

Метод главных компонент для обратной задачи спутникового зондирования тяжелой воды в атмосфере

В.И. Захаров¹, К.Г. Грибанов¹, R. Imasu², D. Noone^{3*}

¹Институт естественных наук, Уральский федеральный университет
620000, г. Екатеринбург, пр. Ленина 51, Россия

²Atmosphere and Ocean Research Institute, The University of Tokyo
General Research Building Room No. 315b, 5-1-5 Kashiwanoha, Kashiwa-shi, Chiba 277-8568, Japan

³Department of Atmospheric and Oceanic Sciences,
Cooperative Institute for Research in Environmental Sciences
Campus Box 216, University of Colorado,
Boulder, CO 80309-0216, USA

Поступила в редакцию 4.04.2016 г.

Рассматривается метод главных компонент в приложении к обратной задаче для определения относительного содержания тяжелой воды ($\text{HDO}/\text{H}_2\text{O}$) в атмосферном водяном паре из спектров уходящего теплового излучения Земли, регистрируемых Фурье-спектрометрами высокого разрешения спутникового базирования. Метод апробирован на спектральных данных сенсора IMG спутника ADEOS над акваторией Тихого океана. Приведено сравнение результатов, полученных предлагаемым методом из спектральных данных сенсора IMG, и результатов, полученных независимо наиболее распространенным в литературе методом оптимальной статистической оценки из данных сенсора TES спутника AURA. Отмечается хорошее согласие данных IMG и TES для Северного полушария, обсуждаются отличия для Южного полушария.

Ключевые слова: атмосфера, спутниковое зондирование, изотопологи водяного пара; atmosphere, satellite sounding, water vapour isotopologues.

Введение

Важной компонентой современной системы дистанционного зондирования атмосферы для глобального мониторинга следовых газов являются инфракрасные Фурье-спектрометры высокого разрешения спутникового и наземного базирования. Появление спутниковых Фурье-спектрометров достаточно высокого спектрального разрешения ($\sim 0,1 \text{ см}^{-1}$), таких как японский IMG на спутнике ADEOS [1], американский TES на спутнике AURA [2], европейский IASI на спутнике METOP [3], японский TANSO-FTS на спутнике GOSAT [4], с десятками тысяч спектральных каналов в тепловой инфракрасной области ($600\text{--}2000 \text{ см}^{-1}$) позволило существенно повысить информативность регистрируемых спектров уходящего в космос теплового излучения Земли. Создание и совершенствование достаточно подробных баз данных спектроскопической информации по атмосферным газам HITRAN [5] и GEISA [6] способствовало про-

грессу в детектировании и спутниковому мониторингу важных малых газовых составляющих в атмосфере, таких как H_2O , CH_4 , CO , O_3 , CO_2 и др. [7, 8], включая тяжелую воду HDO [9].

Мониторинг изотопического состава водяного пара в атмосфере позволяет получить важную информацию об атмосферном водном цикле. Тяжелые изотопологи воды, HDO, конденсируются более активно и испаряются менее активно, чем основной изотополог H_2O . Каждый цикл испарения и конденсации приводит к обеднению водяного пара в воздухе тяжелыми изотопологами HDO и обогащению ими жидкой фазы. Относительное содержание этих изотопологов в водяном паре служит трассером атмосферного водного цикла и может быть использовано для понимания изменений, происходящих в атмосферном водяном цикле в процессе изменения климата [10–12].

Целью настоящей статьи является разработка, апробация и верификация метода главных компонент для решения обратной задачи по определению относительного содержания тяжелой воды ($\text{HDO}/\text{H}_2\text{O}$) или дейтерия (D/H) в атмосферном водяном паре из спектров уходящего теплового излучения Земли, регистрируемых Фурье-спектрометрами высокого

* Вячеслав Иосифович Захаров (v.zakharov@remotesensing.ru); Константин Геннадьевич Грибанов (kgribanov@remotesensing.ru); Ryoichi Imasu (imasu@aori.u-tokyo.ac.jp); David Noone (dcn@colorado.edu).

разрешения спутникового базирования. Для апробации предлагаемого метода в качестве целевой области исследования была выбрана атмосфера над акваторией Тихого океана (65° ю.ш. – 65° с.ш., 130–170° з.д.) (рис. 1) и эталонные спектральные данные сенсора IMG со спутника ADEOS для условий чистого неба.

