий данные численного прогноза погоды по локальным измерениям и учет опыта результативности индексов. Однако пока преждевременно говорить о существовании такого подхода, поэтому актуальной видится задача адаптации или разработки новых индексов для обработки результатов микроволнового зондирования. Первым шагом на пути к этому служит оценка возможностей современных индексов рассчитываемых с помощью микроволновых данных. Уникальной чертой проведенного исследования является количественная характеристика предсказательной способности индексов гроз по результатам микроволнового зондирования.

1.3.2 Расчет индексов и определение их предсказательной способности

Наблюдения посредством НАТPRO-G3 и аэрологических зондов описаны в разделе 1.2. Нижеизложенные сведения дополняют описание в 1.2. В этом исследовании набор данных существенно иной: другой критерий выбора данных (нет цели рассмотрения исключительно случаев ясного неба); использование результатов восстановленных НАТPRO атмосферных профилей вместо яркостных температур; привлечение данных флюксметров в различных локациях.

Поскольку речь идет в первую очередь о метеорологических явлениях, таких как грозы, полезно соответствующим образом охарактеризовать место наблюдений. Нижний Новгород – город-миллионник, расположенный на Восточно-Европейской равнине в месте слияния двух больших рек – Ока и Волга. Город находится в зоне умеренно континентального климата с длинными холодными зимами и теплым, но коротким летом. Лето достаточно влажное. Ока делит город на верхнюю (100–200 м над уровнем моря) и нижнюю часть (70–80м). Ввиду разницы высот общее количество осадков и температурный режим несколько отличаются в различных частях города. Например, в нижней части в год выпадает на 15–20% больше осадков. Конвективный сезон в Нижнем Новгороде обычно длится с мая по август.

В данном исследовании использовались данные микроволнового и радиозондового зондирования за период 2014 – 2018 гг., а также двух флюксметров VOLTEK

EFM-100. Подробная документация по приборам дана на сайте производителя [48]. Флюксометры измеряют вертикальную составляющую напряженности электрического поля в диапазоне частот 0–10 Гц в пределах ± 50 кВ/м. Один прибор расположен на здании ИПФ РАН вблизи НАТПРО, другой соответственно на аэрологической станции.

Поскольку известно, что сильная облачность делает результаты дистанционного зондирования посредством НАТПРО менее надежными, было решено ограничиться случаями умеренной облачности с LWP (см. 1.2), не превышающими 400 г/м². Результаты микроволнового зондирования усреднены по получасовому интервалу вблизи момента аэрологического зондирования (15 минут до и после запуска). В итоге на конвективный сезон с 2014 по 2018 год мы имеем 663 одновременных микроволновых и радиозондовых профилей температуры и водяного пара.

Для каждого случая одновременных измерений были рассчитаны 15 индексов по формулам, представленным в [13, 49, 50]. Рассматривались следующие индексы: CAPE (Convective Available Potential Energy), MUCAPE (Maximum Unstable CAPE), CIN (Convective Inhibition), JI (Jefferson Index), KI (K index), KOI (KO index), LI (Lifted Index), MDPI (Microburst Day Potential Index), FT (fog threat index), ShowI (Showalter Index), SI (S index, STT), TI (Thompson index), TT (Total Totals index), TQ (TQ index), и EPI (Equivalent Potential Instability) (индекс потенциальной неустойчивости). В результате обработки одного случая получаются две группы из 15 индексов. Обозначим соответствующий временной ряд из групп индексов как FI, следуя [51]: FI^{sonde} – полученные из радиозондовых данных, FI^{IAP} из – микроволновых. (Здесь и далее по возможности будем использовать обозначения [51].)

Чтобы оценить предсказательную способность индексов нужно, определиться с временем гроз. Для этой цели, по данным флюксометров (напряженность электрического поля) с помощью метода изложенного в [52] было определено количество вспышек (молний) в минуту. Обозначим эту величину как NLF_{min} . В результате найдено два набора NLF_{min} : NLF_{min}^{IAP} , полученный с флюксометра на здании ИПФ РАН (пункт установки НАТПРО), и NLF_{min}^{sonde} – с метеостанции. График NLF_{min}^{IAP} изображен на рис. 1.13. Будем определять наличие грозы по вспышке молнии. Всего по данным флюксометров за 2014, 2015, 2016, 2017 и 2018 годы зафиксировано 38, 46, 44, 40 и 38 дней с грозовыми событиями соответственно. В результате имеются четыре набора данных: FI^{IAP} , FI^{sonde} , NLF_{min}^{IAP} , NLF_{min}^{sonde} . Выбирая пару FI и NLF_{min} , можно проводить исследование предсказательной способности индексов. Исследование для каждого индекса проводится в зависимости от порогового значения λ_{ttp} , величина которого варьировалась в широких пределах. О возможной грозе свидетельствуют: индексы CAPE, MUCAPE, CIN, JI, KI, MDPI, SI, TI, TT, и TQ превышают значе-

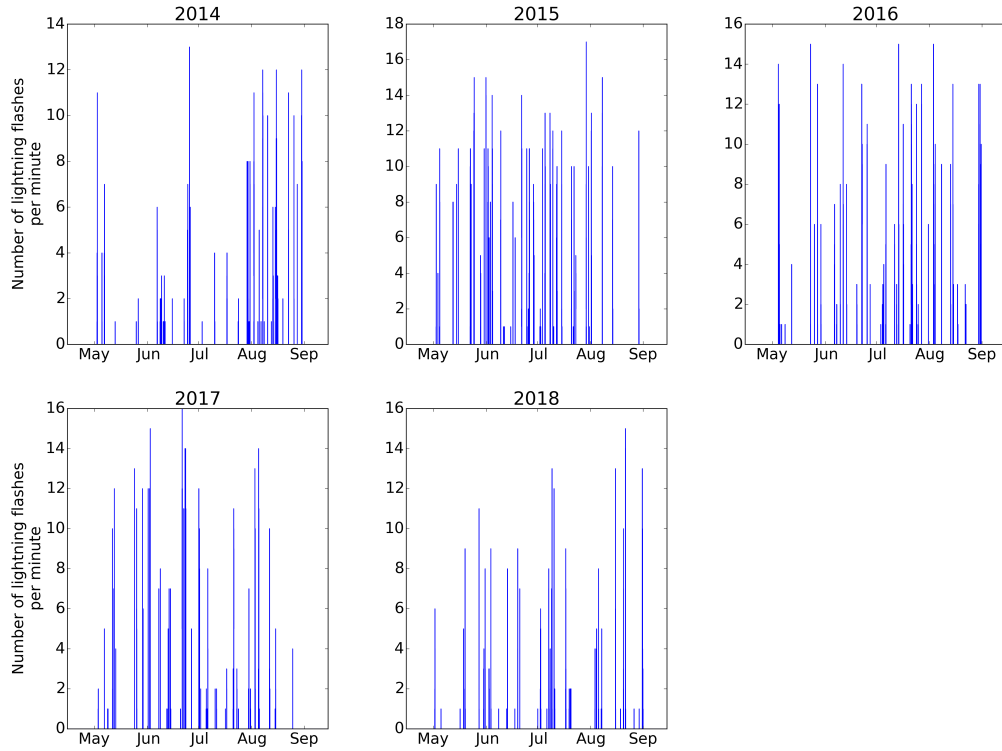


Рис. 1.13: Количество молниевых вспышек (NLF_{min}^{IAP}), зарегистрированное флюксметром в ИПФ РАН, в конвективный сезон с 2014 по 2018 год.

ния λ_{ttp} ; индекс KOI, LI, FT, ShowI, and EPI становится ниже λ_{ttp} . При конкретном значении λ_{ttp} исследование одного индекса из набора FI производилось следующим образом.

Для каждого случая одновременных измерений (отсчета временного ряда FI) по выбранному набору NLF_{min} находим время до следующей (t_{nt}) и до предыдущей (t_{bf}) молниевой вспышки. Для того чтобы отфильтровать данные после начала грозы, мы рассматриваем только те отсчеты, для которых $t_{bf} > 2$ часов. Для получившегося временного ряда заполняем так называемую таблицу сопряженности (см. [19]). Если индекс указывает на возможную грозу и $t_{nt} < 12$ часов (т.е. гроза произошла в ближайшие 12 часов), то случай относится к категории предсказанных событий. Если индекс спрогнозировал грозу, но она не произошла ($t_{nt} > 12$ часов), – к категории ложных тревог. Если индекс не прогнозировал грозу, а она случилась, – в категорию неожиданных событий. Если индекс не прогнозировал грозу, и она не произошла – в категорию ожидаемых отсутствий. Соответствующее количество случаев в каждой

из категорий обозначаем a , b , c и d (см. табл. 1.3). По результатам из таблицы сопряженности вычисляем следующие характеристики:

Вероятность обнаружения (Probability of Detection)

$$POD = \frac{a}{a + c}. \quad (1.3.1)$$

Меняется в пределах от 0 до 1. В идеальном восстановлении $POD=1$.

Вероятность ложной тревоги (False Alarm Rate):

$$FAR = \frac{b}{a + b}. \quad (1.3.2)$$

Меняется в пределах от 0 до 1. В идеальном восстановлении $FAR=0$.

Вероятность ложного предсказания (Probability of False Detection):

$$POFD = \frac{b}{b + d}. \quad (1.3.3)$$

Аналог FAR – для отсутствия события. В идеальном восстановлении $POFD=0$.

Индекс критического успеха (Critical Success Index):

$$CSI = \frac{a}{a + b + c}. \quad (1.3.4)$$

Меняется в пределах от 0 до 1. В идеальном восстановлении $CSI=1$.

TSS критерий (True Skill Statistic):

$$TSS = POD - POFD = \frac{ad - cb}{(a + c)(b + d)}. \quad (1.3.5)$$

Критерий HSS (Heidke Skill Score):

$$HSS = \frac{a + d - R}{a + b + c + d - R}, \quad (1.3.6)$$

где

$$R = \frac{(a + b)(a + c) + (c + d)(b + d)}{a + b + c + d}. \quad (1.3.7)$$

Меняется в пределах от $-\infty$ до 1. В идеальном восстановлении $HSS=1$.

В результате для каждого микроволнового или радиозондового индекса мы получили зависимость таблицы сопряженности и характеристик POD , FAR , $POFD$, CSI , TSS и HSS от порогового значения λ_{tpr} . На рис. 1.14 представлена типичная зависимость элементов матрицы сопряженности и соответствующих характеристик. При этом анализ был произведен для всех возможных пар FI и NLF_{min}: FI^{IAP}+NLF_{min}^{IAP}, FI^{sonde}+NLF_{min}^{IAP}, FI^{IAP}+NLF_{min}^{sonde}, FI^{sonde}+NLF_{min}^{sonde}.

Таблица 1.3: Таблица сопряженности

		Наблюдения	
		есть	нет
Прогноз	будет	a -предсказанное событие	b -ложная тревога
	не будет	c -неожиданное событие	d -ожидаемое отсутствие события

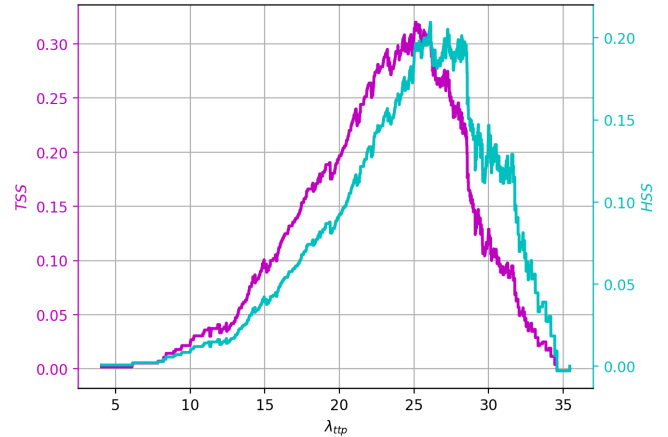
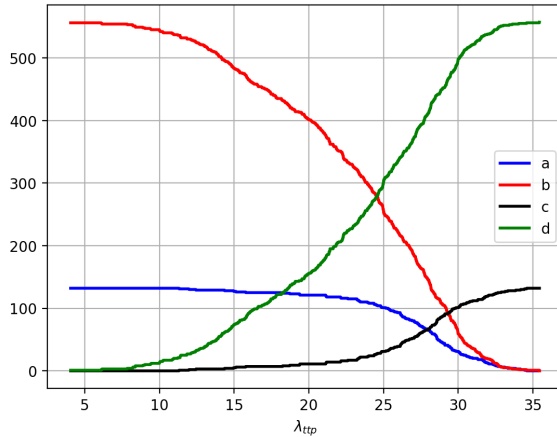


Рис. 1.14: (слева) Значения таблицы сопряженности в зависимости от λ_{ttp} ; (справа) соответствующие этому значения TSS и HSS

1.3.3 Сравнение индексов, полученных по радиозондовым и микроволновым данным

Поскольку индексы вычисляются по профилям атмосферных характеристик, логично сначала рассмотреть различие между профилями в зависимости от способа измерения. На рис. 1.15 представлены средние и среднеквадратичные от разности между профилями температуры и абсолютной влажности, полученные по результатам аэрологического и микроволнового зондирования. Сразу стоит оговориться, что нельзя разность между аэрологическим и микроволновым профилем однозначно отождествлять с ошибкой измерения. Как уже отмечалось в разделе 1.2, между профилями может существовать объективная разность в силу удаленности 7 км между аэрологической станцией и наблюдательным пунктом ИПФ РАН. С другой стороны, стоит напомнить, что массив данных, используемых в разделе 1.2, существенно иной и выводы, сделанные в нем касательно отклонения в температуре на малых высотах, здесь неприменимы. Из рис. 1.15 видно, что средняя разность по температуре меняется

в пределах от $-0,5$ К до $+1,6$ К, в то время как разность по влажности – от $-0,5$ г/м² до 0 г/м². Соответствующие средне квадратичные отклонения принимают значения от 1,2 К до 4,6 К по температуре и от 0 до 1,9 г/м² по влажности. На большинстве высот средняя разность по температуре положительна, а по влажности отрицательна. И средние, и среднеквадратичные от разности значительно меньше общей вариации атмосферных профилей. Большинство индексов вычисляется по участку профилей, не превышающему 6 км. Если ограничиться рассмотрением только первых 6 км, то в сравнении с общей вариацией профилей разность в температуре значительно меньше, чем во влажности: среднеквадратичное отклонение в температуре в 6 раз меньше, чем общая вариация температуры, в то время как во влажности – только в 1,8 раза.

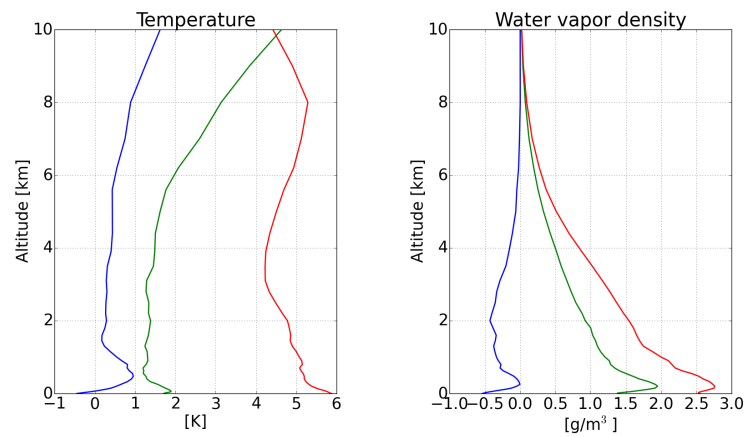


Рис. 1.15: Результаты сравнения микроволновых и зондовых данных за конвективный сезон (май–август) 2014–2018 гг.: (слева) температуры ; (справа) абсолютной влажности. Синие линии изображают среднее от разности зондовый профиль минус профиль NATPRO. Зеленые – среднеквадратичное отклонение разности. Красные линии показывает естественную вариацию (среднеквадратичное отклонение) соответствующего профиля.

Разница в атмосферных профилях не может не сказаться на самих индексах. На рис. 1.16 представлено сравнение индексов FI^{IAP} и FI^{sonde} посредством точечных диаграмм. Рисунок дополнен количественными характеристиками рассогласования между индексами (см. подпись к рис. 1.16). Можно заметить хорошую или умеренную корреляцию по всем индексам за исключением FT и MUCAPE. Коэффициенты корреляции принимают значения 0,68–0,78 для восьми индексов (TT, CAPE, EPI, LI, SI, MDPI, ShowI, TQ), и превосходят 0,8 для пяти индексов (CIN, KOI, KI, LI и TI)

Результаты максимизации предсказательных характеристик TSS и HSS для наборов данных $FI^{sonde} + NLF_{min}^{sonde}$ и $FI^{IAP} + NLF_{min}^{sonde}$ приведены в табл. 1.4 и 1.5 со-

Таблица 1.4: Индексы по аэрологическим данным ($FI^{sonde} + NLF_{min}^{sonde}$) в порядке убывания по максимальному TSS

Индекс FI^{IAP}	TSS_{max}	λ_{rrp}^{TSS}	POD	FAR	CSI	HSS_{max}	λ_{rrp}^{HSS}	POD	FAR	CSI
лучший/ худший	1/-1		1/0	0/1	1/0	1/<0		1/0	0/1	1/0
JI	0.4	25.4	0.8	0.59	0.36	0.31	26	0.76	0.59	0.36
KI	0.37	24.1	0.68	0.58	0.35	0.3	24.7	0.65	0.57	0.35
SI	0.36	35.5	0.83	0.63	0.35	0.29	39	0.69	0.59	0.35
TI	0.34	20.4	0.76	0.62	0.34	0.28	27	0.5	0.56	0.31
TQ	0.3	12.9	0.74	0.64	0.32	0.22	12.9	0.74	0.64	0.32
ShowI	0.3	4.2	0.8	0.65	0.32	0.21	4.2	0.8	0.65	0.32
TT	0.26	44.7	0.71	0.65	0.3	0.2	45.4	0.64	0.64	0.3
MUCAPE	0.25	58.7	0.57	0.63	0.29	0.22	210.2	0.4	0.58	0.26
EPI	0.22	2.4	0.64	0.66	0.29	0.17	2.4	0.64	0.66	0.29
LI	0.18	-0.52	0.43	0.63	0.24	0.17	-6.85	0.4	0.63	0.24
MDPI	0.15	15.2	0.37	0.64	0.22	0.15	15.2	0.37	0.64	0.22
CAPE	0.14	164	0.41	0.66	0.23	0.15	918	0.2	0.53	0.16
KOI	0.13	0.45	0.65	0.7	0.26	0.13	-5.3	0.26	0.63	0.18
CIN	0.13	-876	0.53	0.69	0.24	0.12	-100	0.22	0.61	0.16
FT	0.08	2.1	0.32	0.69	0.19	0.08	2.1	0.32	0.69	0.19

ответственно. Индексы в таблицах расположены по убыванию максимального TSS (TSS_{max}). В табл. 1.6 представлены разность между табл. 1.5 и 1.4 в TSS_{max} и максимальному HSS (HSS_{max}). Исходя из результатов в таблицах, можно заключить, что предсказательные характеристики индексов по микроволновым данным превосходят соответствующие характеристики радиозондовых индексов. В особенности восемь микроволновых индексов (ShowI, MUCAPE, TT, TQ, JI, SI, KI и TI) с TSS_{max} от 0,4 до 0,43 можно рассматривать как наилучшие предикторы, как с точки зрения TSS_{max} , так и HSS_{max} . В случае аэрологических данных индексы JI, KI, SI и TI являются наилучшими с TSS_{max} , принимающим значения от 0,34 до 0,4, и HSS_{max} – от 0,28 до 0,31. Глядя на табл. 1.6, можно заметить, что это именно те индексы, что наиболее близки к микроволновым по значениям TSS_{max} и HSS_{max} , в то время как предсказательные характеристики других индексов значительно уступают микроволновым.

В [13] так же, как и на рис. 1.16, проводилось сравнение микроволновых и радиозондовых индексов. При этом исследования проводились на аэрологической станции

Таблица 1.5: Индексы по данным RPG-HATPRO ($FI^{IAP} + NLF_{min}^{sonde}$) в порядке убывания по максимальному TSS .

Индекс FI^{sonde}	TSS_{max}	λ_{rrp}^{TSS}	POD	FAR	CSI	HSS_{max}	λ_{rrp}^{HSS}	POD	FAR	CSI
лучший/ худший	1/-1		1/0	0/1	1/0	1/<0		1/0	0/1	1/0
ShowI	0.43	2.3	0.81	0.64	0.33	0.33	-0.8	0.64	0.59	0.33
MUCAPE	0.43	6.3	0.8	0.63	0.34	0.33	56	0.64	0.58	0.34
TT	0.42	47.8	0.74	0.61	0.34	0.35	48.8	0.59	0.56	0.34
TQ	0.42	15	0.78	0.63	0.33	0.33	16.7	0.57	0.57	0.33
JI	0.41	27.6	0.76	0.63	0.33	0.35	30.2	0.51	0.52	0.33
SI	0.41	41.3	0.79	0.64	0.33	0.34	45.2	0.54	0.55	0.33
KI	0.4	26.3	0.72	0.62	0.33	0.32	39.3	0.55	0.57	0.32
TI	0.4	25.2	0.77	0.64	0.32	0.34	32.9	0.48	0.52	0.31
EPI	0.37	2.5	0.86	0.68	0.3	0.27	-2.1	0.5	0.6	0.28
LI	0.37	-0.3	0.7	0.64	0.31	0.32	-2.5	0.5	0.55	0.31
CAPE	0.33	335	0.6	0.63	0.3	0.31	974	0.38	0.49	0.28
KOI	0.31	-4.2	0.52	0.6	0.29	0.28	-4.2	0.52	0.6	0.29
FT	0.31	3.5	0.68	0.67	0.28	0.23	3.35	0.64	0.66	0.28
CIN	0.29	-651	0.74	0.7	0.27	0.25	-138	0.49	0.62	0.27
MDPI	0.29	7.5	0.62	0.66	0.28	0.22	7.5	0.62	0.66	0.28

MOL-RAO (52,2° с.ш, 14,1° в.д.). Радиозондирование производилось посредством зондов Vaisala, заявленная точность которых (0,5 К и 5% по относительной влажности) превосходит характеристики зондов, используемых на станции Нижний Новгород. В [13] микроволновые данные были получены прибором MA-3000A от radiometrics (см. [53]), который с технической точки зрения довольно похож на HATPRO. В таблице 1.6 в последней колонке приведены коэффициенты корреляции между микроволновыми и радиозондовыми индексами в [13]. При этом мы приводим значения корреляции для случая процедуры восстановления атмосферных профилей из радиометрических данных посредством регрессионных моделей (в статье [13] так же рассматривается альтернативный способ восстановления). Исходя из табл. 1.6 можно заключить, что в плане корреляций наши результаты не сильно отличаются от приведенных в [13]. Следует подчеркнуть, что высокая корреляция между индексами отражает их качественное соответствие и не означает количественной схожести предсказательных характеристик.

Можно видеть следующие возможные причины того, что предсказательные ха-

Таблица 1.6: Разница между результатами в табл. 1.5 и 1.4 в максимальном TSS и в максимальном HSS . Индексы повторяют порядок в табл. 1.5.

Индекс	ΔTSS_{max}	ΔHSS_{max}	COR	COR из [13]
ShowI	0.13	0.12	0.74	0.74
MUCAPE	0.18	0.11	0.39	-
TT	0.16	0.15	0.68	0.74
TQ	0.12	0.11	0.75	0.80
J1	0.01	0.04	0.78	0.81
SI	0.05	0.05	0.78	0.82
KI	0.03	0.02	0.81	0.82
TI	0.06	0.06	0.86	0.85
EPI	0.15	0.1	0.75	-
LI	0.19	0.15	0.84	0.92
CAPE	0.19	0.16	0.74	0.82
KOI	0.18	0.15	0.84	0.85
FT	0.23	0.15	0.56	0.77
CIN	0.16	0.13	0.86	0.21
MDPI	0.14	0.07	0.71	0.68

характеристики микроволновых индексов значительно превосходят соответствующие характеристики радиозондовых индексов:

1. Более низкая чувствительность флюксметра, расположенного на аэрологической станции Нижний Новгород, чем флюксметра в наблюдательном пункте ИПФ РАН.
2. 30-минутное усреднение может захватывать данные несколько ближе к вспышке (незначительный эффект), а также большое время усреднения соответствует большой точности измерений (в смысле измеряемых количеств, см [54], о повышении разрешения говорить достаточно сложно).

С целью нивелирования первого фактора были рассмотрены предсказательные способности радиозондовых индексов с определением вспышек по данным флюксметра в пункте ИПФ РАН (набор данных $FI^{sonde} + NLF_{min}^{IAP}$). Как видно из табл. 1.7, подобная смена не меняет картину в целом. Наилучшие индексы все также J1, KI и SI с $TSS_{max}=0,36$ и $HSS_{max}=0,25-0,31$, однако характеристики нескольких индексов (CIN, KOI, LI, EPI и MDPI) действительно выросли. Чтобы проверить влияние второго фактора, табл. 1.5 была пересчитана с данными микроволновых индексов, полученных

Таблица 1.7: Индексы по данным RPG-НАТPRO ($FI^{sonde} + NLF_{min}^{IAP}$) в порядке убывания по максимальному TSS

Индекс FI^{sonde}	TSS_{max}	λ_{rrp}^{TSS}	POD	FAR	CSI	HSS_{max}	λ_{rrp}^{HSS}	POD	FAR	CSI
лучший/ худший	1/-1		1/0	0/1	1/0	1/<0		1/0	0/1	1/0
TI	0.36	19.1	0.82	0.68	0.3	0.31	27.7	0.51	0.57	0.3
KI	0.36	22.3	0.78	0.67	0.3	0.25	24.1	0.68	0.65	0.3
JI	0.36	25.4	0.79	0.67	0.3	0.25	26.1	0.74	0.66	0.3
SI	0.34	35.2	0.84	0.69	0.29	0.24	41.5	0.55	0.64	0.28
TQ	0.33	11.4	0.9	0.7	0.29	0.22	16.4	0.41	0.62	0.24
ShowI	0.32	4.2	0.82	0.7	0.28	0.24	1.8	0.54	0.64	0.27
EPI	0.29	2.5	0.71	0.69	0.28	0.2	2.5	0.71	0.69	0.28
TT	0.28	44.7	0.73	0.7	0.27	0.22	51	0.26	0.51	0.2
LI	0.28	1.6	0.71	0.7	0.27	0.22	-1.8	0.34	0.6	0.23
MUCAPE	0.26	129	0.5	0.64	0.26	0.23	129	0.5	0.64	0.26
KOI	0.23	0.5	0.74	0.72	0.26	0.2	-4.2	0.4	0.64	0.23
CIN	0.21	-876	0.6	0.71	0.24	0.18	-48	0.23	0.56	0.18
MDPI	0.2	9.6	0.62	0.72	0.24	0.17	15.7	0.38	0.66	0.22
CAPE	0.19	118	0.51	0.7	0.23	0.21	529	0.32	0.6	0.22
FT	0.06	9.4	0.97	0.78	0.22	0.04	-1.1	0.36	0.5	0.03

без усреднения. В результате уменьшение предсказательных характеристик составило не более 0,03 в значениях TSS_{max} и HSS_{max} . Это указывает на другую причину, например, неожиданно низкая точность используемых радиозондовых данных, прежде всего в измерениях влажности (см. рис. 1.15), либо фактор не попавший в поле нашего рассмотрения.

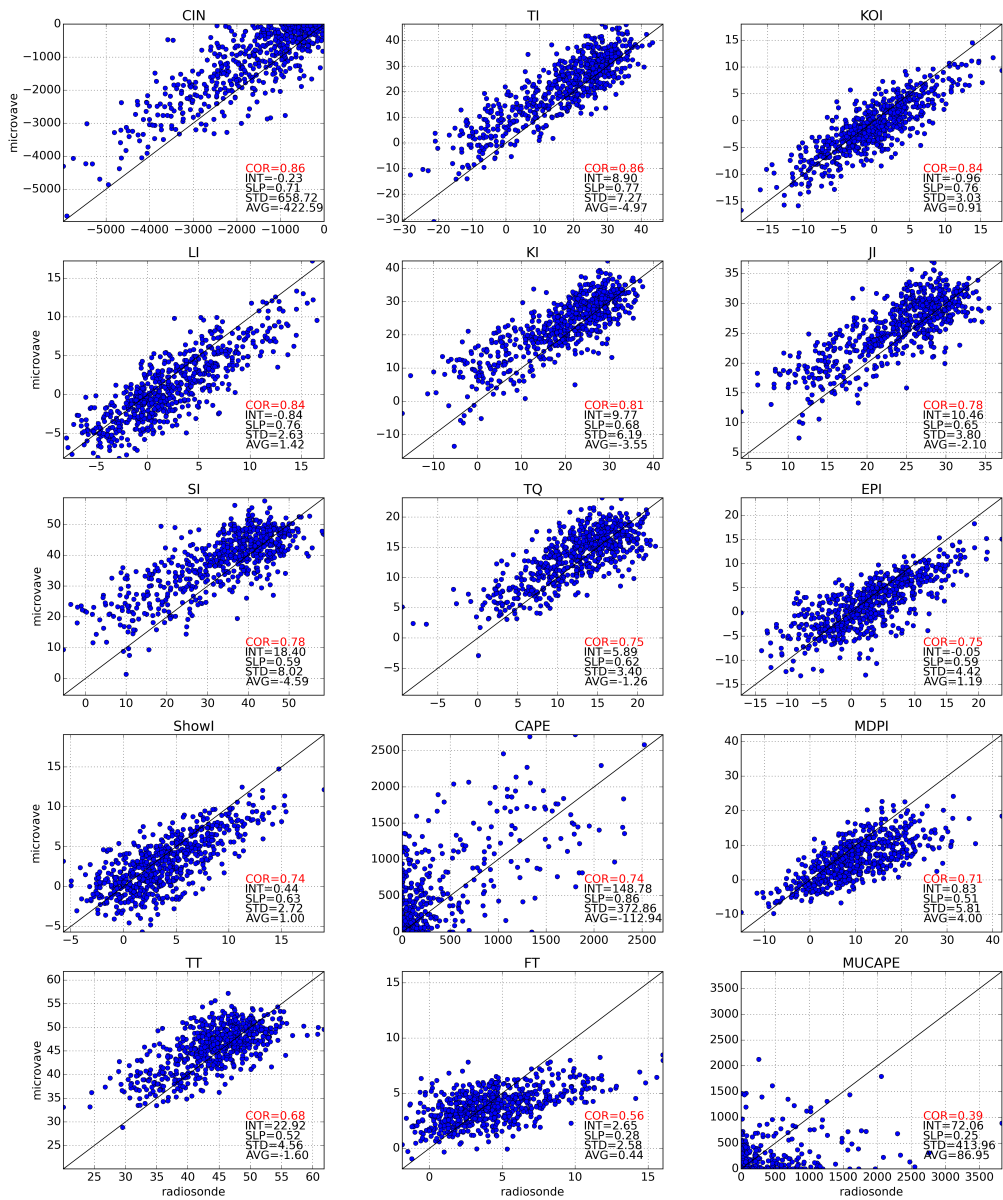


Рис. 1.16: Точечная диаграмма сравнения индексов, полученных посредством микро-волновых и аэрологических данных. Расшифровка значений на диаграммах: COR – коэффициент корреляции; SLP (slope) и INT (intercept) – коэффициенты линейной зависимости $FI^{IAP} = INT + SLP \cdot FI^{sonde}$, полученной методом наименьших квадратов; AVG – среднее и STD – среднеквадратичное от разности $FI^{sonde} - FI^{IAP}$. Таким образом, AVG, STD и INT имеют размерность индекса, а SLP и COR безразмерны.

1.4 Выводы главы

На основании результатов, описанных в главе 1, можно сделать следующие выводы.

Сравнение наблюдаемых спектров с симуляциями на основе радиозондовых измерений и существующих моделей распространения микроволнового излучения в атмосфере (МРМ - Microwave Propagation model) выявляет существенную систематическую разницу (до 2 К) яркостной температуры излучения атмосферы в диапазоне 51–54 ГГц. Зависимость разности от модели поглощения воздуха и ее спектральная форма позволяют отождествить наблюдаемую разность со спектроскопической ошибкой модельных симуляции. Это позволяет сделать вывод, что текущие варианты модели МРМ имеют существенное систематическое смещение. Показано, что модель, построенная на основе формализма ECS (Energy Corrected Sudden), существенно снижает спектроскопическую ошибку и наилучшим образом соответствует натурным наблюдениям в диапазоне 50-60 ГГц.

Сравнение прогностических характеристик индексов, рассчитанных по микроволновым и аэрологическим данным, показало, что для ряда индексов микроволновые данные предпочтительны: при одной и той же заблаговременности 12 часов индексы, использующие результаты микроволновых измерений, показывают лучшую прогностическую способность, чем те же индексы, использующие радиозондовые измерения.

Глава 2

Исследование химического /фотохимического равновесия малых примесей мезосферы – нижней термосферы

2.1 Введение

Известно, что малые примеси (МП) средней атмосферы и физико-химические процессы с их участием – один из ключевых факторов, определяющих фундаментальные свойства структуры и динамики данной области атмосферы. В частности, они оказывают существенное влияние на радиационный и тепловой баланс, например, обеспечивают один из основных источников нагрева воздуха в средней атмосфере за счет поглощения УФ излучения солнца и последующих экзотермических реакций. С другой стороны, эволюция МП подвержена влиянию всех типов атмосферного переноса, чувствительна к температуре, вариациям солнечной освещенности и др., т.е. МП являются важными индикаторами и трассерами основных атмосферных процессов, в том числе обусловленных климатическими изменениями. Их пространственное распределение и эволюция определяются взаимосвязанными физическими и химическими процессами, образующими сложную систему, изменчивость которой описывается химико-транспортными моделями – системами дифференциальных уравнений высокого порядка.

Экспериментальное наблюдение МП средней атмосферы производится с помощью двух групп методов: контактных и дистанционных. Контактные измерения осуществляются посредством наземных стационарных и мобильных станций мониторинга,

самолетов, зондов, стратостатов или ракет и, как правило, обеспечивают более высокую точность измерений. При этом они имеют недостаточно хорошее горизонтальное покрытие или временное разрешение, либо существенные ограничения по высоте или, как в случае самолетных, стратостатных и ракетных измерений, оказываются весьма дорогостоящими и производятся эпизодически. Дистанционные методы позволяют зондировать атмосферу в существенно большем диапазоне высот и горизонтальных координат, однако для них существует проблема точности измерений, поскольку эти методы оперируют с интегральным сигналом, который формируется излучением, приходящим, как правило, из широкого диапазона высот и почти всегда сильно зашумленным. Поэтому, несмотря на значительный рост объема данных наблюдений за эволюцией МП средней атмосферы в последние два десятилетия (прежде всего, за счет спутниковых наблюдений посредством приборов NASA и Европейского космического агентства), число доступных прямым и регулярным измерениям МП остается по-прежнему невелико.

Хорошо известный способ увеличить информативность экспериментальных данных – использование химико-транспортных моделей для извлечения информации о неизмеряемых характеристиках из доступных экспериментальных данных. В рамках такого подхода (его нередко называют «обратным моделированием») модель выступает в качестве априорной связи между измеряемыми непосредственно и восстанавливаемыми характеристиками. Они могут применяться для восстановления неизмеряемых МП из имеющихся экспериментальных данных, независимого определения параметров атмосферы (например, температуры), валидации данных одновременных наблюдений нескольких МП, оценки констант химических реакций, известных с большой погрешностью, исследования источников (эмиссий) и др. Отметим, что привлечение моделей к обработке измеряемых данных может значительно (в разы) увеличивать информативность результатов экспериментальных кампаний по исследованию средней атмосферы.

Хотя применение обратного моделирования в различных областях науки является в настоящее время повсеместным, всегда возникает вопрос, что делать, когда исходные данные зашумлены, например, включают в себя ошибку измерений. Нелинейность и нелокальность изучаемых систем и процедур восстановления означают возможность сильного отклика системы на малые изменения начальных условий и параметров, что делает прямой пересчет известной ошибки измерений в погрешности восстанавливаемых характеристик бессмысленным. Это в особенности касается МП средней атмосферы, где вопрос об ошибке измерений возникает еще на начальной стадии обработки первичных экспериментальных данных, получаемых в результате дистанционного зондирования атмосферы. Известный способ преодолеть указанную

проблему – построение статистического ансамбля восстанавливаемых параметров и неизвестных переменных используемой модели; характеристики этого ансамбля должны соответствовать характеристикам погрешностей экспериментальных данных. Математически корректный подход к построению такого ансамбля основан на теоремах Байеса и включает отыскание многомерной функции распределения переменных и параметров модели [55].

