

ОПТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ И БАЗЫ ДАННЫХ ОПТИЧЕСКОЙ ИНФОРМАЦИИ
ОБ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЕ

УДК 535; 504.32

**Влияние обновления информации по параметрам
линий поглощения атмосферных газов
на результаты моделирования потоков
теплового излучения в атмосфере**

Т.Ю. Чеснокова^{✉1}, К.М. Фирсов^{2*}

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

²Волгоградский государственный университет
400062, г. Волгоград, пр. Университетский, 10

Поступила в редакцию 9.03.2023 г.;
после доработки 30.03.2023 г.;
принята к печати 10.05.2023 г.

Точность расчета радиационных характеристик в задачах прогноза климата зависит от качества используемой спектроскопической информации. Современные спектроскопические базы данных по параметрам линий атмосферных газов и модели континуального поглощения периодически обновляются, поэтому необходимо проводить оценки, насколько существенны эти обновления при решении задач переноса излучения в атмосфере Земли и потребуют ли эти обновления модернизации радиационных блоков климатических моделей. В работе проведены массовые расчеты нисходящих и восходящих ИК-потоков для метеорологических условий, наблюдаемых в летние месяцы в Нижнем Поволжье и зимние месяцы в Новосибирске, а также для среднезональных метеомоделей. Выполнено сравнение потоков и скоростей радиационного выхолаживания на различных уровнях в атмосфере, вычисленных с новыми версиями спектроскопических баз HITRAN и GEISA и предыдущими версиями. Показано, что различие в параметрах линий поглощения в спектроскопических базах данных приводит к погрешности менее 0,7 Вт/м² (0,3%) при моделировании интегральных ИК-потоков в диапазоне 0–3000 см⁻¹, при этом относительные различия в спектральных потоках, вычисленных с умеренным разрешением (20 см⁻¹), составляют до 10%. Выявлены атмосферные газы и спектральные интервалы, дающие наибольший вклад в погрешности моделирования ИК-потоков за счет неопределенностей исходной спектроскопической информации.

Ключевые слова: атмосферный радиационный перенос, потоки ИК-излучения, спектроскопические базы данных; atmospheric radiative transfer, IR radiative flux, spectroscopic database.

Введение

Спектроскопические базы данных (БД) HITRAN и GEISA периодически обновляются, поэтому по мере появления новых данных о параметрах спектральных линий необходимо оценивать, насколько существенны эти изменения при моделировании радиационного переноса в атмосфере Земли и при каком спектральном разрешении это будет проявляться. Наиболее чувствительны к изменениям спектроскопических параметров линий поглощения задачи дистанционного зондирования газового состава атмосферы приборами высокого спектрального разрешения [1, 2], когда применяются методы прямого счета *line-by-line*.

В задачах глобального спутникового зондирования атмосферы и поверхности Земли приборами со средним спектральным разрешением такие методы неприемлемы, так как вычисления требуют слишком много времени. В этом случае для описания характеристик молекулярного поглощения используются параметрические методы. Для того чтобы определить параметры таких моделей, необходимо проводить массовые расчеты переноса излучения в атмосфере Земли прямыми методами *line-by-line* для различных метеорологических условий, а затем на основе полученных таблиц определять параметры модели. Это достаточно трудоемкая работа, и такого сорта модели обновляются достаточно редко. Вышесказанное касается и радиационных блоков в моделях общей циркуляции атмосферы и прогнозирования климата.

Регулярные оценки различий в радиационных потоках из-за обновления информации

* Татьяна Юрьевна Чеснокова (ches@iao.ru); Константин Михайлович Фирсов (fkm.volsu@mail.ru).

в спектроскопических БД помогают выявить, когда необходимо модернизировать радиационные блоки в климатических моделях. Также они важны при валидации измерений спутниковыми ИК-спектрометрами, регистрирующими уходящее излучение Земли и атмосферы. Такие оценки были сделаны в работах Mingwei Zhu et al. [3], Г.Э. Колокутина, Б.А. Фомина [4] и наших работах [5, 6]. В [3] было показано, что различия в интегральных ИК-потоках, восходящих на верхней и нисходящих на нижней границах атмосферы, при использовании версий спектроскопической БД HITRAN2008, 2012, 2016 не превышали $0,65 \text{ Вт/м}^2$ для стандартных метеомоделей AFGL, причем для HITRAN2012 и HITRAN2016 различие было меньше $0,1 \text{ Вт/м}^2$. Однако спектральные потоки, рассчитанные с использованием различных версий БД HITRAN, могут значительно отличаться. В [3] было отмечено, что различие в модельных спектральных яркостных температурах в отдельных каналах (например, $1190\text{--}2200 \text{ см}^{-1}$) гиперспектрального спутникового прибора FY-3D HIRAS (Hyperspectral Infrared Atmospheric Sounder) все еще превышает эквивалентную шуму температуру NETD и, следовательно, это различие нужно учитывать в гиперспектральном спутниковом зондировании. Моделирование [4] показало, что различие в модельных яркостных температурах за счет использования HITRAN2008, HITRAN2012 и GEISA2011 может достигать 1 К в каналах спутникового Фурье-спектрометра IASI, при этом замена на более новую версию спектроскопической БД несколько улучшает согласие между расчетными и измеренными спектрами, но расхождения все еще остаются. Тем не менее в задачах определения источников и стоков атмосферного углекислого газа точность моделирования переноса излучения полинейным методом должна быть около 0,2 К в единицах яркостной температуры [4]. Дальнейшие улучшения согласия в тепловом диапазоне предлагается достигать за счет применения «нефойгтовских» контуров линий поглощения.

Другим возможным источником спектроскопических погрешностей при вычислении переноса ИК-излучения в атмосфере являются неопределенности в моделях континуума водяного пара. Ранее в нашей работе [7] проводились оценки влияния континуального поглощения водяного пара в атмосфере на радиационный форсинг углекислого газа за счет увеличения концентрации CO_2 от 330 до 395 ppm на основе массовых расчетов потоков теплового излучения для летних месяцев 2021 г. в регионе Нижнего Поволжья. Наши расчеты показали, что различия в радиационном форсинге CO_2 на нижней границе атмосферы, обусловленные использованием разных моделей континуума H_2O , достигают 2%, тогда как для верхней границы атмосферы эти различия существенно меньше.

В 2021 г. вышли новые версии спектроскопических БД HITRAN2020 [8] и GEISA2020 [9]. Цель настоящей работы — оценить влияние обновления баз данных по параметрам линий поглощения на результаты моделирования атмосферного пропуска-

ния и потоков ИК-излучения на основе массовых расчетов для реальных атмосферных условий.

Вычисление атмосферного пропускания

Для сравнения информации по линиям поглощения атмосферных газов в различных версиях спектроскопических баз данных HITRAN [8, 10–12] и GEISA [9, 13] были выполнены расчеты атмосферного пропускания методом *line-by-line* [14] на вертикальной трассе через всю атмосферу со спектральным разрешением $0,01 \text{ см}^{-1}$. В расчетах использовались прямоугольная аппаратная функция и контур линий Фойгта. В тепловом диапазоне водяной пар и углекислый газ являются основными газами, у которых изменения в параметрах линий поглощения в современных спектроскопических БД могут значимо влиять на вычисления потоков излучения и скорости выхолаживания атмосферы [3]. Пример сравнения пропускания при поглощении водяным паром представлен на рис. 1. Для отдельных линий различия в пропускании, вычисленном с данными из GEISA2020, GEISA2015 и HITRAN2020, могут достигать 0,2 и более. Как видно из рис. 1, для H_2O в тепловом диапазоне различие между новыми версиями известных спектроскопических БД GEISA2020 и HITRAN2020 намного больше, чем различие между HITRAN2020 и его предыдущей версией HITRAN2016.