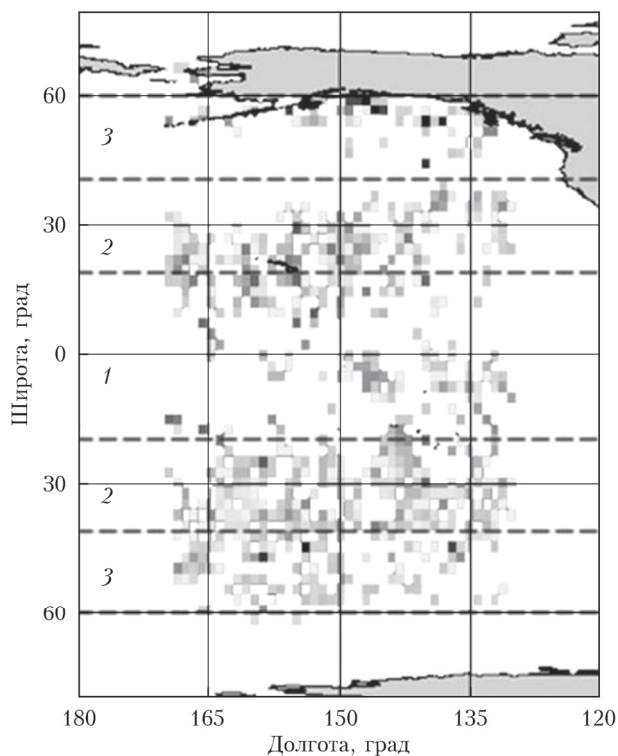


Рис. 1. Координаты спектров, измеренных сенсором IMG в условиях чистого неба над районом Тихого океана (65° ю.ш. – 65° с.ш., 130–170° з.д.). Цифрами показаны зоны разделения априорной информации, выбранные для построения ковариационных матриц. Квадратами обозначены точки наблюдения IMG в условиях чистого неба

Считается, что океаническая вода имеет достаточно постоянный изотопный состав, распространенность дейтерия в ней (отношение концентрации D/H в океане) равна величине $R_0 \equiv R_{\text{SMOW}} = 1,5576 \cdot 10^{-4}$ (SMOW – Standard Mean Ocean Water). В литературе изотопный состав водяного пара в атмосфере принято выражать в единицах промилле по отношению к океанической воде в виде δ -величины [13], которая определяется следующим выражением:

$$\delta D = (R/R_0 - 1) \cdot 1000, \quad (1)$$

где R – искомое отношение концентрации D/H в водяном паре атмосферы.

Описание метода

Метод главных компонент (МГК) используется в различных областях науки [14, 15]. Согласно ему искомое решение задачи представляется разложе-

нием по собственным векторам ковариационной матрицы априорных данных. В обратных задачах зондирования атмосферы метод впервые применен в работах [16, 17]. Наиболее удобная модификация метода для задач зондирования атмосферы была предложена в [16], где искомый профиль представляется разложением по собственным векторам масштабированной ковариационной матрицы априорных профилей. Эта модификация метода будет использована в настоящей работе:

$$\mathbf{x} = \sum_{i=1}^l c_i V_i, \quad \mathbf{x} = S_{\text{ex}}^{-1/2} (\mathbf{x} - m_x),$$

$$G V_k = \lambda_k V_k, \quad G = S_x S_{\text{ex}}^{-1},$$

$$S_x^{ij} = \frac{\sum_{k=1}^M (x_k^i - m_x^i)(x_k^j - m_x^j)}{M-1}, \quad i, j = 1 \dots n, \quad (2)$$

где \mathbf{x} – масштабированный искомый вектор; S_{ex} – ковариационная матрица ошибок измерений вектора \mathbf{x} ; m_x – средний вектор, рассчитанный по набору априорных векторов \mathbf{x} ; M – число векторов в наборе; c_i – коэффициенты разложения или главные компоненты (ГК); λ_k, V_k – набор собственных значений и собственных векторов обобщенной ковариационной матрицы G ; S_x – выборочная ковариационная матрица, вычисленная по априорному набору атмосферных профилей (матрица естественной изменчивости); l – число ГК, используемых в разложении; n – размерность вектора \mathbf{x} . Ограничивая ряд (2) несколькими первыми членами и сводя задачу к нахождению коэффициентов разложения, можно понизить размерность задачи. Это аналогично поиску решения на множестве гладких функций, как это делается в случае регуляризации по Тихонову.

