

Влияние качества спектроскопической информации на моделирование нисходящих потоков солнечного излучения в УФ-диапазоне

Татьяна Юрьевна Чеснокова, Юлия Викторовна Воронина

*Институт оптики атмосферы СО РАН, г. Томск
634055, г. Томск, пл. акад. Зюева, 1
ches@iao.ru, yulia@iao.ru*

Поступила в редакцию 26.02.2008 г.

Проведено моделирование нисходящих потоков солнечного излучения в диапазоне 280–370 нм для различных экспериментальных данных по сечениям поглощения озона и NO₂. Этот диапазон представляет интерес для восстановления общего содержания озона в атмосфере из измерений спектра солнечного излучения, приходящего на поверхность Земли. В расчетах учитывались поглощение атмосферными газами, молекулярное и аэрозольное рассеяние и поглощение, а также облачность. Показано, что спектральные потоки, вычисленные со спектральным разрешением 1 нм с тремя наиболее популярными наборами данных по сечениям поглощения озона, отличаются на 8% и более. При этом общее содержание озона, восстановленное из измерений солнечного фотометра, может отличаться на 2%. Различие в потоках при использовании различных данных сечений поглощения NO₂ составило 0,3%.

Ключевые слова: сечения поглощения озона, УФ-радиация.

Введение

Измерения спектральных потоков солнечного излучения, приходящего на поверхность Земли в спектральном диапазоне 300–370 нм, используются для определения общего содержания озона в атмосфере, оптической толщи аэрозоля и других оптически активных компонент, влияющих на климатический режим планеты. Для решения обратной задачи восстановления общего содержания газов необходим точный учет характеристик молекулярного поглощения. В настоящее время имеется множество экспериментальных данных разных авторов по сечениям поглощения озона, полученных в достаточно большом диапазоне температур при различном спектральном разрешении.

Согласно исследованиям [1] использование сечений поглощения озона, определенных в эксперименте GOME [2], и сечений поглощения, полученных Bass, Paul [3] и Daumont, Malicet, Brion [4–6], может значительно влиять на восстановление озона из-за различия в этих данных. Результаты восстановления озона из данных спутниковых измерений излучения с использованием этих сечений поглощения имели различие до 12 е.д. в общем содержании озона и до 100% в восстановленном значении озона в отдельных слоях атмосферы. В работе [7] сделаны оценки различий в функциях пропускания, вычисленных с сечениями поглощения озона Bass [3], Daumont [4] и Molina [8]. Функции пропускания отличались до 10%.

В ИОА СО РАН работает сеть солнечных фотометров [9], измеряющих приходящее солнечное излучение. На фотометрах имеются фильтры в УФ-диапазоне спектра, что дает возможность определять общее содержание озона в атмосфере. В данной статье рассмотрено влияние различия в массивах спектроскопических данных по сечениям поглощения озона и NO₂ на моделирование нисходящих потоков солнечного излучения и точность восстановления общего содержания озона в атмосфере из измерения солнечного излучения фотометром SP6.

Моделирование потоков солнечного излучения в ультрафиолетовом диапазоне

В настоящее время для решения стационарного уравнения переноса солнечного излучения в рассеивающей и поглощающей атмосфере широко используется метод дискретных ординат DISORT [10], который позволяет корректно учесть многократное рассеяние излучения в сочетании с высокой скоростью расчета. Входными данными для вычисления потоков излучения являются высотные профили оптической толщи газового поглощения и аэрозоля, альbedo однократного рассеяния аэрозоля, коэффициентов молекулярного (рэлеевского) рассеяния и поглощения, коэффициентов рассеяния и поглощения в облаках, индикатрисы рассеяния аэрозоля и облачности, альbedo подстилающей поверхности.

В УФ-диапазоне оптическая толщина поглощения атмосферных газов определяется на основе экспериментальных данных по сечениям поглощения, полученных при вариации температур и давлений в лабораторных условиях. Для получения значения поглощения в произвольных атмосферных условиях используются интерполяционные полиномы, описывающие температурную зависимость сечений поглощения [11]. В спектральном диапазоне 280–370 нм основными поглощающими газами являются O_3 и NO_2 , меньший вклад в поглощение вносят атмосферные SO_2 , BrO , HNO_2 , $OCIO$ и формальдегиды.

