

## СПЕКТРОСКОПИЯ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ

УДК 551.521.32

# Вклад погрешностей параметров линий поглощения водяного пара в определение континуального поглощения в полосах 0,94 и 1,13 мкм

А.А. Симонова, И.В. Пташник\*

Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН  
634055, г. Томск, пл. Академика Зуева, 1

Поступила в редакцию 6.02.2019 г.

Исследуются восстановленные спектры континуального поглощения (континуума) в чистом водяном паре в полосах ближнего ИК-диапазона 0,94 и 1,13 мкм ( $10600$  и  $8800$   $\text{cm}^{-1}$ ). Континуум определялся как разность между спектрами поглощения водяного пара, измеренными с помощью Фурье-спектрометра, и модельными спектрами поглощения мономеров воды, рассчитанными на основе базы данных HITRAN2016. Сделана верхняя оценка погрешности восстановления коэффициентов континуума, которая обусловлена неточностью значений параметров спектральных линий в HITRAN2016. Показано, что эта погрешность превосходит другие виды погрешностей в исследованных полосах поглощения.

**Ключевые слова:** континуальное поглощение, водяной пар, параметры спектральных линий, полосы поглощения, ближний ИК-диапазон частот; continuum absorption, water vapor, spectral line parameters, absorption bands, near-IR spectral range.

## Введение

Взаимодействие электромагнитного излучения с молекулами воды в атмосфере связано с рядом важнейших процессов, которые обеспечивают условия для жизни на Земле. На сегодняшний день спектр поглощения излучения водяным паром изучен достаточно подробно, однако природа одной из его компонент по-прежнему до конца не ясна. Это так называемое континуальное поглощение водяного пара, или континуум, который характеризуется слабой зависимостью от частоты. Обнаруженные за все время исследований начиная с 1918 г. [1] уникальные спектральные особенности континуума позволяют идентифицировать его в спектре поглощения водяного пара (несмотря на относительно малый вклад) как в атмосферных окнах прозрачности, так и в полосах поглощения.

Известно, что прямая регистрация спектров континуального поглощения водяного пара в эксперименте, особенно в полосах поглощения, не представляется возможной. Для извлечения вклада континуума нужно из полного спектра поглощения вычлест локальный вклад спектральных линий. Настоящее исследование дополняет серию работ по изучению континуума водяного пара в полосах поглощения 0,94 и 1,13 мкм [2, 3]. Оно посвящено оценке погрешности восстановления континуума, обусловленной неточностью значений параметров спектраль-

ных линий мономеров воды, содержащихся в базе данных HITRAN2016 [4].

## Исходные данные

Ранее нами были восстановлены спектры континуального поглощения водяного пара в двух полосах поглощения 0,94 и 1,13 мкм [2]. Регистрация спектров поглощения водяного пара была выполнена в Rutherford Appleton Laboratory (Великобритания) с помощью Фурье-спектрометра Bruker IFS 125HR при повышенных температурах 398, 431 и 471 К, в широком диапазоне давлений  $p_{\text{self}}$  1–5 атм. Спектральное разрешение варьировалось от 0,1 до 0,4  $\text{cm}^{-1}$  в зависимости от давления и составляло  $\approx 0,2$ – $0,25$  от средней ширины спектральной линии. Локальный вклад спектральных линий мономеров воды рассчитывался методом *line-by-line* с использованием контура Фойгта, усеченного в пределах 25  $\text{cm}^{-1}$  от центра линий, и параметров линий из компиляции UCL-2010 [5]. В настоящей работе используются спектры континуума из эксперимента [2], но определенные на основе параметров линий воды из HITRAN2016 [4].

## Расчет погрешностей

Спектроскопическая база данных HITRAN содержит оценочные значения погрешностей основных параметров спектральных линий. Параметрам  $x$  ставятся в соответствие индексы погрешностей  $x_{\text{err}}$ , которые обозначают абсолютные (для положения

\* Анна Андреевна Симонова (saa@iao.ru); Игорь Васильевич Пташник (piv@iao.ru).

и сдвига центра линии) и относительные (для интенсивности линии, коэффициентов уширения и температурной зависимости коэффициента уширения воздухом) погрешности, выражаемые в  $\text{см}^{-1}$  и процентах соответственно.

