

Ю.В. Богданова, О.Б. Родимова

О термодинамических зависимостях коэффициентов разложения радиационных характеристик в ряды экспонент

Институт оптики атмосферы СО РАН, г. Томск

Поступила в редакцию 17.12.2007 г.

Предложенный ранее метод получения однопараметрических аппроксимационных формул для атмосферных функций пропускания в заданных спектральных интервалах использовал точные выражения для коэффициентов разложения исследуемых функций в ряды экспонент и ориентировался на высотное распределение температур и давлений, характерное для стандартных моделей атмосферы. В данной статье найдена аппроксимация коэффициентов разложения в ряд экспонент в зависимости от температуры и давления для всего диапазона температур и давлений, наблюдаемых в атмосфере, которая далее может быть применена к произвольному высотному распределению термодинамических параметров. Возможности аппроксимации иллюстрируются примерами расчета радиационных потоков, обусловленных поглощением CO_2 в области полосы 15 мкм.

Введение

До появления массовых расчетов *line-by-line* при расчете радиационных потоков широко использовались модели полос поглощения и различные способы замены поглощения на неоднородных трассах поглощением на эквивалентных однородных трассах.

При всех преимуществах в точности метода *line-by-line* (при использовании правильной формы контура спектральных линий) по сравнению с моделями полос он требует существенно большего времени для своей реализации. Поэтому в радиационных блоках климатических моделей коэффициенты поглощения, рассчитанные методом *line-by-line* для разных давлений и температур, используются, как правило, для нахождения коэффициентов разложений функций пропускания в ряды экспонент с небольшим числом членов [1, 2], которые далее применяются для расчета радиационных характеристик и неявно содержат информацию о термодинамических зависимостях коэффициента поглощения.

Другим вариантом учета зависимости коэффициентов разложения в рядах экспонент от температуры и давления является получение для них аппроксимационных формул, означающих в какой-то мере возвращение к моделям поглощения на эквивалентных однородных трассах. Подобный вариант реализован в работах Chou et al. [3], получивших так называемые однопараметрические аппроксимационные формулы для пропускания, являющегося функцией только приведенной поглощающей массы. Эти формулы представляют собой суммы экспоненциальных членов, которые не связаны напрямую с упомянутыми разложениями радиационных величин в ряды экспонент. Они, однако, оказались очень удобны для применения в радиационных блоках благодаря простоте и универсальности и, в частности, используются в климатической модели Института

вычислительной математики РАН [4]. Формулы [3] недостаточно хорошо описывают поглощение на больших высотах в связи с трудностями расчета пропускания при низких давлениях. Также авторам [5] не удалось получить подобные формулы для озона в области полосы 9,6 мкм, так что в этом случае они применяли интерполяционные таблицы. Кроме того, хотелось бы иметь более адекватные формулы для оценки поглощения, обусловленного крыльями линий в некоторых участках спектра, в частности в интервале 8–20 мкм H_2O .

В предыдущих работах [6, 7] мы показали возможность получения однопараметрических аппроксимационных формул для коэффициентов разложения радиационных характеристик в ряды экспонент в произвольных спектральных интервалах для заданного высотного распределения термодинамических параметров в рамках стандартных моделей атмосферы.

В данной статье исследуется возможность существования аппроксимации коэффициентов разложения в ряд экспонент в зависимости от температуры и давления, применимой для произвольного высотного распределения термодинамических параметров.

1. Однопараметрические аппроксимационные формулы для пропускания

В работах Chou et al. (см., например, [3]) однопараметрическое масштабирование сводит неоднородную трассу к эквивалентному однородному пути с выделенными давлением p_r и температурой T_r . Пропускание вдоль такой трассы зависит только от приведенного количества вещества. Коэффициент поглощения при произвольном давлении и температуре экстраполируется от коэффициента поглощения при выделенном давлении и температуре:

$$k_v(p, T) = k_v(p_r, T_r)(p/p_r)^m f(T, T_r), \quad (1)$$

где m – положительное число, близкое к 1; f – множитель, учитывающий изменение температуры. Пропускание слоя с произвольными p , T и поглощающей массой u , усредненное по зенитному углу θ ($\theta = \cos^{-1}\mu$), дается формулой

$$\tau_v(u, p, T) = 2 \int_0^1 \exp[-k_v(p, T)u/\mu] \mu d\mu. \quad (2)$$

При однопараметрическом масштабировании пропускание сводится к

$$\tau_v(u, p, T) \approx \tau_v(w) = 2 \int_0^1 \exp[-k_v(p_r, T_r)w/\mu] \mu d\mu, \quad (3)$$

где w есть приведенная поглощающая масса:

$$w = u(p, p_r)^m f(T, T_r). \quad (4)$$

Из сравнения (1) и (4) видно, что масштабирование коэффициента поглощения эквивалентно масштабированию поглощающей массы.