Согласно работе [16] использование матрицы G вместо S_x при вычислении набора собственных векторов V_k дает удобный критерий выбора достаточного числа ГК, используемых в разложении вектора \mathbf{x} . Математически критерий записывается исходя из требования того, чтобы погрешность аппроксимации \mathbf{x} в разложении (2) была на уровне априорно заданной погрешности представления искомого вектора, что сводится к выражению [16]:

$$n^{-1} \sum_{l=1}^n \lambda_k \leq 1. \quad (3)$$

При этом величина λ_k интерпретируется как отношение дисперсии ГК к дисперсии шума в направлении соответствующего собственного вектора V_k , т.е. отношение сигнал-шум. Матрица естественной изменчивости ГК искомых векторов, построенных по (2), есть диагональная матрица, состоящая из собственных значений λ_k ; ковариационная матрица ошибок ГК, соответствующая S_{ex} , есть единичная матрица.

В качестве априорной информации в настоящей статье были использованы данные модели общей циркуляции атмосферы NASA GISS ModelE [18],

учитывающей фракционирование изотопологов воды при фазовых переходах (испарение и конденсация). Выходные данные модели представляют собой глобальный пространственно-временной набор метеорологических состояний атмосферы, каждое из них включает: вертикальные профили давления и температуры, концентрации водяного пара и δD — относительного содержания дейтерия. Пространственное покрытие земного шара выполнено с шагом 40 км по широте и 50 км по долготе, т.е. одномоментное покрытие планеты описывается набором из ~3300 точек на географической сетке. Временное покрытие выполнено с шагом 3 ч, и годовой набор глобальных состояний насчитывает ~2800 засечек. Высотная сетка атмосферы содержит 20 узлов (0,0; 0,3; 0,6; 1,1; 1,8; 3,2; 5,3; 7,6; 9,8; 12,1; 14,4; 16,6; 19; 21,9; 25,4; 29,7; 35,7; 44; 52; 60,4 км).

Информативная репрезентативность выборочных оценок для теоретической ковариационной матрицы (2), соответствующих собственных значений и собственных векторов обеспечивается в случае, если атмосферные параметры в априорном наборе распределены нормально около некоторого среднего [19]. Анализ выходных данных модели NASA GISS ModelE для всего региона (65° ю.ш. — 65° с.ш.,

130—170° з.д.) показал, что их распределение далеко от нормального, функция распределения существенно несимметричная (рис. 2, кривая 0). Однако анализ модельных данных, разделенных по отдельным областям по широте: зона 1 — 20° ю.ш. — 20° с.ш., зона 2 — от 20° с.ш. до 40° ю.ш. и с.ш., и зона 3 — от 40° до 60° ю.ш. и с.ш. (рис. 1), показывает, что для каждой из выделенных зон функции распределения для температуры приземного слоя атмосферы T_1 , а также концентрации водяного пара N_{H_2O} и δD в приземном слое атмосферы становятся существенно более симметричными и демонстрируют распределения, близкие к нормальному (гауссовому) распределению (рис. 2, кривые 1, 2, 3).

Выборка области 1 составила ~150000, областей 2 и 3 по ~135000 состояний атмосферы — совместных вертикальных профилей T , концентрации H_2O и δD . По этим наборам были рассчитаны ковариационные матрицы, их собственные значения и векторы и осуществлен переход от профилей T , N_{H_2O} и δD к коэффициентам (ГК) в разложении (2). На рис. 2 показаны распределения температуры, концентрации водяного пара и относительного содержания дейтерия в приземном слое для всех модельных данных и отдельно для каждой области.