В атмосферных расчетах достаточно часто используются сечения поглощения озона, определенные в экспериментах [3, 4–6, 8, 12, 13].

В исследованиях [14] было рекомендовано использовать в атмосферных расчетах данные [3–6].

Для моделирования потоков излучения мы выбрали три набора данных из [3, 4, 8], так как они были получены с наиболее высоким спектральным разрешением и для большого диапазона температур. Абсолютная и относительная разница в сечениях поглощения озона при температуре 298 К представлена на рис. 1.

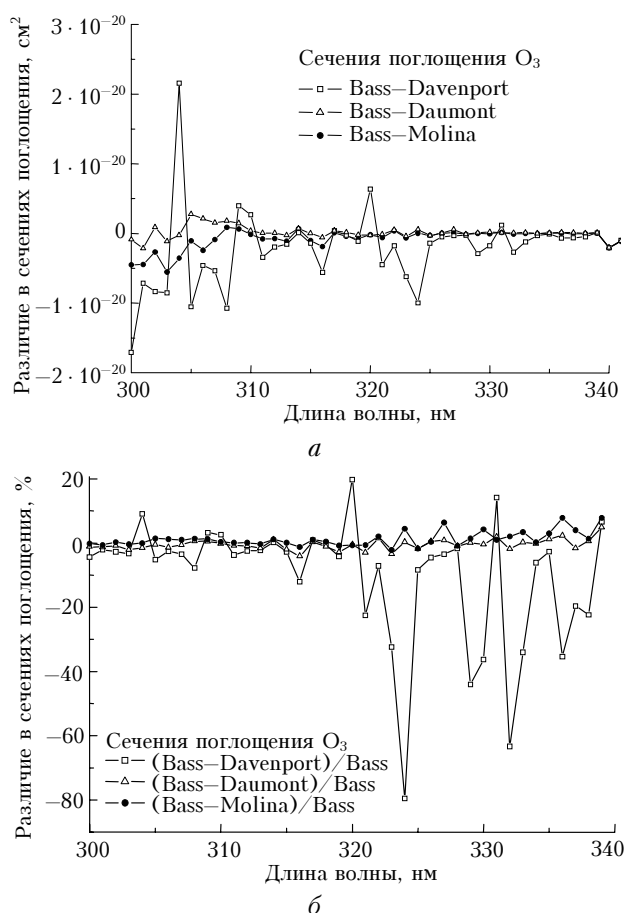


Рис. 1. Абсолютная (а) и относительная (б) разница в сечениях поглощения озона при температуре 298 К

Относительная разница в сечениях поглощения озона определялась относительно данных Bass [3], так как они включены в спектроскопическую базу

данных HITRAN-2004 [15] и достаточно часто используются в расчетах атмосферного переноса солнечного излучения.

На рис. 2 приведена абсолютная и относительная разница в сечениях поглощения NO_2 в работах [16–18]. Различие на спектральном интервале 300–350 нм достигает 20%.

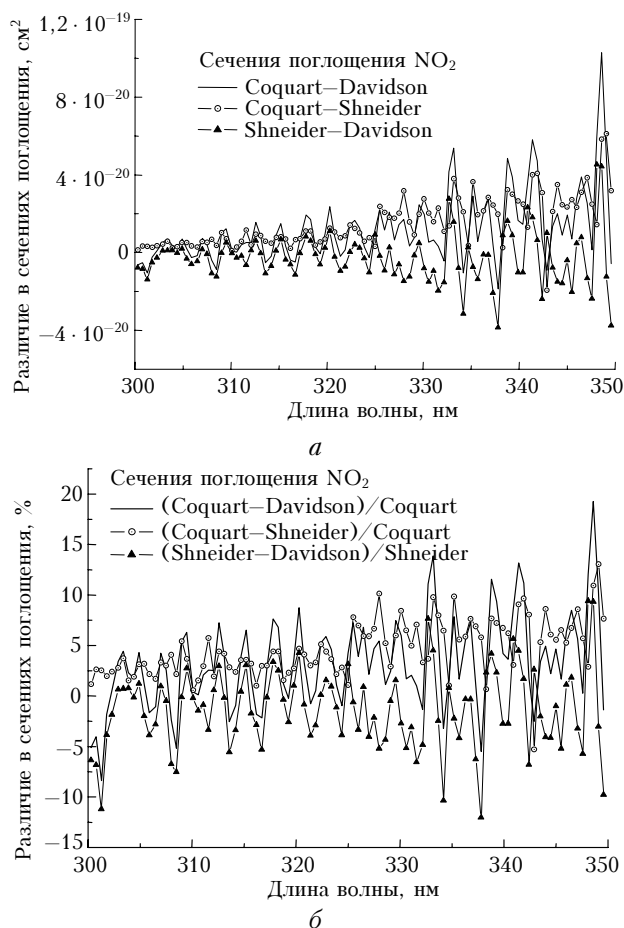


Рис. 2. Абсолютная (а) и относительная (б) разница в сечениях поглощения NO_2 при температуре 298 К