Моделирование ИК-потоков в атмосфере

С помощью различных версий БД HITRAN (2008, 2012 и 2020) и GEISA2020 мы провели моделирование восходящих и нисходящих потоков ИК-излучения в атмосфере и сравнили их. Для расчета длинноволновых потоков и скорости радиационного выхолаживания атмосферы на произвольных уровнях по высоте нами была разработана модель FluxLW на основе быстрого метода *k*-распределения. Детальное описание модели учета молекулярного поглощения приведено в [15]. Из-за трудоемкости прямые методы расчета имеют ограниченное применение, поэтому для задач, требующих высокой скорости, было решено применять метод рядов экспонент (метод *k*-распределения [16]). Для каждого газа, поглощающего в заданном спектральном подинтервале, проводился расчет методом *line-by-line* на основе различных спектроскопических БД, затем осуществлялось преобразование Лапласа и рассчитывались кумулятивные коэффициенты поглощения для заданных температур и давления. Учитывалось поглощение основными атмосферными газами H_2O , CO_2 , O_3 , N_2O , CO , CH_4 , а также континуальное поглощение H_2O с использованием модели MT_CKD3.3 [17]. Отличие аппроксимации функции пропускания методом *k*-распределения от результатов прямого расчета *line-by-line* для однородного слоя, как правило, не превышает 0,3% [18]. Для параметризации оптической толщины в неоднородной атмосфере использовалось приближение *c-k*-корреляции. В работах [16, 19] показано, что для длинно-

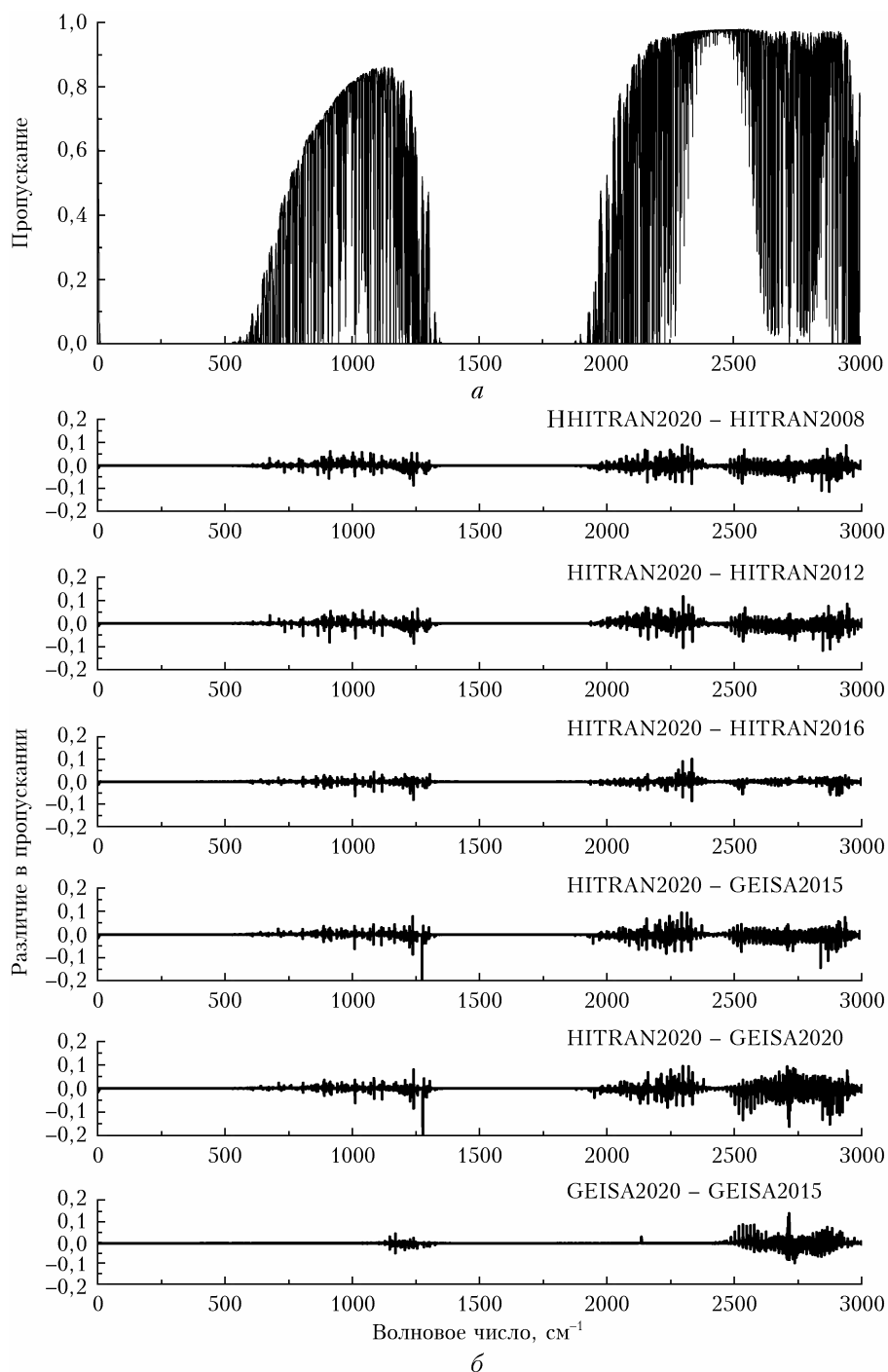


Рис. 1. Атмосферное пропускание H₂O (а) и различие в атмосферном пропускании, вычисленном с линиями поглощения H₂O из различных версий спектроскопических БД HITRAN и GEISA на вертикальной трассе через всю атмосферу для метеомодели лета средних широт (б). Спектральное разрешение 0,01 см⁻¹

волнового диапазона в спектральных интервалах шириной 10–100 см⁻¹ с большим количеством линий это приближение дает погрешность расчета функции пропускания не более 1% в атмосферных условиях.

Коэффициент поглощения является функцией давления и температуры, поэтому была создана БД кумулятивных (параметрических) коэффициентов поглощения. Для этого в диапазоне высот 0–100 км

были выделены 36 уровней по давлению (от 10⁻³ до 10⁴ мбар) и 18 уровней по температуре, которые перекрывали диапазон температур от 160 до 330 К. Спектральный диапазон от 0 до 3000 см⁻¹ разбивался на подинтервалы по 20 см⁻¹, в каждом из которых использовались 10 квадратур Гаусса и определялись 10 значений кумулятивных коэффициентов поглощения. При моделировании потоков излучения

коэффициенты поглощения для заданного вертикального профиля температуры и давления воздуха рассчитывались посредством линейной интерполяции из БД кумулятивных коэффициентов поглощения. Перекрывание полос поглощения учитывалось наиболее простым и традиционным способом в виде произведения функций пропускания. Согласно нашим оценкам погрешность такого приближения составляет обычно менее 1%. Для интегрирования по высоте была выбрана оптимальная неравномерная сетка высот с более частым шагом в нижних слоях атмосферы, постепенно увеличивающимся с высотой, что позволило ускорить время расчетов при сохранении точности интегрирования. Шаг сетки подбирался пропорционально логарифму давления [20]. Для точности 0,1 Вт/м² в ИК-потоках минимальное число узлов интегрирования по высоте при такой сетке составляет около 200 [18].