Известно, что уравнения химической кинетики являются диссипативными, т.е. в общем случае неинтегрируемыми. Однако, диссипативность является важным свойством химии атмосферы, что обуславливает присутствие заметного числа «быстрых» переменных: МП со сравнительно малым временем жизни, что в большинстве случаев позволяет рассматривать их находящимися в состоянии локального устойчивого фотохимического равновесия. Алгебраические соотношения, следующие из баланса стоков и источников данных компонент, являются наиболее простыми априорными связями между измеряемыми и неизмеряемыми МП и уже несколько десятилетий используются для решения широкого диапазона локальных задач. В частности, такой подход применялся для исследования химии стратосферы (10-50 км), в том числе, для определения критических параметров в каталитических циклах разрушения озона в полярной стратосфере. В частности, в работах [56,57] условие фотохимического равновесия ClO и Cl_2O_2 и данные дневных и ночных измерений этих компонент в полярной стратосфере применялись для оценки температурной зависимости концентрации ClO , констант реакций, определяющих равновесие $\text{ClO} + \text{ClO} + \text{M} \leftrightarrow \text{Cl}_2\text{O}_2 + \text{M}$ и константы фотодиссоциации Cl_2O_2 . В работе [58] предложен метод восстановления концентрации OH по данным спутниковых измерений NO_2 и HNO_3 , основанный на использовании простого алгебраического соотношения, следующего из условия фотохимического равновесия для HNO_3 . В работах [59, 60] предложены алгоритмы восстановления распределений OH и HO_2 по данным спутниковых измерений O_3 , NO_2 , H_2O , HNO_3 LIMS/Nimbus 7 и UARS с помощью алгебраических моделей, следующих из фотохимического равновесия O_x , HO_x и NO_x компонент. В работе [61] фотохимическое равновесие NO и NO_2 было использовано для понимания суточных вариаций NO , измеренных в процессе самолетных кампаний. В работе [62] одновременные данные зондовых измерений NO , NO_2 , HNO_2 , O_3 и N_2O и условие фотохимического равновесия для различных азотных компонент используются для определения OH , N_2O_5 и NO_y . Подобный подход был использован в работе [63], где по данным самолетных измерений NO , ClO и O_3 были восстановлены концентрации NO_2 , N_2O_5 , ClNO_3 , HNO_3 и OH . В работе [64] было обнаружено, что концентрация NO_3 , измеряемая прибором GOMOS на спутнике ENVISAT, коррелирует с температурой вплоть до высоты 45 км, что объясняется фотохимическим равновесием NO_3 и O_3 . В работе [65] усло-

вие равновесия NO и NO₂ использовано для проверки корректности нового подхода восстановления распределений этих компонент по данным измерений MIPAS/Envisat.

Также, такой подход применялся для исследования химии компоненты семейств нечетных соединений кислорода O_x (O, O(¹D), O₃) и водорода HO_x (H, OH, HO₂) и атмосферных свечений в мезосфере (50-90 км) и в области верхней мезосферы – нижней термосферы (80-105 км). Наиболее простая, по-видимому, химическая модель, позволяющая реализовывать обсуждаемый подход, следует из условия химического равновесия озона. Это условие уже несколько десятилетий используется для определения распределений O и H и нагрева за счет экзотермических реакций на высотах мезосферы и нижней термосферы по данным дневных и ночных ракетных и спутниковых измерений озона, интенсивности свечений OH*, O(¹S) и O₂(a¹) в ИК диапазоне [66–83]. Кроме того, условие химического равновесия озона было использовано для определения сезонной и глобальной климатологии O по данным спутниковых измерений WINDII/UARS, для исследования механизмов эмиссии OH*, морфологии и изменчивости его распределения на высотах мезосферы – нижней термосферы, для исследования отклика мезосферного слоя OH* на распространение внутренних гравитационных волн, для определения зависимости высоты положения максимума OH* от концентрации O и температуры, анализе годовых вариаций OH* и т.п.

Отметим, что во всех упомянутых выше исследованиях условие фотохимического равновесия МП средней атмосферы применяется без должного математического анализа. В лучшем случае, принадлежность конкретной МП к быстрым переменным обосновывается тем, что время ее жизни много меньше относительно времён жизни других компонент, относительно продолжительности суток, дня, ночи и т.д. При этом совершенно не учитывается временная эволюция самого равновесного значения интересующей МП, что впоследствии, при использовании ее фотохимического равновесия может приводить к значительным неконтролируемым качественным и количественным ошибкам, например, в величинах восстанавливаемых МП средней атмосферы.

2.2 Общий подход к исследованию условия равновесия малых примесей атмосферы

Пусть есть набор реакций, определяющий эволюцию некоторой атмосферной фотохимической системы. Рассмотрим уравнение химической кинетики для интересующей нас компоненты X:

$$\frac{dX}{dt} = I_X - S_X, \quad (2.2.1)$$

где $I_X(t)$ и $S_X(t, X)$ фотохимические источники и стоки соответственно с учетом замены $\tau_X = \frac{X}{S_X}$, $X^{eq} = \tau_X \cdot I_X$ это уравнение можно переписать в следующем виде:

$$\frac{dX}{dt} = -\frac{1}{\tau_X} \cdot (X - X^{eq}), \quad (2.2.2)$$

где τ_X – время жизни X , X^{eq} – его равновесная концентрация с характерным временем эволюции $\tau^{eq} = X^{eq}/|dx^{eq}/dt|$, которое определяется изменениями, главным образом, других компонент рассматриваемой системы. Из этого уравнения можно видеть, что в случае, когда $\tau_X \ll \tau^{eq}$, X за характерное время $t \approx \tau_X$ приблизится к своему равновесному значению (т.е. $X \approx X^{eq}$) и далее будет отслеживать динамику X^{eq} и эволюционировать с характерным временем τ^{eq} (см. рисунок 2.1). В случае, когда $\tau_X > \tau^{eq}$, X будет «отставать» от «убегающего» от нее равновесного значения, так что в некоторые интервалы локального времени отношение X/X^{eq} может на несколько порядков отличаться от 1.

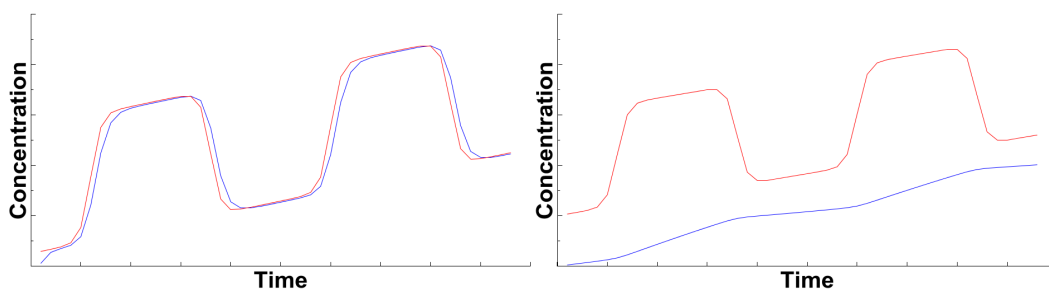


Рис. 2.1: Два примера эволюции (синие кривые) и (красные) при разных соотношениях τ_X и τ^{eq} : $\tau_X \ll \tau^{eq}$ (левый), $\tau_X > \tau^{eq}$ (правый).

Представленный качественный анализ демонстрирует, что самый простой путь проверки выполнения условия химического/фотохимического равновесия некой компоненты – численное моделирование и непосредственное сравнение локальных значений X^{eq} и результатов расчета концентрации этой компоненты с помощью полной модели интересующей нас фотохимической системы с учетом всех возможных процессов атмосферного переноса.

Таким образом, сформулируем общий подход к исследованию применимости условия химического/фотохимического равновесия малых газовых составляющих атмосферы. Он должен включать в себя выполнение следующих пунктов:

1. Определение с помощью трехмерного химико-транспортного моделирования пространственно-временных зон, где эволюция интересующей нас компоненты происходит вблизи локального устойчивого положения равновесия (т.е. $X(t) \approx X^{eq}$).

2. Математическое построение количественных критериев, позволяющих, например, по локальным данным определять границы зон равновесия и таким образом контролировать ошибки применения этого условия равновесия для восстановления неизмеряемых характеристик. В качестве такого критерия может выступать условие:

$$K_X = \frac{\tau_X}{\tau^{eq}} \ll 1. \quad (2.2.3)$$

3. Проверка с помощью результатов трехмерного химико-транспортного моделирования соответствия критериев границам пространственно-временных зон равновесия.

2.3 Описание используемой глобальной 3D химико-транспортной модели МНТ

Мы используем 3-D химико-транспортную модель МНТ, разработанную в Институте атмосферной физики (Leibniz Institute of Atmospheric Physics), Кьюленсборн, Германия. История ее создания подробно описана в [84]. Модель создавалась специально для изучения процессов в регионе мезосферы-нижней термосферы (МНТ). Она осуществляет моделирование фотохимии и переноса посредством адвекции (ветром) и диффузии (молекулярной и вихревой). При этом пренебрегается влиянием малых газовых составляющих на основные молекулярные кислород и азот. По сути, модель осуществляет численное решение следующей системы уравнений:

$$\frac{\partial X_i(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\nabla (X_i \vec{u}) + \nabla (\mathbf{D} \nabla X_i) + PL_i(\vec{r}, t, X_1 \dots X_N), \quad (2.3.1)$$

где X_i – концентрация i -й малой газовой составляющей в точке с координатами \vec{r} в момент времени t , $\vec{u}(\vec{r}, t)$ – скорость ветра. Операция ∇ берется по пространственной координате \vec{r} , \mathbf{D} – коэффициент диффузии. Первое слагаемое правой части (2.3.1) отвечает за адвекцию; второе – за диффузию; третье слагаемое PL_i описывает фотохимию: баланс источников и стоков i -й компоненты. Явная зависимость PL_i от \vec{r} и t обусловлена зависимостью коэффициентов реакций от температуры и концентрации основных компонент (фактически давления), а также зависимостью реакций фотодиссоциации от зенитного угла солнца и солнечной активности.

Система (2.3.1) в настоящей модели решается на сетке давления, что является общепринятой практикой в атмосферном моделировании (см., например [85]). Эволюция полей скорости ветра, высоты (ввиду того что используется сетка давления) и температуры является входными данными для химико-транспортной модели. Источником этих данных является модель общей динамики атмосферы. В исследованиях,

приведенных в диссертации, использовались модели СОМА-IAP (COlogne Model of the Middle Atmosphere of the Institute of Atmospheric Physics) [86–88] и СМАМ (Canadian Middle Atmosphere Model) [89–92]. Горизонтальное разрешение химико-транспортной модели выбиралось таким же, как у моделей динамики атмосферы: для СОМА-IAP – 5° по широте и $22,5^\circ$ по долготе, для СМАМ – $5,625^\circ$ по широте и долготе. В рассматриваемых задачах разрешение по высоте составляет 118 уровней давления, что соответствует равномерной сетке по условной высоте от 0 до 135 км. Условная высота z_{eff} уровня давления P определяется экспоненциальным соотношением:

$$P = P_0 \cdot \exp\left(-\frac{z_{eff}}{H_{scale}}\right), \quad (2.3.2)$$

где $P_0=1013$ мБар – давление на нулевой высоте и $H_{scale}=7$ км. Диссертантом реализована возможность кратного увеличения разрешения модели по высоте, что было использовано в работе [93].

Для реализации адвекционного переноса используется схема Вальчека [94, 95]. Диффузия осуществляется посредством алгоритма Томаса, изложенного в разделе 2.9 книги [96]. В модели реализована диффузия только в вертикальном направлении. Это обусловлено тем, что градиенты по высоте значительно больше, чем по горизонтальным направлениям, а также масштабы по вертикали значительно меньше (около 1,15 км по вертикали и сотни километров по горизонтали). Молекулярная диффузия оказывает заметное влияние на высотах более 100 км. На меньших высотах большее значение играет так называемая вихревая диффузия, которая отражает влияние динамики (перемешивания воздушных масс) на подсеточных масштабах. Значения вертикальной вихревой диффузии взяты из работы [97].

Химический модуль включает 17 химических компонент: Н, ОН, НО₂, Н₂О₂, Н₂, Н₂О, СН₄, О, О(¹D), О₃, N, NO, NO₂, NO₃, N₂O, СО, СО₂. Список используемых реакций приведен в таблице 2.1¹. Компонента М – концентрация воздуха (сумма О₂ и N₂) определяется из давления посредством уравнения состояния идеального газа и температуры. Соотношение О₂ и N₂ в М протабулировано для каждого из 118 уровней. Большинство коэффициентов реакций табл. 2.1 взято из [98]. Коэффициенты температурозависящих реакций пересчитываются при каждом изменении динамики. Ввиду того что система дифференциальных уравнений, описывающих фотохимию МНТ, является жесткой [99], для ее численного решения используется концепция семей (см. [100]). В модели используются следующие семьи: нечетного кислорода О_Х=О+О(¹D)+О₃, нечетного водорода Н_Х=Н+ОН+НО₂+Н₂О₂ и нечетного азота NO_Х=N+NO+NO₂+NO₃. В коде предусмотрена возможность размыкания семей (в

¹Во всей главе 2 реакции и их коэффициенты будут иметь обозначения табл. 2.1

рассматриваемых задачах может размыкаться семья O_X), при этом для адекватности результатов необходимо соответствующим образом уменьшить шаг интегрирования по времени. В реакциях фотодиссоциации используются препросчитанные коэффициенты, масштабированные в соответствии с солнечной активностью [88]. Результаты модели вошли в большое количество публикаций [101–105].

Таблица 2.1: Список реакций химико-транспортной модели. Коэффициент реакции обозначается как c_i , где c – символ верхней строки, а i – номер в левом столбце. Обозначение коэффициента реакции также будем использовать для обозначения самой реакции: например, реакция k_7 .

	k	f	g
1	$O(^1D)+O_2 \rightarrow O+O_2$	$OH+O_3 \rightarrow O_2 +HO_2$	$NO_2 +O_3 \rightarrow NO_3 +O_2$
2	$O(^1D)+N_2 \rightarrow O+N_2$	$HO_2 +O_3 \rightarrow OH+2O_2$	$N+OH \rightarrow NO+H$
3	$O(^1D)+O_3 \rightarrow O_2 +2O$	$H+OH+N_2 \rightarrow H_2 O+N_2$	$NO+HO_2 \rightarrow NO_2 +OH$
4	$O(^1D)+O_3 \rightarrow 2O_2$	$OH+H_2 \rightarrow H_2 O+H$	$H +NO_2 \rightarrow OH+NO$
5	$O(^1D)+N_2 O \rightarrow 2NO$	$OH+OH \rightarrow H_2 O+O$	$NO_3 +NO \rightarrow 2NO_2$
6	$O(^1D)+N_2O \rightarrow N_2+O_2$	$OH+OH+M \rightarrow H_2O_2+M$	$N+NO \rightarrow N_2+O$
7	$O(^1D)+H_2O \rightarrow 2OH$	$OH+HO_2 \rightarrow H_2O+O_2$	$N+NO_2 \rightarrow N_2O+O$
8	$O(^1D)+H_2 \rightarrow H+OH$	$H_2O_2+OH \rightarrow H_2O+HO_2$	$O_2 +h\nu \rightarrow 2O$
9	$O(^1D)+CH_4 \rightarrow CH_3+OH$	$HO_2+HO_2 \rightarrow H_2O_2+O_2$	$O_2+h\nu \rightarrow O+O(^1D)$
10	$O(^1D)+CH_4 \rightarrow H_2+CH_2O$	$2HO_2+M \rightarrow H_2O_2+O_2+M$	$O_3+h\nu \rightarrow O_2+O$
11	$O+O+M \rightarrow O_2+M$	$CH_3+O \rightarrow CH_2O+H$	$O_3 +h\nu \rightarrow O_2+O(^1D)$
12	$O+O_2+M \rightarrow O_3+M$	$OH+CO \rightarrow H+CO_2$	$N_2+h\nu \rightarrow 2N$
13	$O+O_3 \rightarrow O_2+O_2$	$CH_4+OH \rightarrow CH_3+H_2O$	$NO+h\nu \rightarrow N+O$
14	$H+HO_2 \rightarrow 2OH$	$CH_3+O_2+M \rightarrow CH_3O_2 +M$	$NO_2+h\nu \rightarrow NO+O$
15	$H+HO_2 \rightarrow H_2O+O$	$O_3+N \rightarrow NO+O_2$	$N_2O+h\nu \rightarrow N_2 +O(^1D)$
16	$H+HO_2 \rightarrow H_2+O_2$	$NO_3+O \rightarrow NO_2+O_2$	$N_2O+h\nu \rightarrow N+NO$
17	$OH+O \rightarrow H+O_2$	$O+NO+M \rightarrow NO_2 +M$	$H_2O+h\nu \rightarrow H+OH$
18	$HO_2+O \rightarrow OH+O_2$	$NO_2+O \rightarrow NO+O_2$	$CH_4+h\nu \rightarrow CH_2 +H_2$
19	$H_2O_2 +O \rightarrow OH+HO_2$	$NO_2+O+M \rightarrow NO_3+M$	$H_2O_2 +h\nu \rightarrow 2OH$
20	$H+O_2+M \rightarrow HO_2+M$	$N+O_2 \rightarrow NO+O$	$NO_3+h\nu \rightarrow NO_2+O$
21	$H+O_3 \rightarrow OH+O_2$	$NO+O_3 \rightarrow NO_2 +O_2$	$CO_2+h\nu \rightarrow CO+O$

Работа модели сводится к поочередному применению к малой газовой составляющей адвекционного транспорта, вертикальной диффузии и фотохимии. Иными словами, шаг интегрирования для переноса и фотохимии одинаковый. В зависимости

от рассматриваемой задачи он составляет 9 или 90 секунд.

2.4 Исследование химического равновесия ночного озона в задаче восстановления O по данным SABER /TIMED

Атомарный кислород (O) является ключевой малой газовой составляющей МНТ региона. Будучи результатом фотолиза молекулярного кислорода, он является нелокальным (как по времени, так и по пространству) посредником, участвующим в трансформации поглощенной солнечной энергии в нагрев МНТ за счет экзотермических химических реакций. С другой стороны, столкновения CO_2 с O усиливают радиационное охлаждение этой области в полосе CO_2 15 мкм [106, 107]. Наряду с атомарным водородом (H) он ответственен за формирование наблюдаемых свечений МНТ региона. Измерения *in situ* малых газовых составляющих в МНТ регионе сводятся к исключительно ракетному зондированию. Ввиду того, что количество ракетных пусков сильно ограничено их высокой стоимостью, особое значение принимают дистанционные методы определения концентрации составляющих МНТ, и в частности O.

Рассмотрим один из таких методов: определение ночного атомарного кислорода по результатам измерения свечения возбужденного гидроксила (OH^*) прибором SABER (The Sounding of the Atmosphere using Broadband Emission Radiometry) на спутнике Timed (Thermosphere-Ionosphere-Mesosphere Energetics and Dynamics) [78]. Прибор SABER проводит лимбовые измерения в различных оптических диапазонах, в том числе на 2 мкм, соответствующих переходам $\text{OH}^*(\nu 9 \rightarrow \nu 7)$ и $\text{OH}^*(\nu 8 \rightarrow \nu 6)$ ². Возбужденный гидроксил является продуктом реакции k_{21} табл. 2.1³. Измеренные лимбовые яркости (интенсивность на определенном угле зрения, $\text{Вт} \cdot \text{м}^{-2} \cdot \text{ср}^{-1}$, см. [77]) пересчитываются в объемную плотность излучения (количество фотонов, излученных в единице объема фотоны $\cdot \text{см}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$ – volume emission rate – VER). Пересчет предполагает решение некорректной обратной задачи. Задача линейна в силу того, что перенос излучения рассматривается в приближении слабых линий, то есть отсутствия поглощения рассматриваемой компонентой (OH^*). Эта задача общеизвестна и очень часто решается в спутниковом зондировании. Ввиду этого, а также того, что соотношение сигнал-шум в этой задаче очень высоко, не будем отдельно рассматривать ошибки, связанные с восстановлением VER. Для упрощения изложения будем считать, что

²Влиянием переходов $\text{OH}^*(\nu 7 \rightarrow \nu 5)$ пренебрегают см. [78].

³В описанной версии химико-транспортной модели возбуждение OH не рассматривается.

SABER измеряет VER в определенном спектральном диапазоне (2 мкм). Опуская подробности, связанные с формой спектральных каналов, аппаратными функциями прибора и достаточно сложным спектром излучения переходов гидроксила, связь между VER на 2 мкм и составляющими атмосферы следующая:

$$VER_{2\mu m}(T, O_2, N_2, O) = \Phi \cdot \left[\frac{v_9}{A_9 + C_9} A_{97} + \frac{v_8}{A_8 + C_8} A_{86} + \frac{v_9}{A_9 + C_9} \frac{A_{98} + C_{98}}{A_8 + C_8} A_{86} \right], \quad (2.4.1)$$

где Φ – скорость реакции k_{21} ($\Phi \equiv k_{21} \cdot H \cdot O_3$). Остальные составляющие формулы (2.4.1) приведены в табл. 2.2. Выражение (2.4.1) описывает процесс излучения в состоянии (фотохимического) равновесия. Данное приближение оправдано тем, что времена релаксации уровней намного меньше, чем характерные времена изменения составляющих атмосферы. Формула описывает процессы спонтанного излучения переходов $OH^*(\nu 9 \rightarrow \nu 7)$ и $OH^*(\nu 8 \rightarrow \nu 6)$. При этом населенности возбужденных состояний $OH^*(\nu 9)$ и $OH^*(\nu 8)$ определяются: реакцией k_{21} (источников), потерями в результате столкновений и реакций с O_2 , N_2 и O , а также столкновительным гашением с переходом из $OH^*(9-8)$. В работе [78] приведены ссылки/источники коэффициентов, приведенных в табл. 2.2. Для определения атомарного кислорода из $VER_{2\mu m}$ в [78] используется предположение о фотохимическом равновесии ночного озона (O_3), то есть что концентрация ночного O_3 определяется балансом источника (реакции k_{12}) и стока (k_{21}). В [78] указано, что в рамках такого подхода возможен учет реакции k_{13} , но это делает схему численно нестабильной и может приводить к нефизичным результатам. В результате равенство скоростей реакции k_{12} и k_{21} дает:

$$k_{21} \cdot H \cdot O_3 = k_{12} \cdot O \cdot O_2 \cdot M. \quad (2.4.2)$$

Напомним, что $\Phi \equiv k_{21} \cdot H \cdot O_3$. Таким образом, подставив в (2.4.1) правую часть (2.4.2), получаем связь O с T , O_2 , N_2 и $VER_{2\mu m}$. Концентрации молекулярных кислорода и азота определяются из измерений температуры и уравнения состояния идеального газа. При этом соотношение смеси O_2 предполагалось равным 0,21. По причине наличия членов с O в (2.4.1) (см. табл. 2.2) результирующее выражение для O является квадратным уравнением.

Следует отметить, что в работе [80] $VER_{2\mu m}$ используется для определения концентрации атомарного водорода (H). При этом помимо формулы (2.4.1) также привлекается концентрация озона, измеренного по эмиссиям на 9,6 мк. Ввиду наличия в формуле (2.4.1) гашения на O , определяемого по вышеописанной методике, восстановление H также завязано на предположении о фотохимическом равновесии озона.

В работе [78] границы применимости предположения о фотохимическом равновесии ночного озона не обсуждаются, но делается вывод о малых концентрациях ночного O

Таблица 2.2: Описание составляющих формулы (2.4.1)

	Описание	Значение
ν_9	Доля $\text{OH}^*(\nu_9)$, формируемая в результате реакции k_{21}	0.4444
ν_8	Доля $\text{OH}^*(\nu_8)$, формируемая в результате реакции k_{21}	0.2756
A_9	Обратное радиативное время жизни $\text{OH}^*(\nu_9)$	215.05 c^{-1}
A_8	Обратное радиативное время жизни $\text{OH}^*(\nu_8)$	178.06 c^{-1}
A_{98}	Коэффициент Эйнштейна для перехода $\nu_9 \rightarrow \nu_8$	20.05 c^{-1}
A_{97}	Коэффициент Эйнштейна для перехода $\nu_9 \rightarrow \nu_7$	118.35 c^{-1}
A_{86}	Коэффициент Эйнштейна для перехода $\nu_8 \rightarrow \nu_6$	117.21 c^{-1}
k_{9o2}	Скорость убыли населенности $\text{OH}^*(\nu_9)$ из-за столкновений с O_2	$1.05 \cdot 10^{-11} \exp(220/T) \text{cm}^3 \text{c}^{-1}$
k_{9n2}	Скорость убыли населенности $\text{OH}^*(\nu_9)$ из-за столкновений с N_2	$3.36 \cdot 10^{-13} \exp(220/T) \text{cm}^3 \text{c}^{-1}$
k_{9o}	Скорость убыли населенности $\text{OH}^*(\nu_9)$ из-за столкновений с O	$5 \cdot 10^{-11} \text{cm}^3 \text{c}^{-1}$
C_9	$k_{9o2} \cdot \text{O}_2 + k_{9n2} \cdot \text{N}_2 + k_{9o} \cdot \text{O}$	
k_{8o2}	Скорость убыли населенности $\text{OH}^*(\nu_8)$ из-за столкновений с O_2	$8 \cdot 10^{-12} \text{cm}^3 \text{c}^{-1}$
k_{8n2}	Скорость убыли населенности $\text{OH}^*(\nu_8)$ из-за столкновений с N_2	$7 \cdot 10^{-13} \text{cm}^3 \text{c}^{-1}$
k_{8o}	Скорость убыли населенности $\text{OH}^*(\nu_8)$ из-за столкновений с O	$5 \cdot 10^{-11} \text{cm}^3 \text{c}^{-1}$
C_8	$k_{8o2} \cdot \text{O}_2 + k_{8n2} \cdot \text{N}_2 + k_{8o} \cdot \text{O}$	
k_{98o2}	Скорость гашения $\text{OH}^*(\nu_9 \rightarrow \nu_8)$ из-за столкновений с O_2	$4.2 \cdot 10^{-12} \text{cm}^3 \text{c}^{-1}$
k_{98n2}	Скорость убыли населенности $\text{OH}^*(\nu_9 \rightarrow \nu_8)$ из-за столкновений с N_2	$4 \cdot 10^{-13} \text{cm}^3 \text{c}^{-1}$
C_{98}	$k_{98o2} \cdot \text{O}_2 + k_{98n2} \cdot \text{N}_2$	

на высоте 80 км по данным SABER, для чего необходима справедливость данного предположения на этой высоте. На первый взгляд, предположение кажется разумным ввиду того, что характерное время релаксации озона порядка часа, что на порядок меньше длительности ночи. Однако само по себе время релаксации не гарантирует равновесия, поскольку характерное время изменения положения равновесия может

быть меньше времени релаксации. Примечательно, что у первого соавтора публикации [78] в более ранних статьях [108] утверждалось⁴, что равновесная концентрация не является хорошей аппроксимацией для ночного озона ниже 85 км.

Справедливость предположения о фотохимическом равновесии ночного озона была оценена по результатам химико-транспортного моделирования. Для этого описанная ранее (2.3) модель использовалась с динамикой СОМА-IAP. Шаг интегрирования был выбран 9 с, что позволило производить расчеты с разомкнутой семьей нечетного кислорода. По результатам модели была посчитана равновесная концентрация озона (O_{3eq}) из соображений равенства источника (k_{12}) и всех стоков озона в модели (k_{13} , k_{21} , f_1 , f_2 , f_{15} , f_{21} и g_1).

$$O_{3eq} = \frac{k_{12} \cdot M \cdot O \cdot O_2}{k_{13}O + k_{21}H + f_1OH + f_2OH_2 + f_{15}N + f_{21}NO + g_1NO_2}. \quad (2.4.3)$$

Основной вклад в (2.4.3) вносят реакции k_{12}, k_{13}, k_{21} и f_1 . По выводу модели с временным разрешением 1,5 часа было посчитано отношение концентрации озона к его равновесному значению (O_3/O_{3eq}). На рис. 2.2 изображено зональное месячное среднее от отношения в ночное время ($\langle O_3/O_{3eq} \rangle$). Для каждой опорной точки на рис. 2.2 среднее вычислялось следующим образом: из трехмерной эволюции O_3/O_{3eq} выбиралось подмножество, соответствующее определенному уровню давления и широте; из данного подмножества выбирались данные за рассматриваемый временной период (календарный месяц) и с зенитным углом, соответствующим ночи; вычислялось среднее по результирующей выборке. Чтобы избежать влияния процессов, связанных с прохождением терминатора при моделировании на достаточно грубой по долготе сетке, ночными считались значения, соответствующие зенитному углу более 100° , что больше используемого в [78] угла 95° . На рис. 2.3 изображено стандартное отклонение отношения O_3/O_{3eq} (σ_{eq}), посчитанное по той же выборке, что при подсчете среднего. Будем говорить, что ночной озон находится в равновесии, если:

- $|\langle O_3/O_{3eq} \rangle - 1| < 0.1$ – отклонение от равновесия в среднем меньше 10%;
- $\sigma_{eq} < 0.1$ – среднеквадратичное отклонение меньше 10%.

Граница области, где выполняются эти условия, отображена на рис. 2.2 линией черного цвета. Видно, что за исключением единичных точек на рис. 2.2, предположение о фотохимическом равновесии выполняется до определенной высоты z_{eq} . С уверенностью можно сказать, что $z_{eq} > 80$ км. Сразу следует оговориться, что на рисунке приведены условные высоты, а в статье [78] «примерные высоты», формула для которых не приводится. Однако по шкале давлений в [78] и (2.3.2) установлено,

⁴Третий раздел [108], стр. 16500.

что разница между этими шкалами в диапазоне между уровнями 10^{-2} и 10^{-3} ГПа составляет менее 1 км. Среднее и стандартное отклонения на рис. 2.2 и 2.3 хорошо коррелируют друг с другом: чем ближе $\langle O_3/O_{3eq} \rangle$ к 1, тем меньше σ_{eq} . Положение z_{eq} существенно меняется в зависимости от широты и времени года. В летнем полушарии z_{eq} выше, чем в зимнем. Заметна существенная асимметрия между северным и южным полушариями.

Только на высотах более 87 км предположение выполняется для любых широт вне зависимости от сезона. Возможно, такой результат является исключительно свойством нашей модели и используемой ею динамики. В качестве альтернативы моделированию, проведенному в ИПФ РАН, были взяты результаты многолетнего расчета модели СМАМ ([89–92], см. подраздел 2.3), которая имеет собственный химический блок. Модель использует другую динамику, а также обладает лучшим разрешением по долготе. В нашем распоряжении имелись только результаты расчета, детали расчета химического блока неизвестны, поэтому было оценено приблизительное соотношение O_3/O_{3eq} с учетом только основных реакций k_{12} , k_{13} и k_{21} :

$$[O_3/O_{3eq}]_{estim} = O_3 \cdot \frac{k_{13}O + k_{21}H}{k_{12} \cdot M \cdot O \cdot O_2}. \quad (2.4.4)$$

На рис. 2.4 представлены средние от оценки (2.4.4), посчитанные тем же способом, что и средние на рис. 2.2. Черной линией отмечена граница равновесности рис. 2.2. В целом общий ход границы равновесности схож с результатами на рис. 2.2. Он испытывает те же сезонные тенденции. Однако детали различаются и граница равновесности по СМАМ часто на 1–2 км выше. На высотах больше 90 км отличие озона от равновесного составляет 10–15%, что значительно больше, чем в моделировании ИПФ РАН. Это результат большего потока атомарного кислорода: особенность присущая моделям, подстроенным под реанализ ERA-interim [109].

По результатам химико-транспортного моделирования ИПФ РАН⁵, а также СМАМ, предположение о фотохимическом равновесии ночного озона на высотах менее 87 км может не выполняться. Поэтому результаты измерения O (а также H) методом [78] на этих высотах могут быть ошибочны.

2.5 Проверка критерия химического равновесия ночного озона

Критика метода [78], изложенная в предыдущем подразделе (2.4), ставит вопрос о том, как можно улучшить процедуру обработки измерений SABER/Timed. Поскольку

⁵Не только с использованием динамики СОМА, но и СМАМ см. рис. 2.4, 2.5.

предположение о фотохимическом равновесии ночного озона является основополагающим в процессе измерения O и отказаться от него в данном случае нельзя, большую практическую пользу будет иметь способ фильтрации, позволяющий определить, для каких измерений предположение о равновесности хорошо выполняется, а для каких нет.

Первая попытка выработки критерия равновесности ночного озона предложена диссертантом в [A2], в которой представлены месячные зональные средние O_3/O_{3eq} , вычисленные с использованием соотношения (2.4.3). При этом использовалась химико-транспортная модель с динамикой СМММ, в остальном моделирование совпадало с изложенным в подразделе 2.4. Результаты приведены на рис. 2.5. В целом картина сезонного изменения z_{eq} схожа с представленной на рис. 2.2 и 2.4, но граница равновесности на рис. 2.5 выше. Между 2.5 и 2.4 наблюдается сходство в мелких деталях вследствие одинаковой динамической составляющей. Эмпирическим путем было подмечено, что положение границы равновесности очень хорошо коррелирует с положением максимума усредненного гидроксила (ОН). Граница равновесности z_{eq} на 3–4 км выше положения максимума ОН. В работе [110] было показано, что положение максимума возбужденного гидроксила (ОН*) находится на 3–4 км выше максимума, не возбужденного ОН. Максимум ОН* соответственно совпадает с максимумом измеряемого, поэтому на высотах выше максимума $VER_{2\mu m}$ предположение о фотохимическом равновесии ночного озона, скорее всего, будет выполняться.

Представленный выше критерий не опирается на конкретные физические принципы, а также достаточно не точен: как видно на рис. 2.5, разница между z_{eq} и максимумом ОН может достигать 7 км. Для разработки более обоснованного критерия необходимо было понять природу неравновесности. Основным являлось предположение, основанное на фотохимических соображениях об изменениях равновесной концентрации O_3 с характерными временами ($\tau_{O_{3eq}}$) меньшими характерного времени релаксации озона (τ_{O_3}). Чтобы оценить влияние транспорта в рамках моделирования раздела 2.4, был оценен вклад транспорта (как адвекционного, так и диффузионного) по сравнению с фотохимией. Для этого суммарные изменения концентрации вследствие транспорта, деленные на шаг интегрирования модели (фактически первые два слагаемых правой части (2.4.1)), были взяты по модулю и усреднены тем же способом, что $\langle O_3/O_{3eq} \rangle$. В результате мы получили среднюю оценку влияния транспорта ($\langle Tr_{O_3} \rangle$). Усредняя числитель и домноженный на O_3 знаменатель правой части (2.4.3), получим усредненные фотохимические источник ($\langle Pr_{O_3} \rangle$) и сток ($\langle L_{O_3} \rangle$) озона соответственно. Отношения $\frac{\langle Tr_{O_3} \rangle}{\langle Pr_{O_3} \rangle}$ и $\frac{\langle Tr_{O_3} \rangle}{\langle L_{O_3} \rangle}$, полученные за февраль, изображены на рис. 2.6. На контурные карты отношений наложена пурпурной линией граница равновесности с рисунка 2.2. Очевидно, что по крайней мере близко к границе можно

ограничиться только фотохимическими факторами.

В работе [111] был выведен критерий фотохимического равновесия ночного озона с помощью применения метода базовых динамических моделей:

$$Cr = \frac{\tau_{O_3}}{\tau_{O_{3eq}}} = 2 \frac{k_{12}k_{20} \cdot M^2 \cdot O_2^2}{k_{21}^2 \cdot H \cdot O_3} \cdot \left(1 - \frac{k_{15} + k_{16}}{k_{18}} \right) < 1. \quad (2.5.1)$$

В основе вывода (2.5.1) лежала упоминаемая выше концепция характерных времен $\tau_{O_{3eq}}$ и τ_{O_3} . Необходимо было проверить работоспособность критерия на модельных данных, что и было сделано. Путем экспериментов было установлено, что пороговое значение $\langle Cr \rangle = 0,1$ хорошо описывает границу равновесности, что демонстрирует пурпурная линия на рис. 2.7.