Моделирование потоков осуществлялось для метеоусловий лета средних широт AFGL [19]. Оптическая толщина аэрозоля задавалась по формуле Англстрема с параметрами $\alpha = 1,1$ и $\beta = 0,2$, при этом ее значение менялось в пределах от 1,4 до 1,32 для длин волн 300–400 нм. Индикатриса рассеяния аэрозоля рассчитывалась по формуле Хенни–Гринстейна [20] со средним косинусом рассеяния 0,7. Общее содержание озона 300 е.Д. Концентрация других атмосферных газов задавалась согласно метеомодели AFGL [19]. В расчетах учитывались сечения поглощения озона [3, 4, 8], сечения поглощения NO_2 [16–18], рэлеевское и аэрозольное рассеяние и поглощение. Расчет производился со спектральным разрешением 1 нм и зенитным углом Солнца (SZA), равным 30° . Результаты сравнения нисходящих потоков солнечного излучения на уровне Земли, вычисленных с различными сечениями поглощения O_3 , представлены на рис. 3.

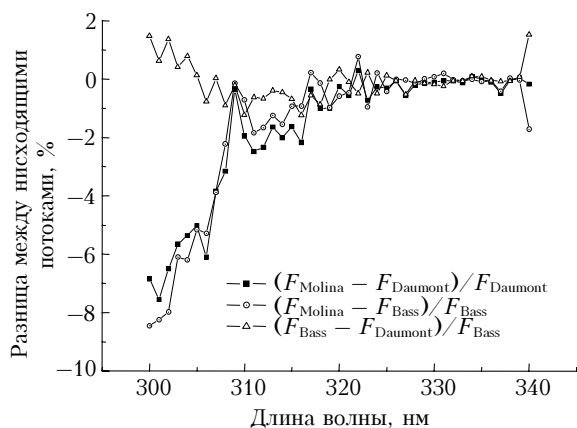


Рис. 3. Относительная разница между нисходящими потоками на уровне поверхности Земли, вычисленными с сечениями поглощения озона Molina [8], Bass [3] и Daumont [4]. Зенитный угол Солнца 30°

При сравнении потоков с сечениями Molina [8] – Bass [3] и Daumont [4] – Bass [3] относительное различие определялось по отношению к потокам, вычисленным с сечениями Bass [3]. При сравнении потоков с сечениями Daumont [4] и Molina [8] относительное различие определялось по отношению к потокам, вычисленным с сечениями Daumont [4]. Относительная разница в потоках, вычисленных с данными Molina [8] и Bass [3], достигает 8% и более. Различие между потоками с сечениями Daumont [4] и Bass [3] не превысило 2%.

На рис. 4 приведено сравнение нисходящих потоков, вычисленных с сечениями поглощения NO₂ по данным Coquart [16], Davidson [17] и Shneider [18]. Относительная разница между потоками в спектральном диапазоне 280–370 нм не превысила 0,3%. Различие в данных по сечениям поглощения NO₂ оказывает меньшее влияние на расчеты потоков, чем различия в сечениях поглощения озона, так как в атмосфере содержится на порядок меньше NO₂ по сравнению с O₃. Различия в сечениях поглощения NO₂