Были сделаны расчеты восходящих и нисходящих потоков излучения для атмосферных моделей лета и зимы средних широт и тропической модели AFGL [21]. Результаты вычисления интегральных ИК-потоков для различных метеомоделей и спектроскопических БД HITRAN2020, HITRAN2012, HITRAN2008 и GEISA2020 представлены в табл. 1, а спектральные потоки — на рис. 2–4.

Расчеты с HITRAN2016 очень близки к расчетам HITRAN2020, поэтому здесь не приводятся. Как показано в табл. 1, минимальные различия наблюдались между результатами расчетов с использованием БД HITRAN2020 и GEISA2020, расхождения в потоках не превышали 0,07 Вт/м². Немногим большие различия наблюдались между потоками излучения, рассчитанными с БД HITRAN2020 и HITRAN2008.

Наибольшие различия наблюдались между результатами расчетов с использованием HITRAN2020 и HITRAN2012 либо между HITRAN2008 и HITRAN2012. Максимальное различие в нисходящих потоках у поверхности Земли составило 0,68 Вт/м² (0,3%) для зимы средних широт. Для лета средних широт максимальное различие в интегральных восходящих потоках на верхней границе атмосферы за счет использования разных спектроскопических БД составило 0,64 Вт/м² (0,2%), тогда как для нисходящих потоков оно было почти на порядок меньше — 0,09 Вт/м² (0,03%).

В спектральных потоках, в отличие от интегральных, наблюдались большие различия за счет использования разных спектроскопических БД.

На рис. 2 представлены спектральные восходящие потоки ИК-излучения на верхней границе атмосферы и нисходящие потоки у поверхности Земли, вычисленные со спектральным разрешением 20 см⁻¹ для метеомодели лета средних широт.

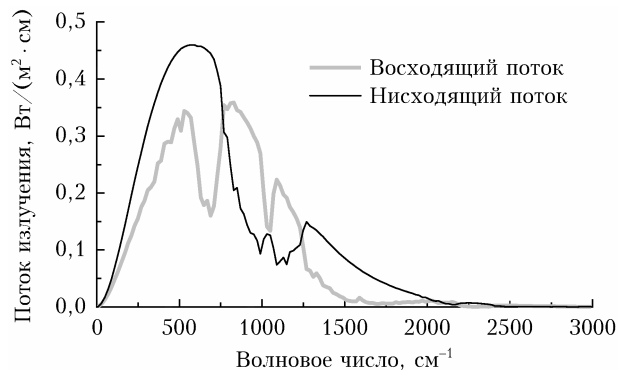


Рис. 2. Восходящие потоки ИК-излучения на верхней границе атмосферы и нисходящие потоки у поверхности Земли, вычисленные с HITRAN2020 и с моделью континуума H₂O MT_CKD3.4. Спектральное разрешение 20 см⁻¹. Метеомодель — лето средних широт AFGL

На рис. 3 приведены абсолютные и относительные различия в спектральных потоках для разных версий HITRAN и GEISA2020. Наибольшие абсолютные различия в потоках наблюдаются в спектральном диапазоне 700–1370 см⁻¹, который включает макроокно прозрачности 8–12 мкм, а максимальные относительные различия наблюдаются в макроокне прозрачности 3–5 мкм. Из рис. 3 видно, что относительные различия между спектральными нисходящими потоками у поверхности Земли для метеомодели лета средних широт, вычисленными с БД HITRAN2020, HITRAN2012 и HITRAN2008 могут достигать 10% при спектральном разрешении 20 см⁻¹. Для восходящих потоков на верхней границе атмосферы наблюдаются еще большие относительные различия.

Для того чтобы определить, какие из поглощающих атмосферных газов вносят наибольший вклад в разницу ИК-потоков за счет различия параметров линий в спектроскопических БД, для стандартной модели лета средних широт были сделаны расчеты спектральных потоков (с тем же спектральным разрешением 20 см⁻¹) отдельно для каждого газа (H₂O, CO₂, O₃, N₂O, CO и CH₄) с использованием разных версий HITRAN и GEISA2020. Результаты моделирования приведены на рис. 4. В каждом расчете

Таблица 1

Восходящие потоки ИК-излучения на верхней границе атмосферы (F_{up}) и нисходящие потоки у поверхности Земли (F_{down}), вычисленные с использованием различных версий БД HITRAN и GEISA2020 в диапазоне 0–3000 см⁻¹, Вт/м²

Модель атмосферы	HITRAN2008		HITRAN2012		HITRAN2020		GEISA2020	
	F_{up}	F_{down}	F_{up}	F_{down}	F_{up}	F_{down}	F_{up}	F_{down}
Лето средних широт	283,44	357,29	282,87	357,38	283,18	357,11	283,20	357,18
Тропики	287,66	397,49	287,07	397,56	287,41	397,32	287,43	397,36
Зима средних широт	230,97	224,76	230,53	224,10	230,76	224,78	230,77	224,79