Функции пропускания от слоя j_1 до слоя j_2 , используемые в расчете радиационных потоков [3], имеют вид сумм экспоненциальных членов

$$\tau(j_2; j_1) = \sum_{i=1}^m c_i \exp(-1,66 k_i^{(j_s)} w(j_2, j_1)), \quad (5)$$

где $k_i^{(j_s)} = n^{(j_s)} k_i^{(j_s)}$ – константы; $w(j_1, j_2)$ – соответствующая поглощающая масса. Для поглощающих масс CO_2 в [3] используются аппроксимационные формулы вида (4), где u – количество поглощающего вещества; p и T – давление и температура рассматриваемого атмосферного слоя;

$$f(T, T_r) = 1 + a(T - T_r) + b(T - T_r)^2. \quad (6)$$

Численные коэффициенты в (4)–(6) были найдены в [3] для каждого из спектральных интервалов при заданном разбиении ИК-диапазона на 10 спектральных интервалов $j_s = 1, \dots, 10$.

2. Аппроксимационные формулы для коэффициентов разложения функций пропускания в ряды экспонент

Разложение функций пропускания в ряды экспонент для однородной трассы означает существование выражения [1, 2]:

$$P(x) = \frac{1}{\Delta\omega} \int_{\omega}^{\omega'} e^{-x\kappa(\omega)} d\omega = \sum_v b_v e^{-x s_v^{(j)}}. \quad (7)$$

Коэффициенты разложений в ряды экспонент находят чаще всего с помощью методов минимизации, причем абсциссы ряда экспонент и коэффициенты при членах ряда получаются из чисто вычис-

лительной процедуры (см., например, [8]). Наряду с этим существует способ, дающий точные аналитические выражения для параметров ряда экспонент в случае задания спектрального интервала, числа членов ряда и типа квадратурной формулы [9], причем от термодинамических параметров зависят только $s(g)$. Так, для функции пропускания в случае однородной среды (7) выражение для функции $g(s)$, обратной $s(g)$, имеет вид

$$g(s) = \frac{1}{\Delta\omega} \int_{\kappa(\omega) \leq s} d\omega, \quad \omega \in [\omega', \omega''], \quad (8)$$

удобный для численной реализации. Точные теоретические выражения для коэффициентов разложения исследуемых функций в ряды экспонент $g(s)$ получены для неоднородных трасс, перекрывающихся спектров, интегралов с функцией источника и радиационных потоков.

Наличие точных формул разложения радиационных характеристик в ряды экспонент позволяет обратиться к аппроксимации термодинамических зависимостей коэффициентов разложения. Коэффициенты разложения $s(g)$ ведут себя гладко с высотой (рис. 1), что позволяет надеяться, что коэффициенты разложения в различных слоях могут иметь относительно простые зависимости от температуры и давления.

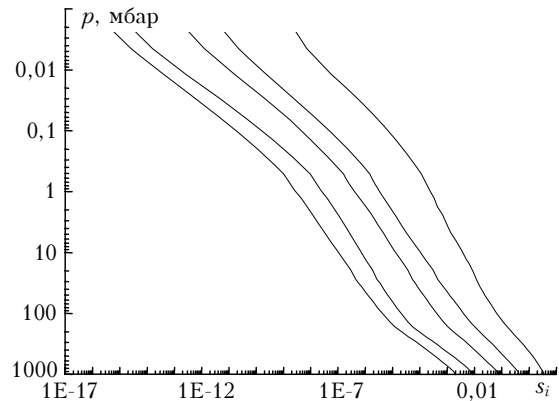


Рис. 1. Поведение коэффициентов разложения в рядах экспонент в зависимости от высоты для CO_2 в атмосфере лета средних широт в спектральном интервале $720\text{--}800 \text{ см}^{-1}$ (5 членов разложения). Шаг по частоте в расчете *line-by-line* $\Delta\omega = 0,01 \text{ см}^{-1}$

Можно предполагать [6], что коэффициенты разложения $s_i^{(j_r)}$ в слое j_r при некоторых средних давлениях p_r и температуре T_r могут быть использованы для нахождения $s_i^{(j)}$ в остальных слоях с помощью формул, подобных (4):

$$s_i^{(j)} = s_i^{(j_r)} A_{\text{pCO}_2}(j) (1 + 0,0184(T_j - T_r) + 0,000112(T_j - T_r)^2)(p_j/p_r)^{0,5}, \quad (9)$$

где $s_i^{(j)}$ – коэффициенты разложения в ряды экспонент, функций пропускания, взвешенных с функцией Планка; j – номер слоя; i – номер члена разложения; A – варьируемый параметр; ρ – плотность.