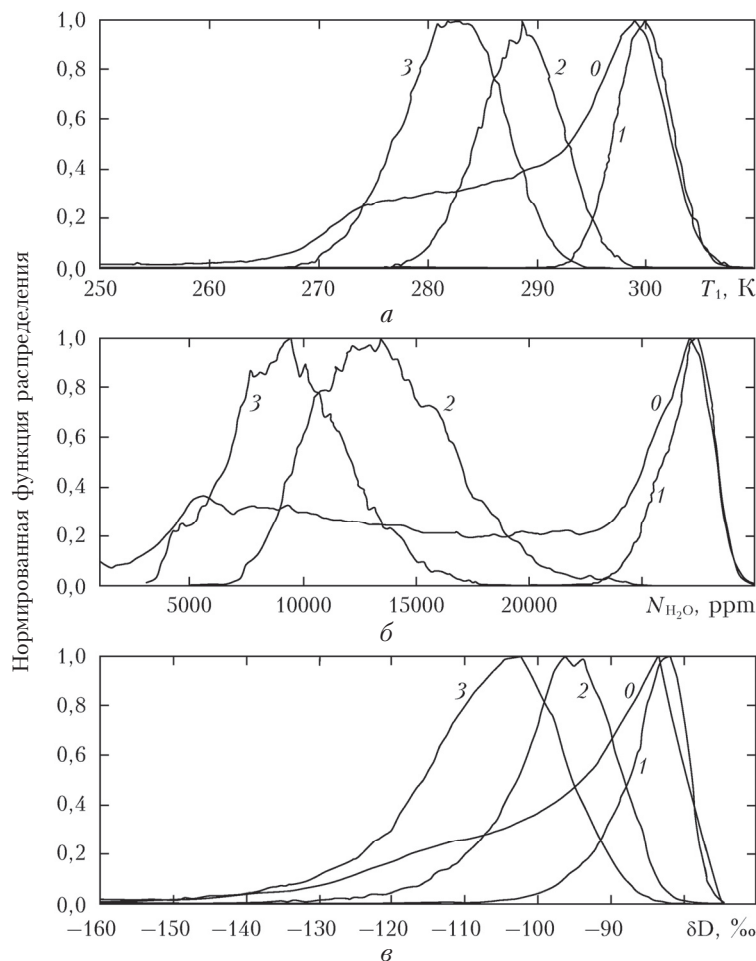


Рис. 2. Нормированные функции распределения параметров атмосферы в приземном слое: а — температуры, б — концентрации водяного пара, в — относительного содержания дейтерия. Распределения построены по всему исследуемому району над Тихим океаном (0) и с учетом разбиения по областям (1, 2, 3, см. рис.1)

Для определения достаточной размерности базиса ГК в пространстве атмосферных параметров был использован критерий (3) при заданной допустимой погрешности входящих в него атмосферных параметров. Число ГК, заведомо достаточное для представления профилей искомым атмосферных параметров, согласованное с инструментальным шумом сенсора IMG, и соответствующие погрешности представления векторов приведены в таблице.

Выбор числа ГК исходя из метеорологической точности представления параметров и точности расчета синтетического спектра IMG

Профиль	Ошибка представления профиля (в среднем до высоты 10 км)	Размерность базиса l
Температуры	1 К	3
N_{H_2O}	10%	4
δD	25%	3

Синтетический спектр IMG является сверткой модельного спектра высокого разрешения для уходящего в космос теплового излучения молекулярной

атмосферы и подстилающей поверхности с аппаратной функцией спектрометра IMG [1]. Модельный спектр высокого разрешения для уходящего в космос теплового излучения молекулярной атмосферы и подстилающей поверхности рассчитывается с помощью ПО FIRE-ARMS (Fine InfraRed Explorer of Atmospheric Radiation MeasurementS) [20] с использованием спектроскопической базы данных HITRAN [5].

Процедура определения вертикального профиля δD из измеренных спектров IMG состояла из следующих этапов.

1. Формирование начального состояния атмосферы: из подготовленного набора атмосферных состояний выбираются ближайшие по координатам и времени к обрабатываемому спектру, и проводится их аппроксимация. Результатом являются профили начального приближения для температуры, концентрации водяного пара и δD при решении обратной задачи.

2. Определение температуры поверхности T_s проводится из спектра в области окна прозрачности атмосферы в интервале волновых чисел $817-822 \text{ см}^{-1}$. С использованием спектральных интервалов из диапазона $680-765 \text{ см}^{-1}$, содержащих линии CO_2 (рис. 3),