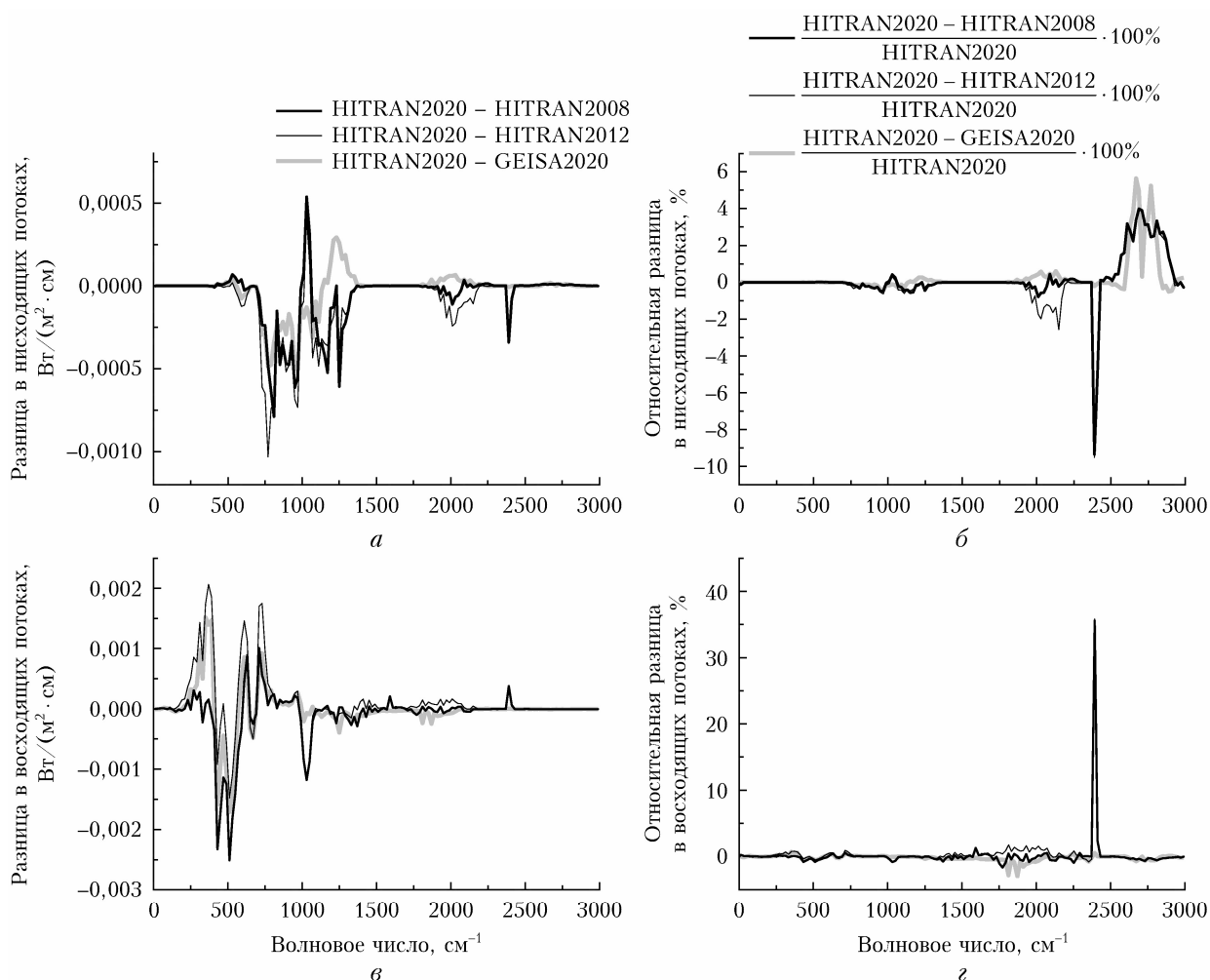


Рис. 3. Абсолютная и относительная разница между ИК-потоками, вычисленными с различными версиями БД HITRAN и GEISA2020 для лета средних широт AFGL: *а, б* – нисходящие потоки у поверхности Земли; *в, г* – восходящие потоки на верхней границе атмосферы

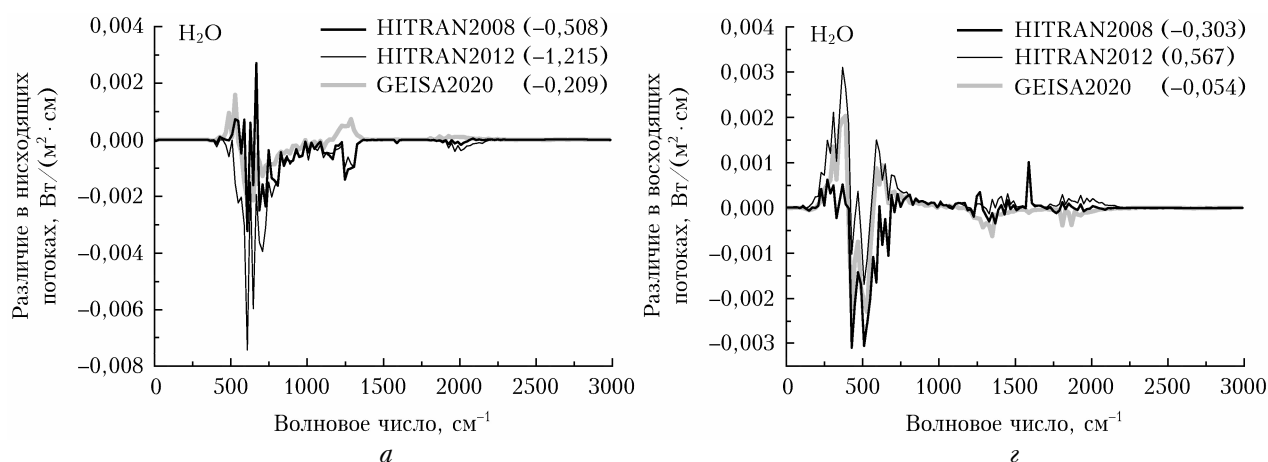
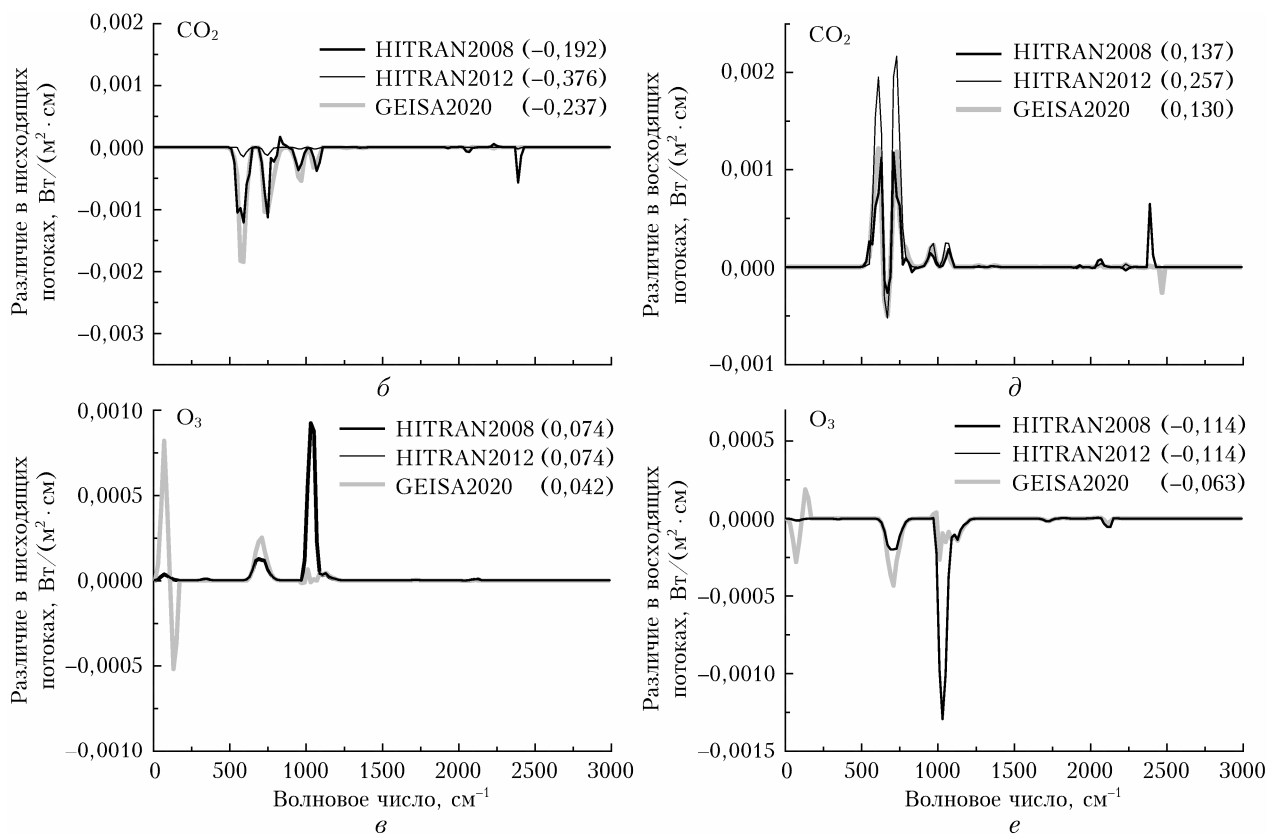


Рис. 4. Различия в спектральных потоках ИК-излучения, вычисленных с помощью БД HITRAN2020 и других спектроскопических БД отдельно для каждого поглощающего газа: нисходящие потоки у поверхности Земли (*а–в*), восходящие потоки на верхней границе атмосферы (*г–е*). Метеомодель – лето средних широт AFGL2. Спектральное разрешение 20 см⁻¹. В скобках приведены суммарные различия в диапазоне 0–3000 см⁻¹ (окончание см. на с. 392)



Окончание рис. 4 (начало см. на с. 391)

учитывалось селективное поглощение только одним газом без учета континуума. Сравнение потоков показало, что наибольшие различия в потоках в тепловом диапазоне обусловлены неопределенностями в параметрах линий поглощения H₂O (в диапазоне 500–800 см^{–1}), вторыми по значимости являются неопределенности в параметрах линий CO₂ (500–1100, 2300–2500 см^{–1}) и O₃ (100–200, 600–700 и 1000–1100 см^{–1}). Неопределенности в линиях N₂O, CO и CH₄ оказывают существенно меньшее влияние на моделирование ИК-потоков в атмосфере. Расчеты, полученные с БД GEISA2020, достаточно близки к результатам расчетов с HITRAN2020. Наибольшие различия наблюдались между HITRAN2012 и другими БД.