Критерий (2.5.1) примечателен тем, что он может быть применен, используя данные SABER/Timed, что было успешно проделано в [112]. Таким образом, демонстрация работы критерия (2.5.1) на модельных данных в конечном итоге позволила значительно улучшить измерения атомарного кислорода в МНТ регионе.

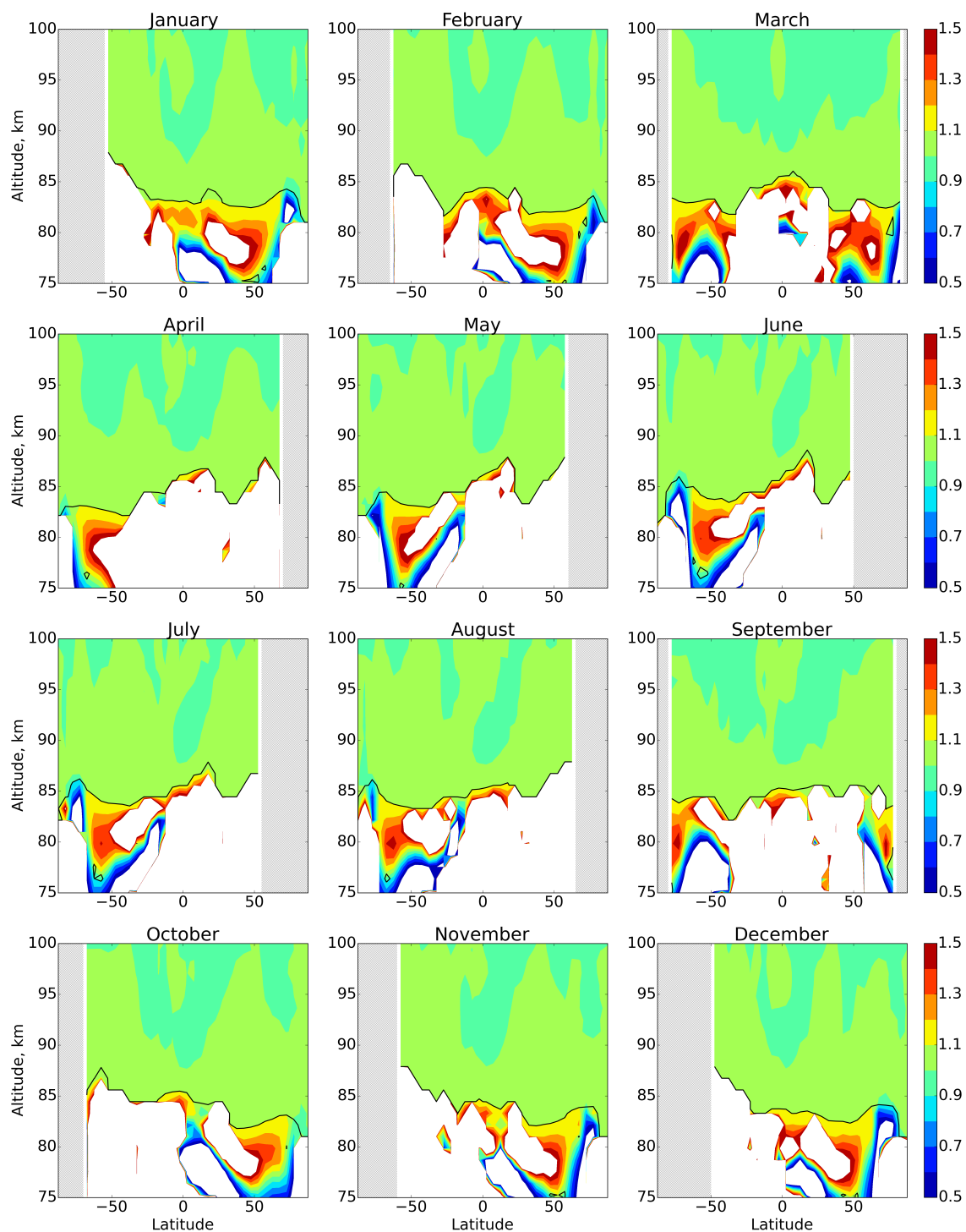


Рис. 2.2: Зональное месячное среднее от отношения O_3/O_{3eq} в ночное время по результатам химико-транспортного моделирования с динамикой СОМА-IAP. Черная линия изображает границу области, где выполняется фотохимическое равновесие ночного озона. Штриховкой показаны широты, в которых нет ночных (с зенитным углом Солнца $>100^\circ$) данных.

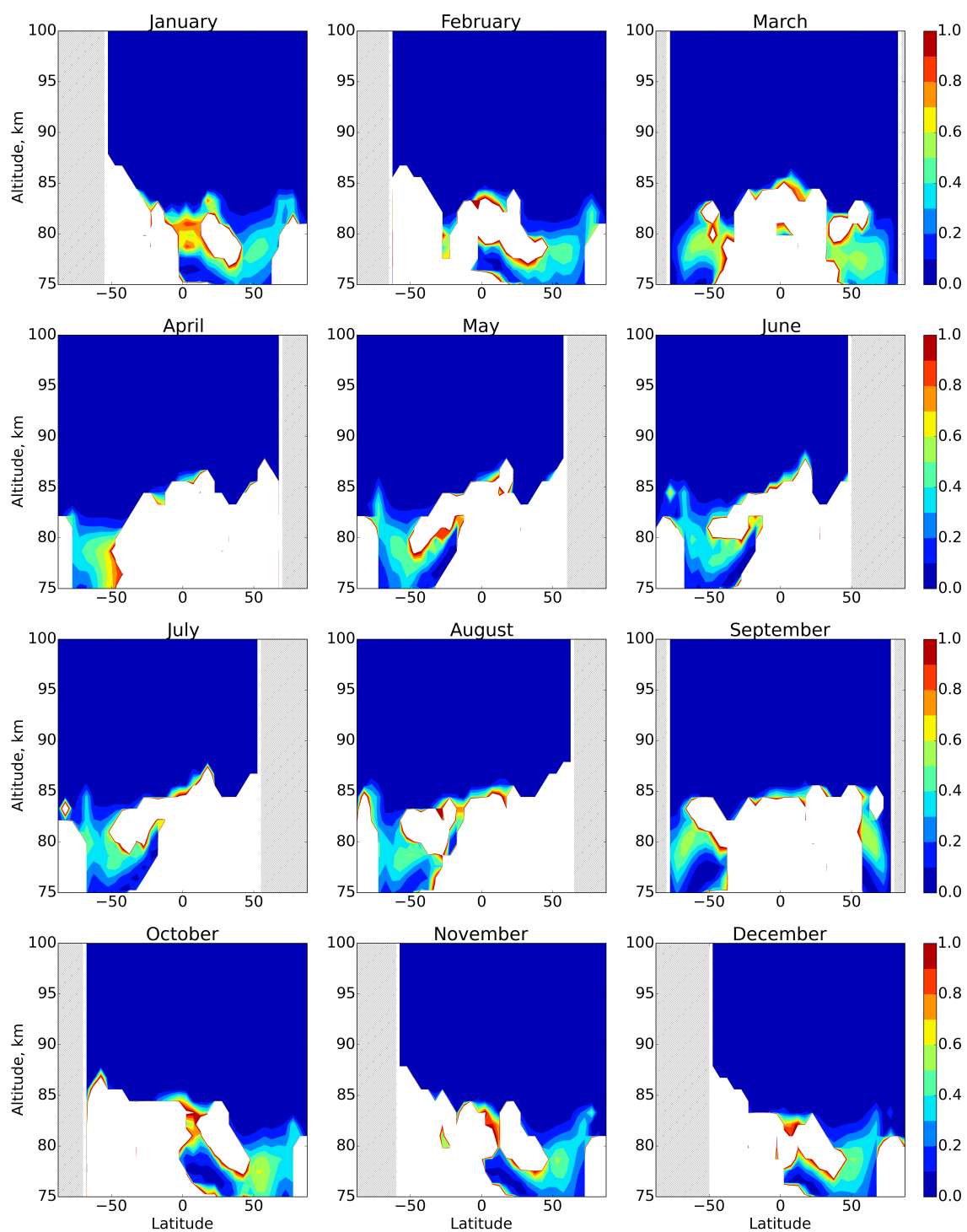


Рис. 2.3: Стандартное отклонение отношения O_3/O_{3eq} в ночное время, посчитанное по той же выборке, что средние на рис. 2.2.

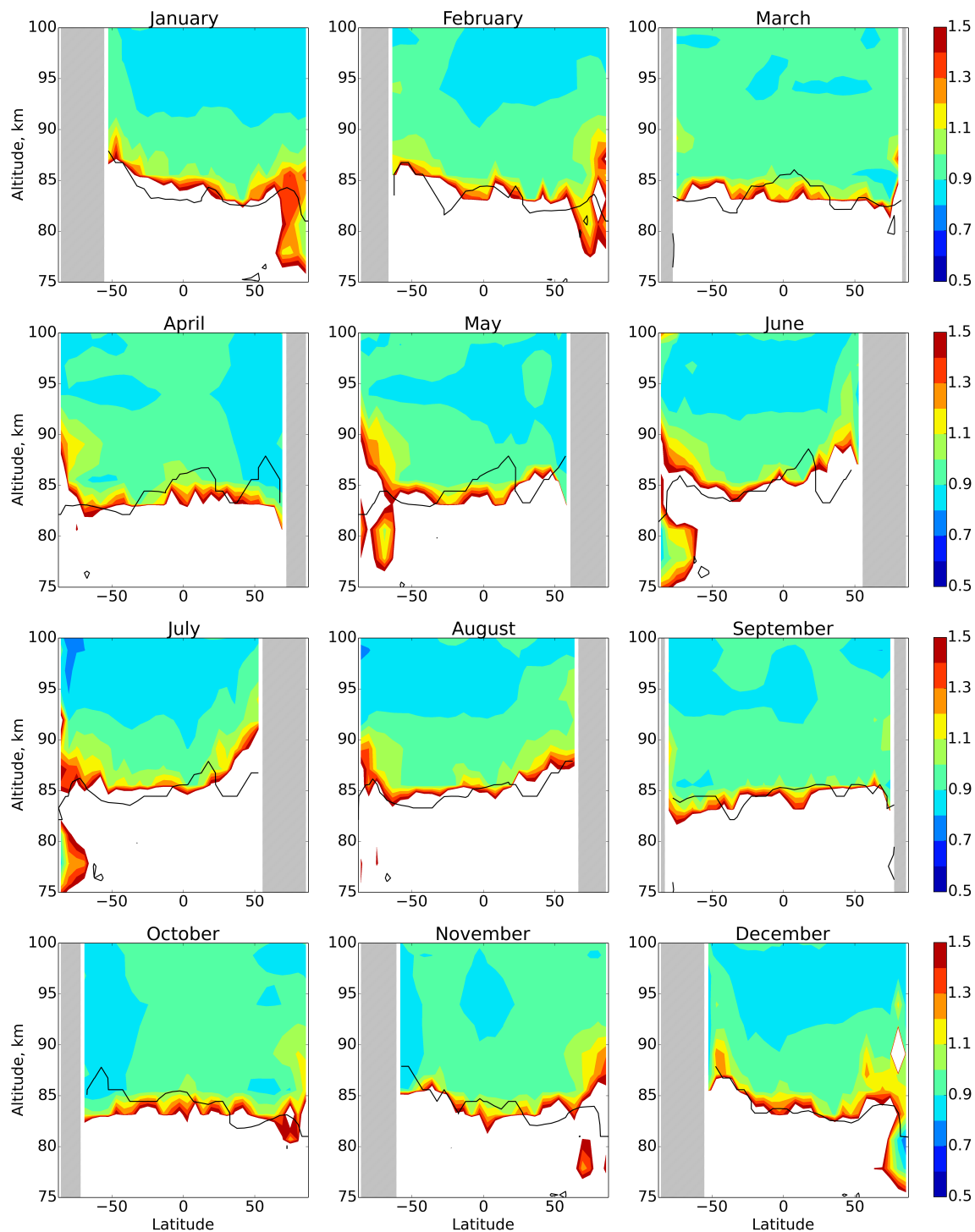


Рис. 2.4: Средняя оценка отношения O_3/O_{3eq} по результатам химического блока модели СМАМ (учет реакций k_{12}, k_{13} и k_{21}). Усреднение производится по той же методике, что и на рис. 2.2. Черная линия – наложенная граница равновесия с рис. 2.2.

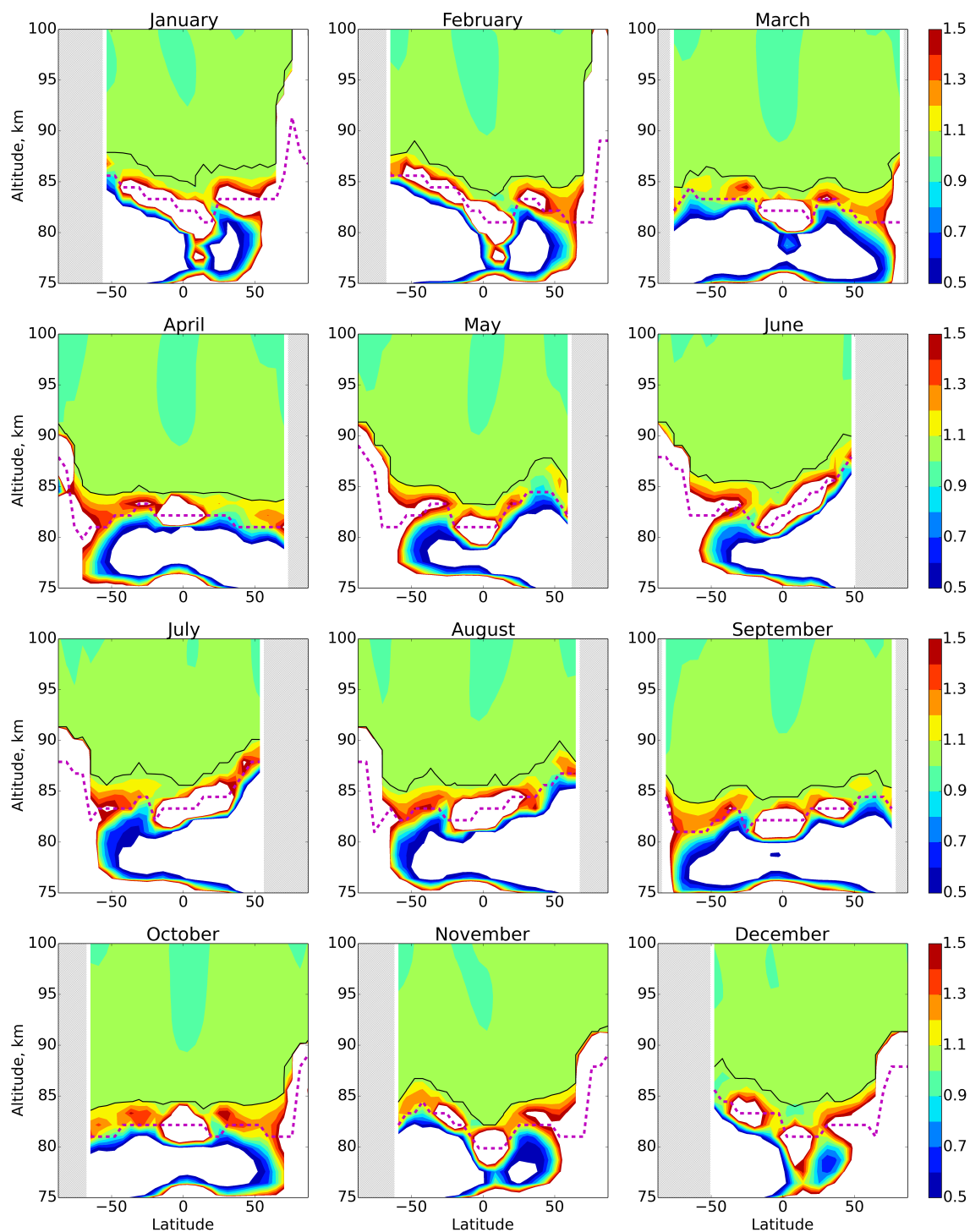


Рис. 2.5: Зональное месячное среднее от отношения O_3/O_{3eq} в ночное время по результатам химико-транспортного моделирования с динамикой СМАМ. Черная линия изображает границу области, где выполняется фотохимическое равновесие ночного озона. Штриховкой показаны широты, в которых нет ночных (с зенитным углом Солнца $>100^\circ$) данных. Прерывистая пурпурная линия обозначает положение максимума среднего ОН.

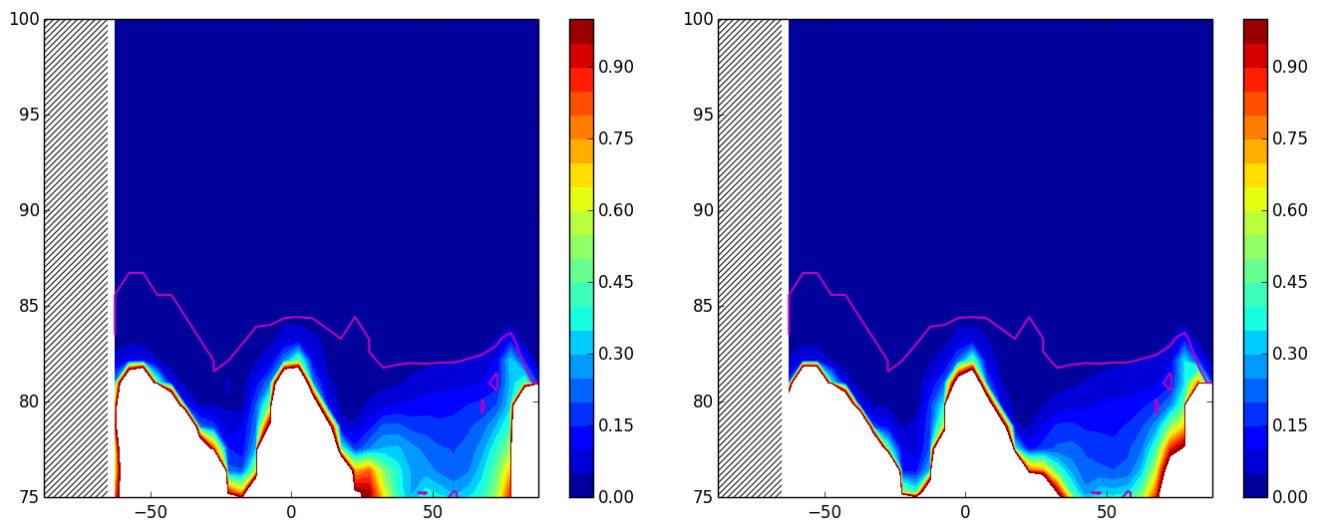


Рис. 2.6: Отношения средних $\frac{\langle Tr_{O_3} \rangle}{\langle Pr_{O_3} \rangle}$ и $\frac{\langle Tr_{O_3} \rangle}{\langle Lo_3 \rangle}$ за февраль (усреднение проводилось так же, как на рис. 2.2). Пурпурная линия обозначает границу равновесности ночного озона с рис. 2.2 за соответствующий месяц.

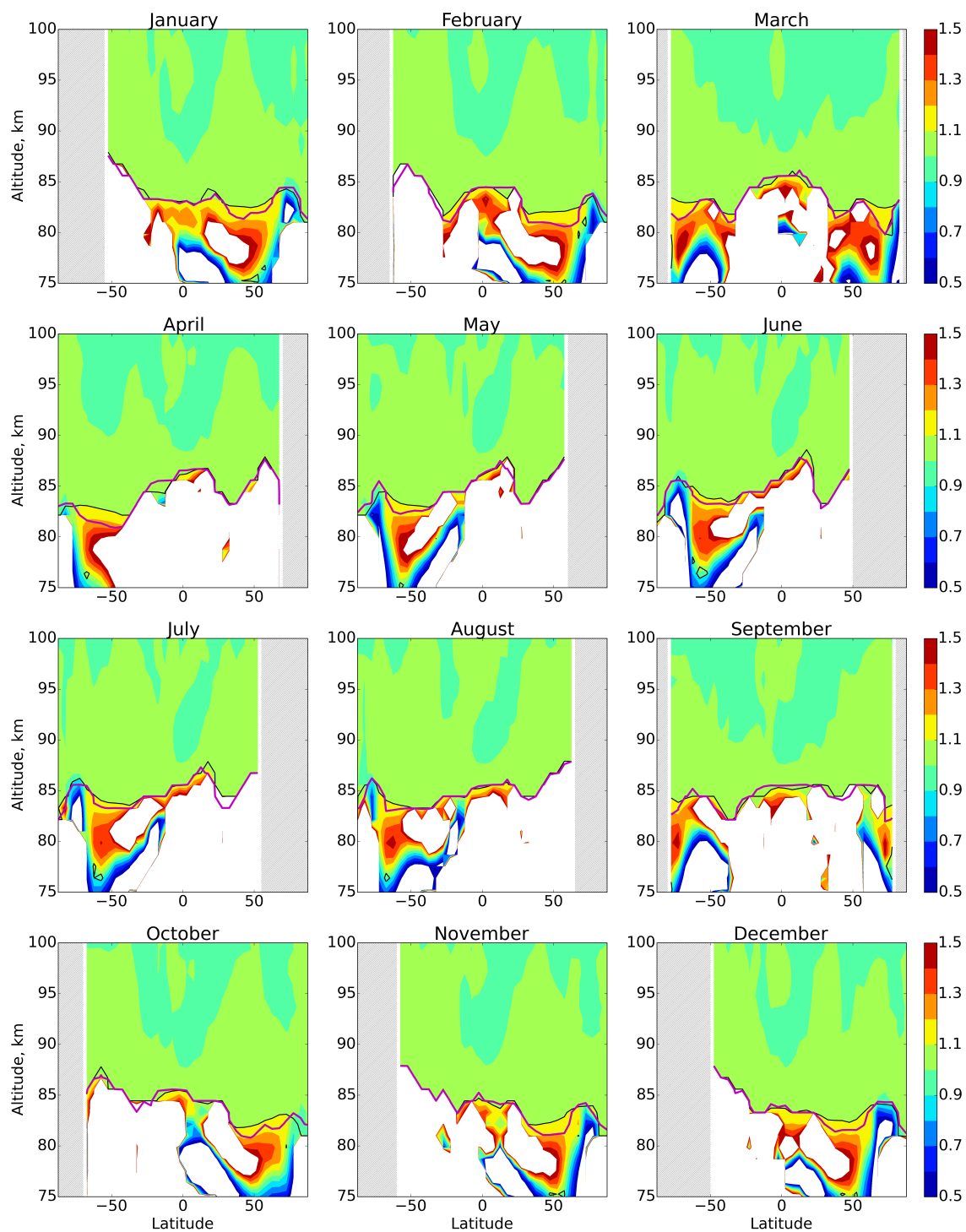


Рис. 2.7: Рис. 2.2, на который наложена пурпурная линия $\langle Cr \rangle = 0,1$. Усреднение величины Cr проводится тем же образом, что на рис. 2.2.

2.6 Замечание о способе представления результатов

Любой способ представления результатов преследует две цели: наглядность и простоту подачи, с одной стороны, и точность и адекватность, с другой. Средства визуализации ограничены, и человек с трудом воспринимает трехмерные распределения визуально, поэтому в данном разделе для представления результатов используются зональные средние за определенный период с отбором по зенитному углу (см. подраздел 2.4). Зональные средние повсеместно используются в физике атмосферы. Как правило, находится среднее от концентрации или скорости ветра. Однако усреднение отношения O_3/O_{3eq} , а тем более величины Cr , менее физически обосновано. Величина Cr при значениях выше пороговых вовсе не должна быть пропорционально связана с отклонением O_3/O_{3eq} от 1, поэтому граница по $\langle Cr \rangle$ может несоответствовать границе по $\langle O_3/O_{3eq} \rangle$. Проиллюстрируем данный момент, рассмотрев временную эволюцию O_3/O_{3eq} и Cr в одной точке (0° с.ш., 90° в.д.). Воспользуемся результатами химико-транспортного моделирования с использованием динамики СМАМ, с выдачей данных каждые 30 минут. На рис. 2.8 в виде контурной карты представлена временная эволюция O_3/O_{3eq} , черной линией обозначена граница равновесности (граница области $|O_3/O_{3eq} - 1| < 0,1$), пурпурной линией – $Cr=0,1$. По оси нижней оси абсцисс отложено время в номерах выдачи данных (1 соответствует 30 мин.), по оси ординат – условная высота. Штриховкой показаны области, несоответствующие выбранному критерию ночи (зенитный угол $> 100^\circ$). На график наложены графики от средних ($\langle O_3/O_{3eq} \rangle$ и $\langle Cr \rangle$) за ночное время. Они разделяют ось ординат по высоте с контурной картой и имеют свою собственную (верхнюю) ось абсцисс. На наложенном графике $|O_3/O_{3eq} - 1|$ отображена синей линией с кружками, $\langle Cr \rangle$ – красной линией. Для наложенных графиков шкала оси абсцисс изображена сверху. Вертикальные пунктирные линии проведены для того, чтобы лучше было заметно превышение порогов (0,1) наложенными графиками. Из рисунка видно, что, с одной стороны, на временной эволюции линия $Cr=0,1$ имеет незначительные отклонения от границы равновесности, с другой – по средним значениям $\langle Cr \rangle$ достигает порогового значения на километр выше, чем $\langle O_3/O_{3eq} \rangle$.

Не стоит также забывать о том, что на приведенных ранее рисунках линии уровня являются результатом работы алгоритма марширующих квадратов [113, 114], поэтому форму контуров, проведенных между опорными высотами и широтами, нужно воспринимать как результат интерполяции.

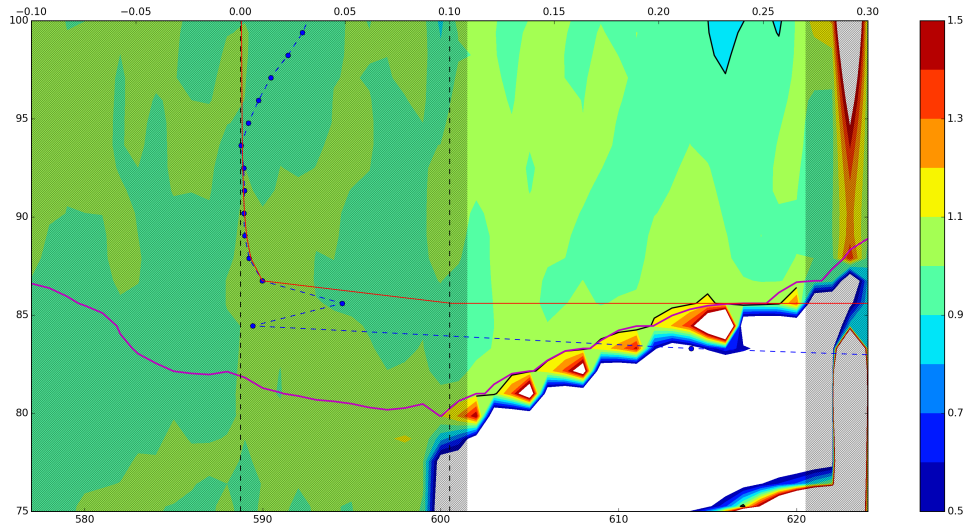


Рис. 2.8: Временная эволюция O_3/O_{3eq} в одной географической точке (0° с.ш., 90° в.д.) (см. описание рисунка в тексте).

2.7 Исследование фотохимического равновесия дневного озона

2.7.1 Сравнительный анализ основных стоков озона по данным моделирования

Баланс дневного озона на высотах МНТ определяется основными реакциями стока и производства: k_{12} ($O+O_2+M \rightarrow O_3+M$), g_{10} ($O_3+h\nu \rightarrow O_2+O$), g_{11} ($O_3+h\nu \rightarrow O_2+O(^1D)$) и k_{21} ($H+O_3 \rightarrow OH+O_2$), в соответствии с которыми условие равновесия этой компоненты выглядит следующим образом:

$$(g_{10} + g_{11} + k_{21} \cdot H) \cdot O_3 = k_{12} \cdot M \cdot O_2 \cdot O \quad (2.7.1)$$

В значительном количестве работ (см., например, [69, 72, 77, 80, 83]) условие равновесия дневного озона используется для определения пространственно-временных распределений O и H по данным ракетных и спутниковых измерений озона и интенсивности излучения возбужденных состояний OH и O_2 . Однако, в большинстве этих исследований принято не учитывать реакцию k_{21} , т.е. используется укороченный вид условия равновесия O_3 :

$$(g_{10} + g_{11}) \cdot O_3 = k_{12} \cdot M \cdot O_2 \cdot O \quad (2.7.2)$$

В частности, при обработке данных спутниковой кампании SABER/TIMED [78,83,115] это выражение сначала применяется для восстановления дневных профилей O в

диапазоне давлений 0.1-0.0001 гПа ($\sim 65-105$ км) по измеренным профилям O_3 и параметрам МНТ (температуры и M). Дневные профили H затем восстанавливаются с помощью выражения (2.4.1), следующего из модели возбужденных уровней $OH(\nu = 9, 8)$, основным источником которых является реакция k_{21} . (В работе [115] константы таблицы 2.2 были модифицированы).

Пренебрежение реакцией k_{21} ($H+O_3 \rightarrow OH+O_2$) справедливо при $H \ll 5 \cdot 10^8 \text{ см}^{-3}$ [69]. С другой стороны, есть спутниковые измерения [72], указывающие на концентрацию атомарного водорода порядка $2 - 5 \cdot 10^8 \text{ см}^{-3}$, а также есть теоретические работы [116], в которых влияние k_{21} сравнимо с фотодиссоциацией. Таким образом, пренебрежение реакцией k_{21} недостаточно обосновано и нуждается в проверке.

Для проверки основных предположений, используемых в определении дневных O и H , было произведено моделирование посредством химико-транспортной модели (см. раздел 2.3) с использованием динамики СМАМ.

На рис. 2.9 изображено отклонение месячного зонального среднего отношения O_3/O_{3eq} от 1 в дневное время, иными словами, $\langle O_3/O_{3eq} \rangle - 1$. Вне зависимости от сезона на высотах более 90 км отклонение концентрации O_3 от равновесной менее 1%. В эшелоне высот 80–85 км отклонение от фотохимического равновесия достигает 3-4%. Область отклонения испытывает сезонные вариации. В зимнем полушарии отклонение выражено больше. Осенью и весной область менее выражена. В целом во всем рассматриваемом регионе от 75 до 100 км отклонение от равновесия не превышает более 4%, поэтому, принимая во внимание величины других ошибок определения O и H по методике [78, 80], можно считать, что предположение о фотохимическом равновесии дневного озона верно.

На рис. 2.10 показаны месячные зональные средние отношения стоков озона: скорости реакции k_{21} к реакциям фотодиссоциации (g_{10} и g_{11}). Обозначим это отношение как R :

$$R = \frac{k_{21} \cdot H}{g_{10} + g_{11}}. \quad (2.7.3)$$

Черная и прерывистая линии на рисунке 2.10 указывают, где среднее отношение (2.7.3) принимает значение 0,1 и 0,3 соответственно. Иными словами, в областях, обозначенных этими линиями, потери, связанные с реакцией с атомарным водородом составляют 10 и 30% от потерь от фотодиссоциации. Как видно из рис. 2.10, область $R > 0,1$ существует на протяжении всего года и покрывает почти половину графика 75–100 км. Максимум среднего отношения (2.7.3) достигается на высотах 85–90 км в экваториальных и низких широтах. Его величина составляет 0,2-0,7 в зависимости от времени года. Таким образом, очевидно, что реакция k_{21} является важной составляющей стоков дневного озона и не может быть исключена из рассмотрения.

Среднегодовое зональное среднее отношения (2.7.3) изображено на рис. 2.11. Сравнивая рис. 2.11 с результатами SABER/Timed, можно видеть, как неучет реакции k_{21} может возмущать наблюдаемые значения. Так, на рисунке Fig.5 из [78] атомарный кислород на высотах менее 92 км распределен равномерно по всем широтам. Однако принимая во внимание реакцию k_{21} , можно видеть, что в диапазоне высот 84–92 км у атомарного кислорода должен быть максимум в приэкваториальных и низких широтах. Это может внести существенные поправки в расчеты химического тепла, основанные на измерениях O [77], а также может увеличить отношение дня к ночи в суточной вариации O [83].

Таким образом, в данном разделе с помощью 3D моделирования годовой эволюции фотохимии МНТ было показано, что использование укороченного условия (2.7.2) может приводить к заметным систематическим занижениям концентрации O на высотах ниже 92 км: до 50-70% в среднемесячных распределениях и до 35% в среднегодовых.

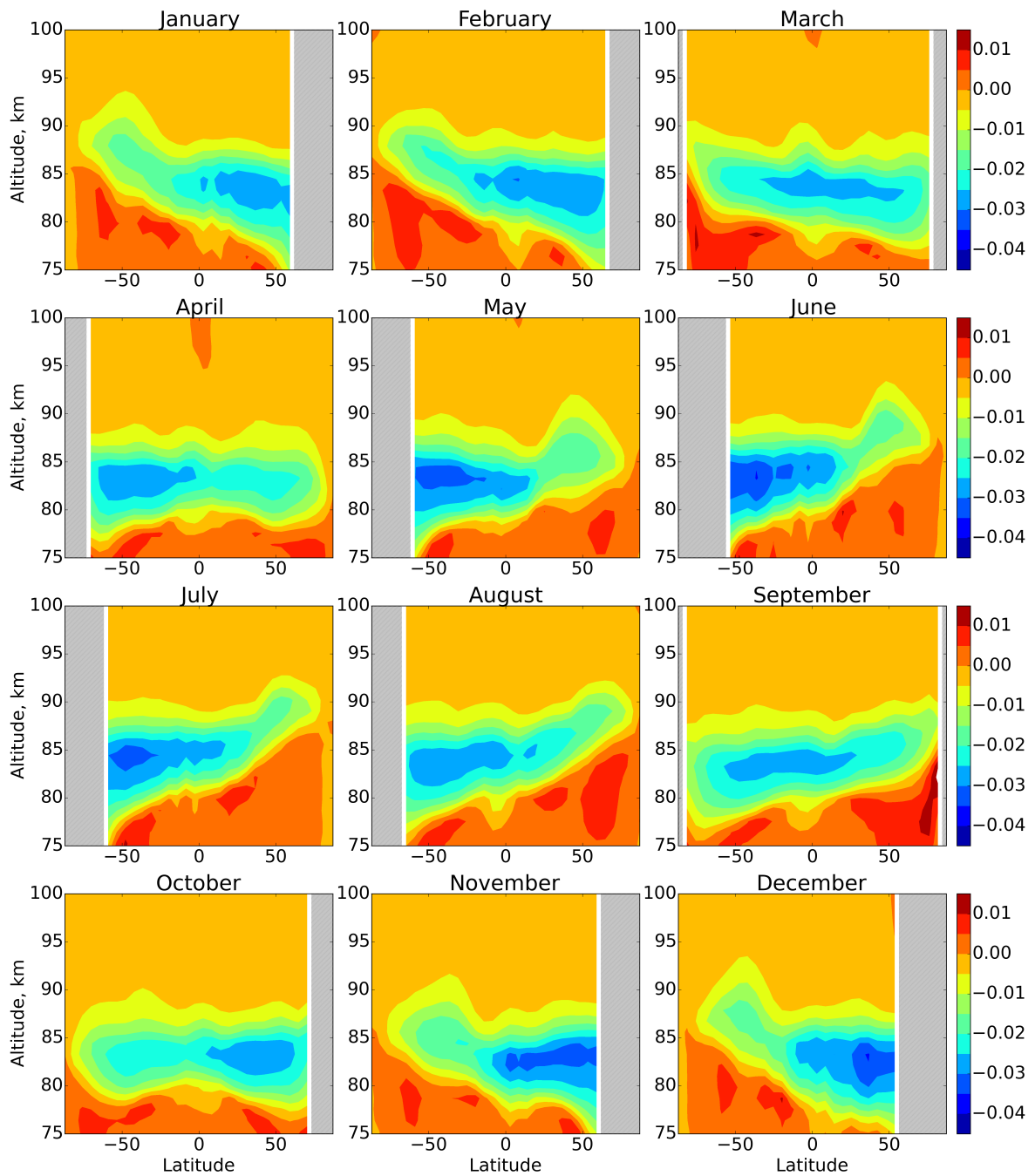


Рис. 2.9: Отклонение зонального месячного среднего O_3/O_{3eq} от 1 в дневное время. Усреднение проводится тем же образом, что и на рис. 2.2.