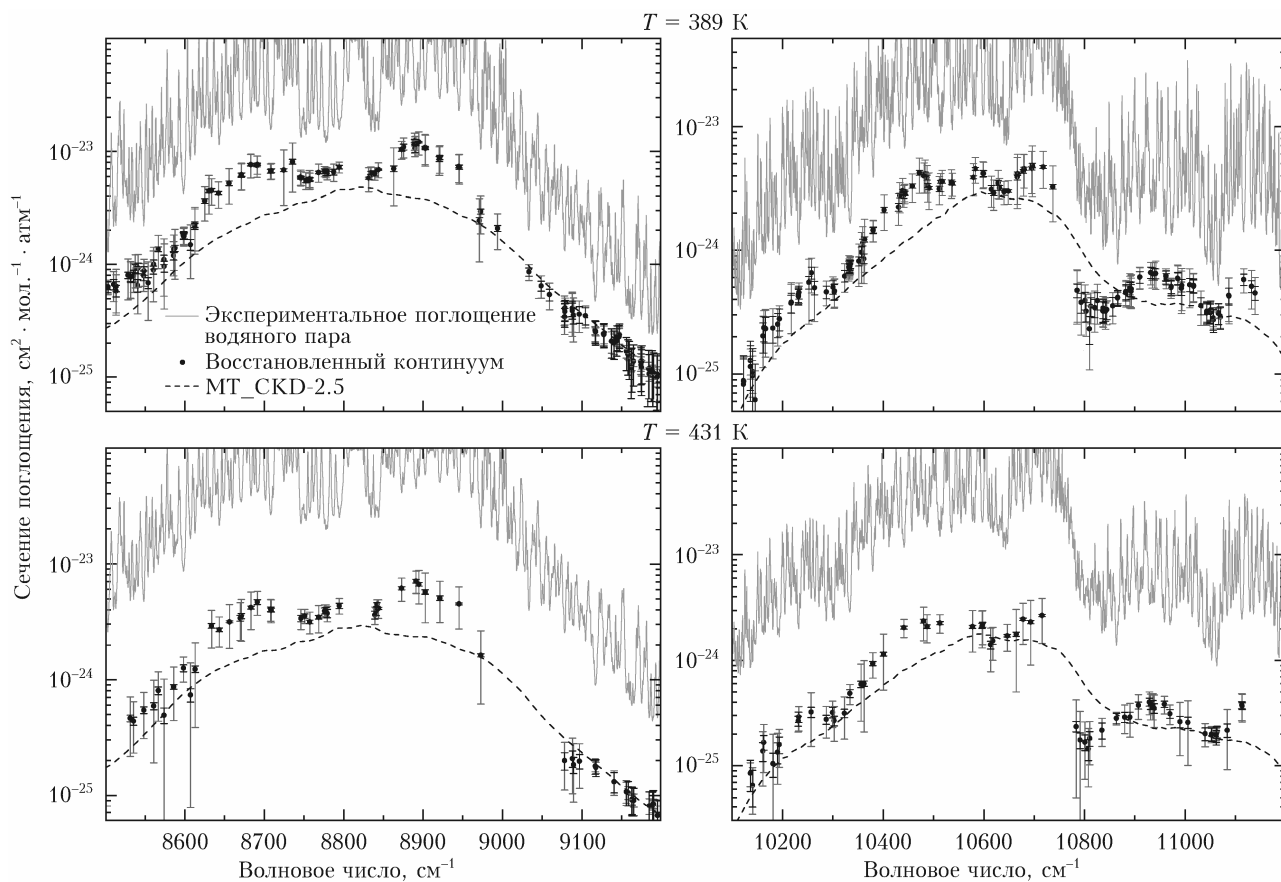
В работе [2] измерения проводились в чистом водяном паре, поэтому параметры линий, связанные с влиянием воздуха (сдвиг центра линии, индуцированный давлением воздуха, и полуширина линии, обусловленная уширением воздухом), и соответствующие им погрешности не учитывались. Температурная зависимость полуширины линии при уширении воздухом  $n_{\text{air}}$  использовалась для расчета при

самоуширению  $\gamma_{\text{self}}$ , поскольку температура является важным макропараметром наряду с давлением и концентрацией молекул, а информация об аналогичной зависимости при самоуширении  $n_{\text{self}}$  отсутствует в базе данных HITRAN.

