

УДК 535.33.34

К.М. Фирсов, Т.Ю. Чеснокова

**НОВЫЙ МЕТОД УЧЕТА ПЕРЕКРЫВАНИЯ ПОЛОС ПОГЛОЩЕНИЯ
АТМОСФЕРНЫХ ГАЗОВ ПРИ ПАРАМЕТРИЗАЦИИ УРАВНЕНИЯ ПЕРЕНОСА**

Описывается метод параметризации уравнения переноса длинноволновой радиации в атмосфере Земли. Характеристики молекулярного поглощения рассчитываются на основе параметров спектральных линий. Показано, что метод *k*-распределения допускает некоторый произвол при вычислениях частотной зависимости преобразованного коэффициента молекулярного поглощения. Данная неопределенность позволила построить феноменологическую схему учета перекрытия полос поглощения разных газов, которая обеспечивает высокую степень параметризации функций пропускания в сравнении с традиционными методами. Оценки показывают, что погрешность расчета функций пропускания в сравнении с методом line-by-line не превышает 1–2% для произвольных атмосферных трасс.

Введение

Специфика современных задач климатологии состоит в том, что расчет переноса радиации через атмосферу Земли должен выполняться достаточно быстро, но без потери точности, что, в сущности является взаимоисключающими требованиями [1, 2]. Вследствие этого значительные усилия исследователей направлены на создание эффективных методов параметризации уравнения переноса, которые позволили бы найти компромисс между скоростью света и точностью. В данной статье описывается метод параметризации функций пропускания в случае перекрывающихся полос поглощения атмосферных газов.

Для того чтобы пояснить особенности учета молекулярного поглощения в радиационных задачах, рассмотрим решение уравнения переноса длинноволнового излучения в безоблачной атмосфере в виде [1]

$$F^\uparrow(z) = \int_0^\infty \pi B_\nu(z_0) T_\nu^f(z, z_0) d\nu + \int_0^z \int_0^z \pi B_\nu(z') \frac{dT_\nu^f(z, z')}{dz'} dz' d\nu; \tag{1}$$

$$F^\downarrow(z) = \int_0^z \int_0^z \pi B_\nu(z') \frac{dT_\nu^f(z, z')}{dz'} dz' d\nu, \tag{2}$$

где $F^\uparrow(z)$ и $F^\downarrow(z)$ – потоки, направленные вверх и вниз через уровень z соответственно; $B_\nu(z)$ – функция Планка; $T_\nu^f(z, z')$ – диффузная функция пропускания, определяемая соотношением

$$T_\nu^f(z, z') = 2 \int_0^1 \exp \left\{ -\frac{1}{\mu} \tau(\nu, z, z') \right\} d\mu, \tag{3}$$

где μ – косинус зенитного угла;

$$\tau(z, z') = \int_z^{z'} K(\nu, p(h), T(h)) \rho(h) dh, \tag{4}$$

$\tau(z, z')$ – оптическая толщина слоя $z-z'$; $K(\nu, p(h), T(h))$ – коэффициент молекулярного поглощения, является функцией давления p и температуры T ; $\rho(h)$ – концентрация газа.

Для описания формы контура отдельной линии на неоднородной трассе применяется, как правило, фойгтовский контур, который является сверткой доплеровского и лоренцевского контуров и содержит несобственный интеграл. Кроме того, при расчете коэффициентов поглощения необходимо проводить суммирование по большому числу спектральных линий (в полосах поглощения озона приходится учитывать до 10^5 линий). Это суммирование можно интерпретировать как еще одно интегрирование. Необходимо подчеркнуть, что интегрирование по частоте – это интегрирование быстроосциллирующих функций. Несмотря на все усилия по разработке быстрых алгоритмов расчета характеристик молекулярного поглощения [3, 4], даже для этого простейшего случая использование прямых методов требует значительных затрат компьютерного времени.

