

Б.А. Воронин, И.М. Насретдинов, А.Б. Серебренников, Т.Ю. Чеснокова

Моделирование переноса солнечного излучения с учетом слабых линий поглощения водяного пара в различных аэрозольных условиях

Институт оптики атмосферы СО РАН, г. Томск

Поступила в редакцию 28.01.2003 г.

В настоящее время наблюдаются расхождения между измеренными и расчетными потоками солнечного излучения на поверхности Земли. Согласно последним исследованиям эти расхождения коррелируют с содержанием водяного пара. В статье рассматриваются результаты расчета вклада многочисленных слабых линий поглощения водяного пара, обычно не учитываемых в атмосферных приложениях, в освещенность земной поверхности и спектральную яркость неба. Моделирование пространственно-угловой яркости проводилось для нескольких спектральных интервалов в ближнем ИК- и видимом диапазонах для различных направлений визирования и положений Солнца. Оценки освещенности земной поверхности получены в диапазоне 4000–20000 см⁻¹. Для расчетов использовался метод Монте-Карло.

Введение

В настоящее время многие исследователи отмечают, что существует расхождение (до 20%) между рассчитанными и экспериментально измеренными радиационными потоками в атмосфере Земли даже в отсутствие облаков [1]. Возможными причинами этого расхождения могут быть недостаточно корректные модели рассеяния [1], неточное определение континуального поглощения атмосферных газов [2] и отсутствие в расчетах многочисленных слабых линий водяного пара [3].

В данной статье, являющейся продолжением [4], оценивается радиационный вклад слабых линий водяного пара из расчета Партриджа и Швенке [5, 6], не учитываемых в современных спектроскопических базах данных HITRAN [7] и GEISA [8]. В данной работе по сравнению с работой [4] в рассмотрение взят более широкий спектральный диапазон и получены оценки влияния этих линий на спектрально-угловую яркость неба в области горизонта. «Новые» линии, не учтенные в атласе HITRAN, почти все являются слабыми, но вследствие их большого числа суммарный вклад данных линий в ослабление солнечной радиации может быть достаточно заметным для длинных трасс и многократного рассеяния излучения.

Вклад слабых линий в перенос солнечной радиации рассматривался при моделировании освещенности земной поверхности и спектральной яркости неба для различных аэрозольных условий. Моделирование пространственно-угловой яркости проводилось для нескольких спектральных интервалов в ближнем ИК- и видимом диапазонах для различных направлений визирования и положений Солнца. Оценки освещенности земной поверхности сделаны в диапазоне 4000–20000 см⁻¹.

Критерии селекции спектральных линий

Для применения результатов вариационного расчета [5, 6] в оценках радиационного баланса атмосферы необходимо провести анализ точности *ab initio* расчетов интенсивностей линий: H₂¹⁶O, HDO, H₂¹⁷O и H₂¹⁸O.

Сравнивая спектроскопические банки данных (БД) по числу линий (табл. 1) и по спектральным диапазонам (табл. 2), можно видеть, что новый расчет [5, 6] представляет более детальную информацию по сравнению с другими базами данных. Здесь необходимо уточнить, что число линий для БД Швенке приводится для условий комнатной температуры и не учитываются линии с интенсивностью менее 10⁻³⁰ см/молек.

Таблица 1

Число линий изотопных модификаций
H₂O в различных БД

Банк данных	Изотопные модификации H ₂ O					
	H ₂ ¹⁶ O	H ₂ ¹⁸ O	H ₂ ¹⁷ O	HD ¹⁶ O	HD ¹⁷ O	HD ¹⁸ O
HITRAN-96	30117	6357	3744	9226	—	—
GEISA-97	30117	6357	3744	9799	—	200
HITRAN-2000	31646	7423	3755	8493	175	438
БД Швенке [5]	289806	64734	46003	96102,	—	—
[6]				939687		

Как видно из табл. 1 и 2, данные по БД Швенке значительно расширены по сравнению с другими банками данных, особенно для HDO, так как в [6] приводится новый, более точный расчет Партриджа и Швенке. Для оценок точности центров и интенсивностей расчета Швенке был произведен специальный анализ точности центров [9] и интенсивностей линий [10]. Анализ показал, что средняя погрешность для центров линий равна ~ 0,1 см⁻¹ и для интенсивностей ~ 20–50%.