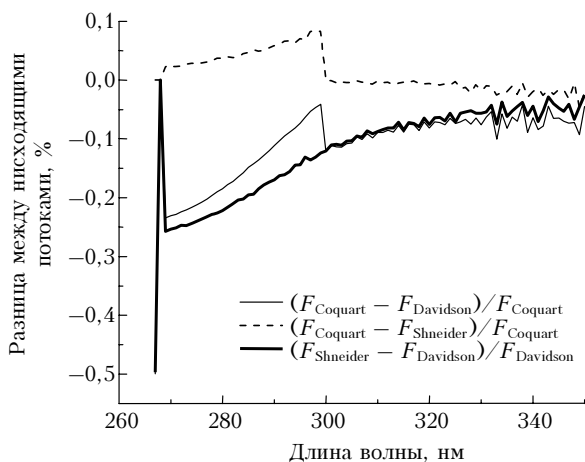


Рис. 4. Относительная разница между нисходящими потоками на уровне поверхности Земли, вычисленными с сечениями поглощения NO₂ Coquart [16], Davidson [17] и Shneider [18]. Зенитный угол Солнца 30°

не будут заметно влиять на результаты восстановления озона, но будут играть значительную роль в задачах определения NO₂.

На рис. 3 и 4 приведены результаты сравнения потоков для зенитного угла Солнца 30°. Абсолютное значение потоков нисходящего излучения для зенитных углов Солнца 30 и 75° для облачных и безоблачных ситуаций показано на рис. 5.

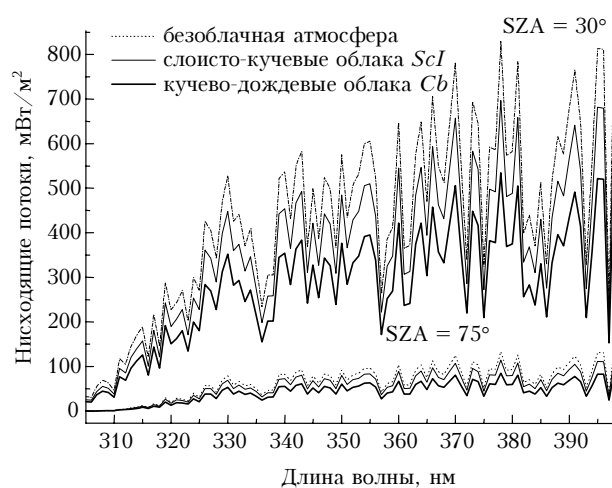


Рис. 5. Нисходящие потоки солнечного излучения на уровне поверхности Земли при различных зенитных углах Солнца для безоблачной атмосферы и в присутствии кучево-дождевых *Cb* и слоисто-кучевых *ScI* облаков [21, 22]. Учитывалось поглощение O₃ [3], NO₂ [16], рэлеевское поглощение и рассеяние и многократное рассеяние аэрозолями и облаками

Были рассмотрены 2 типа облаков [21]: *Cb* – облака с относительно большой оптической толщиной ($\tau = 10$), расположенные в низком слое атмосферы 1,8–2 км, и *ScI* – облака с небольшой оптической толщиной ($\tau = 2,81$) в верхней тропосфере на высоте 12,4–13 км. Оптические свойства жидкокапельных облаков (коэффициент ослабления, альbedo однократного рассеяния ω и средний косинус рассеяния) задавались согласно модели [22]. Индикатриса рассеяния облака рассчитывалась по формуле Хенни–Гринштейна [20]. Наличие облаков значительно уменьшает приходящее на поверхность Земли УФ-излучение. Для рассмотренных примеров облаков *ScI* и *Cb* нисходящие потоки уменьшились на 16 и 34% соответственно по сравнению с потоками в безоблачной атмосфере.

Увеличение оптической толщи атмосферы за счет облаков (или увеличение зенитного угла Солнца) приводит к ослаблению излучения, при этом относительное влияние различий в сечениях поглощения на вычисление нисходящих потоков увеличивается. Для восстановления общего содержания озона (ОСО) в атмосфере по данным измерения приходящего УФ-излучения наиболее подходящими для решения обратных задач восстановления ОСО являются данные измерений потоков в безоблачной атмосфере при высоких зенитных углах Солнца.