Также были рассчитаны суммарные различия в потоках излучения за счет применения различных спектроскопических БД во всем диапазоне от 0 до 3000 см^{–1}. Суммарное различие в нисходящих потоках излучения у поверхности Земли из-за неопределенности в параметрах линий H₂O достигало 1,2 Вт/м² (между HITRAN2020 и HITRAN2012), что почти в два раза превышало аналогичные величины при учете всех газов.

Выполнены расчеты скорости радиационного выхолаживания на разных уровнях в атмосфере для различных версий БД HITRAN и GEISA2020. Результаты представлены на рис. 5. Скорости радиационного выхолаживания атмосферы отличаются незначительно, расхождения не превышают 0,04 К/сут.

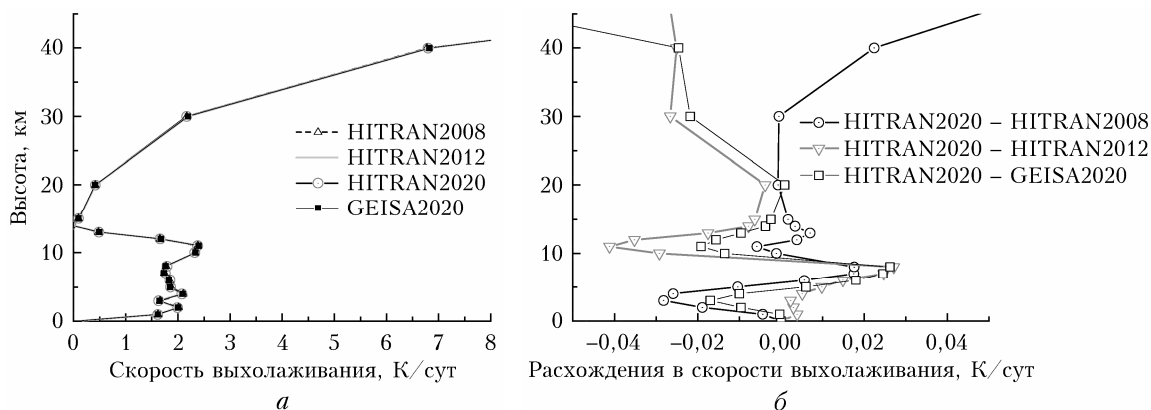


Рис. 5. Скорости радиационного выхолаживания атмосферы (а) на разных высотах и разница в скоростях выхолаживания (б), вычисленных с HITRAN2020 и другими спектроскопическими БД для лета средних широт AFGL

Результаты моделирования потоков ИК-излучения с многолетними данными для средней полосы России

Приведенные выше результаты свидетельствуют, что расхождения между восходящими и нисходящими потоками варьируются для различных метеорологических условий, характерных для среднестациональных моделей. Однако эти метеорологические модели не могут описать все многообразие ситуаций, которые реализуются в атмосфере Земли, поэтому для более полного описания возможных расхождений между потоками, рассчитанными с использованием различных спектроскопических БД, мы привлекли данные аэрологического зондирования атмосферы для типичных метеорологических условий средних широт для двух регионов: Западной Сибири и Нижнего Поволжья. Профили температуры,

давления и концентрации атмосферных газов были получены на основе данных реанализа ECMWF ERA-5 [22]. Так, для Нижнего Поволжья летом температура варьировалась от 287 до 311 К при средней температуре 300 К, влажность — от 0,98 до 4,65 г/см², а для Новосибирска температура зимой варьировалась от 230 до 272 К при средней температуре 255 К, влажность — от 0,05 до 0,97 г/см². Летние условия для Нижнего Поволжья и зимние условия для г. Новосибирска обеспечивают достаточно широкие вариации температуры и влажности. На основе этих данных были проведены массовые расчеты нисходящих и восходящих ИК-потоков.

В табл. 2–5 приведено статистическое описание результатов моделирования, которое включает средние значения, среднеквадратические отклонения, а также диапазон изменения соответствующих характеристик.

Таблица 2

Восходящие потоки излучения на верхней границе атмосферы F_{up} , рассчитанные для летних условий Нижнего Поволжья с использованием HITRAN2020 и других БД, и их абсолютные и относительные расхождения ΔF_{up}

Характеристика	Спектроскопическая БД	Среднее	СКО	Минимум	Максимум	Диапазон
Приземная температура, К		300,0	5,4	287,0	311,4	24,4
W_{H_2O} , г/см ²		2,74	0,71	0,98	4,65	3,67
F_{up} , Вт/м ²	HITRAN2008	285,71	12,90	255,97	315,89	59,92
	HITRAN2012	285,11	12,86	255,50	315,24	59,74
	HITRAN2020	285,48	12,90	255,75	315,68	59,93
	GEISA2020	285,24	12,83	255,71	315,28	59,57
ΔF_{up} , Вт/м ²	HITRAN2020 – HITRAN2008	–0,22	0,03	–0,33	–0,16	0,17
	HITRAN2020 – HITRAN2012	0,37	0,04	0,25	0,48	0,23
	HITRAN2020 – GEISA2020	0,24	0,11	0,02	0,54	0,52
ΔF_{up}	$\frac{HITRAN2020 - HITRAN2008}{HITRAN2020} \cdot 100\%$	–0,08	0,01	0,05	0,11	0,06
	$\frac{HITRAN2020 - HITRAN2012}{HITRAN2020} \cdot 100\%$	0,13	0,01	0,10	0,16	0,06
	$\frac{HITRAN2020 - GEISA2020}{HITRAN2020} \cdot 100\%$	0,08	0,03	0,00	0,18	0,18

Таблица 3

Нисходящие потоки излучения на нижней границе атмосферы F_{down} , рассчитанные для летних условий Нижнего Поволжья с использованием HITRAN2020 и других БД, и их абсолютные и относительные расхождения ΔF_{down}