Таблица 2

Спектральные диапазоны (см^{-1}) для изотопных модификаций H_2O в разных БД

Изотопные модификации H_2O	Банк данных			
	HITRAN-96	HITRAN-2000	Швенке-97	GEISA-97
H_2^{16}O	0,4–22656,4	0,4–22656,4	0,1–28279,3	0,4–22656,4
H_2^{17}O	6,5–11150,8	6,5–11144,0	0,1–17306,5	6,5–11150,8
H_2^{18}O	6,8–13900,4	6,8–13900,4	0,2–17299,2	6,8–13900,4
HD^{16}O :				
[5]	0,0–5507,5	0,0–5507,5	0,2–15704,4	0,0–5507,5
[6]			0,0–20101,4	
HD^{18}O	–	1173,8–1684,2	–	1231–1607
HD^{17}O	–	1234,2–1598,8	–	–

Концентрация изотопических модификаций HD^{18}O и HD^{17}O в атмосфере очень незначительна – 0,0000623 и 0,0000116% соответственно (для сравнения H_2^{16}O – 99,7317; H_2^{18}O – 0,199983%, H_2^{17}O – 0,0372; HD^{16}O – 0,031069%), т.е. данными по этим изотопам можно пренебречь.

Сравниваемые из БД Швенке и HITRAN-2000 линии считались идентичными, если совпадали: 1) вращательные квантовые числа J' , J'' нижнего и верхнего уровней энергии перехода; 2) тип симметрии верхнего и нижнего уровней энергии перехода, определяемый из колебательно-вращательных чисел J' , $K'_a - K'_c$, V'_3 и J'' , $K''_a - K''_c$, V''_3 соответственно; 3) значение частоты перехода (окно сравнения зависело от частоты перехода, частота ν (см^{-1}), деленная на 10000 см^{-1} ($d\nu = \nu/10000 \text{ см}^{-1}$)); 4) значение нижнего уровня энергии E (окно сравнения для нижнего уровня энергии бралось как для частоты перехода, но уменьшалось в 2 раза ($dE = d\nu/2$)).

В БД HITRAN-2000 около 2 тыс. линий водяного пара не имеют квантовой идентификации и несколько десятков линий не удалось сравнить с помощью процедуры, указанной выше. Для того чтобы сравнить оставшиеся линии, мы применили следующую процедуру. Из БД Швенке и БД HITRAN те линии считались совпадающими, для которых значение выражения $(\nu_{\text{Швенке}} - \nu_{\text{HITRAN}})^2 + \ln(I_{\text{Швенке}}/I_{\text{HITRAN}})$ было минимальным. Здесь I – интенсивность линии. В итоге мы сравнили 51317 линий и к ним добавили 448330 линий из БД Швенке.

В расчете [5] не приводятся данные по самоуширению, уширению воздухом и температурной зависимости сдвигов линий. В то же время делать высокоточные расчеты уширения для каждой линии по квантовым числам нецелесообразно: с одной стороны, это очень трудоемко и для большого объема не представляется возможным (линий ~500000), с другой стороны, для оценок поглощения в широком диапазоне в этом нет необходимости. Поэтому мы сделали усредненную по БД HITRAN J -зависимость уширения и самоуширения для H_2^{16}O и H_2O . Для более высоких J была сделана приблизительная экстраполяция, так как экспериментальных данных для J , равных 50 или 55, не существует на сегодняшний день. В частности, в БД HITRAN приводятся данные для H_2O по самоуширению и уширению воздухом

вплоть до $J = 20$, для H_2^{16}O по уширению воздухом до $J = 24$, по самоуширению до $J = 21$. Для изотопов H_2^{17}O и H_2^{18}O данные по уширению и самоуширению были взяты как для H_2^{16}O .

Оценка влияния слабых линий молекулярного поглощения на освещенность земной поверхности

Результаты, приведенные в данной статье, получены для той же схемы эксперимента, что и в [4]. Разница в том, что в настоящей работе существенно расширен спектральный интервал, в котором производится оценка освещенности для моделей с учетом и без учета поглощения слабыми линиями водяного пара (4000–20000 см^{-1}).