На рис. 2 представлены результаты расчета с использованием формулы (9) с $A = 1,25$ в сравнении с другими способами расчета. Рис. 2 показывает приемлемое согласие между различными способами расчета до высот около 50 км.

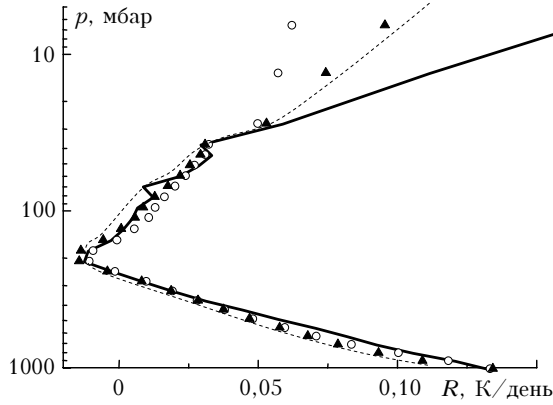


Рис. 2. Скорость выхолаживания R для CO_2 в интервале $720\text{--}800\text{ см}^{-1}$, полученная с помощью различных способов расчета для атмосферы лета средних широт (33 слоя): — расчет *line-by-line* с шагом $0,002\text{ см}^{-1}$; \circ — расчет с помощью рядов экспонент (8) с 5 членами ряда; - - - - - расчет по формулам [3]; \blacktriangle — расчет по аппроксимационным формулам (9) с $A = 1,25$

В дальнейшем для подбора параметров в коэффициентах разложения использовалась программа нелинейной минимизации суммы квадратов отклонений. Аппроксимирующее выражение задавалось в виде функции, зависящей от параметров k_1, k_2, \dots и переменных $s_i^{(j)}$. Было найдено предпочтительным аппроксимировать не сами коэффициенты разложения, а их логарифмы.

На рис. 3 приведены значения скоростей выхолаживания, полученные с помощью выражения

$$\log_{10} s_i^{(jL)} = (i+1) i^{k_1} (p_{jL}/p_r)^{(k_2 i^2 + k_3 i + k_4)} \times (1 + (T_{jL} - T_r)^2). \quad (10)$$

Значения $p_r = 300$ мбар, $T_r = 250$ К были оставлены, как в [3]. Температурный множитель не имеет при этом существенного значения. Хотя желаемой по точности аппроксимации тогда добиться не удалось,

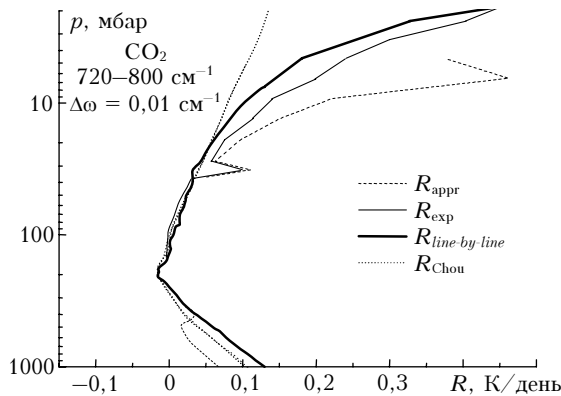


Рис. 3. Поведение скорости выхолаживания с высотой при различных способах расчета. Расчет *line-by-line* с контуром Фойгта, обрезанным на 10 см^{-1}

характер изменения скорости выхолаживания с высотой качественно отражает таковой для расчета *line-by-line*.

3. Аппроксимационные формулы для $s(g)$ с произвольной зависимостью от температуры и давления

Полученные ранее результаты показали возможность получать однопараметрические аппроксимационные формулы для коэффициентов разложения в ряды экспонент в произвольных спектральных интервалах для определенных моделей атмосферы. При этом аппроксимационные выражения для поглощающих масс, приводящие их к некоторым средним температуре и давлению, переносятся на коэффициенты разложения в ряд экспонент:

$$s(g, p, T) = F(p, T, p_r, T_r) s(g, p_r, T_r), \quad (11)$$

где $s(g, p_r, T_r)$ — коэффициенты разложения при фиксированных температуре и давлении; $s(g, p, T)$ — коэффициенты при произвольных температуре и давлении.