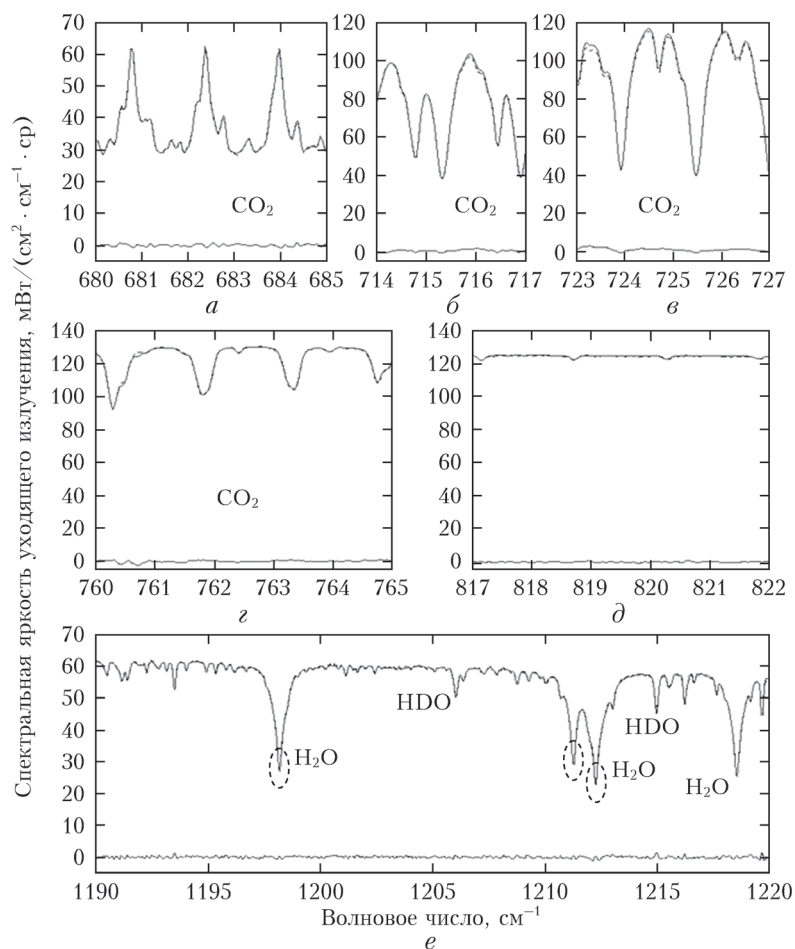


Рис. 3. Спектральные интервалы из диапазона IMG, используемые для определения температуры поверхности (d), вертикальных профилей температуры (a , b , v , z), профилей концентрации H_2O и δD (e) в атмосфере. Показаны измеренный спектр IMG (пунктир) и рассчитанный синтетический спектр IMG (сплошная) с использованием восстановленных профилей температуры, H_2O , δD и разность между измеренным и синтетическим спектрами

производится восстановление профиля температуры путем его варьирования из начального состояния [17].

3. Восстановление вертикального профиля концентрации водяного пара (основного изотополога $N_{\text{H}_2\text{O}}$) и профиля δD в интервале 1190–1220 см^{-1} . Затем расчет относительного содержания дейтерия δD в целом во всем атмосферном столбе [9].

Определение всех искомым профилей происходило единообразно — с помощью подгонки измеренного и модельного спектров (в соответствующих спектральных интервалах) путем минимизации в координатах ГК целевой функции вида [20, 21]:

$$J(x) = \sum_{i=1}^m \left[\frac{W_i^{\text{obs}}}{W_i^{\text{calc}}(x)} - \frac{W_i^{\text{calc}}(x)}{W_i^{\text{obs}}} \right]^2, \quad (4)$$

где W_i^{obs} , W_i^{calc} — измеренный и рассчитанный синтетический спектр IMG соответственно; m — число спектральных каналов; x — искомым параметр (вертикальные профили T , $N_{\text{H}_2\text{O}}$, δD) в координатах главных компонент. Такой выбор целевой функции позволяет вклады от различных спектральных каналов привести к одному порядку величины. Минимизация (4) проводилась методом сопряженных градиентов по алгоритму Флетчера—Ривза [22].

Оценка ошибок

Для определения ошибки МГК для восстановления атмосферных параметров использовалась схема замкнутых модельных экспериментов по следующему алгоритму.

1. Из набора модельных данных NASA GISS ModelE была сделана выборка состояний (каждое из которых включает профили температуры T , концентрации водяного пара $N_{\text{H}_2\text{O}}$ и относительного содержания дейтерия δD). При этом величина δD изменялась в интервале от -250 до -100% . Эти состояния были дополнены профилями давления, концентраций других газов из стандартной модели атмосферы.

2. Для каждого состояния (всего ~ 200) рассчитан IMG-подобный спектр и добавлен нормально распределенный шум с уровнем, характерным для измеренных спектров IMG.

3. Получившиеся модельные спектры были обработаны по описанной схеме, и проведено сравнение восстановленных при решении обратной задачи и начальных профилей T , $N_{\text{H}_2\text{O}}$, δD .