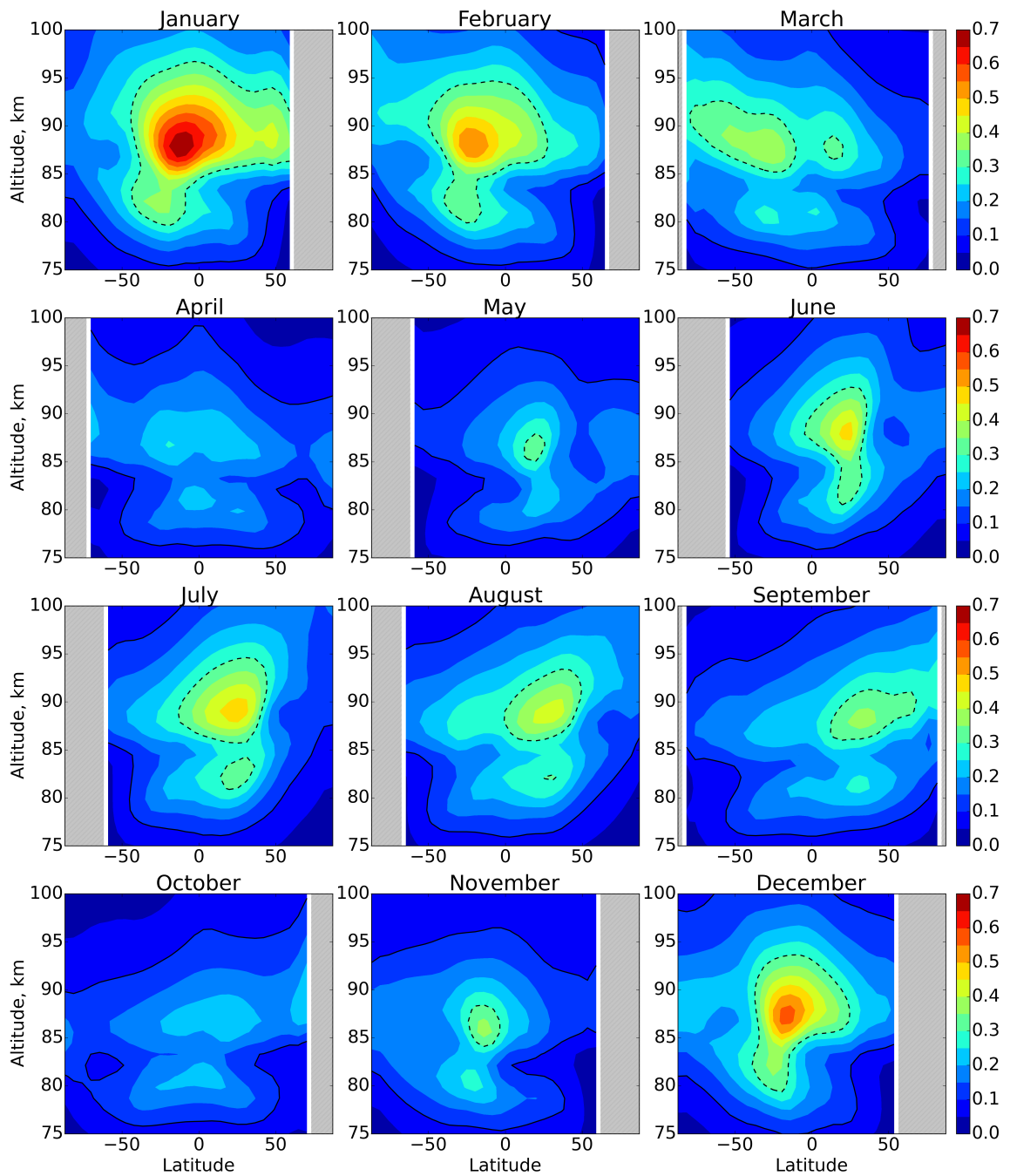


Рис. 2.10: Зональные месячные средние от величины R (2.7.3). Усреднение проводится тем же образом, что и на рис. 2.2.

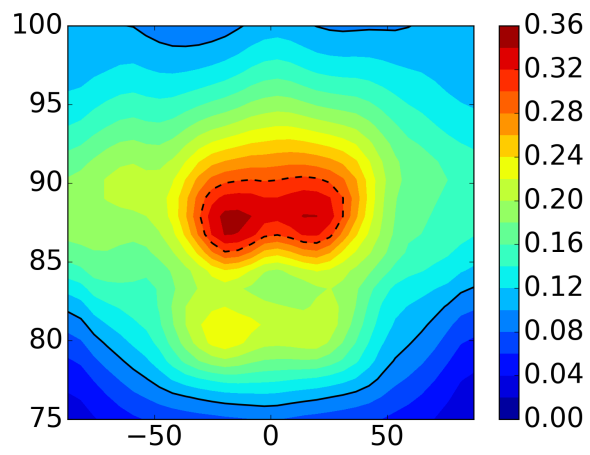


Рис. 2.11: Зональные годовые средние от величины R (2.7.3).

2.7.2 Анализ влияния неучета реакции $\text{H} + \text{O}_3 \rightarrow \text{OH} + \text{O}_2$ на качество восстановления O , H , OH , HO_2 и полной скорости химического нагрева по данным SABER/TIMED

Мы использовали версию 2.0 (Level2A) базы данных SABER/TIMED за 2003-2015 гг, содержащую одновременные профили $VER_{2\mu m}$, O_3 и T на сетке давления в интервале 0.018–0.00032 гПа (примерно 77–100 км), а также профили M , O_2 и N_2 , определенные из уравнения состояния идеального газа. Напомним, что недавно в работе [115] были введены новые скорости гашения OH^* при столкновениях с O , O_2 и пересмотрен квантовый выход популяции из реакции $\text{H} + \text{O}_3 \rightarrow \text{OH}^* + \text{O}_2$. Другими словами, некоторые параметры таблицы 2.2 (и соответственно (2.4.1)) были обновлены. Более того, в работе [117] было предположено, что восстановленный атомарный кислород в базе данных SABER/TIMED слишком велик, что является прямым следствием систематического завышения дневного озона этой спутниковой кампании. Поэтому в работе [115] было указано, что дневные озон и атомарный кислород должны быть снижены на 25%. Тем не менее, в официальной базе данных SABER/TIMED эти изменения не учтены, дневные данные O_3 , O и H соответствуют старой модели OH^* и завышенному озону. Чтобы получить эквивалент данным работы [115], мы повторили всю фильтрацию, представленную в работе [78]. После этого вслед за [115] мы уменьшили дневные данные O_3 и O на 25% и рассчитали профили атомарного водорода с использованием уравнения (2.7.2) и новыми параметрами соотношения (2.4.1). Таким образом, мы получили эталонные профили атомарного кислорода (O') и атомарного водорода (H') в 2003-2015 гг, рассчитанные по укороченному уравнению баланса озона (2.7.2).

Из уравнений (2.7.2) и (2.4.1) можно видеть, что результат восстановления O и H зависит от локального значения скорости фотодиссоциации озона ($g_{10} + g_{11}$), которая, в свою очередь, является функцией потока солнечного УФ-излучения, зенитного угла и высоты. Чтобы избежать разногласий по параметрам между процедурами восстановления группы SABER [115] и нашей, мы предварительно вычислили локальные значения с помощью обращения уравнения (2.7.2) для каждого локального (во времени и пространстве) набора данных SABER:

$$(g_{10} + g_{11}) = \frac{k_{12} \cdot M \cdot \text{O}_2 \cdot \text{O}'}{\text{O}_3}. \quad (2.7.4)$$

Таким образом, мы использовали те же значения этого параметра, что и в работе [115]. Затем для каждого набора исходных данных была решена система двух нелинейных уравнений (2.7.2) и (2.4.1) и были найдены пространственно-временные распределения дневных концентраций O и H для O и H в 2003-2015 гг с помощью правильного

уравнения баланса озона.

Локальные дневные концентрации OH и HO_2 находились из условия фотохимического равновесия этих компонент, предполагая, что фотодиссоциация паров воды в мезопаузе является второстепенным источником образования OH [118, 119].

$$\text{OH} = \frac{k_{18} \cdot \text{O} \cdot \text{HO}_2 + k_{21} \cdot \text{O}_3 \cdot \text{H} + 2k_{14} \cdot \text{H} \cdot \text{HO}_2}{k_{17} \cdot \text{O} + f_1 \cdot \text{O}_3}. \quad (2.7.5)$$

$$\text{HO}_2 = \frac{k_{20} \cdot \text{H} \cdot \text{M} \cdot \text{O}_2 + f_1 \cdot \text{O}_3 \cdot \text{OH}}{k_{18} \cdot \text{O} + (k_{14} + k_{15} + k_{16}) \cdot \text{H}}. \quad (2.7.6)$$

Отметим, что образующаяся в результате реакции k_{21} ($\text{H} + \text{O}_3 \rightarrow \text{OH} + \text{O}_2$) молекула гидроксила изначально рождается в колебательно-возбужденных состояниях ($\nu=5-9$) [120]. Скорости реакций k_{17} и f_1 с участием OH , рассматриваемые в равновесных уравнениях (2.7.5), (2.7.6), зависят от колебательного числа OH^* и могут различаться на порядки между колебательными состояниями. Тем не менее, в первом приближении этой зависимостью можно пренебречь, поскольку, как было установлено в работе [121], эффект с учетом колебательного возбуждения в реакции f_1 : (1) по стоку O и O_3 пренебрежимо мал (много меньше 1%), (2) по стоку OH составляет менее 4%, (3) по источнику HO_2 - менее 2.5%. Влияние учета колебательного возбуждения в реакции k_{17} : (1) на O и O_3 составляет менее 3%, (2) на сток OH - менее 10%. При этом в дневных условиях все эти эффекты в несколько раз меньше [121].

Локальные значения полной скорости химического нагрева (СХН) были определены как сумма семи скоростей нагрева за счет экзотермических реакций k_{11} , k_{12} , k_{13} , k_{17} , k_{18} , k_{21} , которые в свою очередь были рассчитаны в соответствии с работами [75, 79].

Систематическая неопределенность восстановленных данных в основном определяется неопределенностями O_3 , скоростей химических реакций и параметров таблицы 2.2 [78, 80]. Мы воспроизвели анализ, представленный в работах [78] (раздел 5) и [80] (п. 3.1) и рассчитали индивидуальную чувствительность всех определяемых характеристик к возмущению каждого фактора. Полная неопределенность получается путем вычисления квадратного корня суммы всех неопределенностей. В результате установлено, что суммарные систематические погрешности O , H , OH , HO_2 и СХН варьируются в пределах 25-30%, 25-33%, 20-50%, 25-50% и 40-75% соответственно в зависимости от высоты и широты. Благодаря усреднению, случайная ошибка восстановленных данных незначительна.

Таким образом, были получены два пространственно-временных ряда каждой характеристики в 2003-2015 гг: восстановленные с помощью очевидно некорректного подхода группы SABER [115] O' , H' , OH' , HO_2' и $\text{СХН}'$ и восстановленные правильным образом O , H , OH , HO_2 и СХН. Оба набора данных каждой извлеченной характеристики были усреднены по долготе, дневному времени и, наконец, по каждому сезону

(декабрь-февраль, март-май, июнь-август и сентябрь-ноябрь) за весь период 2003–2015 гг. В каждом случае усреднение по времени в определенном бине широты производилось следующим образом. Все данные были отсортированы по часам местного солнечного времени. Мы рассчитали средние значения в зависимости от местного времени, а затем по всем бинам. Затем мы рассчитали относительные отклонения (RD) для каждой характеристики X следующим образом:

$$RD_X = \frac{X - X'}{X'}. \quad (2.7.7)$$

На рис. 2.12 представлены распределения атомарного кислорода и относительное отклонение RD_O в зависимости от времени года. Видно, что во все сезоны $RD_O > 10\%$ охватывает более половины представленных распределений. Абсолютный максимум RD_O ($\sim 30\text{--}36\%$) приходится на высоты 82–90 км в декабре-феврале от $\sim 15^\circ$ ю.ш. до $\sim 45^\circ$ с.ш. и в июне-августе от $\sim 15^\circ$ с.ш. до $\sim 45^\circ$ с.ш. В марте-мае и сентябре-ноябре RD_O не превышает 20% ни в одном из полушарий.

На рис. 2.13 показаны распределения атомарного водорода и RD_H в зависимости от времени года. Можно видеть, что в отличие от предыдущего случая относительное отклонение оказывается небольшим во все сезоны: в основном $|RD_H| \leq 3 - 4\%$, и может увеличиваться до $\sim 7\text{--}10\%$ выше ~ 95 км. Таким образом, использование укороченного равновесия (2.7.2) для дневного озона слабо проявляется в восстановленных распределениях H.

На рис. 2.14 представлены высотно-широтные распределения OH и соответствующее относительное отклонение RD_{OH} для разных сезонов. Значения концентрации гидроксила, рассчитанные посредством полного уравнения баланса озона, достигают $\sim (1 - 2) \cdot 10^7 \text{ см}^{-3}$ только в высоких летних широтах около ~ 80 км, в то время как значения этой компоненты, рассчитанные без учета реакции k_{21} ($\text{H} + \text{O}_3 \rightarrow \text{OH} + \text{O}_2$), могут достигать очень больших величин (до 10^8 см^{-3}) и во все сезоны охватывают заметно большую часть широт ниже 85 км. Отметим, что значения OH $\sim 10^7 \text{ см}^{-3}$ на высоте 80 км соответствуют данным измерений, в частности, наблюдались в рамках спутниковой кампании MLS/AURA [122]. Наибольшая разница в представленных распределениях наблюдается ниже 85 км в экваториальных широтах для всех сезонов и в высоких и средних широтах в летнее время. Более того, локально значения OH' могут на несколько порядков превышать правильные значения OH. В частности, концентрация OH' на высотах 77–85 км может быть близкой или существенно превышать концентрацию H на этих высотах (см. рис. 2.13), что в принципе невозможно.

Как показано в работе [123], существует предельное соотношение между локальными значениями OH и O₃, следующее из дневного фотохимического равновесия OH,

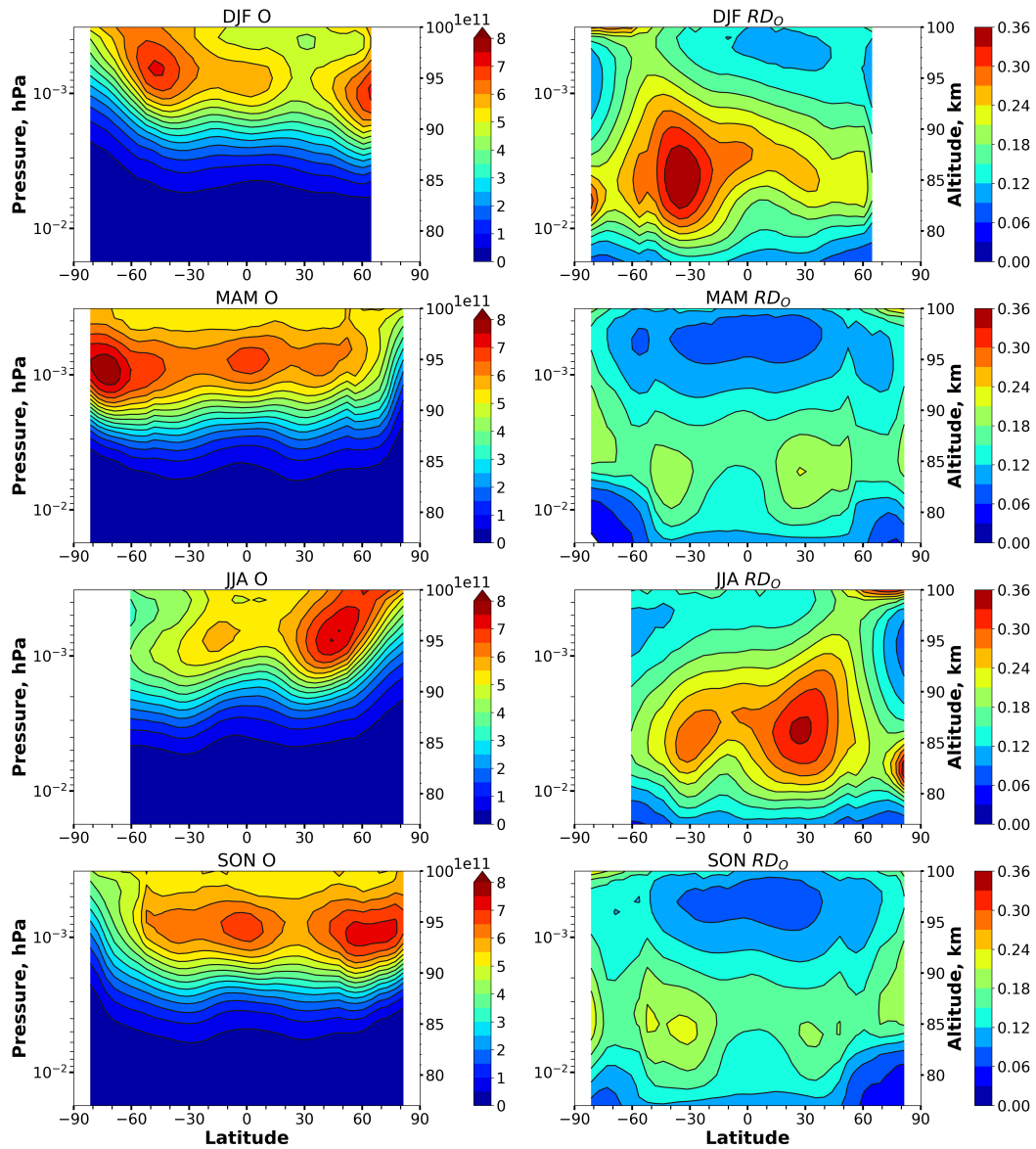


Рис. 2.12: Дневные средние распределения O [cm^{-3}] (левый столбец) и RD_O (правый столбец) зимой (1-й ряд), весной (2-й ряд), летом (3-й ряд) и осенью (4-й ряд). Правые вертикальные оси указывают высоту (в км).

NO_2 и O_3 . Без учета ряда вторичных реакций оно выглядит следующим образом:

$$\text{OH} < \text{OH}_{lim}(\text{O}_3, M, T) = \frac{k_{12}}{k_{17}} \cdot M \cdot \text{O}_2 \cdot \left(1 + \frac{k_{20} \cdot M \cdot \text{O}_2}{k_{21} \cdot \text{O}_3} \right). \quad (2.7.8)$$

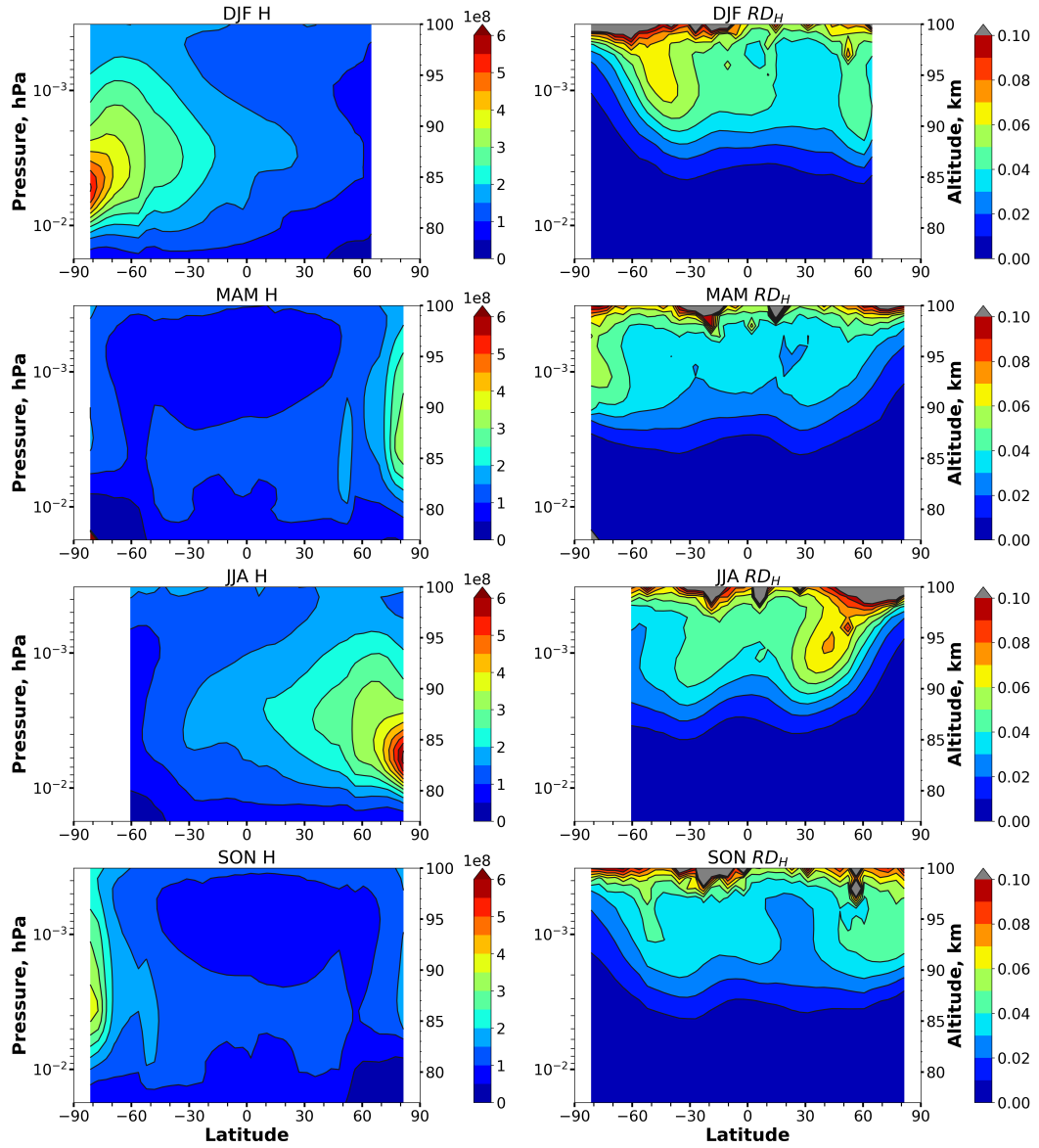


Рис. 2.13: Дневные средние распределения H [см^{-3}] (левый столбец) и RD_H (правый столбец) зимой (1-й ряд), весной (2-й ряд), летом (3-й ряд) и осенью (4-й ряд). Правые вертикальные оси указывают высоту (в км).

Более полный вариант, с учетом вторичных реакций выглядит несколько сложнее:

$$\text{OH}_{lim} = \frac{k_{12}}{k_{17}} \cdot \text{M} \cdot \text{O}_2 \cdot \left(1 + \frac{k_{20} \cdot \text{M} \cdot \text{O}_2}{k_{21} \cdot \text{O}_3} \cdot \frac{k_{18} \cdot k_{21} \cdot \text{O}_3 + 2k_{14} \cdot k_{12} \cdot \text{O}_2}{k_{18} \cdot k_{21} \cdot \text{O}_3 + (k_{14} + k_{15} + k_{16}) \cdot k_{12} \cdot \text{M} \cdot \text{O}_2} \right). \quad (2.7.9)$$

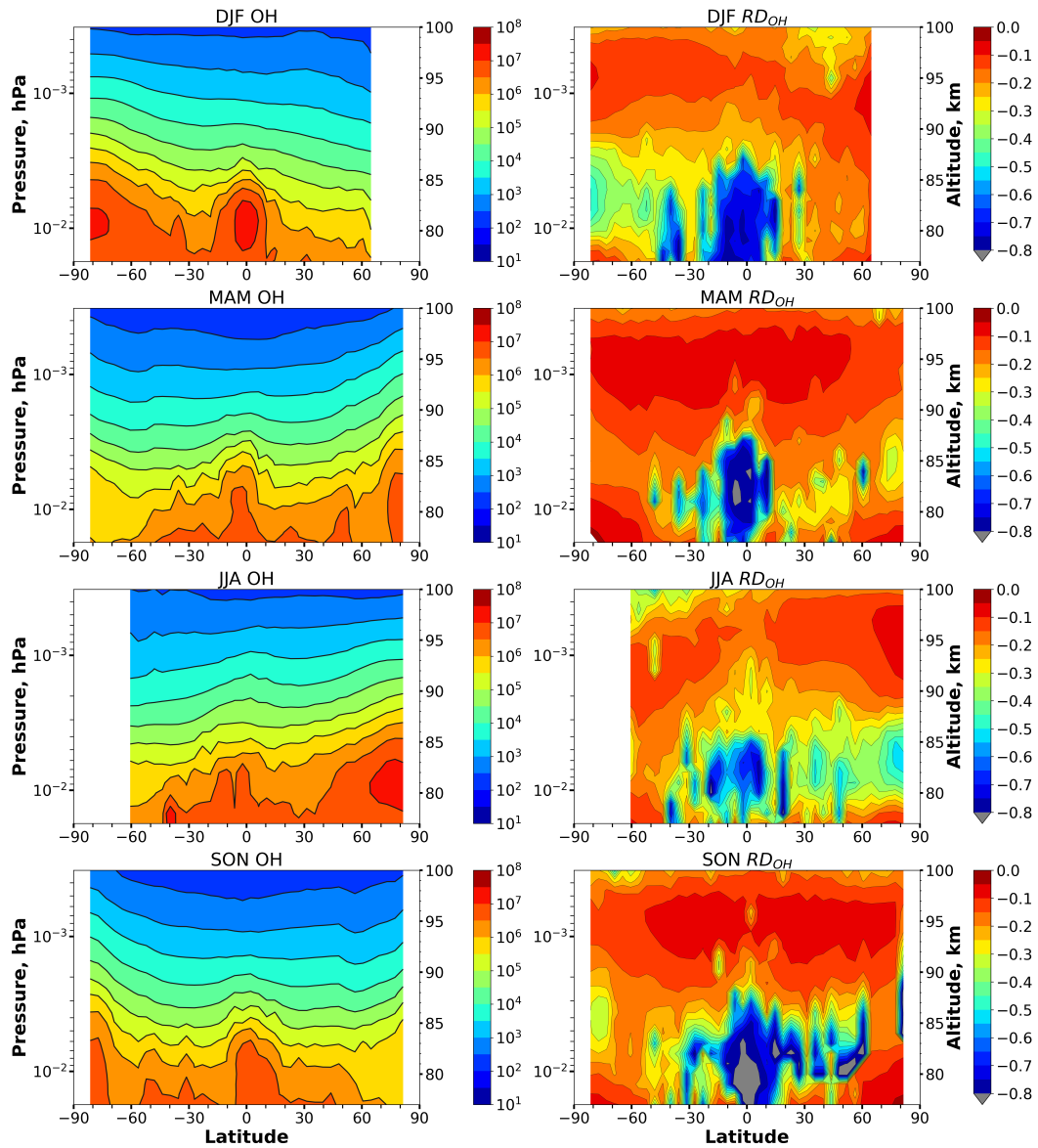


Рис. 2.14: Дневные средние распределения OH [cm^{-3}] (левый столбец) и RD_{OH} (правый столбец) зимой (1-й ряд), весной (2-й ряд), летом (3-й ряд) и осенью (4-й ряд). Правые вертикальные оси указывают высоту (в км).

Легко видеть, что исключение реакции k_{21} ($\text{H} + \text{O}_3 \rightarrow \text{OH} + \text{O}_2$) из дневного баланса озона (т.е. $k_{21} \equiv 0$) приводит к тривиальному неравенству $\text{OH} < \infty$. Именно с этим

связан обнаруженный нами нереалистичный факт, что OH' на высотах 77–85 км может быть близкой или существенно превышать концентрацию H . Мы рассчитали распределения OH_{lim} по уравнению (2.7.9) и нашли отношения $\text{OH}/\text{OH}_{lim}$ и $\text{OH}'/\text{OH}_{lim}$, см. рис. 2.15. Можно видеть, что для всех сезонов $\text{OH}/\text{OH}_{lim} < 0.5$, а отношение $\text{OH}'/\text{OH}_{lim}$ может превышать 1 в экваториальных и высоких летних широтах. Таким образом, наличие реакции k_{21} ($\text{H} + \text{O}_3 \rightarrow \text{OH} + \text{O}_2$) в уравнении баланса дневного озона критично для восстановления OH .

На рис. 2.16 представлены высотно-широтные распределения HO_2 и соответствующее относительное отклонение RD_2 для разных сезонов. Можно видеть, что правильное уравнение баланса озона приводит к уменьшению восстановленных значений концентрации HO_2 во всей области во все сезоны года. Наиболее сильное сокращение (до ~ 2 раз) происходит в высоких и средних широтах на ~ 80 – 90 км летом и в высоких и средних широтах выше ~ 95 км зимой. Результаты кампании Submillimeter-Wave Limb-Emission Sounder (SMILES) на борту Международной космической станции [124] показывают наличие дневного пика HO_2 на экваториальных широтах между 70 и 80 км со значениями 4–6 ppbv⁶ (что соответствует $\sim 10^6$ – 10^7 см⁻³), выше 80 км величина пика снижается с высотой. Это хорошо согласуется с нашими данными восстановления, который показывают аналогичный порядок значений вблизи 80 км. Спутниковый прибор Odin/SMR (Submillimeter wave Radiometer onboard of Odin satellite) Odin/SMR обнаружил схожие значения (~ 6 – 8 ppbv) на пике HO_2 на высоте 75–80 км летом в северном полушарии и отсутствие пика или пониженный пик зимой на юге [125], что также хорошо согласуется с нашими результатами. Аналогичная структура HO_2 (с пиком $\sim 10^6$ – 10^7 см⁻³ на высоте 70–80 км в летнем полушарии и положительным градиентом к летнему полюсу) были получены в ряде других работ [126, 127].

На рис. 2.17 высотно-широтные распределения CXH и соответствующее относительное отклонение RD_{CXH} для разных сезонов. CXH имеет структуру двойных максимумов в высоких широтах летом с пиками между 80–85 км и выше 95 км соответственно. Значения в пиках достигают ~ 10 – 12 К/сутки. Первый пик определяется нисходящими потоками атомарного кислорода из области выше 100 км, так как продукт экзотермических химических реакций k_{12} , k_{21} , k_{11} и k_{13} прямо пропорционален первой или второй степени концентрации атомарного кислорода. Нижний пик определяется реакциями k_{17} , k_{18} , k_{20} и совпадает с низкими температурами в высоких широтах летом, поскольку скорость этих реакций обратно пропорциональна степени температуры. Вне этих областей значения CXH не превышают 6 К/сутки. Отметим, что значения $RD_{\text{CXH}} > 10\%$ покрывают более половины площади представленных

⁶parts per billion by volume – частей на миллиард по объему – единица измерения относительной концентрации

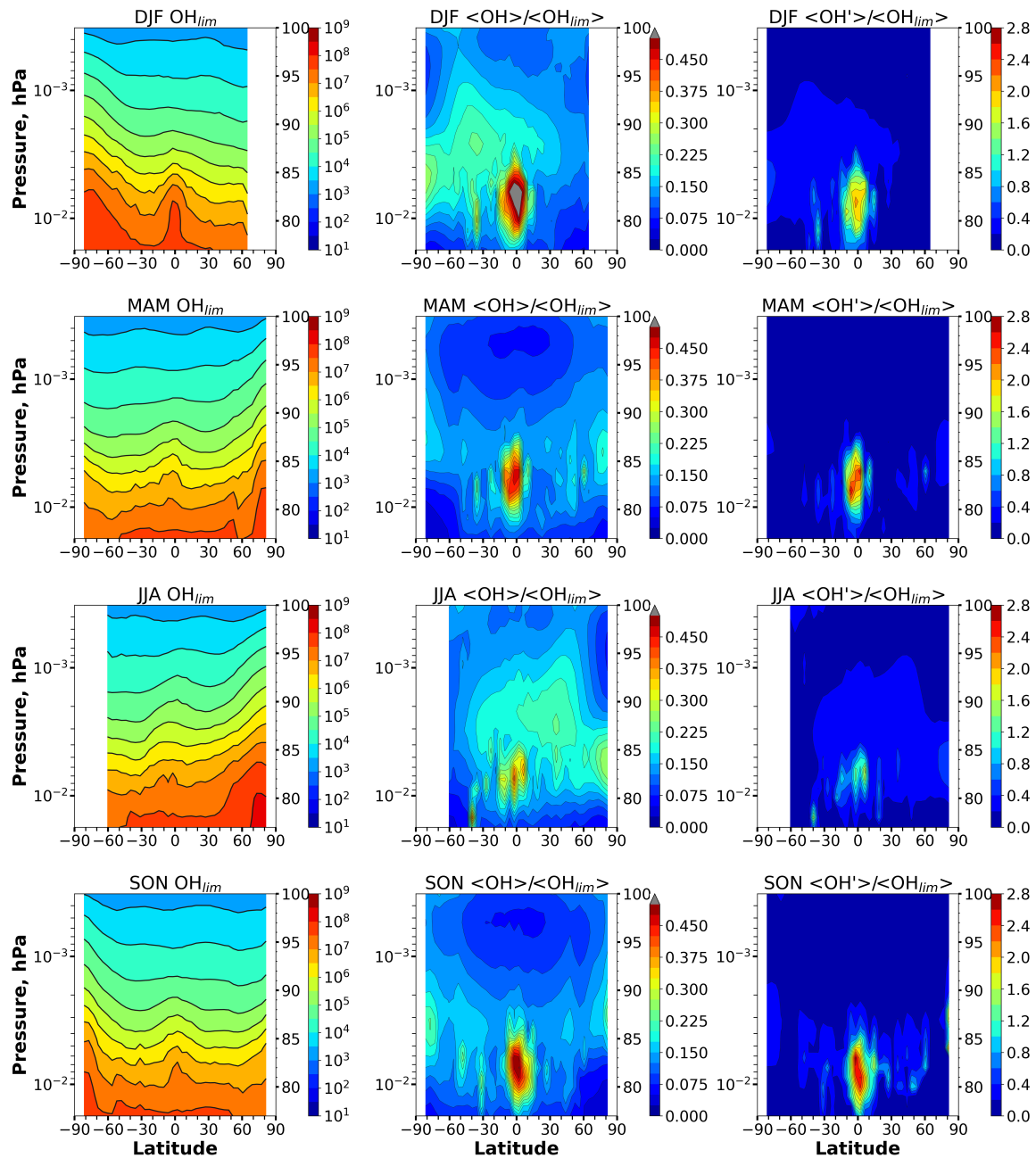


Рис. 2.15: Дневные средние распределения OH_{lim} [cm^{-3}] (левый столбец), $\text{OH}/\text{OH}_{lim}$ (средний столбец) и $\text{OH}'/\text{OH}_{lim}$ (правый столбец) зимой (1-й ряд), весной (2-й ряд), летом (3-й ряд) и осенью (4-й ряд). Правые вертикальные оси указывают высоту (в км). зимой (1-й ряд), весной (2-й ряд), летом (3-й ряд) и осенью (4-й ряд). Правые вертикальные оси указывают высоту (в км).