Для расчета освещенности земной поверхности была выбрана плоскостратифицированная модель системы «атмосфера–подстилающая поверхность» (рис. 1) и использовались две модели оптических свойств атмосферы. Это модель городского аэрозоля с метеорологической дальностью видимости (МДВ) в приземном слое аэрозольной атмосферы, равной 5 км, и модель адвективного тумана с метеорологической дальностью видимости 2 км [12].

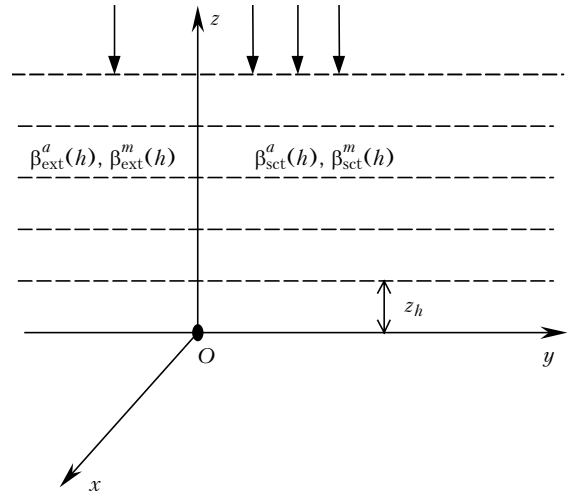


Рис. 1. Геометрическая схема эксперимента: $\beta_{\text{ext}}^a(h)$ и $\beta_{\text{ext}}^m(h)$ – коэффициенты аэрозольного и молекулярного ослабления; $\beta_{\text{sct}}^a(h)$ и $\beta_{\text{sct}}^m(h)$ – коэффициенты аэрозольного и молекулярного рассеяния; z_h – толщина слоя

Численная имитация методом Монте-Карло процесса распространения излучения в молекулярно-аэрозольной атмосфере осуществлена прямым моделированием. Этот выбор обусловлен простотой метода и его низкой трудоемкостью при расчетах освещенности земной поверхности на заданной длине волны λ [11, 13].

При учете молекулярного поглощения использовался метод k -распределения [14], что существенно сократило время вычислений по сравнению с методом line-by-line. Поэтому потребовалось провести вычисления только 10 оценок E_j (вместо 10000, если бы

использовался метод line-by-line с тем же разрешением) методом Монте-Карло для каждого из 160 интервалов длиной $\Delta\nu = 100 \text{ см}^{-1}$ по формуле

$$I = \Delta\nu \sum_{i=1}^{10} C_i I_i S_i,$$

где C_i – коэффициенты параметризации; S_i – значение солнечной постоянной на спектральном интервале $\Delta\nu$, $\text{Вт}\cdot\text{см}^{-1}/\text{м}^2$.

Результаты расчета представлены на рис. 2. Относительный вклад δF слабых линий поглощения H_2O в освещенность земной поверхности на отдельных интервалах шириной 100 см^{-1} достигает 1,6% в области слабых полос поглощения.

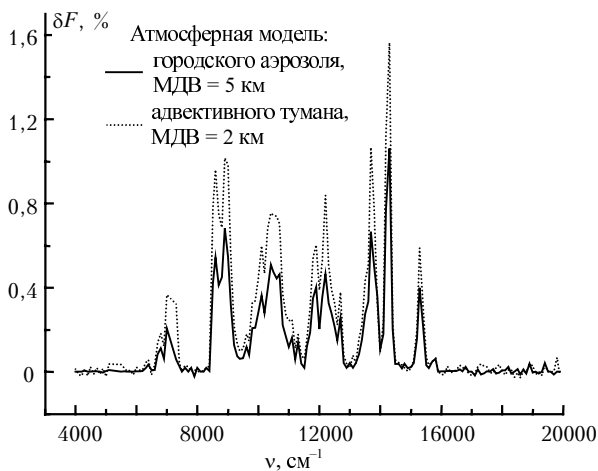


Рис. 2. Относительный вклад слабых линий H_2O в освещенность поверхности Земли солнечным излучением