В результате получены оценки погрешности для данного метода решения обратной задачи. В качестве погрешности определения вертикальных профилей температуры, концентрации водяного пара и относительного содержания дейтерия использовались среднеквадратичные отклонения соответствующих исходных и восстановленных профилей. Погрешность определения температуры поверхности океана, оцененная по описанной схеме, составила менее 0,5 К. Полученные оценки для ошибки восстановления профиля температуры на разных высотах в тропо-

сфере лежат в пределах от менее 1 К до 2 К. Средняя ошибка для профиля концентрации водяного пара в тропосфере составила около 10%, погрешность для профиля δD в среднем по тропосфере — около 25%. В результате погрешность определения относительного содержания дейтерия в целом по атмосферному столбу предложенным методом составляет около 15%.

Сравнение с другими данными

Целесообразность в разработке различных методов для решения обратной задачи обусловлена некорректностью обратных задач, что может приводить к неоднозначности и неустойчивости получаемого решения. В связи с этим наличие нескольких методов для решения одной обратной задачи актуально [23], так как предоставляет возможность для получения «единственного» надежного решения при условии, что все решения, полученные разными методами, совпадают с приемлемой точностью в допустимом коридоре ошибок. В работе [24] исследовалась возможность решения обратной задачи для определения относительного содержания $\text{HDO}/\text{H}_2\text{O}$ в атмосфере из спектров сенсора TES (Tropospheric Emission Spectrometer) со спутника AURA. Диапазон этого сенсора 650–3050 см^{-1} , разрешение спектров 0,1 см^{-1} , спектральные данные при наблюдении в надир аналогичны спектрам, полученным сенсором IMG со спутника ADEOS. Коллективом авторов [24] была обработана выборка ~ 1100 спектров сенсора TES, измеренных в надир, с целью определения вертикальных профилей T , $N_{\text{H}_2\text{O}}$, δD . Для анализа использовались интервалы из участка 1150–1300 см^{-1} . Решение обратной задачи для определения δD из спектров TES осуществлялось с помощью распространенного в литературе метода оптимальной статистической оценки [25]. На рис. 4 представлены результаты сравнения данных по широтному распределению δD в атмосфере над Тихим океаном, полученных из спектров сенсора IMG методом ГК и из спектров сенсора TES методом оптимальной статистической оценки.

Обе кривые на рис. 4, полученные двумя различными и независимыми методами, качественно проявляют все характерные черты широтного распределения δD , получаемого в рамках изотопических версий моделей общей циркуляции атмосферы [10–12]: спад от экватора к полюсам и замедление скорости спада на высоких широтах, наличие «ямки» в районе экватора. Данные TES для Северного полушария очень хорошо согласуются количественно с результатами IMG настоящей работы. В Южном полушарии результаты согласуются (в пределах ошибки метода определения δD для атмосферного столба $\sim 15\%$) не для всех широт. Значительные отличия имеются в интервалах 5–15° ю.ш. и 45–65° ю.ш. В результате анализа имеющихся данных TES сделано предположение, что заметное отличие результатов для Южного полушария, вероятно, связано с тем, что они получены из спутниковых спектров TES

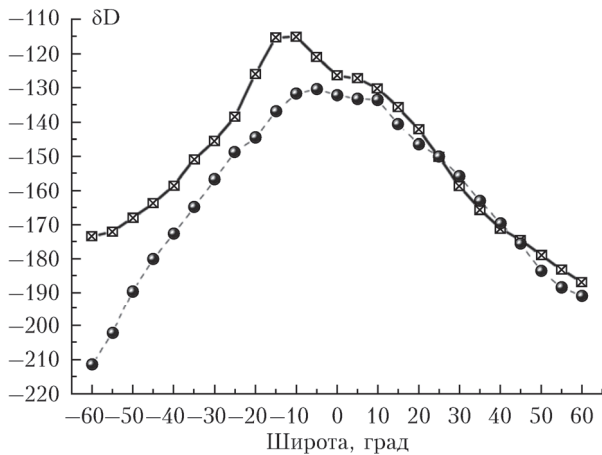


Рис. 4. Результаты, полученные МГК для широтного распределения отношения $\text{HDO}/\text{H}_2\text{O}$ в атмосфере над Тихим океаном по спектрам, измеренным сенсором IMG спутника ADEOS за период 12.1996–06.1997 (черные кружки), и по спектрам, измеренным сенсором TES спутника AURA за период 12.2004(05)–07.2005(06) (квадраты)

с недостаточной статистической представительностью (малая выборка спектров TES чистого неба для Южного полушария) за рассматриваемый период.