Характеристика	Спектроскопическая БД	Среднее	СКО	Минимум	Максимум	Диапазон
F_{down} , Вт/м ²	HITRAN2008	354,10	22,81	299,16	408,80	109,65
	HITRAN2012	354,21	22,80	299,25	408,88	109,63
	HITRAN2020	353,88	22,78	299,02	408,57	109,54
	GEISA2020	353,98	22,78	299,10	408,64	109,54
ΔF_{down} , Вт/м ²	HITRAN2020 – HITRAN2008	–0,22	0,04	–0,31	–0,13	0,18
	HITRAN2020 – HITRAN2012	–0,32	0,06	–0,50	–0,19	0,31
	HITRAN2020 – GEISA2020	–0,10	0,02	–0,14	–0,05	0,09
ΔF_{down}	$\frac{HITRAN2020 - HITRAN2008}{HITRAN2020} \cdot 100\%$	–0,06	0,01	–0,08	–0,04	0,04
	$\frac{HITRAN2020 - HITRAN2012}{HITRAN2020} \cdot 100\%$	–0,09	0,02	–0,14	–0,06	0,08
	$\frac{HITRAN2020 - GEISA2020}{HITRAN2020} \cdot 100\%$	–0,03	0,01	–0,04	–0,01	0,03

Таблица 4

Восходящие потоки излучения на верхней границе атмосферы F_{up} , рассчитанные для зимних условий Новосибирска с использованием HITRAN2020 и других БД, и их абсолютные и относительные расхождения ΔF_{up}

Характеристика	Спектроскопическая БД	Среднее	СКО	Минимум	Максимум	Диапазон
Приземная температура, К		255,0	10,2	229,8	272,5	42,7
$W_{\text{H}_2\text{O}}$, г/см ²		0,38	0,23	0,05	0,97	0,92
F_{up} , Вт/м ²	HITRAN2008	199,58	19,07	155,30	237,03	81,73
	HITRAN2012	199,25	18,98	155,21	236,59	81,38
	HITRAN2020	199,45	19,02	155,30	236,86	81,56
	GEISA2020	199,42	19,03	155,25	236,82	81,57
ΔF_{up} , Вт/м ²	HITRAN2020 – HITRAN2008	–0,13	0,05	–0,24	0,00	0,24
	HITRAN2020 – HITRAN2012	0,20	0,04	0,09	0,28	0,19
	HITRAN2020 – GEISA2020	0,03	0,03	–0,04	0,12	0,16
ΔF_{up}	$\frac{\text{HITRAN2020} - \text{HITRAN2008}}{\text{HITRAN2020}} \cdot 100\%$	–0,07	0,02	–0,12	0,00	0,12
	$\frac{\text{HITRAN2020} - \text{HITRAN2012}}{\text{HITRAN2020}} \cdot 100\%$	0,10	0,013	0,060	0,13	0,07
	$\frac{\text{HITRAN2020} - \text{GEISA2020}}{\text{HITRAN2020}} \cdot 100\%$	0,01	0,02	–0,02	0,07	0,09

Таблица 5

Нисходящие потоки излучения на нижней границе атмосферы F_{down} , рассчитанные для зимних условий Новосибирска с использованием БД HITRAN2020 и других БД, и их абсолютные и относительные расхождения ΔF_{down}

Характеристика	Спектроскопическая БД	Среднее	СКО	Минимум	Максимум	Диапазон
F_{down} , Вт/м ²	HITRAN2008	169,66	30,50	101,79	225,42	123,63
	HITRAN2012	170,10	30,38	102,41	225,62	123,21
	HITRAN2020	169,91	30,37	102,16	225,40	123,24
	GEISA2020	169,76	30,44	102,04	225,43	123,39
ΔF_{down} , Вт/м ²	HITRAN2020 – HITRAN2008	0,24	0,14	–0,02	0,45	0,47
	HITRAN2020 – HITRAN2012	–0,19	0,03	–0,27	–0,11	0,16
	HITRAN2020 – GEISA2020	0,15	0,09	–0,03	0,25	0,28
ΔF_{down}	$\frac{\text{HITRAN2020} - \text{HITRAN2008}}{\text{HITRAN2020}} \cdot 100\%$	0,16	0,11	–0,01	0,38	0,39
	$\frac{\text{HITRAN2020} - \text{HITRAN2012}}{\text{HITRAN2020}} \cdot 100\%$	–0,12	0,02	–0,24	–0,08	0,16
	$\frac{\text{HITRAN2020} - \text{GEISA2020}}{\text{HITRAN2020}} \cdot 100\%$	0,10	0,06	–0,02	0,20	0,22

Для летних условий Нижнего Поволжья среднее значение восходящих потоков излучения составляло 285 Вт/м², диапазон изменчивости потоков – 60 Вт/м², а расхождения между расчетами с HITRAN2020 и другими БД варьировались от –0,33 до 0,54 Вт/м² (см. табл. 2). Для нисходящих потоков среднее значение составляло 354 Вт/м², диапазон изменчивости потоков – 109 Вт/м², а расхождение между расчетами с HITRAN2020 и другими БД варьировались от –0,50 до –0,05 Вт/м² (см. табл. 3).

По сравнению с летними условиями Нижнего Поволжья, для зимних условий г. Новосибирска среднее значение восходящих потоков излучения составляло значительно меньшую величину – 199 Вт/м², при этом наблюдался больший диапазон изменчивости потоков – 82 Вт/м², а расхождения между расчетами по HITRAN2020 и другими БД варьировались от –0,24 до 0,28 Вт/м² (см. табл. 4).

Для нисходящих потоков зимой в Новосибирске среднее значение составляло 170 Вт/м², что в два раза меньше значений потоков для лета Нижнего Поволжья, диапазон изменчивости потоков составлял 123 Вт/м², а расхождения между расчетами с HITRAN2020 и другими БД были в пределах от –0,27 до 0,453 Вт/м² (см. табл. 5).

Эти данные в целом хорошо согласуются с результатами моделирования для среднезональных моделей атмосферы. Однако более детальный анализ показывает некоторые особенности, связанные с использованием реальных профилей температуры и влажности в сравнении с модельными:

1. Сопоставление HITRAN2020 и GEISA2020. Выше отмечалось, что расчеты с применением среднезональных метеомоделей для этих БД были практически идентичны, расхождения не превышали 0,07 Вт/м² (для нисходящих потоков). Однако

при моделировании с реальными атмосферными условиями средней полосы России наибольшее различие наблюдалось между восходящими потоками, рассчитанными с HITRAN2020 и GEISA2020, и варьировалось в диапазоне от $-0,04$ до $0,54$ Вт/м², а для нисходящих потоков различие для этих же БД составляло от $-0,14$ до $0,25$ Вт/м².

2. Для нисходящих потоков наибольшее различие наблюдалось между расчетами с HITRAN2020 и HITRAN2012 и составляло $-0,50$ Вт/м², тогда как для восходящих потоков различие для этих баз не превышало $0,48$ Вт/м². Эти значения по порядку величины сопоставимы с результатами расчетов по среднезональным моделям.

3. Для того чтобы дать более полное представление о том, как проявляются различия в потоках при использовании различных БД, на рис. 6 приведены гистограммы, которые характеризуют некоторые типичные ситуации.

Из рис. 6, а видно, что расхождения в нисходящих потоках между версиями HITRAN2012 и 2020 меньше, нежели между версиями 2008 и 2020.