Как правило, первым этапом параметризации уравнения переноса [1, 2] является приближение

$$T_\nu^f(z, z') = \exp \left\{ -\frac{1}{\mu_0} \tau(z, z') \right\}, \tag{5}$$

где $\mu_0 = 1,66$. В работе [5] отмечено, что это сказывается только в нижней тропосфере для нисходящих потоков, причем погрешность расчета не превышает 1 Вт/м^2 .

Далее, как правило, разбивают интеграл по частоте на подынтервалы $\Delta\nu$, в пределах которых функцию Планка можно считать постоянной, и

приходят к уравнениям типа (1) и (2), но под $T_v^f(z, z')$ понимают уже функцию пропускания, усредненную по спектральному интервалу Δv [1, 2]:

$$T_v^f(z, z') = \frac{1}{\Delta v} \int_{\Delta v} \times \exp \left\{ -\frac{1}{\mu_0} \int_z^{z'} K(v, p(h), T(h)) \rho(h) dh \right\} dv. \quad (6)$$

Таким образом, задача параметризации уравнения переноса в первую очередь связана с параметризацией функций пропускания, описываемой выражением (6). Следует заметить, что введение диффузного фактора, описываемого выражением (5), не является обязательным для параметризации уравнения переноса (см., например, [6, 7]).

Параметризация функций пропускания в случае поглощения одним газом

В настоящее время уже является установленным фактом, что методы модельного представления спектров поглощения и могут приводить к значительным погрешностям, особенно в случае поглощения углекислым газом и озоном [1, 5, 8]. Для уменьшения этих погрешностей приходится отказываться от стандартного метода Куртиса–Годсона [9], что усложняет функциональную зависимость функции пропускания от метеопараметров и не всегда приводит к успеху. Сопоставление радиационных алгоритмов, проведенное в 1990 г., показало, что даже для чисто молекулярной атмосферы (без учета рассеяния и облаков) разброс данных весьма значительный, погрешности на порядок превышают требуемые [10]. Эти расхождения обусловлены, главным образом, способом параметризации характеристик молекулярного поглощения, входящих в уравнение переноса.

Применение преобразования Лапласа дает возможность представить функцию пропускания в виде ряда экспонент (в западной литературе этот метод принято называть «k-distribution»), что позволяет не только повысить точность аппроксимаций, но и упростить технологию получения параметров.

Кроме того, экспоненциальное представление функций пропускания является удобной аппроксимацией при решении уравнения переноса в рассеивающей среде [11, 12].

Использование преобразования Лапласа дает возможность представить функцию пропускания в виде [12]

$$T = \int_0^1 \exp \{-\tau(g)\} dg, \quad (7)$$

где $\tau(g)$ – оптическая толщина, показатель экспоненты в подынтегральном выражении (6):

$$g(\tau) = \frac{1}{v_2 - v_1} \int_{v_1}^{v_2} W(v) dv, \quad (8)$$

$$W(v) = \begin{cases} 1, & \tau(v) < \tau, \\ 0, & \tau(v) > \tau. \end{cases} \quad (9)$$

Способ расчета $g(\tau)$ сводится к суммированию интервалов, для которых выполняется условие $\tau(v) < \tau$. В результате этого получается монотонно возрастающая функция $g(\tau)$, обращая которую легко получить $\tau(g)$. Численная реализация достаточно тривиальна. Для расчета $\tau(g)$ необходимо коэффициенты поглощения, рассчитанные с постоянным шагом по частоте, отсортировать по возрастанию.