Заключение

Резюмируя изложенное, следует отметить, что предложенный метод главных компонент для решения обратной задачи по определению относительного содержания тяжелой воды в атмосферном водяном паре из спектров уходящего теплового излучения Земли, регистрируемых Фурье-спектрометрами высокого разрешения спутникового базирования, демонстрирует хорошую точность. Наряду с распространенным методом оптимальной статистической оценки, он может быть использован в качестве еще одного рабочего инструмента для задач глобального мониторинга тяжелой воды в атмосфере в задачах климатологии.

Авторы признательны Г. Шмидту за предоставление выходных данных изотопической модели общей циркуляции атмосферы NASA GISS ModelE и А.Ю. Топтыгину за обработку данных. Данные исследования выполнены при финансовой поддержке в рамках постановления № 211 Правительства Российской Федерации, контракт № 02.A03.21.0006, проекта № 2189 Минобрнауки РФ и грантов РФФИ № 16-51-50064, 15-01-05984а.

1. Kobayashi H. IMG program report // The Third ADEOS Symposium: Procs. Sendai, Japan. 1998. P. 65–82.
2. Beer R., Glavich T.A., Rider T.M. Tropospheric emission spectrometer for Earth Observing System's Aura satellite // Appl. Opt. 2001. V. 40, N 15. P. 2356–2367.
3. Tashkun S.A., Perevalov V.I., Teffo J.L. CDS-D-IASI, the high precision carbon dioxide spectroscopic databank: Version for METOP-IASI mission // Abstracts Proc. of ASA Int. Workshop. Reims, France, 2005, September 6–8. P. 95.
4. Hamazaki T., Kaneko Y., Kuze A. Carbon dioxide monitoring from the GOSAT satellite // Proc. of XXth ISPRS congress. 12–23 July, Istanbul, Turkey, 2004. P. 225–227.

5. Rothman L.S., Gordon I.E., Barbe A., Benner D.C., Bernath P.F., Birk M., Boudon V., Browng L.R., Campargue A., Champion J.-P., Chance K., Coudert L.H., Dana V., Devi V.M., Fally S., Flaud J.-M., Gamache R.R., Goldman A., Jacquemart D., Kleiner I., Lacombe N., Laferty W.J., Mandin J.-Y., Massie S.T., Mikhailenko S.N., Müller C.E., Moazzen-Ahmadi N., Naumenko O.V., Nikitin A.V., Orphali J., Perevalov V.I., Perrin A., Predoi-Cross A., Rinsland C.P., Rotger M., Šimecková M. The HITRAN-2008 molecular spectroscopic database // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2009. V. 110, iss. 9–10. P. 533–572.
6. Jacquinet-Husson N., Crepeau L., Armante R., Boutamine C., Chédin A., Scott N.A., Crevoisier C., Capelle V., Boone C., Poulet-Crovisier N., Barbe A., Campargue A., Benner D.C., Benilan Y., Bézard B., Boudon V., Brown L.R., Coudert L.H., Coustenis A., Dana V., Devi V.M., Fally S., Fayt A., Flaud J.-M., Goldman A., Herman M., Harris G.J., Jacquemart D., Jolly A., Kleiner I., Kleinböhl A., Kwabia-Tchana F., Lavrentieva N., Lacombe N., Li-Hong Xu, Lyulin O.M., Mandin J.-Y. The 2009 edition of the GEISA spectroscopic database // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2011. V. 112, N 15. P. 2395–2445.
7. Катаев М.Ю., Мицель А.А., Пташник И.В., Фурсов К.М. Методы и системы автоматизации. Обработка данных дистанционного зондирования. Пакет программ для моделирования и обработки данных дистанционного зондирования газового состава атмосферы // Оптика атмосф. и океана. 1996. Т. 9, № 10. С. 1412–1417.
8. Clerbaux C., Hadji-Lazaro J., Turquety S., Megie G., Coheur P.F. Trace gas measurements from infrared satellite for chemistry and climate applications // Atmos. Chem. Phys. Discuss. 2003. V. 3. P. 2027–2058.
9. Zakharov V.I., Imasu R., Gribanov K.G., Hoffmann G., Jouzel J. Latitudinal distribution of deuterium to hydrogen ratio in the atmospheric water vapor retrieved from IMG/ADEOS data // Geophys. Res. Lett. 2004. V. 31, N 12. P. 723–726.
10. Jouzel J., Russell G.L., Suozzo R.J., Koster R.D., White J.W.C., Broecker W.S. Simulation of the HDO and H_2^{18}O atmospheric cycles using the NASA GISS general circulation model: The seasonal cycle for present-day conditions // J. Geophys. Res. D. 1987. V. 92, N 12. P. 14739–14760.
11. Noone D. Evaluation of hydrologic cycles and processes with water isotopes // First pan-GEWEX science meeting. Frascati, Italy, October, 2006.
12. Werner M., Langebroek P., Carlsen T., Herold M., Lohmann G. Stable water isotopes in the ECHAM5 general circulation model: Towards high-resolution isotope modeling on a global scale // J. Geophys. Res. Atmos. 2011. V. 116. D15109.
13. Dansgaard W. Stable isotopes in precipitation // Tellus. 1964. V. 16, N 4. P. 436–468.
14. Дубров А.М. Обработка статистических данных методом главных компонент. М.: Статистика, 1978. 135 с.
15. Харман Г. Современный факторный анализ. М.: Статистика, 1972. 486 с.
16. Успенский А.Б., Романов С.В., Троценко А.Н. Применение метода главных компонент для анализа ИК-спектров высокого разрешения, измеренных со спутников // Исслед. Земли из космоса. 2003. № 3. С. 26–33.
17. Грибанов К.Г., Захаров В.И., Топтыгин А.Ю. Восстановление профилей температуры и влажности по ИК-спектрам Земли на основе сингулярного разложения ковариационных матриц // Оптика атмосф. и океана. 2003. Т. 16, № 7. С. 576–581.