распределений. Абсолютный максимум $RD_{\text{СХН}}$ ($\sim 40\text{--}45\%$) наблюдается на высотах 90–95 км и ~ 100 км в летнем полушарии на $30\text{--}60^\circ$. В марте–мае и сентябре–ноябре

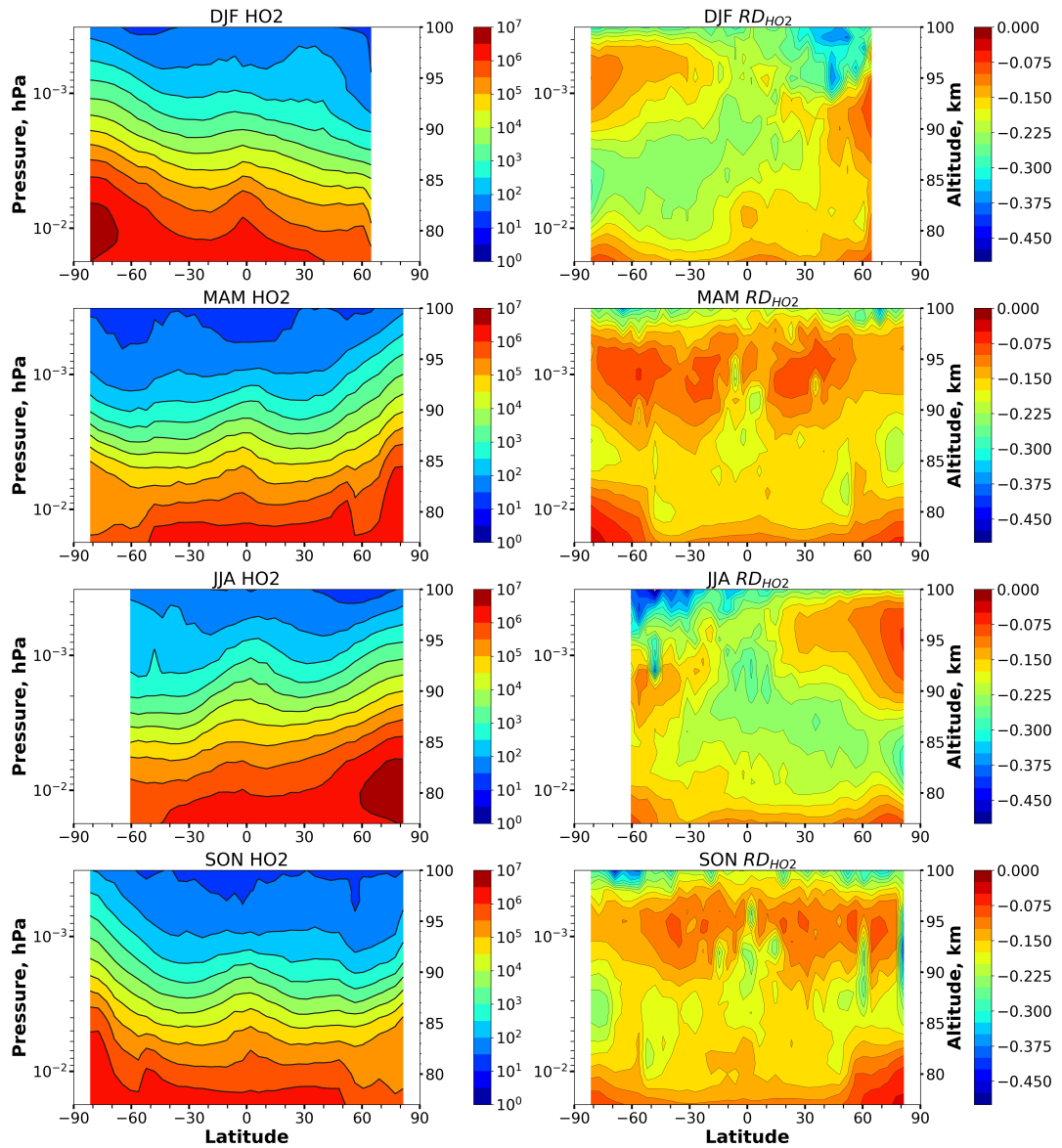


Рис. 2.16: Дневные средние распределения HO_2 [cm^{-3}] (левый столбец) и RD_{HO_2} (правый столбец) зимой (1-й ряд), весной (2-й ряд), летом (3-й ряд) и осенью (4-й ряд). Правые вертикальные оси указывают высоту (в км).

$RD_{\text{СХН}}$ достигает 24–26% в обоих полушариях на ~ 85 –95 км. Следовательно, наличие реакции k_{21} ($\text{H} + \text{O}_3 \rightarrow \text{OH} + \text{O}_2$) в уравнении баланса дневного озона критично для

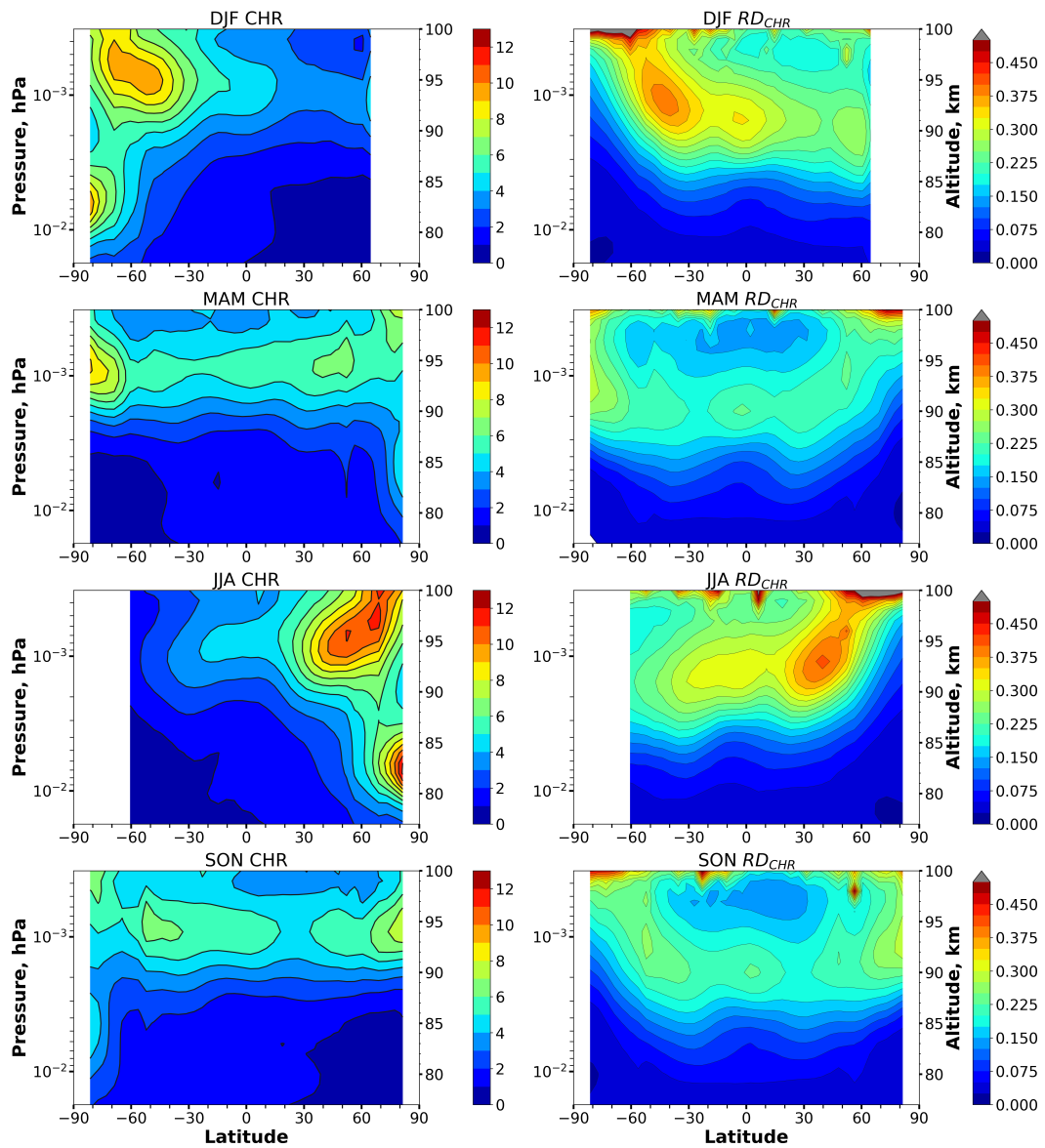


Рис. 2.17: Дневные средние распределения общего химического нагрева (СХН) [К/сут.] (левый столбец) и $RD_{СХН}$ (правый столбец) зимой (1-й ряд), весной (2-й ряд), летом (3-й ряд) и осенью (4-й ряд). Правые вертикальные оси указывают высоту (в км).

правильной оценки химической теплоты.

2.8 Исследование совместного фотохимического равновесия дневных O_3 , OH и HO_2

В работе [118] рассмотрено совместное фотохимическое равновесие дневных O_3 , OH и HO_2 :

$$OH = \frac{k_{18} \cdot HO_2 \cdot O + 2k_{14} \cdot H \cdot HO_2 + k_{21} \cdot H \cdot O_3}{k_{17} \cdot O + f_1 \cdot O_3} \quad (2.8.1)$$

$$HO_2 = \frac{k_{20} \cdot H \cdot O_2 \cdot M + f_1 \cdot O_3 \cdot OH}{k_{18} \cdot O} \quad (2.8.2)$$

$$O_3 = \frac{k_{12} \cdot O \cdot O_2 \cdot M}{(g_{10} + g_{11}) + k_{21} \cdot H} \quad (2.8.3)$$

В результате аналитического анализа выведено алгебраическое соотношение, связывающее локальные концентрации этих компонент, параметрами которого являются только температура и концентрация воздуха, а также константы 8-ми химических реакций. В обозначениях табл. 2.1 оно принимает следующий вид:

$$F(OH, HO_2, O_3) = \left(\frac{k_{20}MO_2}{k_{20}MO_2 + k_{21}O_3 + 2k_{14}HO_2} + \frac{k_{12}f_1MO_2}{(g_{10} + g_{11})k_{17}} \right) \frac{k_{17}OH}{k_{18}HO_2} = 1 \quad (2.8.4)$$

Соотношение (2.8.4) выводится в [118] исходя из того, что каждая из компонент O_3 , OH и HO_2 находится в состоянии фотохимического равновесия. В выводе были сделаны некоторые приближения касательно поведения компонент. При этом влияние транспорта сложно определить в аналитическом выводе. Необходимо было оценить, насколько (2.8.4) выполняется в условиях, соответствующих реальным, что и было сделано посредством химико-транспортного моделирования. Модель (см. подраздел 2.3) использовала динамику СМАМ. Шаг интегрирования составил 9 с.

На рис. 2.18 представлены зональные месячные средние функции $F(OH, HO_2, O_3)$. Дневными считались данные с зенитным углом солнца меньше 85° , соответственно области без дневных данных заполнены штриховкой. Можно видеть, что соотношение (2.8.4) выполняется наиболее точно на высотах 50–76 км и выше 86 км, при этом отличие $\langle F \rangle$ от 1 составляет менее 1%. В диапазоне высот 76–86 км существует область повышенных значений $\langle F \rangle$, где отклонение от 1 может достигать 3–4%. Форма и высота области имеют годовой ход. Максимальное отклонение достигается в зимнем полушарии. Ниже 50 км значение $\langle F \rangle$ увеличивается до 1,2 на 40 км. Ниже стратопазузы, скорее всего, соотношение (2.8.4) больше не описывает одновременное фотохимическое равновесие O_3 , OH и HO_2 . Однако ниже 50 км также необходимо рассмотреть вопрос об адекватности моделирования, поскольку модель в первую очередь предназначена для МНТ региона. Полученные точности выполнения соотношения (2.8.4) могут быть использованы для создания априорных распределений в методе главы 3.

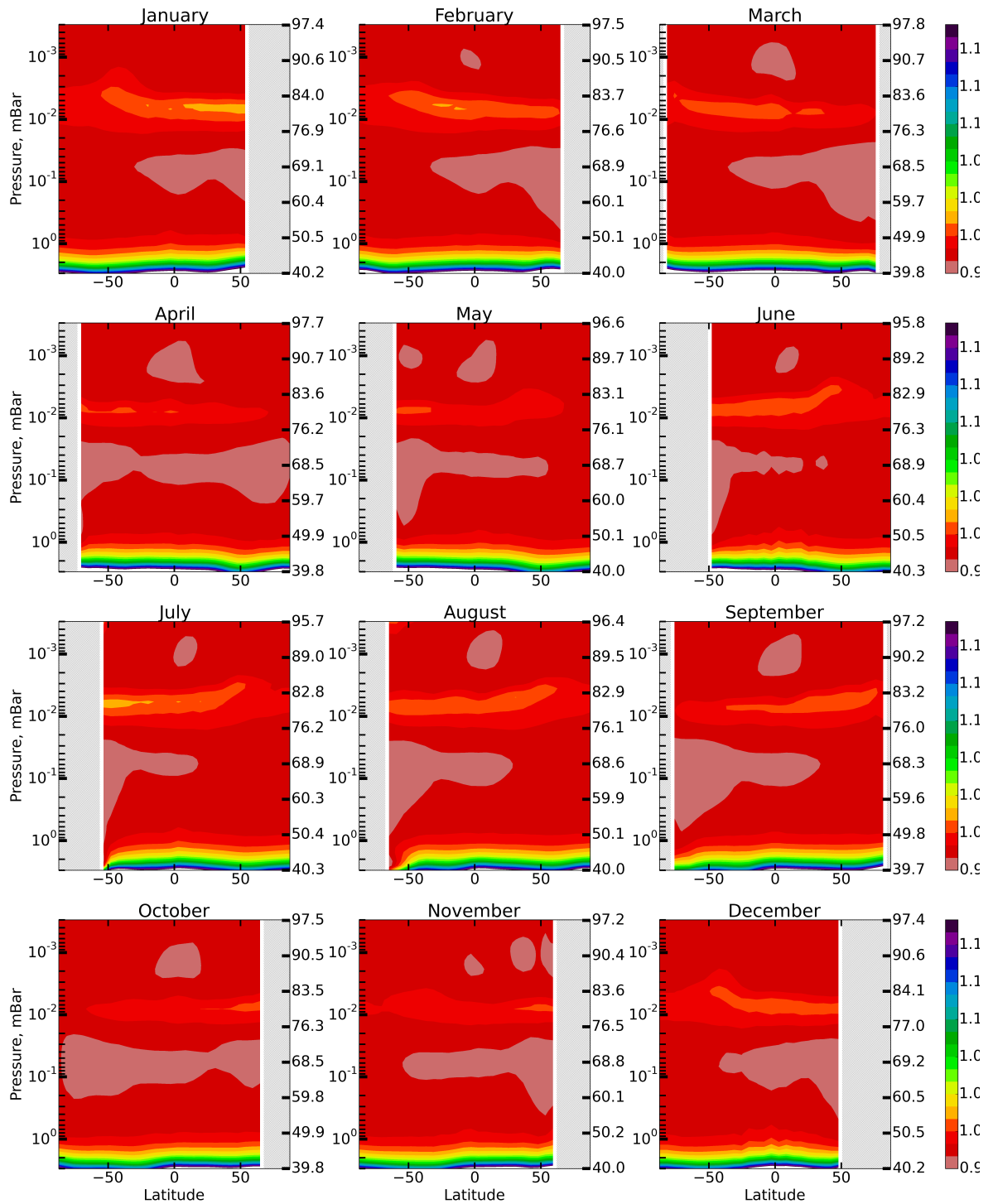


Рис. 2.18: Зональное месячное среднее от величины F (2.8.4) в дневное время по результатам химико-транспортного моделирования с динамикой СМАМ. Штриховкой показаны широты, в которых нет дневных (с зенитным углом Солнца $<85^\circ$) данных.

2.9 Выводы главы

На основании результатов, описанных в главе 2, можно сделать следующие выводы.

С помощью общего подхода, сформулированного в разделе 2.1, были определены границы применимости и точность выполнения предположений о фотохимическом равновесии для компонент ночной и дневной мезосферы. В основе подхода лежит анализ эволюции химических компонент, полученной посредством трехмерного химико-транспортного моделирования.

Полученные результаты имеют большое практическое значение для спутниковых измерений. Так, для получения информации о ночном О на основании измерений прибором SABER на спутнике TIMED в явном виде используется предположение о фотохимическом равновесии ночного озона. Поэтому корректность данных, лежащих далеко за пределами пространственно-временных зон равновесия, находится под сомнением. Было показано, что предложенный критерий равновесности, который может быть применен непосредственно к результатам измерений данным прибором, хорошо воспроизводит нижнюю границу области равновесия.

Анализ поведения компонент в дневное время показал, что фотохимическое равновесие озона выполняется с высокой точностью, а совместное равновесие ОН, НО₂ и О₃ выполняется с точностью не хуже, чем 3–4% во всей мезосфере – нижней термосфере. Однако важным является набор реакций, учитываемый в условиях фотохимического равновесия. Так, выражение, используемое при определении О и Н по данным SABER, учитывает в качестве стока дневного озона только фотодиссоциацию. Подобное приближение является общепотребимым, однако может приводить к систематическим ошибкам. На основе трехмерного химико-транспортного моделирования и обработки данных многолетних спутниковых измерений SABER/TIMED показано, что учет реакции $\text{H} + \text{O}_3 \rightarrow \text{O}_2 + \text{OH}$ приводит к существенному (до ~50–70%) систематическому занижению среднемесячных и среднегодовых концентраций О на высотах 75–90 км, однако мало сказывается на восстановлении Н.

Глава 3

Модернизация метода статистической оценки качества одновременных измерений нескольких атмосферных компонент при условии их фотохимического равновесия.

В данной главе рассмотрены особенности ранее разработанного (см. [118]) метода байесовой статистической оценки качества одновременных спутниковых измерений концентраций OH , HO_2 и O_3 на высотах мезосферы, связанные с введением априорных ограничений на их истинные (скрытые шумом измерений) значения, определяемых условием фотохимического равновесия этих малых примесей. В основе метода лежит вероятностное рассмотрение данных спутниковых измерений, когда истинные значения концентраций OH , HO_2 и O_3 полагаются случайными величинами. Он заключается в построении апостериорной плотности вероятности этих величин и сопоставлении статистических характеристик полученной плотности с такими же характеристиками исходных данных измерений. В данной главе показано, что в процедуре построения апостериорной плотности вероятности OH , HO_2 и O_3 есть неоднозначность, связанная с разными способами предельного перехода от трехмерного вероятностного распределения к поверхностному, которая существенно влияет на статистические средние и приводит к неизбежной систематической ошибке. Представлены основные варианты выбора двумерной плотности вероятности в зависимости от типа предельного перехода. Для оценки систематической ошибки метода проведено тестирование на искусственно зашумленных модельных данных OH , HO_2 и O_3 , ими-

тирующих идеальные (несмещенные) измерения. Показано, что выбор предельного перехода типа «одеяло» приводит к наименьшим систематическим ошибкам метода. Применение метода к данным MLS/Aura за июль 2005 г. подтвердило полученные ранее результаты о том, что спутниковые измерения концентрации NO_2 содержат существенное систематическое смещение, значительно превышающее систематическую погрешность метода, вследствие чего, в частности, возникает существенная ошибка в определении локализации максимума концентрации этой компоненты на высотах мезосферы.

3.1 Метод статистической оценки качества данных измерений малых примесей мезосферы, основанный на учете фотохимической связи между компонентами

Известно, что данные дистанционного зондирования обладают неизбежной случайной и систематической ошибкой. Случайная ошибка может быть оценена, в частности, в рамках процедуры решения некорректной обратной задачи, тогда как оценка систематической ошибки существенно затруднена вследствие, прежде всего, отсутствия в подавляющем большинстве случаев реперного («идеального» в определенных смыслах) ансамбля данных, с которым можно было бы провести сравнение. Особенно это характерно для данных дистанционного зондирования средней атмосферы. Решить эту проблему помогает наличие строгих физико-химических связей между несколькими измеряемыми характеристиками атмосферы. Специальный вероятностный подход, учитывающий, в том числе, случайные ошибки измеренных данных, позволяет провести оценку качества измерений. В работах [128, 129] разработан метод статистической оценки точности характеристик атмосферных фотохимических систем, восстанавливаемых с помощью физико-химических моделей по зашумлённым временным рядам экспериментальных данных. Основная идея заключается в построении совместной условной апостериорной плотности вероятности неизвестных параметров и переменных системы. В работе [118] этот метод был модифицирован для частного случая, когда модель связывает только совместно измеренные характеристики и возникает очевидная возможность проверить, насколько хорошо данные измерений соответствуют модельным ограничениям.

В предыдущей главе (в разделе 2.8) было показано, что мгновенные локальные дневные значения концентраций OH , NO_2 и O_3 , взятые на любой высоте из диапазона

50–100 км в моменты локального времени, отвечающие зенитному углу солнца меньше 85° , хорошо удовлетворяют соотношению:

$$F(\text{OH}, \text{HO}_2, \text{O}_3) = \left(\frac{k_{20}\text{MO}_2}{k_{20}\text{MO}_2 + k_{21}\text{O}_3 + 2k_{14}\text{HO}_2} + \frac{k_{12}f_1\text{MO}_2}{(g_{10} + g_{11})k_{17}} \right) \frac{k_{17}\text{OH}}{k_{18}\text{HO}_2} = 1 \quad (3.1.1)$$

где g_{10} , g_{11} , k_{12} , k_{14} , k_{17} , k_{18} , k_{20} , k_{21} — константы реакций, указанных в табл. 2.1. Численные значения коэффициентов и их зависимости от температуры соответствуют данным NASA JPL [98]. Коэффициенты фотодиссоциации $g_{10} + g_{11}$ в зависимости от номера дня в году, координат и зенитного угла Солнца берутся из модели [103]. Можно заметить, что уравнение (3.1.1) описывает поверхность второго порядка в координатах OH , HO_2 , O_3 .

В соответствие с [118], статистическая оценка качества одновременных измерений OH , HO_2 , O_3 состоит в следующем:

- построении для каждого однократного (на определенном уровне давления) измерения концентраций OH , HO_2 , O_3 и температуры воздуха, характеризуемого своим набором координат и моментом дневного локального времени, условной плотности вероятности истинных значений концентраций этих компонент при условии конкретных данных измерений с учетом алгебраического соотношения (3.1.1);
- вычислении моментов этого распределения (математического ожидания и дисперсии для каждой компоненты);
- усреднении моментов по времени и пространству и сравнении полученных распределений с усредненными исходными экспериментальными данными.

В работе [118] производилась оценка качества данных прибора MLS на спутнике Aura.

Обозначим вектор измерений (измеряемые компоненты) как $\vec{x} := \{\text{HO}_2^m, \text{O}_3^m, \text{OH}^m\}$. Его составляют одновременно измеренные значения концентраций OH , HO_2 и O_3 на некоторой высоте (уровне давления) в некий момент дневного локального времени. Обозначим «вектор состояния» $\vec{u} := \{\text{HO}_2^{ret}, \text{O}_3^{ret}, \text{OH}^{ret}\}$, компонентами которого служат истинные (неизвестные нам) величины концентраций. Компоненты \vec{u} должны удовлетворять фотохимической связи (3.1.1). Шум измерений предполагается аддитивным и гауссовым, тогда

$$\vec{x} = \vec{u} + \vec{\xi}, \quad (3.1.2)$$

где $\vec{\xi}$ подчиняется распределению

$$w(\vec{\xi}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}} \prod_i \sigma_i} \cdot \exp\left(-\sum_i \frac{\xi_i^2}{2\sigma_i^2}\right). \quad (3.1.3)$$

В (3.1.3) σ_i обозначают соответствующие среднеквадратичные отклонения ошибок измерения концентраций HO_2 , O_3 и OH : $\{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3\} \equiv \{\sigma_{\text{HO}_2}, \sigma_{\text{O}_3}, \sigma_{\text{OH}}\}$. Эти величины известны из описания спутниковых данных [130–132]. В итоге апостериорное распределение имеет вид

$$f(\vec{u}|\vec{x}) \propto \Psi(\vec{u}) \cdot w(\vec{x} - \vec{u}), \quad (3.1.4)$$

В работе [118] выражение (3.1.1) было записано как функция OH от двух других переменных, HO_2 и O_3 ($u_3 = G(u_1, u_2)$), и введено в априорную функцию распределения $\Psi(\vec{u})$ следующим образом:

$$\Psi(\vec{u}) = \Psi_{\text{OH}}(\vec{u}) = \delta[u_3 - G(u_1, u_2)] \Phi(u_1, u_2), \quad (3.1.5)$$

где $\delta(u)$ — дельта функция, $\Phi(u_1, u_2)$ — совместная априорная плотность вероятности u_1 и u_2 , в общем случае выбираемая в виде равномерной функции на достаточно большой двумерной области Σ , размеры которой значительно превосходят возможные в реальных условиях мезосферы значения O_3 и HO_2 :

$$\Phi(u_1, u_2) = \begin{cases} 1/S(\Sigma) & (u_1, u_2) \in \Sigma \\ 0 & (u_1, u_2) \notin \Sigma, \end{cases} \quad (3.1.6)$$

где $S(\Sigma)$ — площадь области Σ . Конкретный вид этой области не влияет на конечный результат. Функция (3.1.6) не встречается в работе [118] и введена здесь для математической строгости.

Интегрируя выражение (3.1.4) по переменной u_3 с учетом (3.1.5), получаем следующее выражение для плотности вероятности u_1 и u_2 при условии, что наблюдается \vec{x} :

$$f_{\text{OH}}(u_1, u_2|\vec{x}) \propto \exp\left[-\frac{(x_1 - u_1)^2}{2\sigma_1^2}\right] \exp\left[-\frac{(x_2 - u_2)^2}{2\sigma_2^2}\right] \exp\left\{-\frac{[x_3 - G(u_1, u_2)]^2}{2\sigma_3^2}\right\}, \quad (3.1.7)$$

где $(u_1, u_2) \in \Sigma$. Первые моменты данного распределения находятся по достаточно большой (несколько сотен тысяч) выборке (u_1, u_2) , полученной в результате семплирования плотности вероятности (3.1.7) с применением алгоритма Метрополиса – Гастингса [133]:

$$\begin{aligned} \langle u_1 \rangle &= \int_{(u_1, u_2) \in \Sigma} u_1 f_{\text{OH}}(u_1, u_2|\vec{x}) du_1 du_2 & \langle u_2 \rangle &= \int_{(u_1, u_2) \in \Sigma} u_2 f_{\text{OH}}(u_1, u_2|\vec{x}) du_1 du_2 \\ \langle u_3 \rangle &= \int_{(u_1, u_2) \in \Sigma} G_{1,2} f_{\text{OH}}(u_1, u_2|\vec{x}) du_1 du_2 \end{aligned} \quad (3.1.8)$$

Дисперсии распределений есть $\sigma_j = \sqrt{\langle u_j^2 \rangle - \langle u_j \rangle^2}$, где угловые скобки означают усреднение в смысле (3.1.8). Для проверки использовался также более простой алгоритм «выборки с отклонением» [133]. Отметим, что оба алгоритма не требуют нормировки функции распределения. Средние, полученные по формулам (3.1.8), будем называть результатами восстановления¹.

В работе [118] данный метод был применен к данным MLS/Aura за 2005. Полученные результаты показали, что распределения NO_2 существенно занижают положение мезосферного максимума данной компоненты, что подтверждается результатами «оффлайн»-восстановления NO_2 по первичным данным измерений этой спутниковой кампании.

3.2 Неоднозначность построения априорной функции распределения: парадокс Бореля – Колмогорова

Из теории и практики применения статистических методов восстановления характеристик атмосферы по данным дистанционного зондирования (см. [54]) известно, что введение априорного ограничения всегда вызывает смещение результата восстановления, которое может быть довольно большим в случае существенной ошибки измеренных данных. Теоретически возможно выбрать априорную вероятность так, что в среднем получается среднее по распределению истинной величины. Для этого необходимо, чтобы априорное распределение в точности совпадало с истинным, что не реализуемо с практической точки зрения в задаче оценки качества данных. Однако можно попытаться уменьшить эту ошибку путем выбора оптимальных априорных ограничений. Дело в том, что в нашем случае существует, помимо выражения (3.1.5), бесконечное число различных способов, которыми можно учесть алгебраическую связь (3.1.1) в априорной функции $\Psi(\vec{u})$. Например, если выражение (3.1.1) записать как функцию O_3 от NO_2 и OH , $u_2 = Z(u_1, u_3)$, то

$$\Phi_{\text{O}_3}(\vec{u}) = \delta[u_2 - Z(u_1, u_3)] \Phi'(u_1, u_3), \quad (3.2.1)$$

где вспомогательная функция Φ' введена аналогично Φ , и апостериорная плотность распределения имеет следующий вид:

$$f_{\text{O}_3}(u_1, u_3 | \vec{x}) \propto \exp\left[-\frac{(x_1 - u_1)^2}{2\sigma_1^2}\right] \exp\left\{-\frac{[x_2 - Z(u_1, u_3)]^2}{2\sigma_2^2}\right\} \exp\left[-\frac{(x_3 - u_3)^2}{2\sigma_3^2}\right]. \quad (3.2.2)$$

¹Результаты измерения OH , NO_2 , O_3 сами по себе являются результатами процедуры восстановления концентраций из результатов радиометрических измерений. Однако это восстановление в данном разделе не рассматривается.

Другой вариант искомой плотности вероятности получается, если выражение (3.1.1) записать как функцию HO_2 от O_3 и OH , $u_1 = Q(u_2, u_3)$:

$$\Phi_{\text{HO}_2}(\vec{u}) = \delta [u_1 - Z(u_2, u_3)] \Phi''(u_2, u_3), \quad (3.2.3)$$

где вспомогательная функция Φ'' введена аналогично Φ и Φ' :

$$f_{\text{HO}_2}(u_2, u_3 | \vec{x}) \propto \exp \left\{ -\frac{[x_1 - Q(u_2, u_3)]^2}{2\sigma_1^2} \right\} \exp \left[-\frac{(x_2 - u_2)^2}{2\sigma_2^2} \right] \exp \left[-\frac{(x_3 - u_3)^2}{2\sigma_3^2} \right]. \quad (3.2.4)$$

Отметим, что плотности вероятности (3.1.7), (3.2.2) и (3.2.4) не эквивалентны друг другу. Действительно, если в выражении (3.2.2) сделать замену переменных $(u_1, u_3) \rightarrow (u_1, u_2)$, оно перейдет в следующее:

$$f_{\text{O}_3}(u_1, u_2 | \vec{x}) \propto f_{\text{OH}}(u_1, u_2 | x) \cdot \left| \frac{\partial G(u_1, u_2)}{\partial u_2} \right| \quad (3.2.5)$$

где $|\partial G(u_1, u_2)/\partial u_2|$ — модуль якобиана замены переменных. Поскольку замена переменных является нелинейной, этот множитель не константа, следовательно, распределения (3.2.5) и (3.1.7) существенно различны, и их отличие тем больше, чем сильнее меняется якобиан на характерной ширине функции (3.1.7), определяемой шумом измерений.

Распределения вероятностей (3.1.4) и (3.1.7) имеют простой геометрический смысл. Рассмотрим случайную величину \vec{v} , имеющую плотность вероятностей $w_x(\vec{u}) \equiv w(\vec{x} - \vec{u})$, в нашем случае это трехмерное нормальное распределение. Формула (3.1.4) описывает пересечение функции $w_x(\vec{u})$ с априорной плотностью вероятности $\Psi(\vec{u})$. Таким образом, выражение (3.1.7) описывает условную плотность вероятности величины \vec{v} при условии того, что она лежит на поверхности L , задаваемой выражением $u_3 = G(u_1, u_2)$. Это и есть основа рассматриваемого метода оценки качества данных одновременных спутниковых измерений.

Нетрудно заметить, что плотность вероятности (3.2.2) имеет тот же геометрический смысл, что и (3.1.7): условное распределение случайной величины \vec{v} при условии того, что она находится на поверхности L . Только в случае (3.2.2) используется другая параметризация поверхности. Дело в том, что двумерная поверхность L является множеством меры нуль (фигурой нулевого объема) в трехмерном пространстве возможных векторов состояния (HO_2^{ret} , O_3^{ret} , OH^{ret}). В свою очередь, определять условную вероятность на множестве меры нуль можно по-разному (см. парадокс Бореля — Колмогорова [134] и [135]). Случаи (3.1.7), (3.2.2) и с некоторыми оговорками (3.2.4) представляют различные варианты ее определения.

Рассмотрим δ -функцию в (3.1.5) как предел δ -последовательности:

$$\delta(\tilde{u}_3) = \lim_{\Delta u_3 \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta u_3} \alpha_{\Delta u_3}(\tilde{u}_3), \quad (3.2.6)$$

где

$$\alpha_{\Delta u_3}(\tilde{u}_3) = \begin{cases} 1/\Delta u_3 & \tilde{u}_3 \in [0, \Delta u_3] \\ 0 & \tilde{u}_3 \notin [0, \Delta u_3]. \end{cases} \quad (3.2.7)$$

Тогда если в (3.1.5) вместо δ -функции будет стоять член последовательности (3.2.6), то выражение (3.1.4) будет представлять условное распределение случайной величины \vec{v} при условии того, что она находится в области $\Omega_{\text{ОН}}(\Delta u_3)$ такой, что

$$\vec{u} \in \Omega_{\text{ОН}}(\Delta u_3) : u_3 \in [G(u_1, u_2), G(u_1, u_2) + \Delta u_3] \text{ и } (u_1, u_2) \in \Sigma. \quad (3.2.8)$$

То есть область $\Omega_{\text{ОН}}(\Delta u_3)$ конечного объема, заключенная между поверхностью L и такой же поверхностью, полученной параллельным переносом L на Δu_3 по оси u_3 . Нетрудно видеть, что последовательность областей $\Omega_{\text{ОН}}(\Delta u_3)$ стремится при $\Delta u_3 \rightarrow 0$ к множеству меры нуль, описываемому поверхностью L . Точно так же априорные распределения (3.2.1) и (3.2.3) соответствуют предельным переходам от объемной области к множеству меры нуль, задаваемому поверхностью L . При этом аналогично (3.2.8) соответствующие последовательности областей заключены между поверхностью L и параллельной ей поверхностью, смещенной по одной из координат.