В работах [11, 13] для вычисления функций пропускания применялись соотношения

$$T = \int_0^\infty f(\tau) \exp\{-\tau\} d\tau, \quad (10)$$

где

$$f(\tau_i) = \frac{1}{v_2 - v_1} \sum_j \left| \frac{\Delta v_j}{\Delta \tau_i} \right| W(\tau_i, \tau_{i+1}). \quad (11)$$

Функция $W(\tau_i, \tau_{i+1})$ отлична от нуля (равна единице) для тех спектральных интервалов, где выполняется условие $\tau_i < \tau(v) < \tau_{i+1}$. Для того чтобы установить связь между (7)–(9) и (10)–(11), воспользуемся соотношением [12]

$$g(\tau) = \int_0^\tau f(\vartheta) d\vartheta, \quad (12)$$

из которого следует, что

$$f(\tau) = \frac{dg}{d\tau} \Rightarrow f(\tau) \Delta\tau \approx g(\tau + \Delta\tau) - g(\tau). \quad (13)$$

Соотношение (13) справедливо в силу того, что функция $g(\tau)$ гладкая, монотонно возрастающая и всюду дифференцируема. Из (13) и (18) следует, что для вычисления $f(\tau) \Delta\tau$ необходимо просуммировать спектральные интервалы, для которых выполняется условие $\tau < \tau(v) < \tau + \Delta\tau$, что легко позволяет проследить связь (11) и (8). Следует заметить, что промежуточные вычисления $f(\tau)$ приводят к излишнему усложнению численной реализации и, кроме того, численное дифференцирование всегда приводит к дополнительным погрешностям.

Соотношения (7)–(9) позволяют заменить быстоосциллирующую функцию $\tau(v)$ на монотонную $\tau(g)$, но и только. Задача параметризации не решена, так как при изменении термодинамических параметров атмосферы необходимо по-новому проводить расчеты $\tau(v)$ методом line-by-line, а затем вычислять

$\tau(g)$. В этом смысле нет никакого выигрыша по сравнению с традиционным методом line-by-line, так как основные затраты компьютерного времени приходится не на интегрирование по частоте, а на расчет $\tau(v)$ [3, 4].

Для того чтобы получить модель, применимую для меняющейся атмосферы, необходимо параметризовать $\tau(g)$. Для этого можно воспользоваться методом приведенной поглощающей массы [11, 14] «scale approximation», либо методом c - k -корреляции [6, 13], который позволяет аппроксимировать оптическую толщину выражением

$$\tau(g, z, z') = \int_z^{z'} K(g, p(h), T(h)) \rho(h) dh, \quad (14)$$

где $K(g, p(h), T(h))$ – коэффициенты поглощения на частоте g и высоте h . Качественная интерпретация c - k -корреляции может быть следующей: она справедлива, если коэффициенты молекулярного поглощения, относящиеся к одинаковой частоте g , с изменением высоты не меняют свое положение в преобразованном спектре $k(g)$. Для того чтобы вычислить $K(g)$, необходимо рассчитать $K(v)$ с постоянным шагом по частоте в диапазоне $\nu_1 - \nu_2$, а затем отсортировать по возрастанию и провести нормировку спектрального интервала на $\Delta\nu$. Т.е. в основу этой аппроксимации положен физический факт, что спектральная зависимость коэффициента молекулярного поглощения для каждой линии примерно одинаково трансформируется с ростом высоты. Следует ожидать, что вблизи центров слабых линий могут наблюдаться отклонения. Тем не менее для атмосферных условий величина этих спектральных интервалов, в которых могут наблюдаться отклонения, незначительна. Численные оценки применимости c - k -корреляции были сделаны в работах [6, 13]. Погрешность расчета функции пропускания не превышала 1%.

Вследствие того, что подынтегральное выражение (7) является гладкой функцией, для вычисления интеграла необходимо, как правило, 5–10 членов ряда, в зависимости от применяемых квадратурных формул, т.е.

$$T_v^f(z, z') = \sum_{i=1}^n C_i \exp \left\{ -\frac{1}{\mu_0} \int_z^{z'} K(g_i, p(h), T(h)) \rho(h) dh \right\}. \quad (15)$$

Наш опыт показал, что достаточно сравнительно небольшого набора фиксированных давлений и температуры, чтобы насчитать массив коэффициентов поглощения $K(g_i, p_j, T_k)$, который обеспечивает вычисление функций пропускания для произвольных атмосферных условий (для этого достаточно $\sim 10^3$ значений $K(g_i, p_j, T_k)$).