Абсолютная погрешность, обусловленная неточностью значений параметров линий в HITRAN2016, рассчитывалась нами как модуль разности между спектром поглощения водяного пара  $\sigma_{\text{H}_2\text{O}}^{+\text{err}}$  [ $\text{см}^2 \cdot \text{мол.}^{-1} \cdot \text{атм}^{-1}$ ], при расчете которого использованы «искаженные» (на величину, соответствующую индексу погрешности в HITRAN) значения четырех параметров линий из HITRAN2016 (таблица),

**Формулы для расчета «искаженных» значений основных параметров спектральных линий с учетом индексов погрешностей в HITRAN2016**

Параметр спектральной линии	Формула
Положение центра линии $\nu$ , $\text{см}^{-1}$	$\nu_i^{+\text{err}} = \nu_i +  \nu_{\text{err}} $
Интенсивность линии $S$ , $\text{см} \cdot \text{мол.}^{-1}$	$S_i^{+\text{err}} = S_i \left( 1 + \frac{ S_{\text{err}} }{100} \right)$
Температурная зависимость полуширины линии $n_{\text{air}}$	$n_{\text{air}}^{+\text{err}} = n_{\text{air}} \left( 1 + \frac{ n_{\text{err}} }{100} \right)$
Полуширина при самоуширении $\gamma_{\text{self}}$ , $\text{см}^{-1}$	$\gamma_{\text{self}}^{+\text{err}} = \left( \frac{T_{\text{ref}}}{T} \right)^{n_{\text{air}}^{+\text{err}}} \gamma_{\text{err}} \left( 1 + \frac{ \gamma_{\text{err}} }{100} \right) p_{\text{self}}$



Спектры сечения поглощения водяного пара для двух полос и двух значений температуры: серая кривая — экспериментальное поглощение водяного пара; черные точки — восстановленный континуум; пунктирная линия — модель континуума MT\_CKD-2.5 [6]. Суммарная экспериментальная погрешность спектров поглощения, включая шум приемника и погрешность определения базовой линии, показана черным цветом, а погрешность, обусловленная неточными значениями параметров линий в HITRAN2016 [4], — красным (см. цветной рисунок на сайте: [ao.iao.ru/ru/content](http://ao.iao.ru/ru/content))

и спектром  $\sigma_{\text{H}_2\text{O}}$  с оригинальными (т.е. неискаженными) параметрами линий из HITRAN2016.

Важно отметить, что изменение значения полуширины линии  $\gamma_{\text{self}}$  в сторону ее увеличения приводит к «подседанию» контура в области центра линии и его возрастанию в крыльях линии. Поэтому для оценки максимальной погрешности (т.е. для верхней ее оценки) параметров линий, вносимой в спектр селективного поглощения, значение  $\gamma_{\text{self}}$  необходимо *уменьшать* на величину погрешности. Иначе одновременное увеличение значений  $\gamma_{\text{self}}$  и интенсивности линии  $S$  приведет к компенсации их суммарной погрешности. Но поскольку в настоящей работе нас интересовал вклад данных погрешностей в спектр восстановленного континуума (т.е. в крыльях линий), мы увеличивали  $\gamma_{\text{self}}$ .

## Результаты

Рисунок демонстрирует рассчитанные в настоящей работе погрешности (обозначены красным цветом) для двух исследованных полос поглощения и двух температур (398 и 431 К). Кроме того, черным цветом на графиках показана суммарная экспериментальная погрешность измерения спектров поглощения водяного пара (включая шум приемника и погрешность определения базовой линии), определенная в наших предыдущих работах.

Видно, что рассчитанные погрешности параметров линий в центрах полос преобладают над экспериментальными и потому должны учитываться в первую очередь. В окнах прозрачности континуум, как правило, значительно превышает селективное поглощение водяного пара в микроокнах, поэтому экспериментальная погрешность (и особенно погрешность определения базовой линии) является определяющей.