Рассмотрим другой вариант построения апостериорной плотности вероятности $f_{\text{ОН}}^{\text{patch}}(u_1, u_2 | \vec{x})$, получающийся при предельном переходе способом, названным нами «одеяло». Член стремящейся к множеству меры нуль последовательности $\Omega_{\text{patch}}(\rho)$ является областью, точки которой удалены от поверхности L на расстояние (в Эвклидовой метрике) не больше ρ :

$$\vec{u} \in \Omega_{\text{patch}} : \inf \|\vec{u} - \vec{u}_L\| \leq \rho, \text{ где } \vec{u}_L \in L. \quad (3.2.9)$$

При $\rho \rightarrow 0$ последовательность $\Omega_{\text{patch}}(\rho)$ очевидным образом стремится к множеству, заданному поверхностью L . Рассмотрим условную вероятность события $\vec{v} \in \Delta \Omega_{\text{patch}}(\rho)$ при условии того, что $\vec{v} \in \Omega_{\text{patch}}(\rho)$:

$$P(\vec{v} \in \Delta \Omega_{\text{patch}}(\rho) | \vec{v} \in \Omega_{\text{patch}}(\rho)) = \frac{\int_{\Delta \Omega_{\text{patch}}(\rho)} w(\vec{x} - \vec{u}) \cdot d\vec{u}}{\int_{\Omega_{\text{patch}}(\rho)} w(\vec{x} - \vec{u}) \cdot d\vec{u}}, \quad (3.2.10)$$

где $\Delta \Omega_{\text{patch}}(\rho)$ — малая часть области $\Omega_{\text{patch}}(\rho)$, определяемая точкой $(u_1^*, u_2^*) \in \Sigma$ на поверхности L и размерами $\Delta u_1, \Delta u_2$ по осям u_1, u_2 . В результате область задана выражениями:

$$\vec{u} \in \Delta \Omega_{\text{patch}}(\rho) : \vec{u} \in \Omega_{\text{patch}}(\rho), \quad u_1 \in [u_1^*, u_1^* + \Delta u_1], \quad u_2 \in [u_2^*, u_2^* + \Delta u_2]. \quad (3.2.11)$$

Из геометрического смысла «одеяла» очевидно, что числитель в выражении (3.2.10)

$$\int_{\Delta\Omega_{patch}(\rho)} w(\vec{x} - \vec{u}) \cdot d\vec{u} = 2\rho \cdot I(\Delta L) + o(\rho^2), \quad (3.2.12)$$

где

$$I(\Delta L) = \int_{\Delta L} w(\vec{x} - \vec{u}) \cdot dS(u_1, u_2) = \iint_{\substack{u_1 \in [u_1^*, u_1^* + \Delta u_1] \\ u_2 \in [u_2^*, u_2^* + \Delta u_2]}} w(\vec{x} - \vec{u}) \cdot \sqrt{1 + \left(\frac{\partial G}{\partial u_1}\right)^2 + \left(\frac{\partial G}{\partial u_2}\right)^2} \cdot du_1 du_2 \quad (3.2.13)$$

поверхностный интеграл (от функции $w(\vec{x} - \vec{u})$) первого рода по части поверхности L , ограниченной в соответствии с (3.2.11), $o(\rho^2)$ — величина более высокого порядка малости. Знаменатель в (3.2.10) отличается от числителя только областью интегрирования, поэтому он также пропорционален ρ . В пределе $\rho \rightarrow 0$ выражение (3.2.10) принимает вид:

$$\lim_{\rho \rightarrow 0} P(\vec{v} \in \Delta\Omega_{patch}(\rho) | \vec{v} \in \Omega_{patch}(\rho)) = \frac{\iint_{\substack{u_1 \in [u_1^*, u_1^* + \Delta u_1] \\ u_2 \in [u_2^*, u_2^* + \Delta u_2]}} w(\vec{x} - \vec{u}) \cdot \sqrt{1 + \left(\frac{\partial G}{\partial u_1}\right)^2 + \left(\frac{\partial G}{\partial u_2}\right)^2} \cdot du_1 du_2}{\iint_{(u_1, u_2) \in \Sigma} w(\vec{x} - \vec{u}) \cdot \sqrt{1 + \left(\frac{\partial G}{\partial u_1}\right)^2 + \left(\frac{\partial G}{\partial u_2}\right)^2} \cdot du_1 du_2} \quad (3.2.14)$$

В пределе $\rho \rightarrow 0$ условие $\vec{v} \in \Delta\Omega_{patch}(\rho)$ эквивалентно $u_1 \in [u_1^*, u_1^* + \Delta u_1]$ и $u_2 \in [u_2^*, u_2^* + \Delta u_2]$, в то время как $u_3 = G(u_1, u_2)$. Пользуясь малостью Δu_1 и Δu_2 , получаем

$$\begin{aligned} P(u_1 \in [u_1^*, u_1^* + \Delta u_1], u_2 \in [u_2^*, u_2^* + \Delta u_2] | \vec{v} \in L) &= \\ &= \iint_{\substack{u_1 \in [u_1^*, u_1^* + \Delta u_1] \\ u_2 \in [u_2^*, u_2^* + \Delta u_2]}} f_{OH}^{patch}(u_1, u_2 | \vec{x}) \cdot du_1 du_2 \approx f_{OH}^{patch}(u_1^*, u_2^* | \vec{x}) \cdot \Delta u_1 \Delta u_2. \end{aligned} \quad (3.2.15)$$

В свою очередь, числитель (3.2.14)

$$\iint_{\substack{u_1 \in [u_1^*, u_1^* + \Delta u_1] \\ u_2 \in [u_2^*, u_2^* + \Delta u_2]}} w(\vec{x} - \vec{u}) \cdot \sqrt{1 + \left(\frac{\partial G}{\partial u_1}\right)^2 + \left(\frac{\partial G}{\partial u_2}\right)^2} \cdot du_1 du_2 \approx w(\vec{x} - \vec{u}^*) \cdot \sqrt{1 + \left(\frac{\partial G}{\partial u_1}\right)^2 + \left(\frac{\partial G}{\partial u_2}\right)^2} \cdot \Delta u_1 \Delta u_2 \quad (3.2.16)$$

где $\vec{u}^* = \{u_1^*, u_2^*, G(u_1^*, u_2^*)\}$. В результате апостериорная плотность вероятности u_1 и

u_2 при условии, что наблюдается \vec{x} :

$$f_{\text{OH}}^{\text{patch}}(u_1, u_2 | \vec{x}) \propto \exp \left[-\frac{(x_1 - u_1)^2}{2\sigma_1^2} \right] \exp \left[-\frac{(x_2 - u_2)^2}{2\sigma_2^2} \right] \exp \left\{ -\frac{[x_3 - G(u_1, u_2)]^2}{2\sigma_3^2} \right\} \sqrt{1 + \left(\frac{\partial G}{\partial u_1} \right)^2 + \left(\frac{\partial G}{\partial u_2} \right)^2}. \quad (3.2.17)$$

В случае проведения подобного анализа в другой параметризации поверхности, например $u_2 = Z(u_1, u_3)$, получим:

$$f_{\text{O}_3}^{\text{patch}}(u_1, u_3 | \vec{x}) \propto \exp \left[-\frac{(x_1 - u_1)^2}{2\sigma_1^2} \right] \exp \left\{ -\frac{[x_2 - Z(u_1, u_3)]^2}{2\sigma_2^2} \right\} \exp \left[-\frac{(x_3 - u_3)^2}{2\sigma_3^2} \right] \sqrt{1 + \left(\frac{\partial Z}{\partial u_1} \right)^2 + \left(\frac{\partial Z}{\partial u_3} \right)^2}. \quad (3.2.18)$$

Нетрудно показать, что плотности вероятности (3.2.17) и (3.2.18) эквивалентны с точностью до замены переменных, т.е. $f_{\text{OH}}^{\text{patch}}(u_1, u_2 | \vec{x}) \propto f_{\text{O}_3}^{\text{patch}}(u_1, u_3 | \vec{x})$.

Проделанный предельный переход соответствует введению в (3.1.4) априорного распределения:

$$\Psi_{\text{OH}}^{\text{patch}}(\vec{u}) = \delta [u_3 - G(u_1, u_2)] \Phi(u_1, u_2) \sqrt{1 + \left(\frac{\partial G}{\partial u_1} \right)^2 + \left(\frac{\partial G}{\partial u_2} \right)^2}. \quad (3.2.19)$$

Использование априорного распределения с дельта-функцией делает запись компактной и удобной, при этом важно не забывать об описанном выше предельном переходе.

Таким образом, выше представлены некоторые варианты введения априорных ограничений, соответствующие разным способам перехода от объемных вероятностных распределений к поверхностным и приводящие, вообще говоря, к различным видам апостериорной плотности вероятности.

3.3 Результаты применения различных вариантов апостериорной функции к обработке симулированных данных измерений

Как уже упоминалось, рассматриваемый метод оценки качества данных измерений приносит неизбежную систематическую ошибку (ошибку метода), то есть даже в случае идеальных данных, в которых нет систематической ошибки измерений, результат применения метода может заметно отличаться от исходных данных. Оценку систематической погрешности метода можно получить, применив его к идеальным

данным, имитирующим измерения спутника. Такие данные были сгенерированы с помощью глобальной химико-транспортной модели, представленной во 2 главе. Для определенности ограничимся результатами моделирования, соответствующими июлю 2005 года.

Из реальных спутниковых данных MLS/Aura за тот же период были взяты сведения об орбите спутника (положение, дата и дневное локальное время в моменты измерений), уровнях давления, на которых проводились измерения концентраций ОН, NO₂ и O₃, и величинах ожидаемых ошибок (дисперсиях) этих измерений. Рассматривался диапазон давлений 1–0,046 гПа (соответствует примерно 50–70 км), где данные MLS/Aura пригодны для научных приложений (см. следующий раздел). Из результатов расчета модели брались вертикальные распределения температуры, NO₂ и O₃ и интерполировались на траекторию спутника. Затем по ним вычислялись локальные профили концентрации ОН с помощью алгебраической связи (3.1.1), в которой использовались те же коэффициенты реакций (прежде всего, существенно зависящий от локального времени и высоты коэффициент фотодиссоциации озона), что и в последующем алгоритме восстановления. Наконец, к полученным модельным распределениям концентраций был добавлен гауссов шум с характеристиками, отвечающими данным MLS/Aura. Симулированные данные обрабатывались по схеме, представленной в разделе 3.1: для каждого набора симулированных данных на определенном уровне давления строилась соответствующая апостериорная плотность, производилось ее сэмпирование и по полученному ансамблю находились среднее и дисперсия каждой восстанавливаемой характеристики. Далее, производилось усреднение полученных и исходных данных по зональной координате и времени (за месяц) по большим ансамблям данных, что позволяет эффективно (более, чем на порядок) понизить величину случайного отклонения относительно средних значений (более подробно см. [118, 136]).

На рис. 3.1, 3.2, 3.3, 3.4 представлены результаты обработки модельных (идеальных) данных с использованием апостериорных плотностей вероятности (3.1.7), (3.2.2), (3.2.4) и (3.2.17) соответственно. Они демонстрируют, как усредненные (по долготе и времени) восстановленные распределения ОН, NO₂ и O₃ отличаются от исходных данных. Можно видеть, во-первых, что плотность вероятности (3.2.2) является наименее хорошей с точки зрения ее использования при статистической оценке качества данных реальных измерений, она приводит к значительным (вплоть до 100%) систематическим смещениям всех трех восстановленных компонент. В случае функций (3.1.7) и (3.2.4) ошибки в восстановленных распределениях концентраций ОН и NO₂ оказываются несущественными, но возникают заметные (до 50–60 % и выше) систематические ошибки восстановления концентрации O₃ на больших высотах. Наконец, лучшей

является апостериорная плотность вероятности (3.2.17), в частности, систематические отклонения в распределении концентрации O_3 на больших высотах, возникающие в результате ее применения, не превышают 20–30%.

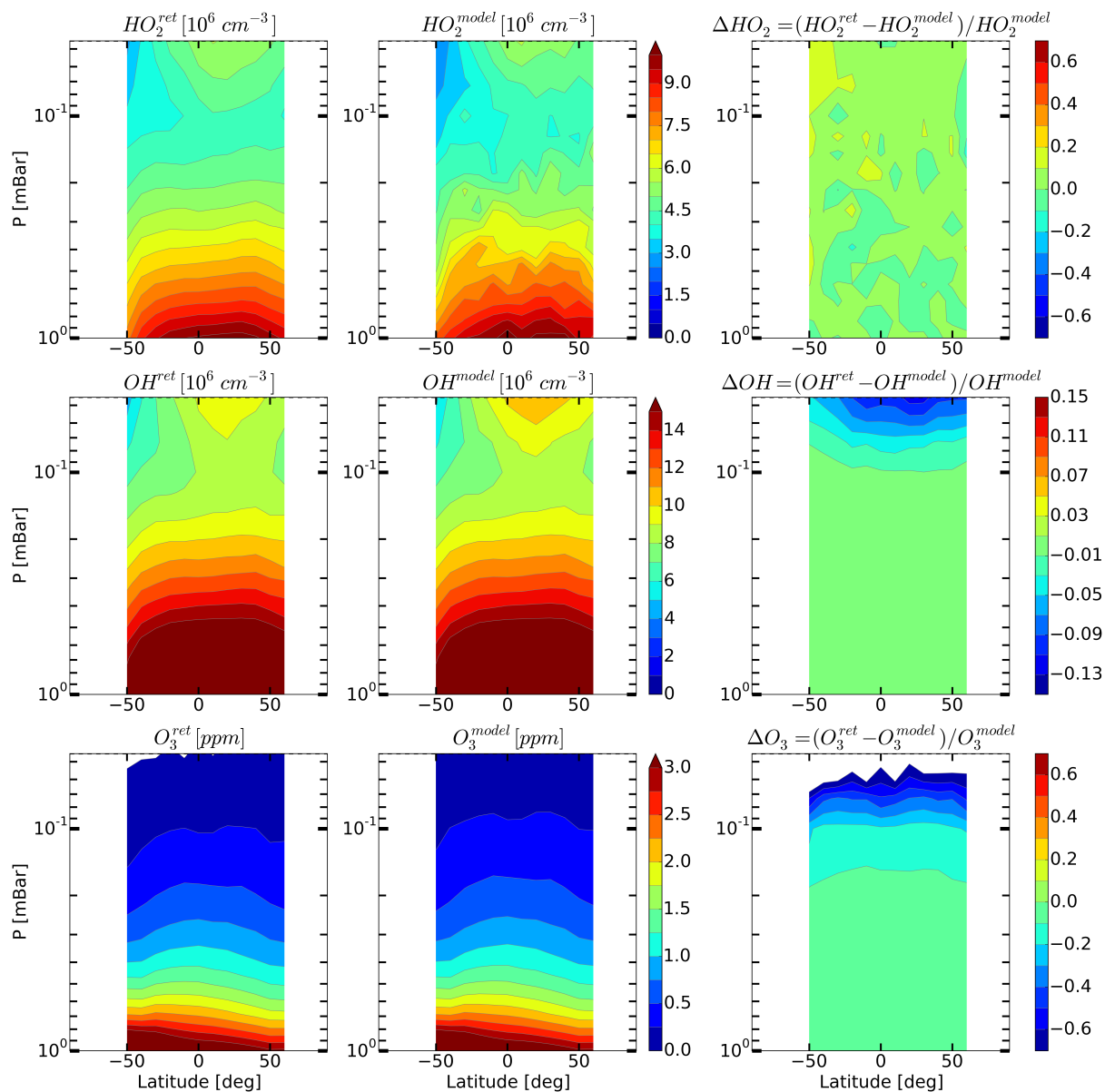


Рис. 3.1: Усреднённые по пространству (по долготе) и времени (за июль 2005 года) дневные распределения концентраций OH , HO_2 , O_3 : результаты восстановления (левый столбец), модельные данные (средний столбец) и их относительная разница (правый столбец). Выбор априорной плотности вероятности (3.1.5) ($\Psi_{OH}(\vec{u})$), что соответствует апостериорной плотности вероятности (3.1.7).

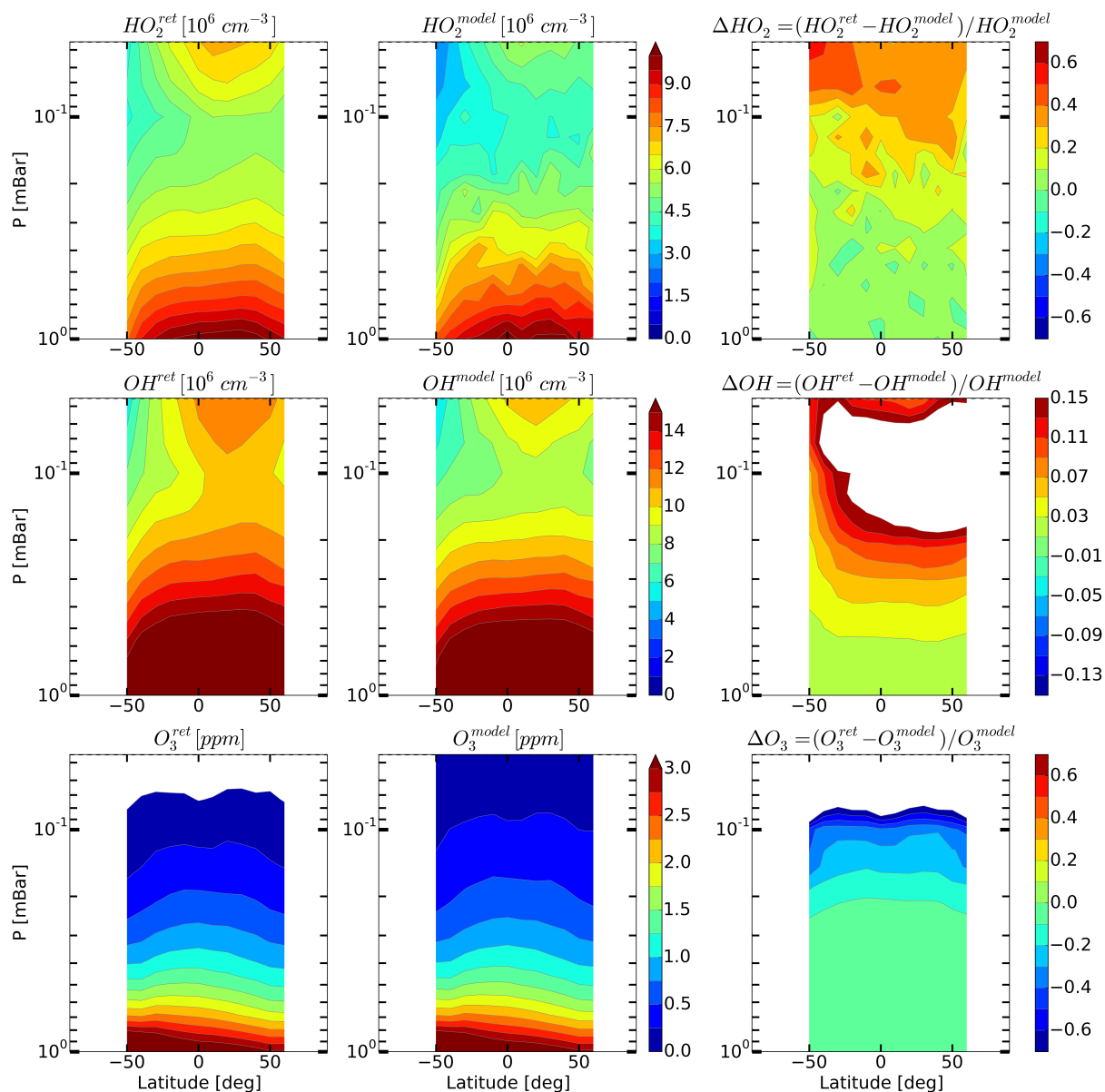


Рис. 3.2: Усреднённые по пространству (по долготе) и времени (за июль 2005 года) дневные распределения концентраций OH , HO_2 , O_3 : результаты восстановления (левый столбец), модельные данные (средний столбец) и их относительная разница (правый столбец). Выбор априорной плотности вероятности (3.2.1) ($\Phi_{\text{O}_3}(\vec{u})$), что соответствует апостериорной плотности вероятности (3.2.2).

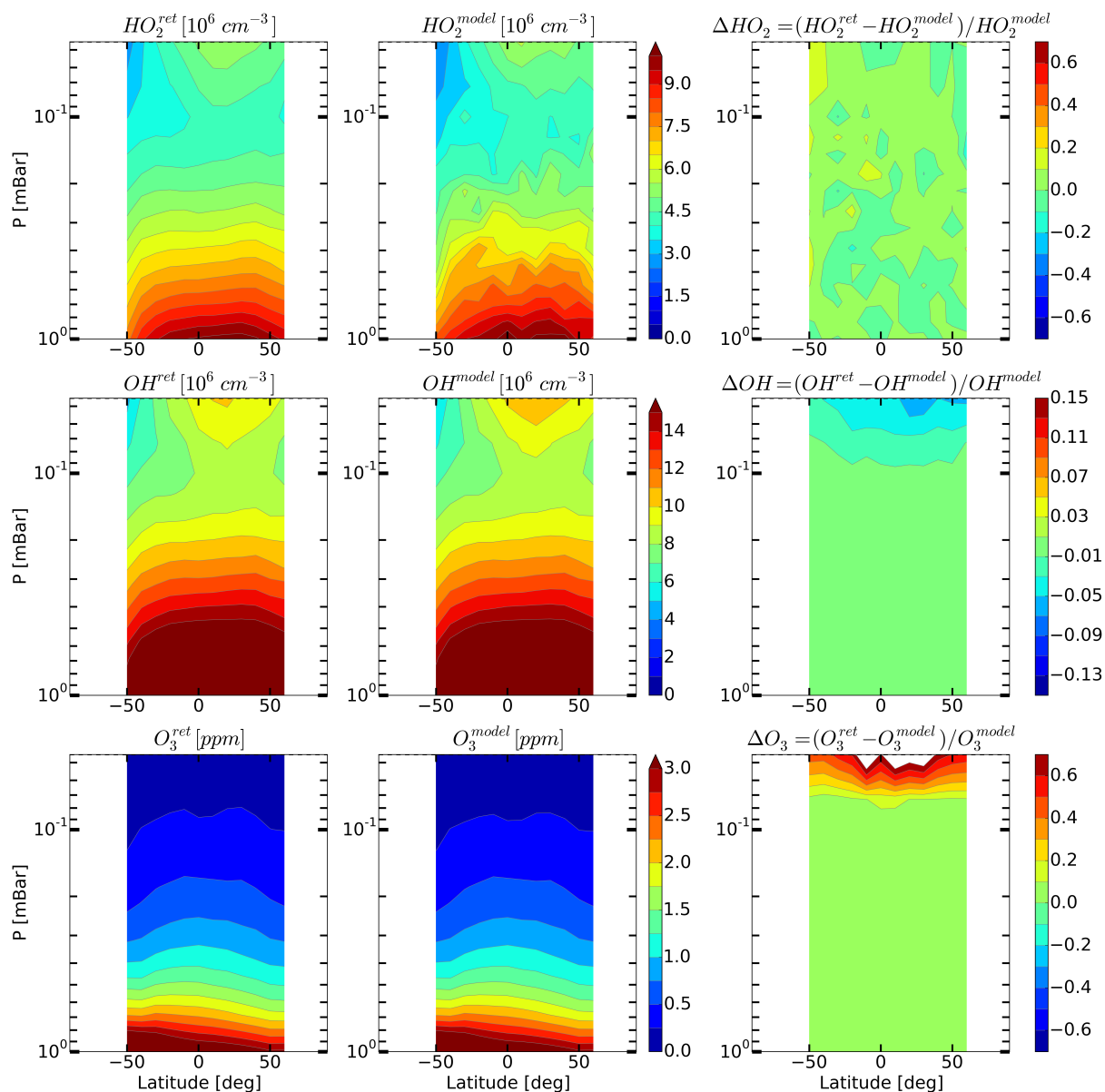


Рис. 3.3: Усреднённые по пространству (по долготе) и времени (за июль 2005 года) дневные распределения концентраций OH , HO_2 , O_3 : результаты восстановления (левый столбец), модельные данные (средний столбец) и их относительная разница (правый столбец). Выбор априорной плотности вероятности (3.2.3) ($\Phi_{\text{HO}_2}(\vec{u})$), что соответствует апостериорной плотности вероятности (3.2.4).

3.4 Результаты применения различных вариантов апостериорной функции к обработке данных измерений MLS/Aura

В данном разделе при обработке данных прибора MLS на спутнике Aura мы следуем алгоритму из работы [137]. Использовались данные температуры, OH , HO_2 и

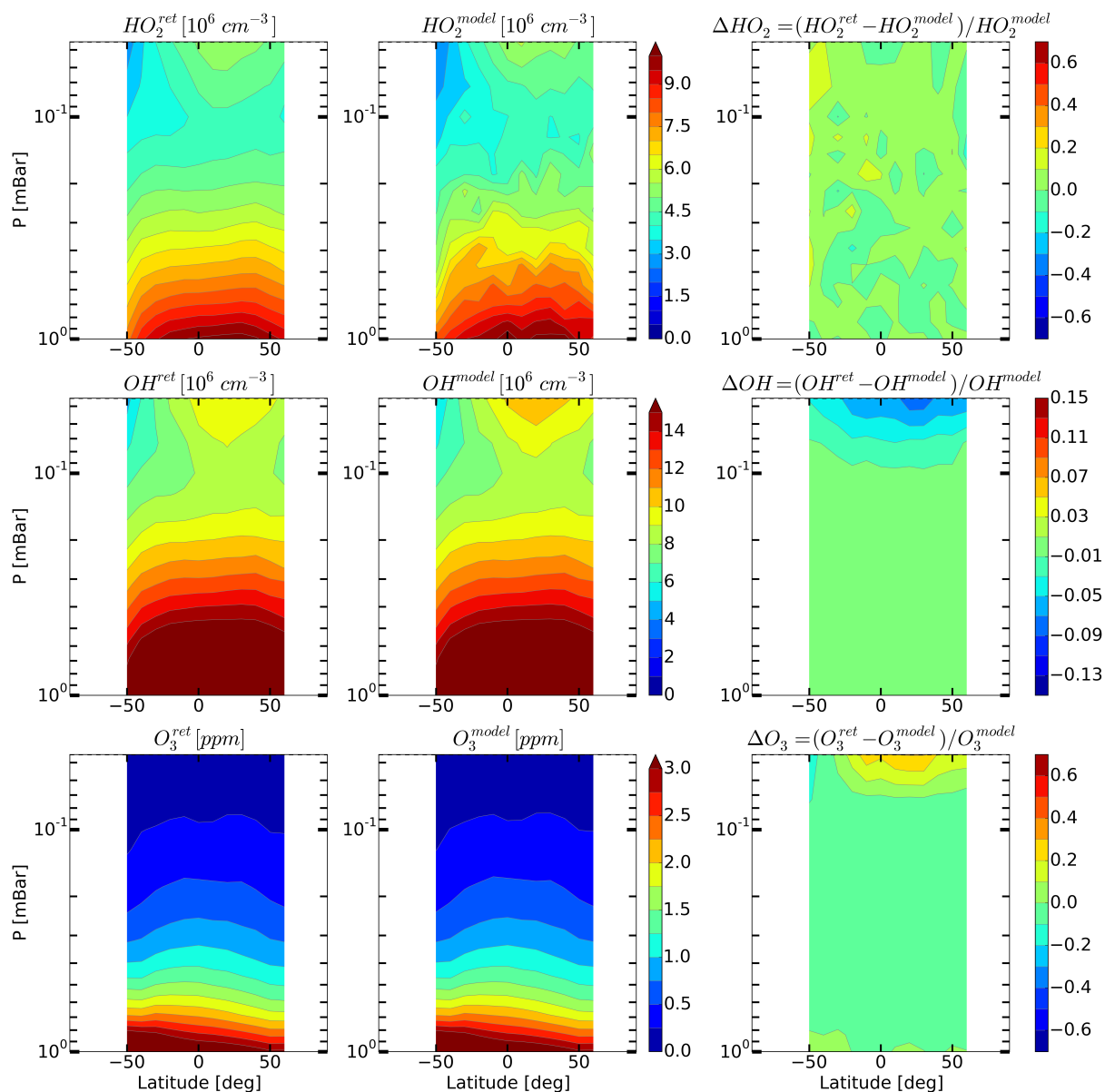


Рис. 3.4: Усреднённые по пространству (по долготе) и времени (за июль 2005 года) дневные распределения концентраций OH, HO₂, O₃: результаты восстановления (левый столбец), модельные данные (средний столбец) и их относительная разница (правый столбец). Выбор априорной плотности вероятности «одеяло» (3.2.19) ($\Psi_{\text{OH}}^{\text{patch}}(\vec{u})$), что соответствует апостериорной плотности вероятности (3.2.17).

O3 версии 4.2 [138], доступные через портал [139]. Каждая из измеряемых химических компонент задана на сетке давлений, являющейся подмножеством уровней давления, на которых задана температура. Кроме того, каждая компонента имеет свой диапазон давлений, в котором ее данные считаются применимыми (корректными) для научного использования согласно [130–132, 138]: OH – в диапазоне 32–0,0032 мБар; HO₂ –

22–0,046 мБар, O_3 – 261–0,02 мБар. Поэтому был взят диапазон, присутствующий во всех данных: 1–0,046 мБар, что соответствует примерно 50–70 км. Нижняя граница 1 мБар обусловлена тем, что точность выполнения (3.1.1) сильно падает ниже 50 км (см. раздел 2.8). Были выбраны дневные данные, отвечающие зенитному углу Солнца менее 80° . К данным были применены все рекомендованные [138] фильтры (флаги сходимости, «статуса», «качества» и т.д.). В частности, согласно [140], концентрация HO_2 определялась как разность между дневными и ночными измерениями MLS: из каждого дневного профиля был вычтен усредненный ночной профиль. Этот профиль определялся путем усреднения всех ночных профилей, лежащих в широтном диапазоне $\pm 5^\circ$ в окрестности широты рассматриваемого дневного профиля и соответствующих тем же суткам. Такая операция позволяет нивелировать систематические ошибки измерения HO_2 , однако она сужает широтный диапазон, доступный для рассмотрения, поскольку необходимо наличие как дневных, так и ночных измерений.

Данные обрабатывались по схеме, представленной в разделе 3.1 и уже применявшейся при обработке симулированных данных: для каждого набора данных измерений на определенном уровне давления строилась соответствующая апостериорная плотность, отвечающая выражениям (3.1.7), (3.2.2), (3.2.4) и (3.2.17), производилось ее сэмлирование и по полученному ансамблю находились среднее и дисперсия каждой восстанавливаемой характеристики. Далее, широтный диапазон измерений MLS был разбит на 17 ячеек по 10° каждая. В месяц в одну ячейку попадает около 3000 измерений. В результате случайное отклонение, связанное с шумом, примерно в 55 раз меньше, чем при однократном измерении. На рис. 3.5, 3.6, 3.7, 3.8 представлены результаты обработки реальных спутниковых данных измерений MLS/Aura за июль 2005 г. с использованием апостериорных плотностей вероятности (3.1.7), (3.2.2), (3.2.4) и (3.2.17) соответственно. Напомним, что соответствующие им результаты симуляции представлены на рис. 3.1, 3.2 и 3.4. Можно видеть, во-первых, что применение плотности вероятности (3.2.2) приводит к тем же систематическим отклонениям восстановленных распределений от исходных, что и в случае симуляции (см. рис. 3.2 и 3.6), которые скрывают действительные ошибки измеренных данных. Более того, в восстановленных распределениях концентрации OH возникают нереалистичные локальные максимумы. Это означает, что использование такого предельного перехода к 2-х мерной поверхности в пространстве возможных значений OH , HO_2 и O_3 приводит к абсолютно неправильным выводам о качестве данных измерений MLS/Aura. Во-вторых, сравнение рис. 3.1 и 3.5, где применялась плотность вероятности (3.1.7), показывает, что подход, использованный в работе [118], в целом неплох и позволяет увидеть проблему в данных измерений HO_2 (занижение максимума), однако приводит к неконтролируемым (до 100%) отклонениям в восстановленных распределениях озона

выше 0,1 мбар, что вызвано влиянием априорных ограничений. В третьих, сравнение рис. 3.4 и 3.8, где применялась плотность вероятности (3.2.17), показывает, что выбор предельного перехода типа «одеяло» приводит к наименьшим систематическим ошибкам метода и полностью подтверждает выводы работы [118], что данные измерений концентрации NO_2 спутником MLS/Aura содержат существенные систематические ошибки.

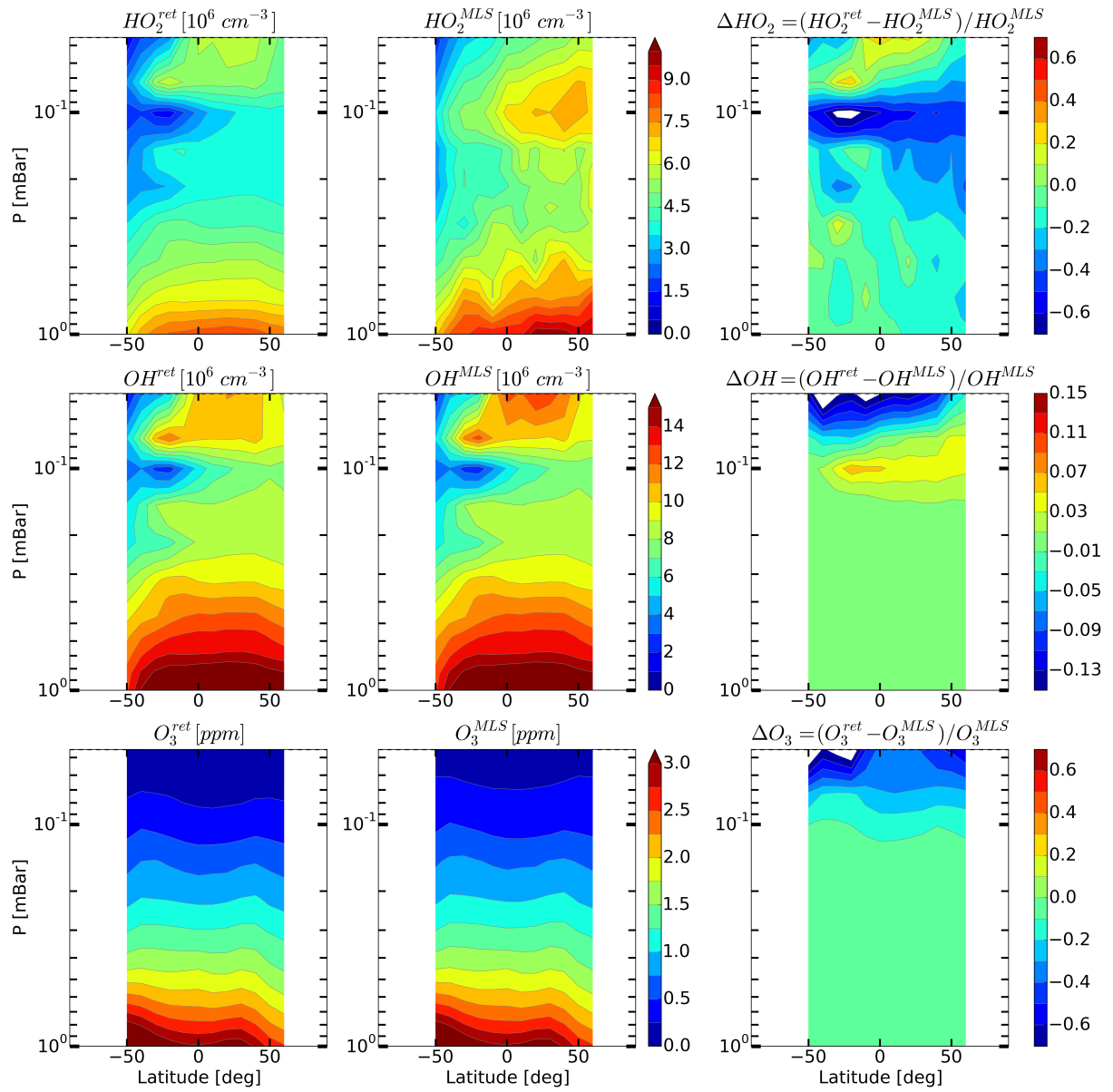


Рис. 3.5: Усреднённые по пространству (по долготе) и времени (за июль 2005 года) дневные распределения концентраций OH, HO₂, O₃: результаты восстановления (левый столбец), измерения MLS/Aura (средний столбец) и их относительная разница (правый столбец). Выбор априорной плотности вероятности (3.1.5) ($\Psi_{OH}(\vec{u})$), что соответствует апостериорной плотности вероятности (3.1.7).

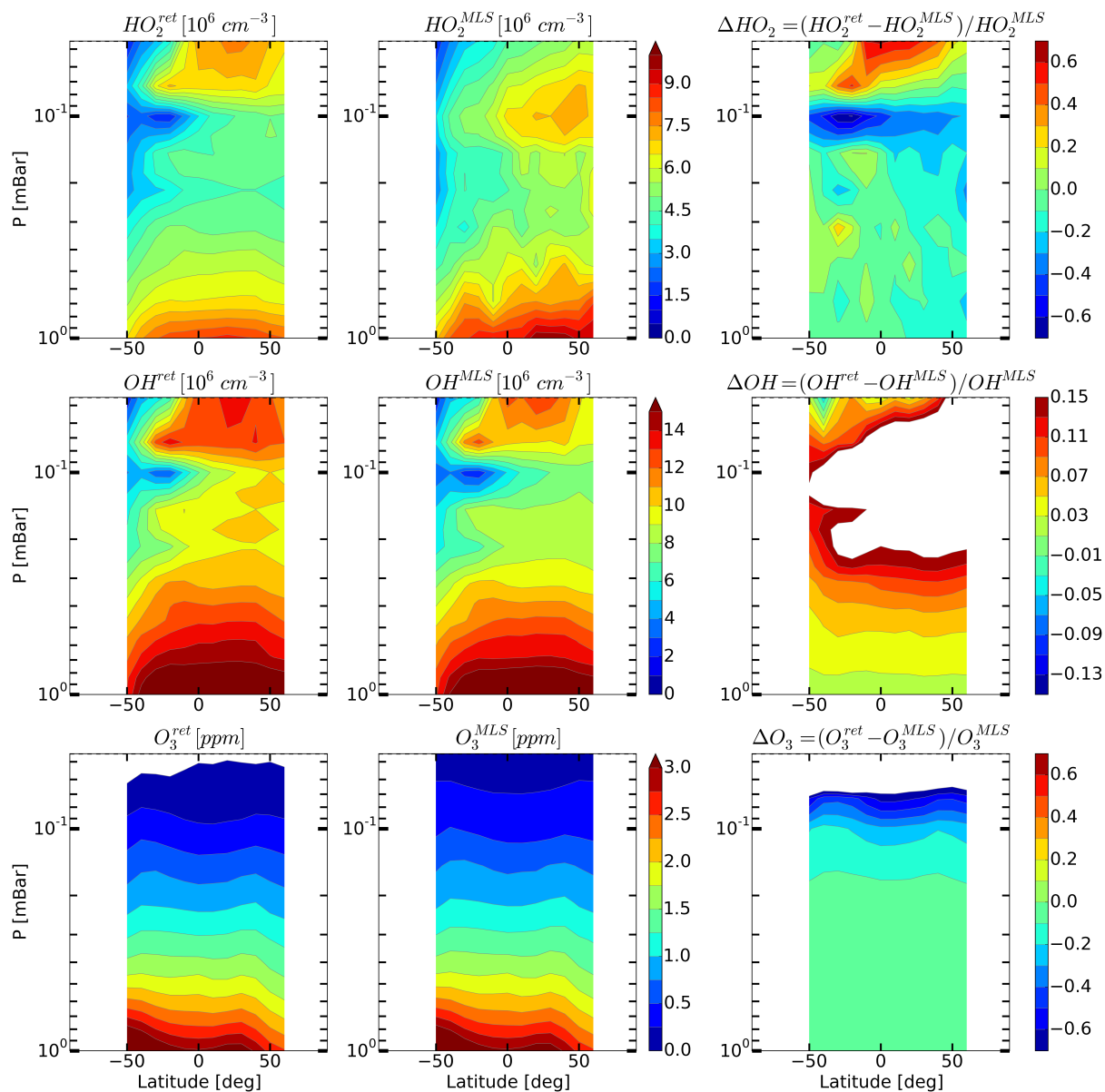


Рис. 3.6: Усреднённые по пространству (по долготе) и времени (за июль 2005 года) дневные распределения концентраций OH , HO_2 , O_3 : результаты восстановления (левый столбец), измерения MLS/Aura (средний столбец) и их относительная разница (правый столбец). Выбор априорной плотности вероятности (3.2.1) ($\Phi_{\text{O}_3}(\vec{u})$), что соответствует апостериорной плотности вероятности (3.2.2).