На рис. 1, 2 изображены типичные зависимости коэффициентов поглощения от высоты и температуры.

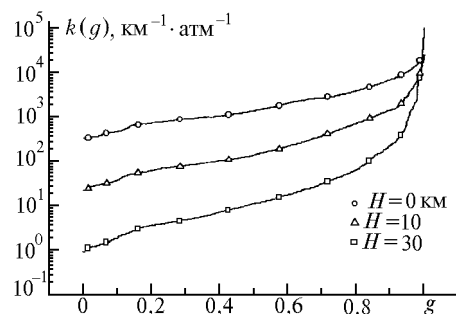


Рис. 1. Высота зависимость коэффициента $k(g)$

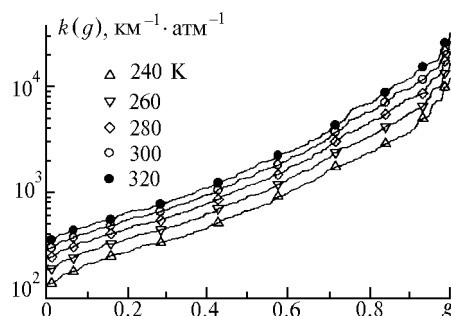


Рис. 2. Температурная зависимость коэффициента поглощения. Точками на графике отмечены значения $k(g)$, соответствующие узлам гауссовских квадратур

Перекрытие полос поглощения

Можно констатировать, что на современном этапе разработаны подходы и созданы методики, которые позволяют достаточно эффективно параметризовать функцию пропускания в случае неоднородной атмосферы, но только лишь в том случае, если рассматривается одна поглощающая компонента.

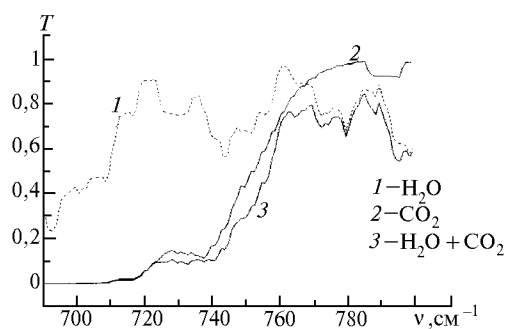


Рис. 3. Спектр пропускания атмосферы для вертикальной трассы 0–50 км. Спектральное разрешение 10 см^{-1} . Метеомодель – лето средних широт. Расчет произведен методом line-by-line

В случае перекрытия полос поглощения двух и более газов суммарное пропускание аппроксимируют в форме произведения функций пропускания отдельных газов. Недостатками этой аппроксимации является то, что перемножение функций пропускания, представленных в виде ряда экспонент, приводит к значительному увеличению количества членов разложения,

что весьма критично в задачах климатологии [1, 16] и, кроме того, это не гарантирует от погрешностей.

На рис. 3 приведен пример расчета функций пропускания прямым методом для случая перекрытия полос поглощения H_2O и CO_2 , а на рис. 4 – погрешность аппроксимации, которая может составлять величину, достигающую 3–4%.

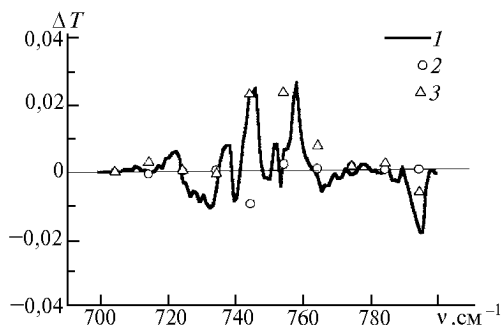


Рис. 4. Погрешность учета перекрытия полос поглощения H_2O и CO_2 при использовании различных аппроксимаций: 1 – суммарная функция пропускания представляется в виде произведения функций пропускания H_2O и CO_2 ; 2, 3 – модель, описанная в данной статье (2 – лето средних широт, 3 – зима полярных широт)