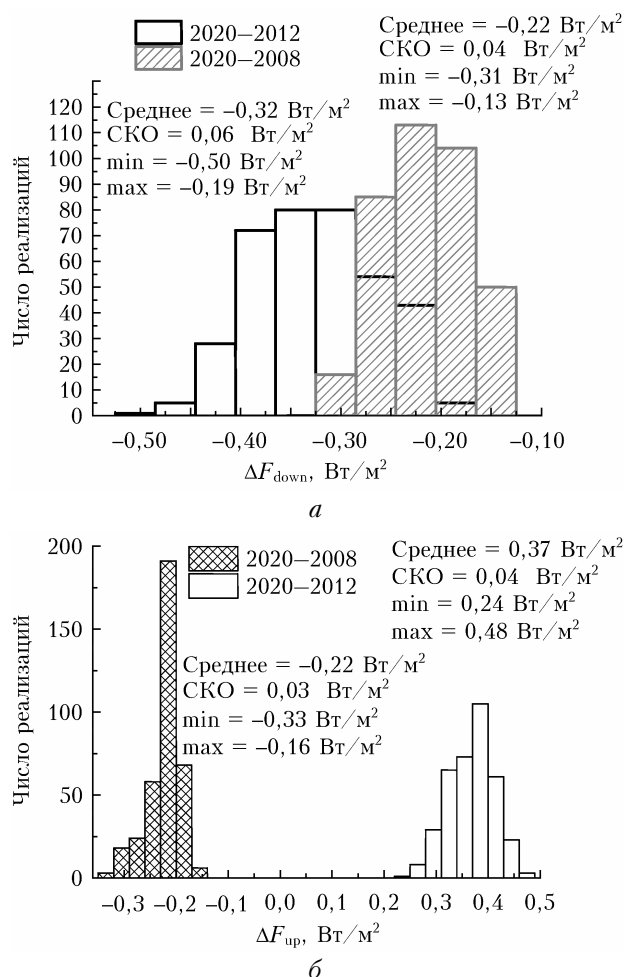


Рис. 6. Расхождения в нисходящих потоках излучения на нижней границе атмосферы (а) и восходящих потоках излучения на верхней границе (б) при использовании БД HITRAN2008, 2012, 2020. Метеорологические условия: лето 2021 г. Нижнее Поволжье, 368 реализаций

Для восходящих потоков ситуация иная: расчет с HITRAN2008 дает более близкие результаты к расчету с HITRAN2020, нежели с версией 2012, причем знак в расхождениях разный. Это хорошо видно из гистограмм, представленных на рис. 6, б. Наибольшие различия наблюдались для спектроскопических БД HITRAN2008 и 2012, среднее расхождение — $0,59$ Вт/м², а разброс составил от $0,46$ до $0,76$ Вт/м², что согласуется с результатами моделирования при использовании среднезональных моделей. Следует также отметить, что все гистограммы имеют колоколообразную форму.

Заключение

Таким образом, результаты моделирования показали следующее.

1. Различия в параметрах линий поглощения в спектроскопических БД незначительно влияют на моделирование интегральных ИК-потоков в диапазоне $0-3000$ см⁻¹, погрешность менее $0,7$ Вт/м² (относительная погрешность $\sim 0,3\%$). Спектральные расчеты с умеренным разрешением (20 см⁻¹) показывают существенно большее различие в относительных погрешностях, которые могут достигать $\sim 10\%$ для нисходящих и $\sim 40\%$ для восходящих потоков излучения.

2. Расхождения в потоках ИК-излучения за счет использования различных спектроскопических БД для среднезональных моделей в целом согласуются с результатами расчетов для условий Нижнего Поволжья и Новосибирска. Однако вычисления потоков с реальными атмосферными профилями для средней полосы России показали заметно больший разброс результатов при сопоставлении БД HITRAN2020 и GEISA2020 по сравнению со среднезональными моделями.

3. Сопоставление четырех БД HITRAN2008, HITRAN2012, HITRAN2020 и GEISA2020 показало, что в HITRAN2012 содержатся параметры спектральных линий, которые приводят к большему поглощению в атмосфере Земли, по сравнению с остальными тремя, и вследствие этого дают большие расхождения в результатах моделирования потоков излучения.

Финансирование. Работа выполнена в рамках государственного задания ИОА СО РАН.

Список литературы

1. *Network for the Detection of Atmospheric Composition Change (NDACC)*. URL: <http://www.ndsc.ncep.noaa.gov> (last access: 17.03.2023).
2. Timofeyev Y., Virolainen Y., Makarova M., Poborovsky A., Polyakov A., Ionov D., Osipov S., Imhasin H. Ground-based spectroscopic measurements of atmospheric gas composition near Saint Petersburg Russia // J. Mol. Spectrosc. 2016. V. 323. P. 2–14. DOI: 10.1016/j.jms.2015.12.007.
3. Mingwei Zhu, Feng Zhang, Wenwen Li, You Wu, Na Xu. The impact of various HITRAN molecular spectroscopic databases on infrared radiative transfer