Если построить таблицу коэффициентов поглощения для ряда значений температур и давлений в данном спектральном интервале, найти соответствующие коэффициенты разложения s_i и по этим s_i построить удачные аппроксимационные формулы, последние должны быть применимы для любых моделей атмосферы.

Таблица коэффициентов поглощения и соответствующих s_i была построена для температур от 170 до 370 К (41 значение) и давлений от 1000 до $5 \cdot 10^{-6}$ мбар (32 значения). Однако в этом случае подгонка оказалась не слишком хорошей. Поэтому из таблицы были удалены некоторые пары «температура — давление», нехарактерные для атмосферы Земли. Количество точек по температуре и давлению уменьшилось при этом с 1312 до 336: для каждого из выбранных 28 значений давления находились 12 значений температур с шагом 5 К, которые перекрывали разброс температур, характерный для моделей атмосферы. На рис. 4 приведены значения наибольшей и наименьшей температур, использованных для каждой высоты, на фоне стандартных модельных температур [10].

Для аппроксимации значений s_i , полученных в рамках описанной таблицы, было найдено удобным использовать следующее выражение:

$$s_i(p, T) = 10^f (Q(T)/Q(T_r)) s_i(p_r, T_r), \quad (12)$$

где

$$f = K_0 + \frac{K_2}{T_s} + \frac{K_1 \log p_s}{\log 10} - x_i \left(K_6 + \frac{K_8}{T_s} + \frac{K_7 \log p_s}{\log 10} \right) - \frac{\log x_i}{\log 10} \left(K_3 + \frac{K_5}{T_s} + \frac{K_4 \log p_s}{\log 10} \right). \quad (13)$$

В (13) $T_s = T/T_r$; $p_s = p/p_r$; $Q, Q(T_r)$ — относительные статсуммы для соответствующих температур; x_i — абсциссы гауссовых точек. Коэффициенты K_0, \dots, K_8

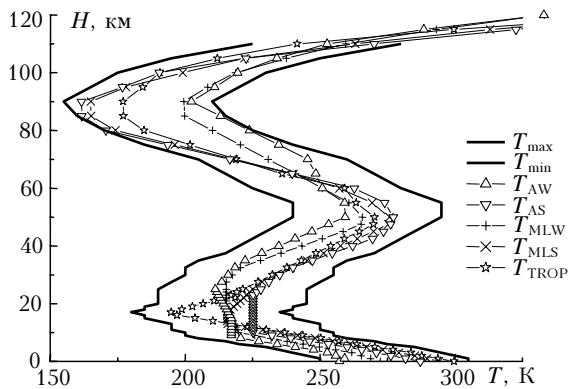


Рис. 4. Интервалы температур в зависимости от высоты, использованные для вычисления исходных для подгонки коэффициентов поглощения и соответствующих $s_i(g)$ вместе со стандартными модельными температурами

свои для каждого рассматриваемого спектрального интервала и находятся путем минимизации суммы квадратов отклонений. Кроме выражения (12) при подгонке использовался также более простой вариант:

$$s_i(p, T) = 10^f(Q(T)/Q(T_r)), \quad (14)$$

с функцией f вида (13). Это выражение, в сущности, означает переход от идеи выделенного слоя