В работе [6] для учета перекрытия полос поглощения двух газов предложен весьма оригинальный подход. Вследствие того что функции пропускания для каждого газа можно рассматривать как изображения, а $f(k)$ как оригиналы, для поглощения двух газов будет справедливо выражение типа свертки

$$g(k) = \int_0^k g_1(k-k') g_2(k') dk'. \quad (16)$$

Это соотношение позволяло избавиться от первого недостатка, связанного с увеличением числа членов разложения функции пропускания в ряд экспонент, однако плата за это достаточно высока, для вычисления интеграла (16) необходима детальная информация о $g_1(k)$ и $g_2(k)$.

Мы решили отказаться от традиционного метода учета перекрытия полос поглощения в виде произведения функций пропускания. Наш подход к этой проблеме детально описан в работе [15], поэтому ниже изложены только основные моменты. Для простоты рассмотрим однородную трассу. Функция пропускания в случае двух поглощающих газов может быть представлена в виде

$$T(U_1, U_2) = \frac{1}{\Delta\nu} \int_{\nu_1}^{\nu_2} \exp \{-K_1(\nu) U_1 - K_2(\nu) U_2\} d\nu. \quad (17)$$

В принципе к выражению (17) можно применить одномерное преобразование Лапласа и получить выражение типа (7) с суммарной оптической толщиной $\tau(g) = k_1(g) U_1 + k_2(g) U_2$. Ясно, что она будет рассчитана для конкретных значений U_1 и U_2 , при изменении U_1 и U_2 расчет $\tau(g)$ необходимо проводить по-новому.

Мы предположили, что для частичной корреляции спектров разных газов функцию пропускания можно представить в виде

$$T_A(U_1, U_2) = \int_0^1 \exp \{-k_1(g) U_1 - \varphi_2(g) U_2\} dg \quad (18)$$

с неизвестной функцией $\varphi_2(g)$, на которую накладывается условие

$$\begin{aligned} T_A(U_1 = 0, U_2) &= \int_0^1 \exp \{-\varphi_2(g) U_2\} dg = \\ &= \int_0^1 \exp \{-k_2(g) U_2\} dg. \end{aligned} \quad (19)$$

Это условие делает соотношение (18) точным для $U_1 = 0$ либо $U_2 = 0$ и позволяет связать между собой $\varphi_2(g)$ и $k_2(g)$:

$$k_2^{-1}(g) = g(k_2) = \int_0^1 W_\varphi(g) dg, \quad (20)$$

где

$$W_\varphi(g) = \begin{cases} 1, & \varphi(g) < k_2, \\ 0, & \varphi(g) > k_2. \end{cases} \quad (21)$$

Соотношения (20)–(21) не дают схему построения $\varphi_2(g)$. Вследствие этого мы чисто феноменологически стали строить эту неизвестную функцию. Мы предположили, что функция $\varphi_2(g)$ – гладкая, одновершинная кривая, которую можно получить, деформируя $k_2(g)$ таким образом, чтобы выполнялось условие (21). Это возможно, так как интегральное преобразование (19) допускает неоднозначность. Типичный вид $\varphi_2(g)$ показан на рис. 5.

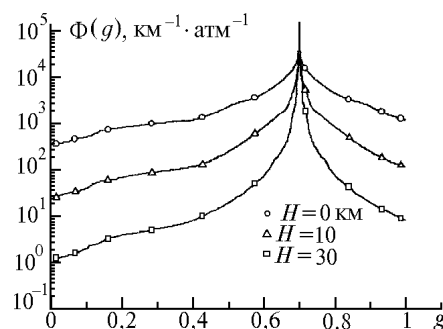


Рис. 5. Типичный вид функции $\varphi_2(g)$

Мы обнаружили, что если максимум этой функции приходится на $g_0 = 1$, то пропускание смеси, как правило, завышено, а если $g_0 = 0$, то пропускание занижено. Если же мы представляем $\varphi_2(g)$ в виде одновершинной кривой, то, варьируя g_0 , удастся добиться согласия между точным расчетом и аппроксимационной формулой. Функцию $\varphi_2(g)$ можно пред-

ставить в более сложном виде, но потребуется большее число членов ряда.