Отсутствие существенного вклада слабых линий в частотном диапазоне $4000\text{--}6500 \text{ см}^{-1}$ вызвано сильным молекулярным поглощением, что значительно уменьшает долю рассеянной радиации, дошедшей до земной поверхности. На интервале $16000\text{--}20000 \text{ см}^{-1}$ наблюдается похожая картина. Однако причиной этого является сильное уменьшение интенсивности поглощения водяного пара (и в том числе его слабых линий) на фоне равномерного роста аэрозольной ослабляющей компоненты.

Моделирование спектрально-угловой яркости неба с учетом и без учета поглощения слабыми линиями водяного пара

Одним из часто используемых методов восстановления оптических характеристик атмосферы является метод, основанный на интерпретации данных измерений спектрально-угловой яркости неба. Для того чтобы оценить влияние слабых линий поглощения водяного пара, нами было проведено численное моделирование работы солнечного фотометра. Рассматривалась следующая геометрия эксперимента. Узконаправленный приемник (угол поля зрения $\approx 1^\circ$) ориентирован на горизонт (ξ_{det} – зенитный угол де-

тектора, равный $89,5^\circ$). Солнце находится в некоторой точке неба ($\xi_0 = 75$ и 80°), сканирование ведется по азимуту с постоянным зенитным углом приемника. Атмосфера предполагается сферической и разбитой на слои, в пределах которых характеристики среды остаются неизменными. Коэффициенты молекулярного поглощения рассчитывались на каждом атмосферном слое с постоянными температурой, давлением и концентрацией газов. Учитывались основные поглощающие атмосферные газы: H_2O , CO_2 , O_3 , N_2O , CO , CH_4 , O_3 .

Для ускорения расчетов спектральной яркости с учетом поглощения в спектральных интервалах, определяемых характеристиками фильтров, также использовался метод k -распределения. В отличие от предыдущих расчетов освещенности земной поверхности, где на интервалах шириной 100 см^{-1} солнечное излучение предполагалось неизменным, в данных расчетах яркости ширина спектральных интервалов принимает большие значения (1000 см^{-1} и более) и солнечное излучение уже существенно меняется в пределах полосы пропускания фильтра, что показано на рис. 3.

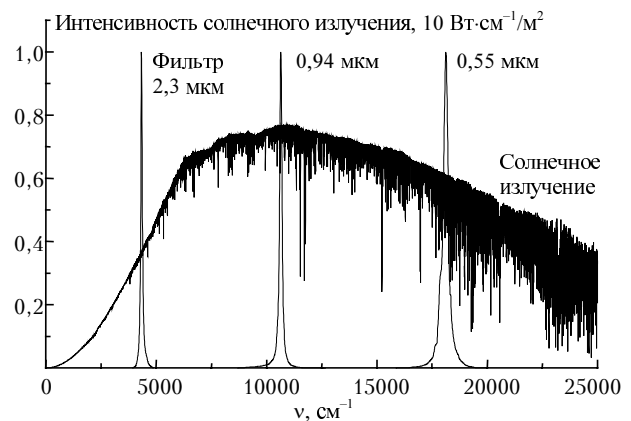


Рис. 3. Спектр излучения Солнца и спектральные диапазоны фильтров солнечного фотометра

Поэтому в параметрические коэффициенты, учитывающие молекулярное поглощение, были добавлены спектральные характеристики фильтра и солнечной постоянной:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\nu_2 - \nu_1} \int_{\nu_1}^{\nu_2} S(\nu) f(\nu) \exp[-k(\nu)] d\nu = \\ & = C_0 \int_0^1 \exp(-k(g)) dg = \sum_{i=1}^{10} C_i \exp(-k_i), \end{aligned}$$

где $S(\nu)$ – солнечная постоянная, $\text{Вт}\cdot\text{см}^{-1}/\text{м}^2$; $f(\nu)$ – аппаратная функция фильтра, нормированная на единицу; k – коэффициент молекулярного поглощения, км^{-1} .