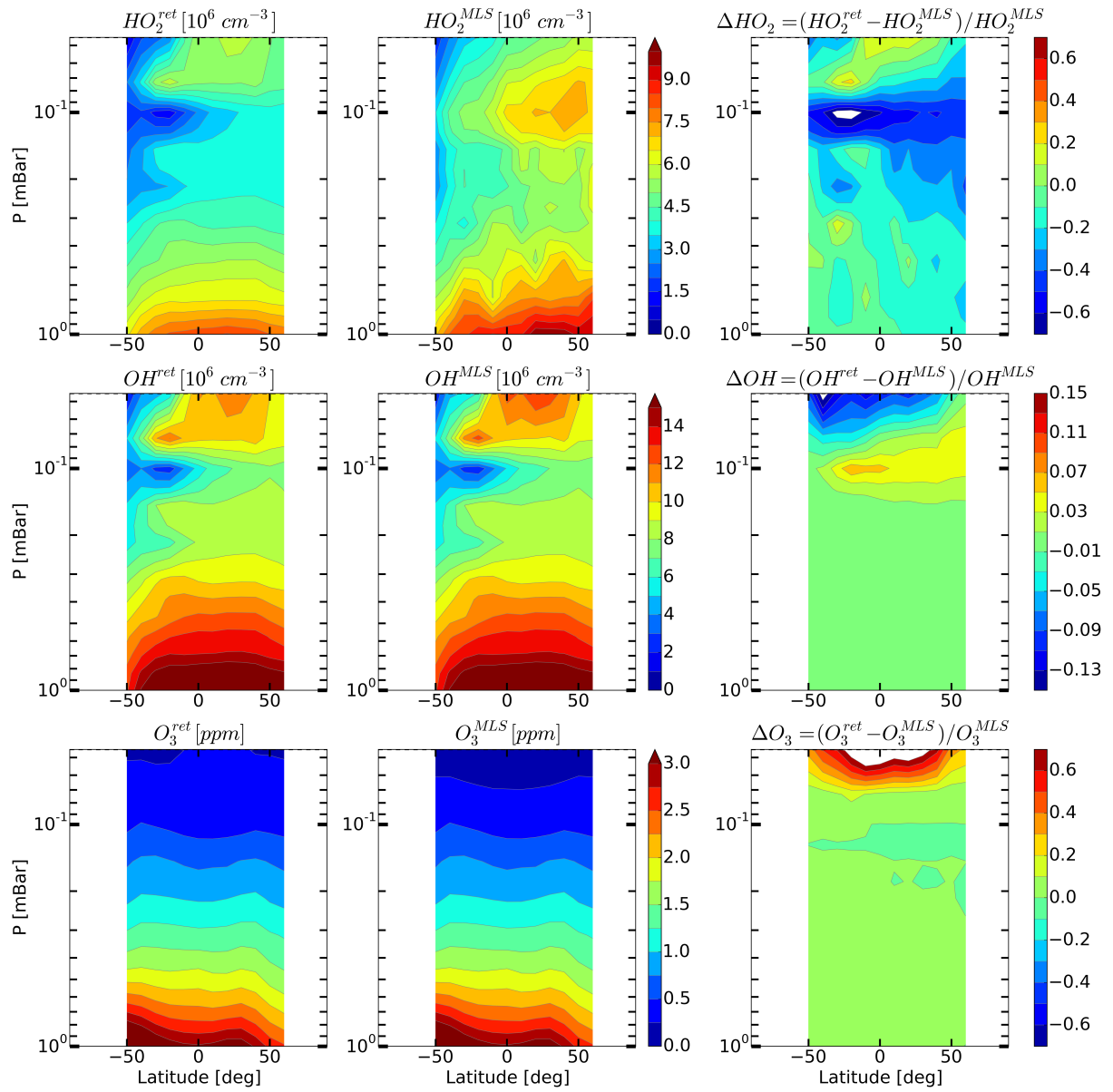


Рис. 3.7: Усреднённые по пространству (по долготе) и времени (за июль 2005 года) дневные распределения концентраций OH , HO_2 , O_3 : результаты восстановления (левый столбец), измерения MLS/Aura (средний столбец) и их относительная разница (правый столбец). Выбор априорной плотности вероятности (3.2.3) ($\Phi_{\text{HO}_2}(\vec{u})$), что соответствует апостериорной плотности вероятности (3.2.4).

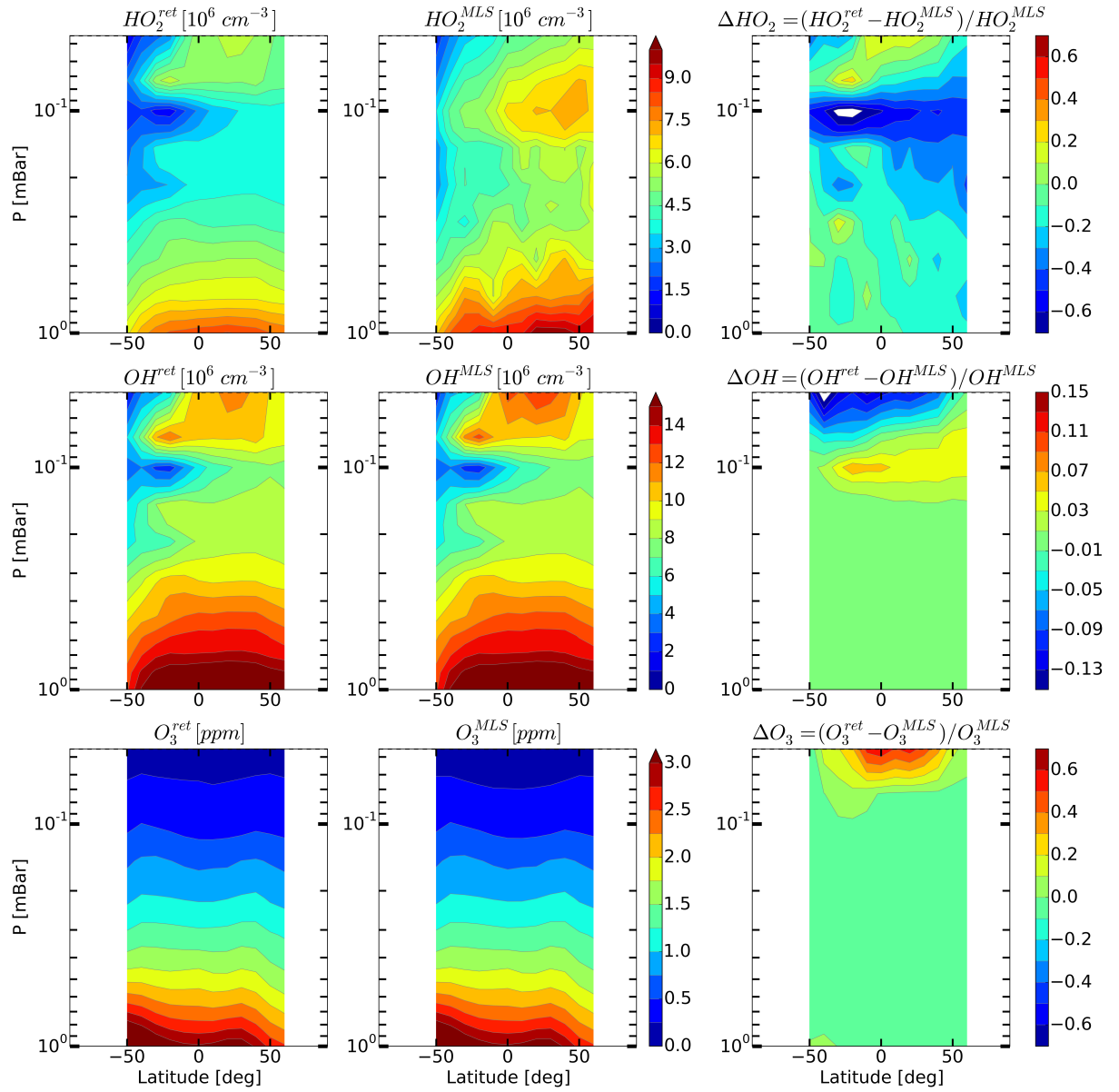


Рис. 3.8: Усреднённые по пространству (по долготе) и времени (за июль 2005 года) дневные распределения концентраций OH , HO_2 , O_3 : результаты восстановления (левый столбец), измерения MLS/Aura (средний столбец) и их относительная разница (правый столбец). Выбор априорной плотности вероятности «одеяло» (3.2.19) ($\Psi_{\text{OH}}^{\text{patch}}(\vec{u})$), что соответствует апостериорной плотности вероятности (3.2.17).

3.5 Выводы главы

На основании результатов, описанных в главе 3, можно сделать следующие выводы.

В процедуре статистической оценки качества одновременных измерений OH , NO_2 и O_3 есть неизбежная систематическая ошибка, связанная с использованием априорных распределений. Поэтому для применения процедуры необходимы оценки систематической ошибки на модельных данных.

В построении апостериорной плотности вероятности (в процедуре статистической оценки качества) есть неоднозначность. Она связана с различными способами введения условной плотности вероятности на множестве меры нуль. Рассмотренные способы соответствуют различным предельным переходам от объемной 3-мерной фигуры к 2-мерной поверхности. От выбора такого способа в построении апостериорной плотности вероятности зависят систематические ошибки метода. В рассмотренной задаче выбор, отвечающий предельному переходу типа «одеяло», приводит к наименьшим систематическим ошибкам метода.

Проведенные оценки систематических ошибок метода, использованного в [118], оказались значительно меньше найденных в работе отклонений, что подтверждает ее выводы, о наличии существенных систематических ошибок в измерениях концентрации NO_2 спутником MLS/Aura.

Заключение

Полученные в диссертационной работе основные научные результаты заключаются в следующем.

1. На основании многолетних одновременных микроволновых и радиозондовых наблюдений над Нижним Новгородом, проведен анализ соответствия между наблюдаемыми микроволновыми спектрами яркостной температуры в диапазоне 20–60 ГГц и результатами расчета этих спектров с помощью ряда современных моделей поглощения микроволнового излучения в атмосфере. В случае зондирования в зенит обнаружено, что: (1) все используемые варианты модели MPM (Microwave Propagation Model) дают существенное (до 2 К) систематическое смещение спектров яркостной температуры в диапазоне 51–54 ГГц; (2) модель поглощения атмосферного воздуха, построенная на основе формализма ECS (Energy Corrected Sudden), наилучшим образом соответствует натурным наблюдениям в этом диапазоне: максимальное смещение между измеренными и рассчитанными спектрами яркостных температур составляет не более 0,6 К.
2. Проведен анализ прогноза грозовых событий над Нижним Новгородом в 2014–2018 гг. по 15 используемых в настоящее время прогностическим индексам конвективной неустойчивости атмосферы, определенным по данным пассивных микроволновых измерений тропосферных профилей температуры и водяного пара и по данным радиозондовых измерений этих же характеристик атмосферы на метеорологической станции Росгидромета. Для каждого индекса проведена сравнительная оценка качества прогнозирования грозы с заблаговременностью 12 часов. Установлено, что для всех индексов вероятность детектирования грозы по микроволновым данным выше, чем по радиозондовым.
3. Разработан общий подход к исследованию применимости условия химического/фотохимического равновесия малых газовых составляющих атмосферы, основанный на анализе нелинейной мультимасштабной динамики трехмерных химико-транспортных моделей. Он включает в себя: (1) определение с помощью

данных моделей пространственно-временных зон, где эволюция интересующей компоненты происходит вблизи мгновенного устойчивого положения равновесия; (2) вывод приближенных аналитических соотношений, определяющих положение границы зон равновесия на основании имеющихся данных измерений и позволяющих контролировать ошибки применения условия равновесия для восстановления неизмеряемых атмосферных характеристик; (3) проверку соответствия найденных приближенных соотношений границам пространственно-временных зон равновесия с помощью трехмерного химико-транспортного моделирования.

4. С помощью трехмерного химико-транспортного моделирования области МНТ с использованием различных современных моделей: (1) определены пространственно-временные зоны равновесия озона в ночное время; (2) показано, что полученные условия равновесия хорошо (как качественно, так и количественно) воспроизводит нижнюю границу зоны равновесия, положение которой варьируется в зависимости от времени года и широты, и которая, в свою очередь, коррелирует с положением максимума объемной скорости эмиссии возбужденного гидроксила, измеряемой современными спутниковыми приборами; (3) продемонстрировано, что в дневное время условия фотохимического равновесия озона и совместного равновесия OH , HO_2 и O_3 выполняются с точностью не хуже, чем 3–4% во всей мезосфере – нижней термосфере.
5. С помощью трехмерного химико-транспортного моделирования и обработки данных многолетних спутниковых измерений SABER/TIMED проведен анализ качества восстановления дневных распределений O , H , OH , HO_2 и скорости химического нагрева на высотах МНТ с помощью используемого в настоящее время приближенного условия фотохимического равновесия дневного озона, учитывающего химический сток этой компоненты только за счет фотодиссоциации. Показано, что (1) данное приближенное условие обеспечивает восстановление высотного распределения концентрации H с точностью не хуже 10%; (2) приводит к существенному (до ~50–70%) систематическому занижению среднемесячных и среднегодовых концентраций O на высотах 75–90 км; (3) завышает (до ~50–85%) значения концентраций OH и HO_2 и занижает (до ~35–40%) скорость химического нагрева МНТ; (4) учет дополнительного стока озона за счет реакции $\text{H} + \text{O}_3 \rightarrow \text{O}_2 + \text{OH}$ обеспечивает корректное восстановление как распределений концентраций всех перечисленных малых газовых составляющих, так и скорости химического нагрева области МНТ.
6. Проведено усовершенствование метода статистической оценки качества одно-

временных измерений нескольких атмосферных компонент при условии их фотохимического равновесия на примере данных измерений OH , HO_2 и O_3 на высотах мезосферы. Обнаружено, что в процедуре построения совместной апостериорной плотности вероятности этих величин есть неоднозначность, связанная с множественностью возможных способов предельного перехода от трехмерного вероятностного распределения к двумерному, которая существенно влияет на статистические средние и приводит к неизбежной систематической ошибке. Тестирование на искусственно зашумленных модельных данных OH , HO_2 и O_3 , имитирующих идеальные (несмещенные) измерения, показало, что выбор предложенного в диссертации предельного перехода типа «одеяло» приводит к наименьшим систематическим ошибкам метода. Продемонстрировано, что вертикальные распределения концентрации HO_2 , полученные в предшествующих работах на основании данных спутниковых измерений MLS/Aura с помощью условия тройного равновесия, содержат систематическое смещение, значительно превышающее погрешность данного метода, что приводит, в частности, к существенной ошибке в определении положения максимума концентрации этой компоненты на высотах мезосферы.

Приложения

А Модели поглощения атмосферного воздуха МРМ1, МРМ2 и МРМ2а

Развернутое пояснение касательно используемых вариантов модели МРМ (МРМ1, МРМ2, МРМ2а) в разделе 1.2. Данное приложение не дает сколь-нибудь полного описания моделей, однако в общих чертах поясняет разницу между моделями и содержит ссылки, необходимые для более глубокого разбора вопроса.

Для того, чтобы пояснить разницу между вариантами модели, необходимо привести некоторые моменты в построении модели МРМ. В дистанционном зондировании МРМ используется как референсная (эталонная) модель. Она редко применяется непосредственно в процедурах восстановления (ввиду ее вычислительной сложности), где обычно используется оптимизированная для быстрых вычислений аппроксимация коэффициента поглощения либо и вовсе всего выражения (1.2.1). Однако с точки зрения спектроскопии в МРМ уже используется ряд существенных приближений.

Спектр излучения/поглощения молекулярного кислорода в микроволновом диапазоне формируется большим количеством спектральных линий, соответствующим так называемым «переходам тонкой структуры». Большинство этих линий наблюдаются в диапазоне 40–80 ГГц. В условиях тропосферы линии формируют полосу поглощения нерегулярной формы (по частоте) с максимумом поглощения в районе 60 ГГц. Главная особенность молекулярного поглощения в этой полосе – это сильное влияние эффекта столкновительного миксинга или смешивания (*collisional coupling*) [141]. Спектральная зависимость поглощения в этой полосе определяется матрицей W столкновительно-релаксационного оператора. Подробно соответствующая теория изложена в [142]. Размерность матрицы W равна количеству учитываемых переходов. Диагональные элементы W определяют столкновительное уширение (действительная часть) и столкновительный сдвиг центральной частоты (мнимая часть) соответствующих линий. Внедиагональные элементы характеризуют «силу» смешивания. Элементы матрицы W можно вычислить различными способами: из первых принци-

пов (*ab initio*) [143], с помощью аналитически выведенных сечений столкновения [42], специальными численными методами из результатов наблюдения реальных профилей поглощения (спектральной зависимости коэффициента поглощения). Именно последний способ используется в МРМ. Точное выражение для коэффициента поглощения [42, 144] содержит обращение матричного выражения, в котором единственным недиагональным слагаемым является PW (домножение матрицы W на скаляр P), где P – давление. При отсутствии столкновительного миксинга W диагональна и спектр поглощения представляется как сумма линий Ван Флека–Вейскопфа [145, 146]. При наличии же миксинга, когда внедиагональные элементы W отличны от нуля, результирующая зависимость может сильно отличаться от такой суммы.

Матричное обращение может быть сделано в рамках теории возмущений, что позволяет использовать удобные и легко вычисляемые аналитические выражения для коэффициента поглощения. Эти выражения используются в соответствующей некорректной обратной задаче оценки элементов W из данных лабораторного эксперимента. Если быть точным, то оцениваются так называемые «коэффициенты миксинга» – произведенные из W , которые непосредственно используются в вычислении поглощения напрямую. В МРМ1 [6] применяется метод возмущений первого порядка. Члены первого порядка описывают основную часть эффекта столкновительного миксинга в полосе вблизи 60 ГГц, что составляет примерно 18% от полного (максимального) поглощения в приземных условиях.

В [144] была использована теория возмущений второго порядка. Даже при давлении 1000 мБар вклад членов второго порядка составляет всего 1–2% от полного поглощения. В [147] были получены коэффициенты миксинга второго порядка. Это было сделано посредством модифицированного метода (решения некорректных обратных задач) Тумей-Тихонова, который ранее использовался только для нахождения коэффициентов первого порядка [148]. Следует отметить две важные особенности коэффициентов миксинга:

- Они являются самосогласованным набором. Коэффициенты обоих порядков находятся в результате решения одной задачи. То есть нельзя, например, коэффициенты миксинга, полученные в рамках первого порядка теории возмущений, использовать как решение для задачи, использующей второй порядок.
- Они сильно связаны с такими основными параметрами линий, как коэффициенты уширения и центральные частоты, которые измеряются независимо [149, 150].

Коэффициенты миксинга второго порядка включительно, а также их температурные зависимости были найдены в [41] с использованием последних и наиболее точных спектроскопических измерений.

Касательно используемых в разделе 1.2 вариантов моделей: МРМ1 это МРМ, учитывающая миксинг только первого порядка; МРМ2, полученная в [41], включает в себя коэффициенты миксинга вплоть до второго порядка; модель МРМ2а, по сути, та же модель МРМ2, в которой поглощение кислорода увеличено в 1,00433 раза. Такой коэффициент был получен на основании результатов анализа интенсивностей линий кислорода на 118 ГГц.

Б Оценка величины возможного отклонения профиля температуры в разделе 1.2

Доказательство оценки наименьшего возможного отклонения профиля температуры, который бы обеспечивал проекцию на правый сингулярный вектор, обсуждаемый в разделе 1.2.

Для начала формализуем обсуждаемое в 1.2. Разность между измерениями и симуляциями δ , вызванная ошибкой ζ (несовпадением зондового профиля с состоянием атмосферы на луче прибора) в профиле температуры, описываем в линейном приближении:

$$\delta = K\zeta, \quad (\text{Б.1})$$

где K – линеаризация модели переноса излучения, описанная формулами (1.2.5), (1.2.6), (1.2.7).

Сингулярное разложение $K = U\Sigma V^T$ позволяет рассмотреть действие матрицы K как ортогональное преобразование (грубо говоря, поворот), масштабирование с отбрасыванием части пространства (поскольку матрица прямоугольная) и еще ортогональное преобразование. Рассмотрим последовательно эти операции. Домножение на матрицу V^T является нахождением проекций на направления, задаваемые строками матрицы V^T (столбцами матрицы V), то есть переход к (ортонормированному) базису правых сингулярных векторов. После домножения на Σ мы получаем амплитуды спектральных возмущений, именно поэтому элементы матрицы были выбраны размерными (размерность К/С). Спектральные возмущения заданы в базисе левых сингулярных векторов, поэтому домножение на U переводит из базиса левых сингулярных векторов в результирующие спектральные особенности.

В разделе 1.2 установлено: чтобы воспроизвести наблюдаемые значения спектральных отклонений, ошибка температуры должна иметь проекцию $\iota = 2437,5$ °С на определенный правый сингулярный вектор (обозначим его e):

$$(\zeta, e) = \iota, \quad (\text{Б.2})$$

где скобки обозначают (эвклидово) скалярное произведение. Какие могут быть возмущения профиля температуры, которые соответствуют такой проекции? Разложим вектор ζ на параллельную и ортогональную e части и найдем квадрат его нормы:

$$\|\zeta\|^2 = \|\zeta_{\perp}\|^2 + \|\zeta_{\parallel}\|^2. \quad (\text{Б.3})$$

Очевидно, что

$$\|\zeta_{\parallel}\|^2 = \iota^2. \quad (\text{Б.4})$$

При этом (Б.4) является оценкой снизу на норму возмущения ζ . Как эта оценка сказывается на отдельных компонентах ζ_i (т.е. возмущениях на определенной высоте)?

$$\sum_{i=1}^n \zeta_i^2 = \iota^2. \quad (\text{Б.5})$$

Рассмотрим минимальный из возможных максимальных квадратов компонент вектора ζ :

$$\min_{\{\zeta_i\}} \max \zeta_i^2 : \sum_{i=1}^n \zeta_i^2 = \iota^2. \quad (\text{Б.6})$$

Минимум достигается при $\zeta_i^2 = \iota^2/n \quad \forall i$, что легко доказать от противного: если бы максимум квадрата компоненты был бы меньше этого значения, то условие (Б.5) не выполнялось бы. Именно этому и соответствует оценка (взяв корень $n=44$), приведенная в разделе 1.2.

Список публикаций по теме диссертации

- [A1] *Kulikov M. Y., Belikovich M. V., Grygalashvyly M. et al.* Daytime ozone loss term in the mesopause region // *Annales Geophysicae*. — 2017. — Vol. 35, no. 3. — Pp. 677–682. — URL: <https://angeo.copernicus.org/articles/35/677/2017/>.
- [A2] *Belikovich M. V., Kulikov M. Yu., Grygalashvyly M. et al.* Ozone chemical equilibrium in the extended mesopause under the nighttime conditions // *Advances in Space Research*. — 2018. — Vol. 61, no. 1. — Pp. 426–432. — URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0273117717307317>.
- [A3] *Kulikov M. Yu., Belikovich M. V., Grygalashvyly M. et al.* Nighttime Ozone Chemical Equilibrium in the Mesopause Region // *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*. — 2018. — Vol. 123, no. 6. — Pp. 3228–3242. — URL: <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/2017JD026717>.
- [A4] *Kulikov M. Y., Nechaev A. A., Belikovich M. V. et al.* Technical note: Evaluation of the simultaneous measurements of mesospheric OH, HO₂, and O₃ under a photochemical equilibrium assumption – a statistical approach // *Atmospheric Chemistry and Physics*. — 2018. — Vol. 18, no. 10. — Pp. 7453–7471. — URL: <https://acp.copernicus.org/articles/18/7453/2018/>.
- [A5] *Беликович М. В., Куликов М. Ю., Нечаев А. А., Фейгин А. М.* Оценка качества измерений концентраций малых примесей атмосферы: априорные статистические ограничения, основанные на фотохимическом моделировании // *Известия высших учебных заведений. Радиофизика*. — 2018. — Vol. 61, no. 8-9. — Pp. 645–661.
- [A6] *Kulikov M. Yu., Nechaev A. A., Belikovich M. V. et al.* Boundary of Nighttime Ozone Chemical Equilibrium in the Mesopause Region From SABER Data: Implications for Derivation of Atomic Oxygen and Atomic Hydrogen // *Geophysical Research Letters*. — 2019. — Vol. 46, no. 2. — Pp. 997–1004. — URL: <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2018GL080364>.

- [A7] *Kulikov M. Yu., Belikovich M. V., Skalyga N. K. et al.* Skills of Thunderstorm Prediction by Convective Indices over a Metropolitan Area: Comparison of Microwave and Radiosonde Data // *Remote Sensing*. — 2020. — Vol. 12, no. 4. — URL: <https://www.mdpi.com/2072-4292/12/4/604>.
- [A8] *Belikovich M. V., Kulikov M. Yu., Makarov D. S. et al.* Long-Term Observations of Microwave Brightness Temperatures over a Metropolitan Area: Comparison of Radiometric Data and Spectra Simulated with the Use of Radiosonde Measurements // *Remote Sensing*. — 2021. — Vol. 13, no. 11. — URL: <https://www.mdpi.com/2072-4292/13/11/2061>.
- [A9] *Kulikov M. Yu., Belikovich M. V., Feigin A. M.* The 2-Day Photochemical Oscillations in the Mesopause Region: The First Experimental Evidence? // *Geophysical Research Letters*. — 2021. — Vol. 48, no. 9. — P. e2021GL092795. — e2021GL092795 2021GL092795. URL: <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2021GL092795>.
- [A10] *Kulikov Mikhail Yu., Belikovich Mikhail V., Grygalashvyly Mykhaylo et al.* Retrieving daytime distributions of O, H, OH, HO₂, and chemical heating rate in the mesopause region from satellite observations of ozone and OH* volume emission: The evaluation of the importance of the reaction $H + O_3 \rightarrow O_2 + OH$ in the ozone balance // *Advances in Space Research*. — 2022. — Vol. 69, no. 9. — Pp. 3362–3373. — URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0273117722001004>.
- [A11] *Kulikov Mikhail Yu., Belikovich Mikhail V., Grygalashvyly Mykhaylo et al.* The revised method for retrieving daytime distributions of atomic oxygen and odd-hydrogens in the mesopause region from satellite observations // *Earth, Planets and Space*. — 2022. — Mar. — Vol. 74, no. 1. — P. 44. — URL: <https://doi.org/10.1186/s40623-022-01603-8>.

Литература

- [1] *Н.П. Шакина, А.Р. Иванова.* Прогнозирование метеорологических условий для авиации : научно-методическое пособие. — Москва: Триада лтд, 2016.
- [2] *National Research Council.* Observing Weather and Climate from the Ground Up: A Nationwide Network of Networks. — Washington, DC: The National Academies Press, 2009. — URL: <https://www.nap.edu/catalog/12540/observing-weather-and-climate-from-the-ground-up-a-nationwide>.
- [3] *National Research Council.* When Weather Matters: Science and Services to Meet Critical Societal Needs. — Washington, DC: The National Academies Press, 2010. — URL: <https://www.nap.edu/catalog/12888/when-weather-matters-science-and-services-to-meet-critical-societal>.
- [4] *Liebe Hans J.* MPM—An atmospheric millimeter-wave propagation model // *International Journal of Infrared and Millimeter Waves*. — 1989. — Vol. 10, no. 6. — Pp. 631–650. — URL: <https://doi.org/10.1007/BF01009565>.
- [5] *Rosenkranz Philip.* Absorption of microwaves by atmospheric gases // *Atmospheric Remote Sensing by Microwave Radiometry* / Ed. by Jin Au Kong. — John Wiley and Sons, 1993.
- [6] *Rosenkranz P.W.* Line-by-Line Microwave Radiative Transfer (Non-Scattering). — Remote Sens. Code Library http://cetemps.aquila.infn.it/mwrnet/lblmrt_ns.html. — (Accessed on 8 April 2021).
- [7] *Rosenkranz P.W.* Line-by-Line Microwave Radiative Transfer (Non-Scattering). — Remote Sens. Code Library <https://rscl-grss.org/coderecord.php?id=483>.
- [8] *Thomas Dave.* Spread the Message – The ‘Moving Weather’ System // *Meteorological Technology International*. — 2010. — Pp. 36–39.

- [9] *Barrere Charles A.Jr., Eilts M., Johnson J. et al.* An Aviation Weather Decision Support System (AWDSS) for the Dubai International Airport // 13th Conference on Aviation, Range and Aerospace Meteorology. — 2008. — P. 4.7.
- [10] *Shaw Brent L., Barrere C. A., Carpenter R. L., Spencer P. L.* Implementation of the WRF model for the Dubai International Airport Aviation Weather Decision Support System (AWDSS) // 13th Conference on Aviation, Range and Aerospace Meteorology. — 2008. — P. 5.2.
- [11] *Madhulatha A., Rajeevan M., Venkat Ratnam M. et al.* Nowcasting severe convective activity over southeast India using ground-based microwave radiometer observations // *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*. — 2013. — Vol. 118, no. 1. — Pp. 1–13. — URL: <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2012JD018174>.
- [12] *Ware R., Cimini D., Campos E. et al.* Thermodynamic and liquid profiling during the 2010 Winter Olympics // *Atmospheric Research*. — 2013. — Vol. 132-133. — Pp. 278–290. — URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169809513001737>.
- [13] *Cimini D., Nelson M., Güldner J., Ware R.* Forecast indices from a ground-based microwave radiometer for operational meteorology // *Atmospheric Measurement Techniques*. — 2015. — Vol. 8, no. 1. — Pp. 315–333. — URL: <https://amt.copernicus.org/articles/8/315/2015/>.
- [14] *Зайцев Н.А., Тимофеев Ю.М., Косцов В.С.* Сравнение радиозондовых и наземных дистанционных микроволновых измерений профилей температуры в тропосфере // *Оптика атмосферы и океана*. — 2014. — Vol. 27, no. 5. — Pp. 392–398.
- [15] *Andersson T., Andersson M., Jacobsson C., Nilsson S.* Thermodynamic indices for forecasting thunderstorms in southern Sweden // *Meteorological Magazine*. — 1989. — Vol. 118, no. 1404. — Pp. 141–146.
- [16] *Haklander Alwin J., Van Delden Aarnout.* Thunderstorm predictors and their forecast skill for the Netherlands // *Atmospheric Research*. — 2003. — Vol. 67-68. — Pp. 273–299. — European Conference on Severe Storms 2002. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169809503000565>.
- [17] *Manzato Agostino.* A climatology of instability indices derived from Friuli Venezia Giulia soundings, using three different methods // *Atmospheric Research*. — 2003. —

- Vol. 67-68. — Pp. 417–454. — European Conference on Severe Storms 2002. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169809503000589>.
- [18] *Manzato Agostino*. The Use of Sounding-Derived Indices for a Neural Network Short-Term Thunderstorm Forecast // *Weather and Forecasting*. — 2005. — Vol. 20, no. 6. — Pp. 896 – 917. — URL: https://journals.ametsoc.org/view/journals/wefo/20/6/waf898_1.xml.
- [19] *Kunz M.* The skill of convective parameters and indices to predict isolated and severe thunderstorms // *Natural Hazards and Earth System Sciences*. — 2007. — Vol. 7, no. 2. — Pp. 327–342. — URL: <https://nhess.copernicus.org/articles/7/327/2007/>.
- [20] *Holtzlag M.C., Steeneveld G.J., Holtzlag A.A.M.* Fog forecasting: “old fashioned” semi-empirical methods from radio sounding observations versus “modern” numerical models. // Proceedings of the 5th International Conference on Fog, Fog Collection and Dew (FOGDEW2010). — NordiCHI. — Münster, Germany: ACM, 2010. — Pp. 207–216. — URL: meetingorganizer.copernicus.org/FOGDEW2010/FOGDEW2010-69.pdf.
- [21] *Roble R. G., Dickinson R. E.* How will changes in carbon dioxide and methane modify the mean structure of the mesosphere and thermosphere? // *Geophysical Research Letters*. — 1989. — Vol. 16, no. 12. — Pp. 1441–1444. — URL: <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/GL016i012p01441>.
- [22] *Golitsyn G. S., Semenov A. I., Shefov N. N. et al.* Long-term temperature trends in the middle and upper atmosphere // *Geophysical Research Letters*. — 1996. — Vol. 23, no. 14. — Pp. 1741–1744. — URL: <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/96GL01592>.
- [23] *NDMC*. NDMC Mission Statement. — <https://ndmc.dlr.de/>. — 2012. — [Online; accessed 10-December-2021].
- [24] *Википедия*. Радиоприёмник прямого усиления — Википедия, свободная энциклопедия. — <https://ru.wikipedia.org/?curid=107755&oldid=111737496>. — 2021. — [Онлайн; загружено 12 августа 2021].
- [25] *Physics RPG-Radiometer*. Technical Instrument Manual. — RPG-Radiometer Physics website http://www.radiometer-physics.de/downloadftp/pub/PDF/Radiometers/General_documents/Manuals/2015/RPG_MWR_STD_Technical_Manual_2015.pdf. — (Accessed on 10 June 2021).