- simulation // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* 2019. V. 234. P. 55–63.
4. Колокутин Г.Э., Фомин Б.А. Новые спектроскопические базы и дистанционное зондирование Земли методами инфракрасной спектроскопии высокого разрешения // *Современные проблемы дистанционного зондирования Земли из космоса.* 2014. Т. 11, № 3. С. 278–287.
5. Firsov K.M., Chesnokova T.Yu., Bobrov E.V., Klitochenko I.I. Estimation of uncertainties in the longwave radiative fluxes simulation due to spectroscopic errors // *Proc. SPIE.* 2014. V. 9292. P. 929205-1. DOI: 10.1117/12.2075550.
6. Chesnokova T.Yu., Chentsov A.V., Firsov K.M. Impact of spectroscopic information on total column water vapor retrieval in the near-infrared spectral region // *J. Appl. Remote Sens.* 2020. V. 14, N 3. P. 034510. DOI: 10.1117/1.JRS.14.034510.
7. Фирсов К.М., Чеснокова Т.Ю., Размолов А.А. Влияние континуального поглощения паров воды на радиационный форсинг углекислого газа в атмосфере для региона нижнего Поволжья // *Оптика атмосф. и океана.* 2022. Т. 35, № 12. С. 1029–1035.
8. Gordon I.E., Rothman L.S., Hargreaves R.J., Hashemi R., Karlovets E.V., Skinner F.M., Conway E.K., Hill C., Kochanov R.V., Tan Y., Wcislo P., Finenko A.A., Nelson K., Bernath P.F., Birk M., Boudon V., Campargue A., Chance K.V., Coustenis A., Drouin B.J., Flaud J.-M., Gamache R.R., Hodges J.T., Jacquemart D., Mlawer E.J., Nikitin A.V., Perevalov V.I., Rotger M., Tennyson J., Toon G.C., Tran H., Tyuterev V.G., Adkins E.M., Baker A., Barbe A., Canè E., Császár A.G., Dudaryonok A., Egorov O., Fleisher A.J., Fleurbaey H., Foltynowicz A., Furtenbacher T., Harrison J.J., Hartmann J.-M., Horneman V.-M., Huang X., Karman T., Karns J., Kass S., Kleiner I., Kofman V., Kwabia-Tchana F., Lavrentieva N.N., Lee T.J., Long D.A., Lukashevskaya A.A., Lyulin O.M., Makhnev V.Yu., Matt W., Massie S.T., Melosso M., Mikhailenko S.N., Mondelain D., Müller H.S.P., Naumenko O.V., Perrin A., Polyansky O.L., Raddaoui E., Raston P.L., Reed Z.D., Rey M., Richard C., Tóbiás R., Sadiek I., Schwenke D.W., Starikova E., Sung K., Tamassia F., Tashkun S.A., Vander Auwera J., Vasilenko I.A., Vidasin A.A., Villanueva G.L., Vispoel B., Wagner G., Yachmenev A., Yurchenko S.N. The HITRAN2020 molecular spectroscopic database // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* 2022. V. 277. P. 107949. DOI: 10.1016/j.jqsrt.2021.107949.
9. Delahaye T., Armante R., Scott N.A., Jacquinet-Husson N., Chédin A., Crépeau L., Crevoisier C., Douet V., Perrin A., Barbe A., Boudon V., Campargue A., Coudert L.H., Ebert V., Flaud J.-M., Gamache R.R., Jacquemart D., Jolly A., Kwabia Tchana F., Kyuberis A., Li G., Lyulin O.M., Manceron L., Mikhailenko S., Moazzen-Ahmadi N., Müller H.S.P., Naumenko O.V., Nikitin A., Perevalov V.I., Richard C., Starikova E., Tashkun S.A., Tyuterev V.I.G., Vander Auwera J., Vispoel B., Yachmenev A., Yurchenko S. The 2020 edition of the GEISA spectroscopic database // *J. Mol. Spectrosc.* 2021. V. 380. P. 111510. DOI: 10.1016/j.jms.2021.111510.
10. Rothman L.S., Gordon I.E., Barbe A., Benner D.C., Bernath P.F., Birk M., Boudon V., Brown 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., Lacome N., Lafferty W.J., Mandin J.-Y., Massie S.T., Mikhailenko S.N., Miller C.E., Moazzen-Ahmadi N., Naumenko O., Nikitin A.V., Orphal J., Perevalov V.I., Perrin A., Predoi-Cross A., Rinsland C.P., Rotger M., Simecková M., Smith M.A.H., Sung K., Tashkun S.A., Tennyson J., Toth R.A., Vandaele A.C., Vander Auwera J. The HITRAN2008 molecular spectroscopic database // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* 2009. V. 110. P. 533–572.
11. Rothman L.S., Gordon I.E., Babikov Y., Barbe A., Benner D.C., Bernath P.F., Birk M., Bizzocchi L., Boudon V., Brown L.R., Campargue A., Chance K., Cohen E.A., Coudert L.H., Devi V.M., Drouin B.J., Fayt A., Flaud J.-M., Gamache R.R., Harrison J.J., Hartmann J.-M., Hill C., Hodges J.T., Jacquemart D., Jolly A., Lamouroux J., Le Roy R.J., Li G., Long D.A., Lyulin O.M., Mackie C.J., Massie S.T., Mikhailenko S., Müller H.S.P., Naumenko O.V., Nikitin A.V., Orphal J., Perevalov V., Perrin A., Polovtseva E.R., Richard C., Smith M.A.H., Starikova E., Sung K., Tashkun S., Tennyson J., Toon G.C., Tyuterev V.I.G., Wagner G. The HITRAN2012 molecular spectroscopic database // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* 2013. V. 130. P. 4–50.
12. Gordon E., Rothman L.S., Hill C., Kochanov R.V., Tana Y., Bernath P.F., Birk M., Boudon V., Campargue A., Chance K.V., Drouin B.J., Flaud J.-M., Gamache 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., Kleiner 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. P. 3–69.
13. Jacquinet-Husson N., Armante R., Scott N.A., Chédin A., Crépeau L., Boutammine C., Bouhdaoui A., Crevoisier C., Capelle V., Boonne C., Poulet-Crovisier N., Barbe A., Chris Benner D., Boudon V., Brown L.R., Buldyreva J., Campargue A., Coudert L.H., Devi V.M., Down M.J., Drouin B.J., Fayt A., Fittschen C., Flaud J.-M., Gamache R.R., Harrison J.J., Hill C., Hodnebrog III., Hut S.-M., Jacquemart D., Jolly A., Jiménez E., Lavrentieva N.N., Liu A.-W., Lodi L., Lyulin O.M., Massie S.T., Mikhailenko S., Müller H.S.P., Naumenko O.V., Nikitin A., Nielsen C.J., Orphal J., Perevalov V.I., Perrin A., Polovtseva E., Predoi-Cross A., Rotger M., Ruth A.A., Yu S.S., Sung K., Tashkun S.A., Tennyson J., Tyuterev V.I.G., Vander Auwera J., Voronin B.A., Makie A. The 2015 edition of the GEISA spectroscopic database // *J. Mol. Spectrosc.* 2016. V. 327. P. 31–72.
14. Мицель А.А., Пташник И.В., Фирсов К.М., Фомин Б.А. Эффективный метод полинейного счета пропускания поглощающей атмосферы // *Оптика атмосф. и океана.* 1995. Т. 8, № 10. С. 1547–1551.
15. Фирсов К.М., Чеснокова Т.Ю., Бобров Е.В. Роль континуального поглощения паров воды в длинноволновых радиационных процессах приземного слоя атмосферы в регионе Нижнего Поволжья // *Оптика атмосф. и океана.* 2014. Т. 27, № 8. С. 665–672; Firsov K.M., Chesnokova T.Yu., Bobrov E.V. The role of the water vapor continuum absorption in near ground long-wave radiation processes of the lower Volga Region // *Atmos. Ocean. Opt.* 2015. V. 28, N 1. P. 1–8.

16. *Lacis A.A., Oinas V.* A description of the K -distribution methods for modelling nongray gaseous absorption, thermal emission, and multiple scattering in vertically inhomogeneous atmospheres // *J. Geophys. Res.* 1991. V. 96, N D5. P. 9027–9063.
17. *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.
18. *Фирсов К.М., Чеснокова Т.Ю.* Влияние вариаций концентрации CH_4 и N_2O на потоки длинноволновой радиации в атмосфере Земли // *Оптика атмосф. и океана.* 1999. Т. 12, № 9. С. 790–795.
19. *Goody R., West R., Chen L., Crisp D.* The correlated- k method for radiation calculations in nonhomogeneous atmospheres // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* 1989. V. 42, N 6. P. 539–550.
20. *Morcrette J.J., Fouquart Y.* On systematic errors in parameterized calculation of longwave radiation transfer // *J. Q. R. Meteorol. Soc.* 1985. V. 111. P. 691–708.
21. *Anderson G., Clough S., Kneizys F., Chetwynd J., Shettle E.* AFGL Atmospheric Constituent Profiles (0–120 km). Air Force Geophysics Laboratory. AFGL-TR-86-0110. Environmental Research Paper. Hanscom AFB: MA 01736. 1986. N 954. 25 p.
22. *ECMWF ERA-5.* URL: <https://www.ecmwf.int/en/forecasts/datasets/reanalysis-datasets/era5> (last access: 17.03.2023).

T.Yu. Chesnokova, K.M. Firsov. Impact of information updating of the atmospheric gases absorption line parameters on the results of simulation of the IR radiative fluxes in the atmosphere.

An impact of uncertainties of the atmospheric gases absorption line parameters in the modern spectroscopic databases on the longwave fluxes simulation in the atmosphere is estimated. The mass calculations of downward and upward IR fluxes are carried out for meteorological conditions observed in summer months in the Lower Volga Region and winter months in Novosibirsk and for average zonal meteorological models. The radiative fluxes and cooling rates at different levels of the atmosphere calculated with use of new versions of HITRAN and GEISA spectroscopic databases and its previous versions are compared. It is shown that the difference in absorption line parameters in the spectroscopic databases leads to an error less than 0.7 W/m^2 (0.3%) in the simulated integral fluxes in the $0\text{--}3000 \text{ cm}^{-1}$ region, at that the relative differences in the spectral fluxes calculated with moderate spectral resolution (20 cm^{-1}) are up to 10%. The atmospheric gases and spectral intervals contributing more to the errors in the IR fluxes simulations due to uncertainties of initial spectroscopic information are revealed.