Положение максимума определяется из условия

$$\int_0^{\infty} \int_0^{\infty} [T_A(U_1, U_2) - T(U_1, U_2)]^2 dU_1 dU_2 = \delta \rightarrow \min. \quad (22)$$

Применяя гауссовские квадратуры к (17), можно получить ряд экспонент

$$T_A(U_1, U_2) = \sum_{i=1}^n C_i \exp \{-k_1(g_i) U_1 - \varphi_2(g_i) U_2\}. \quad (23)$$

Численное моделирование показало, что достаточно учитывать 10 членов ряда.

На рис. 4 приведены погрешности расчета функций пропускания по формуле (23) в сравнении с прямым расчетом [18] с использованием параметров линий из атласа HITRAN-92 [19, 20] для среднезональных метеомоделей [21]. Положение центра функции $\varphi_2(g)$ определялось для метеоусловий, соответствующих модели «лето средних широт». Изменение метеоусловий вызвало увеличение погрешности, причем она носит случайный характер и не превышает тех погрешностей, к которым приводит перемножение функций пропускания отдельных газов. Последующее усреднение по более широкому спектральному интервалу позволяет существенно уменьшить эту погрешность.

Основные выводы

Метод, описанный в данной статье, позволяет представить функцию пропускания для произвольного спектрального разрешения в виде ряда с числом членов не более 10.

Для описания возможных атмосферных метеоусловий коэффициент поглощения представим в виде матрицы $K(g_k, P_m, T_n)$, $k = 1, 10$; $m = 1, 20$; $n = 1, 5$. Интегрирование по высоте осуществляется с помощью сплайн-функций.

Погрешность расчета по сравнению с методом line-by-line не превышает 1%, за исключением случаев сильного перекрытия полос разных газов, когда она может незначительно возрасти. Последующее усреднение по более широкому спектральному интервалу позволяет избавиться от этой погрешности.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 96-05-64293, 96-15-98476).

1. *Stephens G.L.* The Parametrization of Radiation for Numerical Weather Prediction and Climate Models. *Monthly weather rev.* 1984. V. 112. P. 826–867.
2. *Fouquart Y.* Radiative transfer in climate models. Physically-based Modelling and Simulation of Climate and Climatic Change,

Shlesinger M.E. Ed., Kluwer Academic Publishers. Part 1. 1988. P. 223–283.