Значения погрешностей параметров линий в настоящей работе были определены за счет искусственного единообразного (т.е. только в сторону увеличения) завышения коэффициентов поглощения водяного пара на максимальную величину погрешностей из HITRAN2016. Очевидно, что эта оценка является верхней границей данного вида погрешностей. Случайный характер вариаций параметров линий в пределах погрешностей делает практически маловероятным систематическое максимальное завышение или занижение коэффициентов поглощения.

### *A.A. Simonova, I.V. Ptashnik. Contribution of the errors in line parameters to retrieval of the water vapor continuum absorption within 0.94 and 1.13 $\mu\text{m}$ bands.*

The retrieved continuum absorption spectra in pure water vapor within near-IR bands 0.94 and 1.13  $\mu\text{m}$  (10600 and 8800  $\text{cm}^{-1}$ ) are investigated. The continuum was determined as a difference between the water vapor absorption spectra measured using a Fourier transform spectrometer and absorption spectra of the water monomers calculated using the HITRAN2016 database. The work is aimed at estimation of the maximum error in retrieval of the continuum absorption coefficient, which is caused by uncertainty in spectral line parameters in HITRAN2016. It is shown that the calculated errors exceed other types of errors within the absorption bands under studied.

На практике более вероятен случай взаимной частичной компенсации рассмотренных погрешностей на определенных частотах за счет случайного отклонения параметров  $\nu$ ,  $S$ ,  $n_{\text{air}}$ ,  $\gamma_{\text{self}}$  от их истинных значений.

## Заключение

В работе получена оценка верхней границы погрешности восстановления континуального поглощения водяного пара, обусловленной неточностью значений параметров линий поглощения молекулы воды в базе данных HITRAN2016. Показано, что данная погрешность вносит наибольший вклад в спектры восстановленного континуума водяного пара в исследуемых полосах поглощения, варьируя в пределах 10–30%.

1. Hettner G. Über das ultrarote Absorptionsspektrum des Wasserdampfes // Ann. Phys. 1918. V. 360. P. 476–496.
2. Симонова А.А., МакФум Р.А., Пташник И.В., Смит К.М., Шайн К.П. Особенности континуального поглощения водяного пара в полосах 0,94 и 1,13 мкм // Оптика атмосф. и океана. 2015. Т. 28, № 10. С. 867–871.
3. Simonova A.A., Ptashnik I.V. Estimation of water dimers contribution to the water vapour continuum absorption within 0.94 and 1.13  $\mu\text{m}$  bands // Proc. SPIE. 2016. V. 10035. P. 100350K.
4. Gordon I.E., Rothman L.S., Hill C., Kochanov R.V., Tan Y., Bernath P.F., Birk M., Boudon V., Campargue A., Chance K.V., Drouin B.J., Flaud J.-M., Gamaiche R.R., Hodges J.T., Jacquemart D., Perevalov V.I., Perrin A., Shine K.P., Smith M.-A.H., Tennyson J., Toon G.C., Tran H., Tyuterev V.G., Barbe A., Császár A.G., Devi V.M., Furtenbacher T., Harrison J.J., Hartmann J.-M., Jolly A., Johnson T.J., Karman T., Klei-ner I., Kyuberis A.A., Loos J., Lyulin O.M., Massie S.T., Mikhailenko S.N., Moazzen-Ahmadi N., Müller H.S.P., Naumenko O.V., Nikitin A.V., Polyansky O.L., Rey M., Rotger M., Sharpe S.W., Sung K., Starikova E., Tashkun S.A., Vander Auwera J., Wagner G., Wilzewski J., Wcislo P., Yu S., Zak E.J. The HITRAN2016 molecular spectroscopic database // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2017. V. 203, N 1. P. 3–69.
5. Shillings A.J., Ball S.M., Barber M.J., Tennyson J., Jones R.L. An upper limit for water dimer absorption in the 750 nm spectral region and a revised water line list // Atmos. Chem. Phys. 2011. V. 10. P. 23345–23380.
6. Mlawer E.J., Payne V.H., Moncet J.L., Delamere J.S., Alvarado M.J., Tobin D.C. Development and recent evaluation of the MT\_CKD model of continuum absorption // Phil. Trans. R. Soc. A. 2012. V. 370. P. 2520–2556.