18. Schmidt G.A., Ruedy R., Hansen J.E., Aleinov I., Bell N., Bauer M., Bauer S., Cairns B., Canuto V., Cheng Y., Del Genio A., Faluvegi G., Friend A.D., Hall T.M., Hu Y., Kelley M., Kiang N.Y., Koch D., Lacis A.A., Lerner J., Lo K.K., Miller R.L., Nazarenko L., Oinas V., Perlwitz J.P., Perlwitz J., Rind D., Romanou A., Russell G.L., Sato M., Shindell D.T., Stone P.H., Sun S., Tausnev N., Thresher D., Yao M.-S. Present day atmospheric simulations using GISS ModelE: Comparison to *in-situ*, satellite and reanalysis data // *J. Climate*. 2006. V. 19. P. 153–192.
19. Андерсон Т. Введение в многомерный статистический анализ М.: Физматгиз, 1963, 500 с.
20. Грибанов К.Г., Захаров В.И., Ташкун С.А. Пакет программ FIRE-ARMS и его применение в задачах пассивного ИК-зондирования атмосферы // *Оптика атмосф. и океана*. 1999. Т. 12, № 4. С. 372–378.
21. Грибанов К.Г., Захаров В.И. О возможности мониторинга содержания HDO/H₂O в атмосфере, используя наблюдения из космоса уходящего теплового излучения // *Оптика атмосф. и океана*. 1999. Т. 12, № 9. С. 858–860.
22. Муну М. Математическое программирование / Пер. с фр. М.: Мир, 1990. 488 с.
23. Васин В.В., Агеев А.Л. Некорректные задачи с априорной информацией. Екатеринбург: УИФ «Наука», 1993. 262 с.
24. Beer R., Clough S., Eldering A., Fisher B., Goldman A., Gunson M., Herman R., Kulawik S., Lampel M., Luo M., Osterman G., Rinsland C., Rodgers C., Sander S., Shephard M. Worden Tropospheric Emission Spectrometer observations of the tropospheric HDO/H₂O ratio: Estimation approach and characterization // *J. Geophys. Res. D*. 2006. V. 111, N 16. D16309. DOI: 10.1029/2005JD006606.
25. Rogers C.D. Inverse methods for atmospheric sounding. Theory and practice. Singapore, London: World Scientific, 2000. 206 p.

V.I. Zakharov, K.G. Gribanov, R. Imasu, D. Noone. Method of principal components for inverse problem of satellite sounding of heavy water in the atmosphere.

The paper presents a principal component (PC) method for solution of the inverse problem of retrieval of HDO to H₂O ratio in the atmosphere from spectra of outgoing Earth's heat radiation measured with high resolution Fourier spectrometers from satellites. The method is tested by using IMG/ADEOS spectrum data over target area of Pacific Ocean. Intercomparison of results of retrieval of latitudinal distribution of HDO to H₂O ratio in the atmosphere from the IMG spectrum data using PC method with the results obtained from TES/AURA spectrum data using conventional optimal estimation methodology is presented. Good agreement between the data in Northern hemisphere and some discrepancies in Southern hemisphere are discussed.