3. *Fomin B.A.* Effective line-by-line technique to compute radiation absorption in gasses. Preprint IAE-5658/1, Russian Research Center «Kurchatov Institute», Moscow, 1993.
4. *Mitsel A.A., Firsov K.M.* A fast line-by-line method // *Journ. Quant. Spectr. Radiat. Transfer.* 1995. V. 54. P. 549–557.
5. *Розанов Е.В., Тимофеев Ю.М., Троценко А.Н.* Сравнение приближенного и эталонного методов расчета характеристик радиационного теплообмена в атмосфере // *Изв. АН СССР.* 1990. Сер. ФАО. Т. 26. N 6. С. 602–606.
6. *Goody R., West R., Chen L., Crisp D.* The correlated k-method for radiation calculations in nonhomogeneous atmospheres // *Journ. Quant. Spectr. Radiat. Transfer.* 1989 V. 42. N 6. P. 539–550.
7. *Творогов С.Д.* Применение рядов Дирихле в атмосферной спектроскопии // *Оптика атмосферы и океана.* 1997. Т. 10. N 4–5. С. 403–413.
8. *Wang W.-C., Shi G.-Yu.* Total band absorptance and k-distribution function for atmospheric gases // *Journ. Quant. Spectr. Radiat. Transfer.* 1988. V. 39. N 5. P. 387–397.
9. *Chou M., Kouvaris L.* Calculations of transmission functions in the Infrared CO₂ and O₃ bands // *Journ. Geophys. Res.* 1991. V. 96. N D5. P. 9003–9012.
10. *Fourquart Y., Bonnel B.* Intercomparing Shortwave Radiation Codes for Climat Studies // *Journ. Geophys. Res.* 1991. V. 96. N D5. P. 8955–8968.
11. *Chou M.D., Arking A.* An efficient method for computing the absorption of solar radiation by water vapor // *Journ. of the Atmosph. Sciences* 1981. V. 38. P. 798–807.
12. *Творогов С.Д.* Некоторые аспекты задачи о представлении функции поглощения рядом экспонент // *Оптика атмосферы и океана.* 1994. Т. 7. N 3. С. 315–326.
13. *Lacis A., Oinas V.* A Description of the k-distribution method for modeling non-grey gaseous absorption, thermal emission, and multiple scattering in vertically inhomogeneous atmospheres // *Journ. Geophys. Res.* 1991. V. 96(D). N 5. P. 9027.
14. *Фирсов К.М., Смирнов А.Б.* Представление функций пропускания рядом экспонент // *Оптика атмосферы и океана.* 1995. Т. 8. N 8. С. 1248–1253.
15. *Firsov K.M., Mitsel A.A.* The effective parametrisation of overlapping water vapor and carbon dioxide absorption bands // *Proc. Of the XIIIth international symposium on high resolution molecular spectroscopy, SPIF.* P. 361–366.
16. *Галин В.Я.* Формирование радиационных потоков тепла в модели общей циркуляции атмосферы. 1984 (Препринт / Отдел вычислительной математики АН СССР. N 75). 16 с.
17. *Riviere Ph., Soufiani A., Taqinet J.* Correlated-k and fictitious gas methods for H₂O near 2.7 μm // *Journ. Quant. Spectr. Radiat. Transfer.* 1992. V. 48. N 2. P. 187–203.
18. *Мицель А.А., Пташник И.В., Фирсов К.М., Фомин Б.А.* Эффективный метод полинейного света пропускания поглощающей атмосферы // *Оптика атмосферы и океана.* 1995. Т. 8. N 10. С. 1547–1551.
19. *Rothman L.S., Gamache R.R., Goldman A., Brown L.R., Toth R.A., Pickett H.M., Poynter R.L., Flaud J.-M., Camy-Peyret C., Barbe A., Husson N., Rinsland C.P., and Smith M.A.H.* The HITRAN database: 1986 Edition // *Appl. Opt.* 1987. V. 26. P. 4058–4097.
20. *Rothman L.S., Gamache R.R., Tipping R.H., Rinsland C.P., Smith M.A.H., Benner D.C., Deori V.M., Flaud J.-M., Camy-Peyret C., Perrin A., Goldman A., Massie S.T., Brown L.R. and Toth R.A.* The HITRAN molecular database: editions of 1991 and 1992 // *Journ. Quant. Spectr. Radiat. Transfer.* 1992. V. 48. P. 469–507.
21. *Зуев В.Е., Комаров В.С.* Статистические модели температуры и газовых компонент атмосферы // *Л.: Гидрометеоздат,* 1986. 264 с.

K.M. Firsov, T.Yu. Chesnokova. **New Method for Accounting for Absorption Bands of Atmospheric Gases in Transfer Equation Parametrization.**

New method for parametrization of transfer equation for longwave radiation in the Earth's atmosphere is described. The molecular absorption characteristics are calculated based on the parameters of spectral lines. The method of k-distribution is shown to assume some arbitrariness in calculation of frequency dependence of the transformed molecular absorptance. Such arbitrariness allowed us to construct a phenomenologic scheme for an accounting for absorption bands overlapping for different gases, which provides a high degree parametrization of transmission functions comparative to traditional methods. Estimates show the calculation error for the transmission functions to be less than 1–2% in comparison with the line-by-line method for arbitrary atmospheric paths.