Предварительные оценки метода k -распределения показали, что и для больших спектральных интервалов достаточно 10 квадратур, чтобы погрешность параметризации не превысила 0,5%. Такая точность учета молекулярного поглощения позволяет достоверно оценить вклад слабых линий водяного пара.

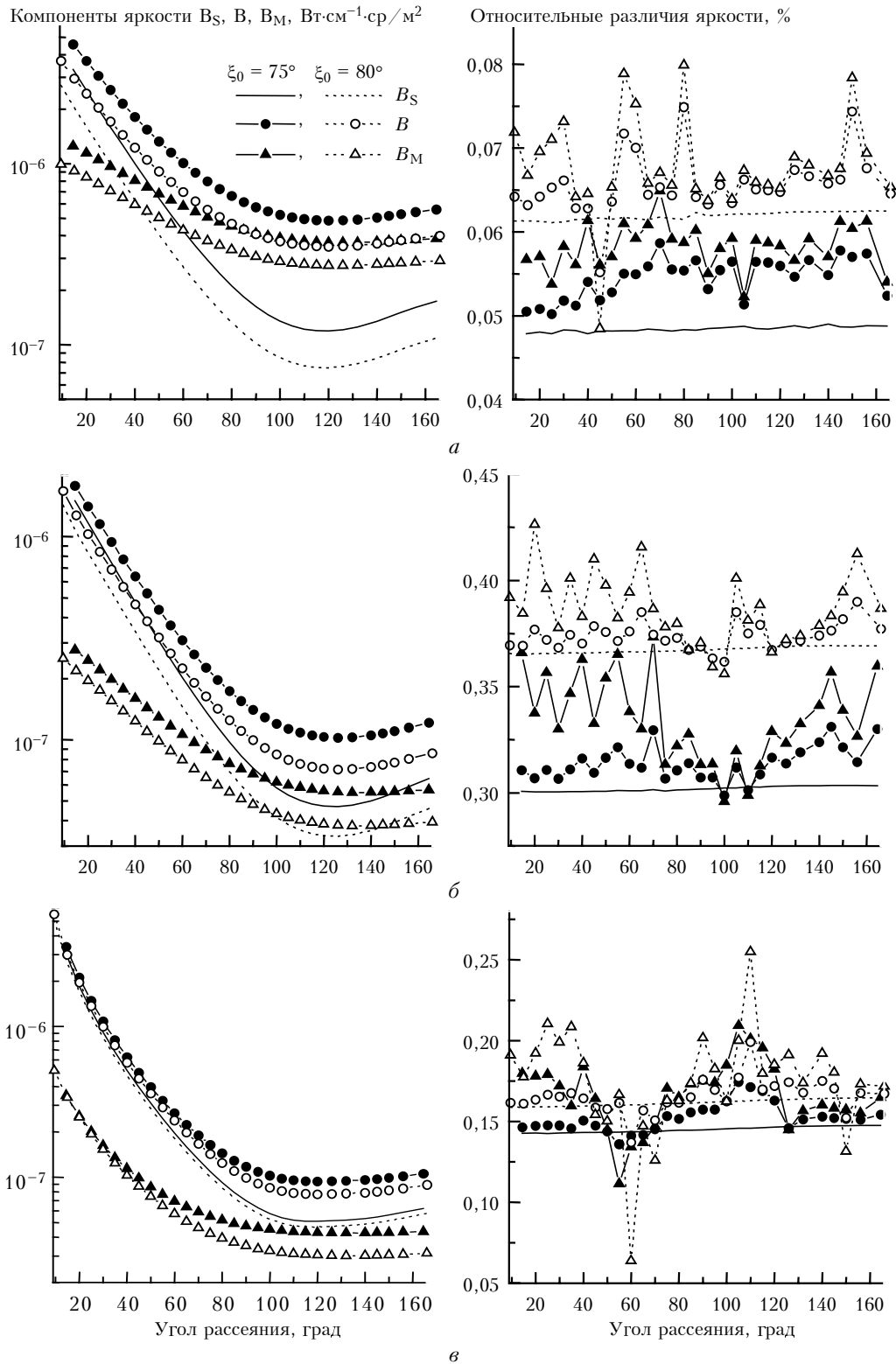


Рис. 4. Угловые зависимости компонент яркости с учетом поглощения слабыми линиями водяного пара (слева) и относительный вклад этих линий в яркость (справа). $A_s = 0,2$, $\xi_{det} = 89,5^\circ$: *a* – фильтр 0,55 мкм, $\omega_0 = 0,891$, оптические толщи аэрозоля $\tau_a = 0,17$ и молекулярного рассеяния $\tau_R = 0,1$; *b* – 0,94 мкм, $\omega_0 = 0,827$, $\tau_a = 0,09$, $\tau_R = 0,01$; *v* – 2,3 мкм, $\omega_0 = 0,758$, $\tau_a = 0,027$, $\tau_R = 0,0003$

Моделирование проводилось для трех фильтров, пропускающих солнечное излучение в спектральных интервалах: $0,55(\pm 0,02)$, $0,94(\pm 0,05)$ и $2,3(\pm 0,1)$ мкм,

для каждого из которых задавались собственные атмосферные параметры: альbedo однократного рассеяния ω_0 , альbedo подстилающей поверхности A_s ,

индикатриса аэрозольного рассеяния $g^a(\theta)$, коэффициенты аэрозольного ослабления, молекулярного рассеяния и газового поглощения. Численные расчеты проводились для однократной B_S , многократной B_M и суммарной B компонент яркости. Угловая зависимость этих компонент яркости от зенитного угла Солнца ξ_0 и относительный вклад слабых линий водяного пара из данных Партриджа–Швенке в яркость приведены на рис. 4.