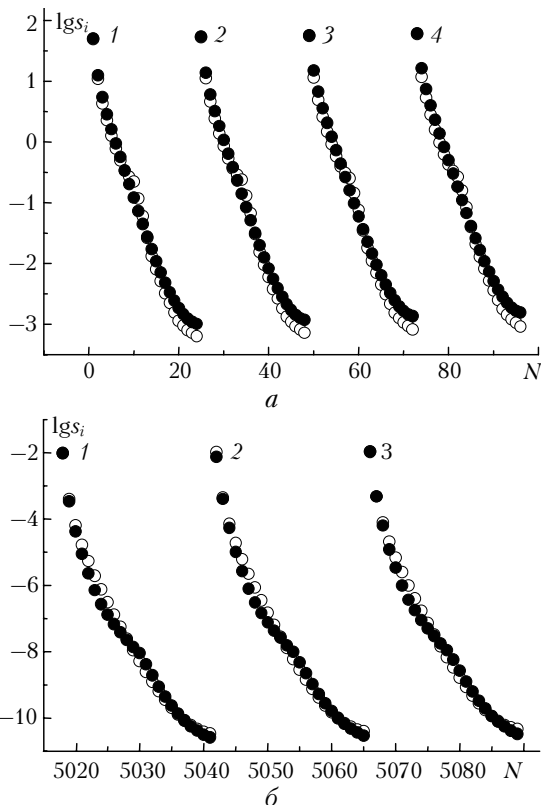


Рис. 5. Сравнение коэффициентов разложения s_i в рядах экспонент, исходных и полученных в результате аппроксимации для поглощения CO_2 в интервале $720\text{--}800\text{ см}^{-1}$; N – номер точки в последовательности значений $s_i(p, T)$; a – кривые 1, 2, 3, 4 соответственно для $T = 250, 255, 260, 265\text{ К}$ и $p = 1000\text{ мбар}$; b – кривые 1, 2, 3 для $T = 250, 255$ и 265 К и $p = 0,2\text{ мбар}$

к обычной аппроксимации значений s_i в зависимости от температуры и давления. Вопрос о том, какой из вариантов является предпочтительным, требует дополнительных исследований. Проведенные к настоящему времени расчеты говорят о том, что тот или иной способ может оказаться лучшим в зависимости от спектрального интервала, в общем же точность подгонки примерно одинакова для обоих случаев. Качество подгонки показывает рис. 5.

Группы точек s_i относятся к парам значений (p, T) . Значения s_i в общем уменьшаются с падением давления и растут с ростом температуры. Варианты a, b взяты из начала таблицы значений (p, T) и ближе к ее концу соответственно. В данном случае при подгонке использовалось выражение (14).

На рис. 6 представлены значения радиационных потоков, рассчитанных с помощью рядов экспонент и с аппроксимацией s_i выражением (14).

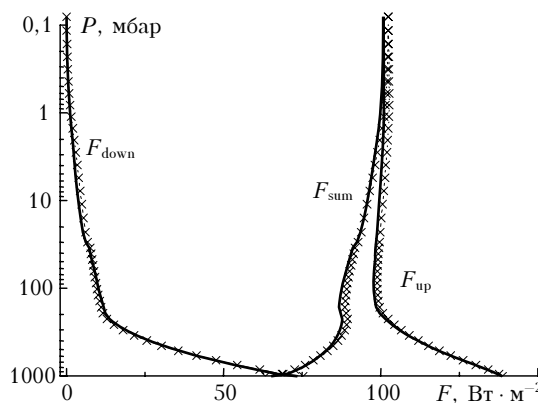


Рис. 6. Значения радиационных потоков CO_2 в интервале $720\text{--}800\text{ см}^{-1}$ для атмосферы лета средних широт (MLS), рассчитанные с помощью рядов экспонент (кривая) и с аппроксимацией s_i выражением (14) (крестики)

Рис. 7 показывает результаты сравнения высотных профилей скорости выхолаживания в интервале $720\text{--}800\text{ см}^{-1}$, посчитанных разными способами для стандартной атмосферы лета средних широт.

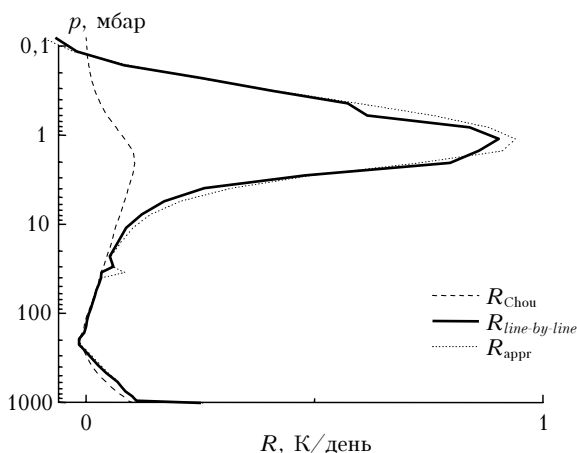


Рис. 7. Скорость выхолаживания для CO_2 в интервале $720\text{--}800\text{ см}^{-1}$ для атмосферы лета средних широт, полученная по формулам Chou [3], методом *line-by-line* и с помощью аппроксимационных формул (14)

Аппроксимационные формулы (13) для коэффициентов разложения в ряд экспонент с 24 членами показывают хорошее согласие с результатами нашего расчета *line-by-line* с шагом $0,01 \text{ см}^{-1}$.