- [26] *Rose Thomas, Crewell Susanne, Löhnert Ulrich, Simmer Clemens.* A network suitable microwave radiometer for operational monitoring of the cloudy atmosphere // *Atmospheric Research*. — 2005. — Vol. 75, no. 3. — Pp. 183–200. — CLIWANET: Observation and Modelling of Liquid Water Clouds. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169809505000189>.
- [27] *Löhnert U., Maier O.* Operational profiling of temperature using ground-based microwave radiometry at Payerne: prospects and challenges // *Atmospheric Measurement Techniques*. — 2012. — Vol. 5, no. 5. — Pp. 1121–1134. — URL: <https://amt.copernicus.org/articles/5/1121/2012/>.
- [28] *Navas-Guzmán F., Kämpfer N., Haefele A.* Validation of brightness and physical temperature from two scanning microwave radiometers in the 60 GHz O₂ band using radiosonde measurements // *Atmospheric Measurement Techniques*. — 2016. — Vol. 9, no. 9. — Pp. 4587–4600. — URL: <https://amt.copernicus.org/articles/9/4587/2016/>.
- [29] *MARTINET PAULINE, DABAS ALAIN, DONIER JEAN-MARIE et al.* 1D-Var temperature retrievals from microwave radiometer and convective scale model // *Tellus A: Dynamic Meteorology and Oceanography*. — 2015. — Vol. 67, no. 1. — P. 27925. — URL: <https://doi.org/10.3402/tellusa.v67.27925>.
- [30] *Liljegren J.C., Boukabara S.-A., Cady-Pereira K., Clough S.A.* The effect of the half-width of the 22-GHz water vapor line on retrievals of temperature and water vapor profiles with a 12-channel microwave radiometer // *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*. — 2005. — Vol. 43, no. 5. — Pp. 1102–1108.
- [31] *Hewison Tim J., Cimini Domenico, Martin Lorenz et al.* Validating clear air absorption models using ground-based microwave radiometers and vice-versa // *Meteorologische Zeitschrift*. — 2006. — 02. — Vol. 15, no. 1. — Pp. 27–36. — URL: <http://dx.doi.org/10.1127/0941-2948/2006/0097>.
- [32] *Martinet P., Cimini D., De Angelis F. et al.* Combining ground-based microwave radiometer and the AROME convective scale model through 1DVAR retrievals in complex terrain: an Alpine valley case study // *Atmospheric Measurement Techniques*. — 2017. — Vol. 10, no. 9. — Pp. 3385–3402. — URL: <https://amt.copernicus.org/articles/10/3385/2017/>.
- [33] *De Angelis F., Cimini D., Löhnert U. et al.* Long-term observations minus background monitoring of ground-based brightness temperatures from a microwave radiometer

- network // *Atmospheric Measurement Techniques*. — 2017. — Vol. 10, no. 10. — Pp. 3947–3961. — URL: <https://amt.copernicus.org/articles/10/3947/2017/>.
- [34] *Cimini D., Rosenkranz P. W., Tretyakov M. Y. et al.* Uncertainty of atmospheric microwave absorption model: impact on ground-based radiometer simulations and retrievals // *Atmospheric Chemistry and Physics*. — 2018. — Vol. 18, no. 20. — Pp. 15231–15259. — URL: <https://acp.copernicus.org/articles/18/15231/2018/>.
- [35] *Physics RPG-Radiometer.* Instrument Operation and Software Guide. — RPG-Radiometer Physics website http://www.radiometer-physics.de/download/PDF/Radiometers/HATPRO/RPG_MWR_STD_Software_Manual%20G5.pdf. — (Accessed on 10 June 2021).
- [36] *ООО Аэроприбор.* Аэрологические малогабаритные радиозонды комплексного зондирования типа АК2. — сайт ООО Аэроприбор <http://zondr.ru/development-product/10-ak-2.html>. — (Accessed on 10 June 2021).
- [37] *University of Wyoming.* Upperair Air Data - Soundings. — University of Wyoming website <http://weather.uwyo.edu/upperair/sounding.html>. — (Accessed on 11 August 2021).
- [38] *Janssen M.* Atmospheric Remote Sensing by Microwave Radiometry. — 1993. — 01. — Vol. 36. — Pp. 1–37.
- [39] *Picone J. M., Hedin A. E., Drob D. P., Aikin A. C.* NRLMSISE-00 empirical model of the atmosphere: Statistical comparisons and scientific issues // *Journal of Geophysical Research: Space Physics*. — 2002. — Vol. 107, no. A12. — Pp. SIA 15–1–SIA 15–16. — URL: <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2002JA009430>.
- [40] *Belikovich Mikhail V., Kulikov Mikhail Yu., Makarov Dmitry S. et al.* Long-Term Observations of Microwave Brightness Temperatures over a Metropolitan Area: Comparison of Radiometric Data and Spectra Simulated with the Use of Radiosonde Measurements // *Remote Sensing*. — 2021. — Vol. 13, no. 11. — URL: <https://www.mdpi.com/2072-4292/13/11/2061>.
- [41] *Makarov Dmitriy S., Tretyakov Mikhail Yu., Rosenkranz Philip W.* Revision of the 60-GHz atmospheric oxygen absorption band models for practical use // *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*. — 2020. — Vol. 243.

— P. 106798. — URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S002240731930576X>.

- [42] *Makarov D.S., Tretyakov M.Yu., Boulet C.* Line mixing in the 60-GHz atmospheric oxygen band: Comparison of the MPM and ECS model // *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*. — 2013. — Vol. 124. — Pp. 1–10. — URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022407313000745>.
- [43] *Turner David D., Clough Shepard A., Liljegren James C. et al.* Retrieving Liquid Water Path and Precipitable Water Vapor From the Atmospheric Radiation Measurement (ARM) Microwave Radiometers // *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*. — 2007. — Vol. 45, no. 11. — Pp. 3680–3690.
- [44] *Jolliffe I T.* Principal Component Analysis. Springer Series in Statistics. — 2nd edition. — New York, NY: Springer New York, 1986. — P. 271.
- [45] *Meunier V., Löhnert U., Kollias P., Crewell S.* Biases caused by the instrument bandwidth and beam width on simulated brightness temperature measurements from scanning microwave radiometers // *Atmospheric Measurement Techniques*. — 2013. — Vol. 6, no. 5. — Pp. 1171–1187. — URL: <https://amt.copernicus.org/articles/6/1171/2013/>.
- [46] *Kuhlman C.J.* — Evaluation of Convective Wind Forecasting Methods During High Wind Events. — Master’s thesis, Naval Postgraduate School, Monterey, CA, USA,, 2006.
- [47] *Gijben Morné, Dyson Liesl L., Loots Mattheus T.* A statistical scheme to forecast the daily lightning threat over southern Africa using the Unified Model // *Atmospheric Research*. — 2017. — Vol. 194. — Pp. 78–88. — URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169809516306354>.
- [48] *Boltek Lightning detection systems.* EFM-100 Atmospheric Electric Field Monitor. — Boltek Lightning detection systems website <https://www.boltek.com/downloads/efm-100/>. — (Accessed on 11 August 2021).
- [49] *de Coning Estelle, Koenig Marianne, Olivier Jana.* The combined instability index: a new very-short range convection forecasting technique for southern Africa // *Meteorological Applications*. — 2011. — Vol. 18, no. 4. — Pp. 421–439. — URL: <https://rmets.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/met.234>.

- [50] *Grieser Jürgen*. Convection Parameters. — <http://www.juergen-grieser.de/ConvectionParameters/ConvectionParameters.pdf>. — 2012. — Accessed: 2021-08-06.
- [51] *Kulikov Mikhail Yu., Belikovich Mikhail V., Skalyga Natalya K. et al.* Skills of Thunderstorm Prediction by Convective Indices over a Metropolitan Area: Comparison of Microwave and Radiosonde Data // *Remote Sensing*. — 2020. — Vol. 12, no. 4. — URL: <https://www.mdpi.com/2072-4292/12/4/604>.
- [52] *Клименко В. В., Мареев Е. А., Шаталкина М. В. et al.* О статистических характеристиках электрических полей грозовых облаков в атмосфере // *Известия высших учебных заведений. Радиофизика*. — 2013. — Vol. 56, no. 11-12. — Pp. 864–874.
- [53] *Radiometrics*. MP-Series Profilers. — official cite <https://radiometrics.com/mp-series/>. — (Accessed on 31 July 2021).
- [54] *Rodgers Clive D.* Inverse Methods for Atmospheric Sounding. — WORLD SCIENTIFIC, 2000. — URL: <https://www.worldscientific.com/doi/abs/10.1142/3171>.
- [55] *Tarantola Albert*. Inverse problem theory. — London, England: Elsevier Science, 1987.
- [56] *Sumińska-Ebersoldt O., Lehmann R., Wegner T. et al.* ClOOCl photolysis at high solar zenith angles: analysis of the RECONCILE self-match flight // *Atmospheric Chemistry and Physics*. — 2012. — Vol. 12, no. 3. — Pp. 1353–1365. — URL: <https://acp.copernicus.org/articles/12/1353/2012/>.
- [57] *Wetzel G., Oelhaf H., Kirner O. et al.* Diurnal variations of reactive chlorine and nitrogen oxides observed by MIPAS-B inside the January 2010 Arctic vortex // *Atmospheric Chemistry and Physics*. — 2012. — Vol. 12, no. 14. — Pp. 6581–6592. — URL: <https://acp.copernicus.org/articles/12/6581/2012/>.
- [58] *Pyle J. A., Zavody A. M., Harries J. E., Moffat P. H.* Derivation of OH concentration from satellite infrared measurements of NO₂ and HNO₃ // *Nature*. — 1983. — Oct. — Vol. 305, no. 5936. — Pp. 690–692. — URL: <https://doi.org/10.1038/305690a0>.
- [59] *Pyle J. A., Zavody A. M.* The derivation of hydrogen-containing radical concentrations from satellite data sets // *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*. — 1985. — Vol. 111, no. 470. — Pp. 993–1012. — URL: <https://rmets.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/qj.49711147005>.

- [60] *Pickett H. M., Peterson D. B.* Comparison of measured stratospheric OH with prediction // *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*. — 1996. — Vol. 101, no. D11. — Pp. 16789–16796. — URL: <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/96JD01168>.
- [61] *Kondo Yutaka, Matthews W. Andrew, Amedieu Patrick, Robbins Donald E.* Diurnal variation of nitric oxide at 32 km: Measurements and interpretation // *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*. — 1988. — Vol. 93, no. D3. — Pp. 2451–2460. — URL: <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/JD093iD03p02451>.
- [62] *Webster Christopher R., May Randy D., Toumi Ralf, Pyle John A.* Active nitrogen partitioning and the nighttime formation of N₂O₅ in the stratosphere: Simultaneous in situ measurements of NO, NO₂, HNO₃, O₃, and N₂O using the BLISS diode laser spectrometer // *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*. — 1990. — Vol. 95, no. D9. — Pp. 13851–13866. — URL: <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/JD095iD09p13851>.
- [63] *Kawa S. R., Fahey D. W., Solomon S. et al.* Interpretation of aircraft measurements of NO, ClO, and O₃ in the lower stratosphere // *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*. — 1990. — Vol. 95, no. D11. — Pp. 18597–18609. — URL: <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/JD095iD11p18597>.
- [64] *Hauchecorne A., Bertaux J. L., Dalaudier F. et al.* Response of tropical stratospheric O₃, NO₂ and NO₃ to the equatorial Quasi-Biennial Oscillation and to temperature as seen from GOMOS/ENVISAT // *Atmospheric Chemistry and Physics*. — 2010. — Vol. 10, no. 18. — Pp. 8873–8879. — URL: <https://acp.copernicus.org/articles/10/8873/2010/>.
- [65] *Funke B., López-Puertas M., von Clarmann T. et al.* Retrieval of stratospheric NO_x from 5.3 and 6.2 μm nonlocal thermodynamic equilibrium emissions measured by Michelson Interferometer for Passive Atmospheric Sounding (MIPAS) on Envisat // *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*. — 2005. — Vol. 110, no. D9. — URL: <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2004JD005225>.
- [66] *Evans W. F. J., Llewellyn E. J.* Atomic hydrogen concentrations in the mesosphere and the hydroxyl emissions // *Journal of Geophysical Research (1896-1977)*. — 1973. — Vol. 78, no. 1. — Pp. 323–326. — URL: <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/JA078i001p00323>.

- [67] *Evans W. F. J., McDade I. C., Yuen J., Llewellyn E. J.* A rocket measurement of the O₂ Infrared Atmospheric (0–0) band emission in the dayglow and a determination of the mesospheric ozone and atomic oxygen densities // *Canadian Journal of Physics*. — 1988. — Vol. 66, no. 11. — Pp. 941–946. — URL: <https://doi.org/10.1139/p88-151>.
- [68] *Good R. Earl.* Determination of atomic oxygen density from rocket borne measurement of hydroxyl airglow // *Planetary and Space Science*. — 1976. — Vol. 24, no. 4. — Pp. 389–395. — URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0032063376900520>.
- [69] *Pendleton W.R., Baker K.D., Howlett L.C.* Rocket-based investigations of O(3P), O₂(α 1 Δ g) and OH*(ν =1,2) during the solar eclipse of 26 February 1979 // *Journal of Atmospheric and Terrestrial Physics*. — 1983. — Vol. 45, no. 7. — Pp. 479–491. — The total solar eclipse of 26 February 1979. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021916983811088>.
- [70] *McDade I.C., Llewellyn E.J., Harris F.R.* Atomic oxygen concentrations in the lower auroral thermosphere // *Advances in Space Research*. — 1985. — Vol. 5, no. 7. — Pp. 229–232. — URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0273117785903795>.
- [71] *McDade I.C., Llewellyn E.J.* Mesospheric oxygen atom densities inferred from nighttime OH Meinel band emission rates // *Planetary and Space Science*. — 1988. — Vol. 36, no. 9. — Pp. 897–905. — Special Issue: Atomic Oxygen Abundance in Thermosphere. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0032063388900979>.
- [72] *Thomas Ronald J.* Atomic hydrogen and atomic oxygen density in the mesopause region: Global and seasonal variations deduced from Solar Mesosphere Explorer near-infrared emissions // *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*. — 1990. — Vol. 95, no. D10. — Pp. 16457–16476. — URL: <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/JD095iD10p16457>.
- [73] *Llewellyn E.J., McDade I.C., Moorhouse P., Lockerbie M.D.* Possible reference models for atomic oxygen in the terrestrial atmosphere // *Advances in Space Research*. — 1993. — Vol. 13, no. 1. — Pp. 135–144. — URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0273117793900132>.
- [74] *Llewellyn E.J., McDade I.C.* A reference model for atomic oxygen in the terrestrial atmosphere // *Advances in Space Research*. — 1996. — Vol. 18, no. 9. —

Pp. 209–226. — URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0273117796000592>.

- [75] *Mlynczak Martin G., Solomon Susan.* Middle atmosphere heating by exothermic chemical reactions involving odd-hydrogen species // *Geophysical Research Letters.* — 1991. — Vol. 18, no. 1. — Pp. 37–40. — URL: <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/90GL02672>.
- [76] *Mlynczak Martin G., Solomon Susan.* A detailed evaluation of the heating efficiency in the middle atmosphere // *Journal of Geophysical Research: Atmospheres.* — 1993. — Vol. 98, no. D6. — Pp. 10517–10541. — URL: <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/93JD00315>.
- [77] *Mlynczak Martin G., Marshall B. Thomas, Martin-Torres F. Javier et al.* Sounding of the Atmosphere using Broadband Emission Radiometry observations of daytime mesospheric O₂(¹Δ) 1.27 μm emission and derivation of ozone, atomic oxygen, and solar and chemical energy deposition rates // *Journal of Geophysical Research: Atmospheres.* — 2007. — Vol. 112, no. D15. — URL: <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2006JD008355>.
- [78] *Mlynczak Martin G., Hunt Linda A., Mast Jeffrey C. et al.* Atomic oxygen in the mesosphere and lower thermosphere derived from SABER: Algorithm theoretical basis and measurement uncertainty // *Journal of Geophysical Research: Atmospheres.* — 2013. — Vol. 118, no. 11. — Pp. 5724–5735. — URL: <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/jgrd.50401>.
- [79] *Mlynczak Martin G., Hunt Linda H., Mertens Christopher J. et al.* Radiative and energetic constraints on the global annual mean atomic oxygen concentration in the mesopause region // *Journal of Geophysical Research: Atmospheres.* — 2013. — Vol. 118, no. 11. — Pp. 5796–5802. — URL: <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/jgrd.50400>.
- [80] *Mlynczak Martin G., Hunt Linda A., Marshall B. Thomas et al.* Atomic hydrogen in the mesopause region derived from SABER: Algorithm theoretical basis, measurement uncertainty, and results // *Journal of Geophysical Research: Atmospheres.* — 2014. — Vol. 119, no. 6. — Pp. 3516–3526. — URL: <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/2013JD021263>.
- [81] *Siskind David E., Marsh Daniel R., Mlynczak Martin G. et al.* Decreases in atomic hydrogen over the summer pole: Evidence for dehydration from polar mesospheric

- clouds? // *Geophysical Research Letters*. — 2008. — Vol. 35, no. 13. — URL: <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2008GL033742>.
- [82] *Siskind David E., Mlynczak Martin G., Marshall Tom et al.* Implications of odd oxygen observations by the TIMED/SABER instrument for lower D region ionospheric modeling // *Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics*. — 2015. — Vol. 124. — Pp. 63–70. — URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1364682615000243>.
- [83] *Smith Anne K., Marsh Daniel R., Mlynczak Martin G., Mast Jeffrey C.* Temporal variations of atomic oxygen in the upper mesosphere from SABER // *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*. — 2010. — Vol. 115, no. D18. — URL: <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2009JD013434>.
- [84] *Grygalashvyly Mykhaylo.* Three-dimensional modeling of minor chemical constituents in the mesosphere/lower thermosphere region: Ph.D. thesis / The University of Rostock. — Rostock, Germany, 2008.
- [85] *Володин Е.М.* Математическое моделирование общей циркуляции атмосферы - Курс лекций. — <http://old.inm.ras.ru/library/direct2/Volodin.pdf>. — 2007. — Accessed: 2021-12-01.
- [86] *Berger Uwe.* Numerische Simulation klimatologischer Prozesse und thermische Gezeiten in der mittleren Atmosphäre: Ph.D. thesis / University of Cologne. — Cologne, Germany, 1994.
- [87] *Berger U., von Zahn U.* The two-level structure of the mesopause: A model study // *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*. — 1999. — Vol. 104, no. D18. — Pp. 22083–22093. — URL: <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/1999JD900389>.
- [88] *Kremp Christine, Berger Uwe, Hoffmann Peter et al.* Seasonal variation of middle latitudes wind fields of the mesopause region – A comparison between observation and model calculation // *Geophysical Research Letters*. — 1999. — Vol. 26, no. 9. — Pp. 1279–1282. — URL: <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/1999GL900218>.
- [89] *de Grandpré J., Beagley S. R., Fomichev V. I. et al.* Ozone climatology using interactive chemistry: Results from the Canadian Middle Atmosphere Model // *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*. — 2000. — Vol. 105, no. D21. —

Pp. 26475–26491. — URL: <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2000JD900427>.

- [90] *Fomichev V. I., Ward W. E., Beagley S. R. et al.* Extended Canadian Middle Atmosphere Model: Zonal-mean climatology and physical parameterizations // *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*. — 2002. — Vol. 107, no. D10. — Pp. ACL 9–1–ACL 9–14. — URL: <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2001JD000479>.
- [91] *Scinocca J. F., McFarlane N. A., Lazare M. et al.* Technical Note: The CCCma third generation AGCM and its extension into the middle atmosphere // *Atmospheric Chemistry and Physics*. — 2008. — Vol. 8, no. 23. — Pp. 7055–7074. — URL: <https://acp.copernicus.org/articles/8/7055/2008/>.
- [92] *Canadian Centre for Climate Modelling and Analysis.* Climate model data. — <https://climate-modelling.canada.ca/climatemodeldata/cmam/output/CMAM-Ext/CMAM30-SD/6hr/atmos/index.shtml>. — 2021. — [Online; accessed 10-December-2021].
- [93] *Kulikov M. Yu., Belikovich M. V., Feigin A. M.* The 2-Day Photochemical Oscillations in the Mesopause Region: The First Experimental Evidence? // *Geophysical Research Letters*. — 2021. — Vol. 48, no. 9. — P. e2021GL092795. — e2021GL092795 2021GL092795. URL: <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2021GL092795>.
- [94] *Walcek Chris J., Aleksic Nenad M.* A simple but accurate mass conservative, peak-preserving, mixing ratio bounded advection algorithm with FORTRAN code // *Atmospheric Environment*. — 1998. — Vol. 32, no. 22. — Pp. 3863–3880. — URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1352231098000995>.
- [95] *Walcek Chris J.* Minor flux adjustment near mixing ratio extremes for simplified yet highly accurate monotonic calculation of tracer advection // *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*. — 2000. — Vol. 105, no. D7. — Pp. 9335–9348. — URL: <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/1999JD901142>.
- [96] *Morton K. W., Mayers D. F.* Numerical solution of partial differential equations. — Cambridge New York: Cambridge University Press, 2005.
- [97] *Lübken F.-J.* Seasonal variation of turbulent energy dissipation rates at high latitudes as determined by in situ measurements of neutral density fluctuations // *Journal*

- of *Geophysical Research: Atmospheres*. — 1997. — Vol. 102, no. D12. — Pp. 13441–13456. — URL: <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/97JD00853>.
- [98] *Burkholder J. B., Sander S. P., Abbatt J. et al.* Chemical Kinetics and Photochemical Data for Use in Atmospheric Studies, Evaluation No. 18: Tech. Rep. 15-10. — Pasadena, California: Pasadena, CA : Jet Propulsion Laboratory, National Aeronautics and Space Administration, 2015.
- [99] *Shampine L. F., Thompson S.* Stiff systems // *Scholarpedia*. — 2007. — Vol. 2, no. 3. — P. 2855. — revision #139228.
- [100] *Shimazaki T.* Minor constituents in the middle atmosphere. — Dordrecht Holland: D. Reidel Publishing Company, 1985.
- [101] *Grygalashvily M., Becker E., Sonnemann G. R.* Wave mixing effects on minor chemical constituents in the MLT region: Results from a global CTM driven by high-resolution dynamics // *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*. — 2011. — Vol. 116, no. D18. — URL: <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2010JD015518>.
- [102] *Grygalashvily M., Becker E., Sonnemann G. R.* Gravity Wave Mixing and Effective Diffusivity for Minor Chemical Constituents in the Mesosphere/Lower Thermosphere // *Space Science Reviews*. — 2012. — Jun. — Vol. 168, no. 1. — Pp. 333–362. — URL: <https://doi.org/10.1007/s11214-011-9857-x>.
- [103] *Grygalashvily M., Sonnemann G. R., Hartogh P.* Long-term behavior of the concentration of the minor constituents in the mesosphere – a model study // *Atmospheric Chemistry and Physics*. — 2009. — Vol. 9, no. 8. — Pp. 2779–2792. — URL: <https://acp.copernicus.org/articles/9/2779/2009/>.
- [104] *Körner U., Sonnemann G. R.* Global three-dimensional modeling of the water vapor concentration of the mesosphere-mesopause region and implications with respect to the noctilucent cloud region // *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*. — 2001. — Vol. 106, no. D9. — Pp. 9639–9651. — URL: <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2000JD900744>.
- [105] *Sonnemann G., Kremp Ch., Ebel A., Berger U.* A three-dimensional dynamic model of the minor constituents of the mesosphere // *Atmospheric Environment*. — 1998. — Vol. 32, no. 18. — Pp. 3157–3172. — URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1352231098001137>.

- [106] *Rodgers C. D., Taylor F. W., Mugeridge A. H. et al.* Local thermodynamic equilibrium of carbon dioxide in the upper atmosphere // *Geophysical Research Letters*. — 1992. — Vol. 19, no. 6. — Pp. 589–592. — URL: <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/92GL00160>.
- [107] *Sharma Ramesh D., Wintersteiner Peter P.* Role of carbon dioxide in cooling planetary thermospheres // *Geophysical Research Letters*. — 1990. — Vol. 17, no. 12. — Pp. 2201–2204. — URL: <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/GL017i012p02201>.
- [108] *Mlynczak Martin G., Drayson S. Roland.* Calculation of infrared limb emission by ozone in the terrestrial middle atmosphere: 1. Source functions // *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*. — 1990. — Vol. 95, no. D10. — Pp. 16497–16511. — URL: <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/JD095iD10p16497>.
- [109] *McLandress C., Plummer D. A., Shepherd T. G.* Technical Note: A simple procedure for removing temporal discontinuities in ERA-Interim upper stratospheric temperatures for use in nudged chemistry-climate model simulations // *Atmospheric Chemistry and Physics*. — 2014. — Vol. 14, no. 3. — Pp. 1547–1555. — URL: <https://acp.copernicus.org/articles/14/1547/2014/>.
- [110] *Sonnemann G. R., Hartogh P., Berger U., Grygalashvyly M.* Hydroxyl layer: trend of number density and intra-annual variability // *Annales Geophysicae*. — 2015. — Vol. 33, no. 6. — Pp. 749–767. — URL: <https://angeo.copernicus.org/articles/33/749/2015/>.
- [111] *Kulikov M. Yu., Belikovich M. V., Grygalashvyly M. et al.* Nighttime Ozone Chemical Equilibrium in the Mesopause Region // *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*. — 2018. — Vol. 123, no. 6. — Pp. 3228–3242. — URL: <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/2017JD026717>.
- [112] *Kulikov M. Yu., Nechaev A. A., Belikovich M. V. et al.* Boundary of Nighttime Ozone Chemical Equilibrium in the Mesopause Region From SABER Data: Implications for Derivation of Atomic Oxygen and Atomic Hydrogen // *Geophysical Research Letters*. — 2019. — Vol. 46, no. 2. — Pp. 997–1004. — URL: <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2018GL080364>.
- [113] *Maple C.* Geometric design and space planning using the marching squares and marching cube algorithms // 2003 International Conference on Geometric Modeling and Graphics, 2003. Proceedings. — 2003. — Pp. 90–95.

- [114] *Gibara Tom.* Marching Squares Implementation. — <http://www.tomgibara.com/computer-vision/marching-squares>. — 2007. — Accessed: 2021-12-06.
- [115] *Mlynczak Martin G., Hunt Linda A., Russell III James M., Marshall B. Thomas.* Updated SABER Night Atomic Oxygen and Implications for SABER Ozone and Atomic Hydrogen // *Geophysical Research Letters*. — 2018. — Vol. 45, no. 11. — Pp. 5735–5741. — URL: <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2018GL077377>.
- [116] *Moreels G, Megie G, Jones A.Vallance, Gattinger R.L.* An oxygen-hydrogen atmospheric model and its application to the OH emission problem // *Journal of Atmospheric and Terrestrial Physics*. — 1977. — Vol. 39, no. 5. — Pp. 551–570. — URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0021916977900654>.
- [117] *Kaufmann M., Zhu Y., Ern M., Riese M.* Global distribution of atomic oxygen in the mesopause region as derived from SCIAMACHY O(1S) green line measurements // *Geophysical Research Letters*. — 2014. — Vol. 41, no. 17. — Pp. 6274–6280. — URL: <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/2014GL060574>.
- [118] *Kulikov M. Y., Nechaev A. A., Belikovich M. V. et al.* Technical note: Evaluation of the simultaneous measurements of mesospheric OH, HO₂, and O₃ under a photochemical equilibrium assumption – a statistical approach // *Atmospheric Chemistry and Physics*. — 2018. — Vol. 18, no. 10. — Pp. 7453–7471. — URL: <https://acp.copernicus.org/articles/18/7453/2018/>.
- [119] *Беликович М. В., Куликов М. Ю., Рыскин В. Г. et al.* Применение параметризации эмпирическими ортогональными функциями в задаче восстановления термической структуры тропосферы по радиометрическим данным // *Известия высших учебных заведений. Радиофизика*. — 2019. — Vol. 62, no. 9. — Pp. 664–680.
- [120] *Adler-Golden Steven.* Kinetic parameters for OH nightglow modeling consistent with recent laboratory measurements // *Journal of Geophysical Research: Space Physics*. — 1997. — Vol. 102, no. A9. — Pp. 19969–19976. — URL: <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/97JA01622>.
- [121] *von Clarmann T., Hase F., Funke B. et al.* Do vibrationally excited OH molecules affect middle and upper atmospheric chemistry? // *Atmospheric Chemistry and Physics*. — 2010. — Vol. 10, no. 20. — Pp. 9953–9964. — URL: <https://acp.copernicus.org/articles/10/9953/2010/>.

- [122] *Minschwaner K., Manney G. L., Wang S. H., Harwood R. S.* Hydroxyl in the stratosphere and mesosphere – Part 1: Diurnal variability // *Atmospheric Chemistry and Physics*. — 2011. — Vol. 11, no. 3. — Pp. 955–962. — URL: <https://acp.copernicus.org/articles/11/955/2011/>.
- [123] *Куликов М. Ю., Фейгин А. М., Зоннеманн Г. Р.* Куликов, М. Ю. Восстановление вертикальных распределений концентрации химических компонент мезосферы по результатам одновременных измерений распределений озона и гидроксила // *Известия высших учебных заведений. Радиофизика*. — 2006. — Vol. 49, no. 9. — Pp. 760–769.
- [124] *Kreyling Daniel, Sagawa Hideo, Wohltmann Ingo et al.* SMILES zonal and diurnal variation climatology of stratospheric and mesospheric trace gasses: O₃, HCl, HNO₃, ClO, BrO, HOCl, HO₂, and temperature // *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*. — 2013. — Vol. 118, no. 20. — Pp. 11,888–11,903. — URL: <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/2012JD019420>.
- [125] *Baron P., Dupuy E., Urban J. et al.* HO₂ measurements in the stratosphere and the mesosphere from the sub-millimetre limb sounder Odin/SMR // *International Journal of Remote Sensing*. — 2009. — Vol. 30, no. 15-16. — Pp. 4195–4208. — URL: <https://doi.org/10.1080/01431160902822831>.
- [126] *Millán L., Wang S., Livesey N. et al.* Stratospheric and mesospheric HO₂ observations from the Aura Microwave Limb Sounder // *Atmospheric Chemistry and Physics*. — 2015. — Vol. 15, no. 5. — Pp. 2889–2902. — URL: <https://acp.copernicus.org/articles/15/2889/2015/>.
- [127] *Wang Shuhui, Zhang Qiong, Millán Luis et al.* First evidence of middle atmospheric HO₂ response to 27 day solar cycles from satellite observations // *Geophysical Research Letters*. — 2015. — Vol. 42, no. 22. — Pp. 10,004–10,009. — URL: <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/2015GL065237>.
- [128] *Куликов М. Ю., Мухин Д. Н., Фейгин А. М.* Куликов, М. Ю. Байесова стратегия оценки точности характеристик, извлекаемых из экспериментальных данных с помощью базовых динамических моделей атмосферных фотохимических систем // *Известия высших учебных заведений. Радиофизика*. — 2009. — Vol. 52, no. 9. — Pp. 690–699.
- [129] *Нечаев А. А., Ермакова Т. С., Куликов М. Ю.* Нечаев, А. А. Определение концентраций малых газовых составляющих на высотах нижней и средней мезо-

- сферы по временным рядам концентрации озона // *Известия высших учебных заведений. Радиофизика*. — 2016. — Vol. 59, no. 7. — Pp. 605–619.
- [130] *Schwartz M., Froidevaux L., Livesey N., Read W.* MLS/Aura Level 2 Ozone (O3) Mixing Ratio V004. Greenbelt: Goddard Earth Sciences Data and Information Services Center. — <https://doi.org/10.5067/AURA/MLS/DATA2017>. — 2015. — Accessed: 2018-12-06.
- [131] *Schwartz M., Froidevaux L., Livesey N., Read W.* MLS/Aura Level 2 Hydroxyl (OH) Mixing Ratio V004. Greenbelt: Goddard Earth Sciences Data and Information Services Center. — <https://doi.org/10.5067/AURA/MLS/DATA2018>. — 2015. — Accessed: 2018-12-06.
- [132] *Schwartz M., Froidevaux L., Livesey N., Read W.* MLS/Aura Level 2 Hydroperoxy (HO2) Mixing Ratio V004. Greenbelt: Goddard Earth Sciences Data and Information Services Center. — <https://doi.org/10.5067/AURA/MLS/DATA2013>. — 2015. — Accessed: 2018-12-06.
- [133] *Chib Siddhartha, Greenberg Edward.* Understanding the Metropolis-Hastings Algorithm // *The American Statistician*. — 1995. — Vol. 49, no. 4. — Pp. 327–335. — URL: <http://www.jstor.org/stable/2684568>.
- [134] *Mosegaard Klaus, Tarantola Albert.* Probabilistic Approach to Inverse Problems // *International Handbook of Earthquake and Engineering Seismology (Part A)*. — Amsterdam Boston: Academic Press, 2002. — Pp. 237–265. — URL: http://www.ipgp.fr/~tarantola/Files/Professional/Papers_PDF/InverseProblemHandbk.pdf.
- [135] *Wikipedia contributors.* Borel–Kolmogorov paradox — Wikipedia, The Free Encyclopedia. — https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Borel%E2%80%93Kolmogorov_paradox&oldid=1032937620. — 2021. — [Online; accessed 29-August-2021].
- [136] *Беликович М. В., Куликов М. Ю., Нечаев А. А., Фейгин А. М.* Оценка качества измерений концентраций малых примесей атмосферы: априорные статистические ограничения, основанные на фотохимическом моделировании // *Известия высших учебных заведений. Радиофизика*. — 2018. — Vol. 61, no. 8-9. — Pp. 645–661.
- [137] *Kulikov M. Y., Feigin A. M., Sonnemann G. R.* Retrieval of water vapor profile in the mesosphere from satellite ozone and hydroxyl measurements by the basic dynamic model of mesospheric photochemical system // *Atmospheric Chemistry and Physics*.

- 2009. — Vol. 9, no. 21. — Pp. 8199–8210. — URL: <https://acp.copernicus.org/articles/9/8199/2009/>.
- [138] *Livesey N. J., Read W. G., Wagner P. A. et al.* Earth Observing System (EOS) Aura Microwave Limb Sounder (MLS) Version 4.2 Level 2 data quality and description document: Tech. Rep. JPL D-33509 Rev. D. — Pasadena, California, 91109-8099: Pasadena, CA : Jet Propulsion Laboratory, California Institute of Technology, 2018.
- [139] NASA. Goddard Earth Sciences Data and Information Services Center (GES DISC). — <https://disc.gsfc.nasa.gov/>. — 2021. — Accessed: 2021-08-29.
- [140] *Pickett H. M., Drouin B. J., Canty T. et al.* Validation of Aura Microwave Limb Sounder OH and HO₂ measurements // *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*. — 2008. — Vol. 113, no. D16. — URL: <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2007JD008775>.
- [141] *Rosenkranz P.* Shape of the 5 mm oxygen band in the atmosphere // *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*. — 1975. — Vol. 23, no. 4. — Pp. 498–506.
- [142] *Gordon R. G.* Semiclassical Theory of Spectra and Relaxation in Molecular Gases // *The Journal of Chemical Physics*. — 1966. — Vol. 45, no. 5. — Pp. 1649–1655. — URL: <https://doi.org/10.1063/1.1727808>.
- [143] *Lam Kai S.* Application of pressure broadening theory to the calculation of atmospheric oxygen and water vapor microwave absorption // *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*. — 1977. — Vol. 17, no. 3. — Pp. 351–383. — URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0022407377901157>.
- [144] *Smith Earl W.* Absorption and dispersion in the O₂ microwave spectrum at atmospheric pressures // *The Journal of Chemical Physics*. — 1981. — Vol. 74, no. 12. — Pp. 6658–6673. — URL: <https://doi.org/10.1063/1.441112>.
- [145] *Van Vleck J. H., Weisskopf V. F.* On the Shape of Collision-Broadened Lines // *Rev. Mod. Phys.* — 1945. — Apr. — Vol. 17. — Pp. 227–236. — URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.17.227>.
- [146] *van Vleck J. H.* The Absorption of Microwaves by Oxygen // *Phys. Rev.* — 1947. — Apr. — Vol. 71. — Pp. 413–424. — URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.71.413>.
- [147] *Makarov D.S., Tretyakov M.Yu., Rosenkranz P.W.* 60-GHz oxygen band: Precise experimental profiles and extended absorption modeling in a wide temperature range //

Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. — 2011. — Vol. 112, no. 9. — Pp. 1420–1428. — URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022407311001099>.

[148] *Rosenkranz P.W.* Interference coefficients for overlapping oxygen lines in air // *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*. — 1988. — Vol. 39, no. 4. — Pp. 287–297. — URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0022407388900040>.

[149] *Tretyakov M.Yu., Koshelev M.A., Dorovskikh V.V. et al.* 60-GHz oxygen band: precise broadening and central frequencies of fine-structure lines, absolute absorption profile at atmospheric pressure, and revision of mixing coefficients // *Journal of Molecular Spectroscopy*. — 2005. — Vol. 231, no. 1. — Pp. 1–14. — URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022285204003650>.

[150] *Koshelev M.A., Vilkov I.N., Tretyakov M.Yu.* Collisional broadening of oxygen fine structure lines: The impact of temperature // *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*. — 2016. — Vol. 169. — Pp. 91–95. — URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022407315300376>.