Анализ полученных результатов показал, что для длины волны 0,55 мкм различия между интенсивностями, рассчитанными с учетом и без учета поглощения слабыми линиями водяного пара, составляют менее 0,1% (рис. 4,а), для других длин волн (0,94 и 2,3 мкм) различия несколько больше, но тем не менее остаются в пределах 0,5% (рис. 4,б,в). Нужно отметить, что эти различия увеличиваются с ростом зенитного угла Солнца, что можно объяснить увеличением относительного вклада слабых линий в общее поглощение с ростом длины трассы.

Заключение

Учет слабых линий водяного пара, обычно не используемых в атмосферных расчетах, в диапазоне 4000–20000 см⁻¹ дает дополнительный вклад в освещенность земной поверхности солнечным излучением до 1,6% на спектральных интервалах шириной 100 см⁻¹ в области 0,7 мкм. Тем не менее при моделировании яркости, измеряемой солнечным фотометром, слабые линии водяного пара оказывают меньшее влияние (до 0,5%) на перенос излучения из-за более широких полос пропускания фильтров и положения центра фильтра, выбранного в диапазонах слабого поглощения водяным паром специально для задач восстановления оптических характеристик аэрозоля.

Авторы выражают благодарность за полезные обсуждения и советы К.М. Фирсову, С.М. Сакерину и Т.Б. Журавлевой.

Работа была поддержана грантом ИОА СО РАН, грантами РФФИ № 00-05-65152а, 02-07-90139в, 02-05-64492.

1. Stephens G.L., Si-Chee Tsay. On the cloud absorption anomaly // Quart. J. Roy. Meteorol. Soc. 1990. V. 116. P. 671–704.
2. Несмелова Л.И., Пхалагов Ю.А., Родимова О.Б., Творогов С.Д., Ужегов В.Н., Щелканов Н.Н. К вопросу о природе атмосферного аномального поглощения коротковолновой радиации // Оптика атмосфер. и океана. 1999. Т. 12. № 3. С. 288–293.
3. Быков А.Д., Воронин Б.А., Науменко О.В., Синица Л.Н., Фирсов К.М., Чеснокова Т.Ю. Вклад слабых

линий поглощения водяного пара в ослабление коротковолнового излучения // Оптика атмосфер. и океана. 1999. Т. 12. № 9. С. 787–790.