Заключение

Аппроксимационные выражения для поглощающих масс, приводящие их к некоторым средним температуре и давлению, можно перенести на коэффициенты разложения в ряд экспонент.

Аппроксимирующие выражения для коэффициентов разложения потоков в ряд экспонент есть функции, зависящие от давления p и температуры T , абсцисс гауссовых точек и параметров подгонки. Для подбора параметров можно использовать программы нелинейной минимизации суммы квадратов отклонений.

Способ получения аппроксимирующих выражений применим к произвольным спектральным интервалам и позволяет корректно учитывать особенности контура линий поглощения, в том числе и в крыльях линий.

Полученные аппроксимационные выражения для коэффициентов разложения в ряд экспонент применимы для моделей атмосферы с произвольным распределением температур и давлений.

Таким образом, показана возможность существования аппроксимации коэффициентов разложения в ряд экспонент в зависимости от температуры и давления, применимой для произвольного высотного распределения термодинамических параметров. Результаты расчетов показывают эффективность применяемого метода нахождения аппроксимационных формул и хорошую точность скорости вычисления при их применении.

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований, грант № 05-05-64256.

1. *Lacis A., Oinas V.* A description of the correlated k -distribution method for modeling nongray gaseous absorption, thermal emission, and multiple scattering in vertically inhomogeneous atmospheres // *J. Geophys. Res.* D. 1991. V. 96. N 5. P. 9027–9063.
2. *Goody R., West R., Chen L., Crisp D.* The correlated- k method for radiation calculations in nonhomogeneous atmospheres // *J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer.* 1989. V. 42. N 6. P. 539–550.
3. *Chou M.-D., Ridgway W.L., Yan M.M.-H.* One-parameter scaling and exponential-sum fitting for water vapor and CO₂ infrared transmission functions // *J. Atmos. Sci.* 1993. V. 50. N 14. P. 2294–2303.
4. *Галин В.Я.* Параметризация радиационных процессов в атмосферной модели ИВМ РАН // *Изв. РАН. Физ. атмосф. и океана.* 1998. Т. 34. № 3. С. 380–389.
5. *Chou M.-D., Kouvaris L.* Calculation of transmission functions in the infrared CO₂ and O₃ bands // *J. Geophys. Res.* D. 1991. V. 96. N 5. P. 9003–9012.
6. *Богданова Ю.В., Родимова О.Б.* Однопараметрические аппроксимационные формулы для функций пропускания CO₂ в области 15 мкм // *Вычислит. технологии.* 2005. Т. 10. Ч. I. Спец. выпуск. С. 87–93.
7. *Родимова О.Б., Богданова Ю.В.* Расчет радиационных потоков, обусловленных углекислым газом, в ИК-области спектра // *Вычислит. технологии.* 2006. Т. 11. Ч. 3 Спец. выпуск. С. 44–51.
8. *Tarasova T.A., Fomin B.A.* Solar radiation absorption due to water vapor: Advanced broadband parametrizations // *J. Appl. Meteorol.* 2000. V. 39. N 11. P. 1947–1951.
9. *Tvorogov S.D., Nesmelova L.I., Rodimova O.B.* k -distribution of transmission function and theory of Dirichlet series // *J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer.* 2000. V. 66. N 3. P. 243–262.
10. *Anderson G.P., Clough S.A., Kneizys F.X., Chetwynd J.H., Shettle E.P.* AFGL Atmospheric Constituent Profiles (0–120 km), AFGL-TR-86-0110 // *Environ. Res. Papers.* 1986. N 954. Air Force Geophys. Laboratory, Hanscom AFB. Mass., U.S.A.

Yu.V. Bogdanova, O.B. Rodimova. On thermodynamic dependences of expansion of the radiation characteristic coefficients into series of exponents.

Earlier developed method of obtaining the one-parametric approximation formulas for the atmospheric transmission functions in specified spectral regions used the exact expressions for the expansion coefficients of the functions under study into series of exponents and the altitude behaviour of temperatures and pressures characteristic of the standard atmospheric models. In the present paper the approximation of the expansion coefficients into series of exponents dependent on temperature and pressure is obtained for the whole range of temperatures and pressures observable in the atmosphere. Further it can be applied to the arbitrary altitude distribution of thermodynamic parameters. Potentialities of the approximation are illustrated by examples of the radiation fluxes calculation due to the CO₂ absorption in the range of 15 micron band.