4. Воронин Б.А., Серебренников А.Б., Чеснокова Т.Ю. Оценка роли слабых линий поглощения водяного пара в переносе солнечного излучения // Оптика атмосфер. и океана. 2001. Т. 14. № 9. С. 788–791.
5. Partridge H., Schwenke D. The determination of an accurate isotope dependent potential energy surface for water from extensive *ab initio* calculations and experimental data // J. Chem. Phys. 1997. V. 106. N. 11. P. 4618–4639.
6. <http://george.arc.nasa.gov/~dschwenke/>
7. Rothman L.S., Rinsland C.P., Goldman A., Massie S.T., Edwards D.P., Flaud J.-M., Perrin A., Camy-Peyret C., Dana V., Mandin J.-Y., Schroeder J., Mccann A., Gamache R.R., Wattson R.B., Yoshino K., Chance K.V., Jucks K.W., Brown L.R., Nemtchinov V., Varanasi P. The HITRAN molecular spectroscopic database and HAWKS (HITRAN Atmospheric Workstation): 1996 edition // JQSRT. 1998. V. 60. № 6. P. 665–710.
8. Jacquinet-Husson N., Arie E., Ballard J., Barbe A., Bjoeraker G., Bonnet B., Brown L.R., Camy-Peyret C., Champion J.P., Chedin A., Chursin A., Clerbaux C., Duxbury G., Flaud J.-M., Fourrie N., Fayt A., Granger G., Gamache R., Goldman A., Golovko V., Guelachvili G., Hartmann J.M., Hilico J.C., Hillman J., Lefevre G., Lellouch E., Mikhailenko S.N., Naumenko O.V., Nemtchinov V., Newham D.A., Nikitin A., Orphal J., Perrin A., Reuter D.C., Rinsland C.P., Rosenmann L., Rothman L.S., Scott N.A., Selby J., Sinitza L.N., Sirota J.M., Smith A.M., Smith K.M., Tyuterev V.I., Tipping R.H., Urban S., Varanasi P., Weber M. The 1997 spectroscopic GEISA databank // JQSRT. 1999. V. 62. N. 2. P. 205–254.
9. Воронин Б.А. Анализ экспериментальных спектров и расчетов *ab initio* водяного пара // Изв. вузов. Физ. 1999. № 3. С. 93–100.
10. Воронин Б.А., Чеснокова Т.Ю., Воронина С.С. Анализ базы данных HITRAN-2000 и *ab initio* вычисления водяного пара // Тезисы докл. Международной конференции «Моделирование, базы данных и информационные системы для атмосферных наук». 25–29 июня 2001 г. Иркутск. С. 14.
11. Зуев В.Е., Белов В.В., Веретинников В.В. Теория систем в оптике дисперсных сред. Томск: Изд-во СО РАН, 1997. 402 с.
12. Kneizys F.X., Abreu L.W., Anderson G.P., Chetwynd J.H., Selby J.E.A., Shettle E.P., Gallery W.O., Clough S.A. User Guide to LOWTRAN 7. AFGL-TR-88-0177. ERP N 1010 / Nanscom AFB, MA01731.
13. Метод Монте-Карло в атмосферной оптике / Под ред. акад. Г.И. Марчука. Новосибирск: Наука, 1976. 216 с.
14. Фирсов К.М., Чеснокова Т.Ю., Белов В.В., Серебренников А.Б., Пономарев Ю.Н. Применение метода *k*-распределения при решении уравнения переноса коротковолнового излучения в пространственно неоднородной среде // Оптика атмосфер. и океана. 2001. Т. 14. № 9. С. 776–781.

B.A. Voronin, I.M. Nasretdinov, A.B. Serebrennikov, T.Yu. Chesnokova. Simulation of solar radiation transfer with allowance for weak water vapor absorption lines under different aerosol conditions.

At present some differences are observed between measured and calculated fluxes of solar radiation at the Earth's surface. According to recent investigations these differences correlate with columnar water vapor. The results of calculation of the contribution of numerous weak absorption lines of water vapor, which usually are not taken into account as applied to atmospheric radiation problems, to the irradiance of the Earth's surface and spectral brightness of sky are considered. Spatial-angular brightness was modeled in several spectral intervals of near IR and visible ranges at different vision directions and Sun positions. Irradiance of the Earth's surface was estimated in the range of 4000–20000 cm⁻¹. The Monte Carlo method was used for calculations.