Влияние данных по сечениям поглощения озона на восстановление общего содержания озона в атмосфере

Общее содержание озона может быть восстановлено из измерений солнечных фотометров SP6, SP8 сети AEROSIBNET [9] при различных зенитных углах Солнца. ОСО является функцией отношений сигналов $F_{308 \text{ нм}}$ и $F_{324 \text{ нм}}$, измеряемых фотометрами SP6 в двух УФ-каналах с центрами фильтров на длинах волн 308 и 324 нм, с учетом константы калибровки C :

$$\text{ОСО} \sim Cf \left(\frac{F_{324 \text{ нм}}}{F_{308 \text{ нм}}} \right).$$

Одним из эффективных способов решения обратной задачи восстановления ОСО является создание таблиц отношений нисходящих потоков на двух длинах волн, рассчитанных при большом наборе зенитных углов и величин ОСО [23]. Использование близких длин волн позволяет свести к минимуму влияние неточности задания характеристик аэрозоля и рэлеевского поглощения при моделировании. Измеренное отношение сигналов фотометра с учетом константы калибровки C сравнивается с модельным отношением и определяется ОСО. Неточность задания входных данных для моделирования может привести к заметным погрешностям при восстановлении ОСО [24].

Мы провели моделирование, чтобы показать, как повлияют отличия в данных по сечениям поглощения озона на точность восстановления ОСО. Расчеты потоков осуществлялись методом дискретных ординат со сферической коррекцией атмосферы SDISORT [25]. Оптическая толща аэрозоля задавалась по формуле Ангстрема с параметрами $\alpha = 1,3$ и $\beta = 0,2$. Использовался среднегодовой профиль температуры и давления. Начальное значение ОСО задавалось на уровне 350 е.Д., что близко к среднегодовым значениям для места измерения. Результаты сравнения ОСО, полученных при решении обратной задачи, с сечениями поглощения озона Molina [8], Bass [3] и Daumont [4] при разных зенитных углах представлены в таблице.

**Общее содержание озона, восстановленное
с применением сечений поглощения озона Molina [8],
Bass [3] и Daumont [4]**

Зенитный угол Солнца SZA, град	ОСО(1/cos(SZA))			Относительное различие в ОСО, %	
	Bass	Molina	Daumont	Bass– Molina	Bass– Daumont
75	1,3523	1,2556	1,3327	7,1538	1,4485
70	1,0233	1,0045	1,0297	1,8374	–0,62161
60	0,7	0,68774	0,70337	1,7516	–0,4818
50	0,5445	0,53497	0,54633	1,75	–0,33566
40	0,45689	0,44884	0,45825	1,7631	–0,29648
30	0,40415	0,39695	0,40524	1,7792	–0,26992
20	0,37246	0,36584	0,37342	1,7784	–0,25698

Видно, что относительное различие в ОСО увеличивается с ростом зенитного угла Солнца, достигая 7 и 1,4% при сравнении данных Bass с данными Molina и данных Bass с данными Daumont.

Заключение

Популярные сечения поглощения озона Bass [3], Daumont [4] и Molina [8] отличаются более чем на 4% в спектральном диапазоне 300–370 нм. Это приводит к различию до 8% в вычисленных нисходящих потоках солнечного излучения у поверхности Земли при зенитном угле Солнца 30° со спектральным разрешением 1 нм. С увеличением зенитного угла относительное различие между потоками увеличивается.

Использование различных данных по сечениям поглощения NO₂ Coquart [16], Davidson [17] и Shneider [18] в диапазоне 300–370 нм не оказывает значительного влияния на расчеты нисходящего солнечного излучения. Различия в потоках не превышают 0,3%.

Величины общего содержания озона в атмосфере, восстановленные с применением сечений поглощений озона Molina [8] и Daumont [4], отличаются от ОСО с сечениями поглощения Bass [3] на 1,8 и 0,62% соответственно при зенитных углах Солнца менее 70°.

Проведенное нами моделирование показало, что для вычисления переноса солнечного излучения в диапазоне 280–370 нм лучше всего использовать данные по сечениям поглощения озона Daumont [4] и Bass [3], что находится в согласии с результатами исследований [1, 14].

Авторы выражают благодарность д.ф.-м.н. К.М. Фирсову и д.ф.-м.н. О.Н. Сулакшиной за полезные советы при подготовке статьи.

Работа выполнена при поддержке гранта Президента РФ № МК-3130.2007.5.

1. Liu X., Chance K., Sioris Ch.E., Kurosu Th.P. Impact of using different ozone cross sections on ozone profile retrievals from GOME ultraviolet measurements // Atmos. Chem. Phys. Discuss. 2006. V. 7. N 1. P. 971–993.
2. Burrows J.P., Dehn A., Deters B., Himmelmann S., Richter A., Voigt S., Orphal J. Atmospheric remote-sensing reference data from GOME: Part 2. Temperature dependent absorption cross sections of O₃ in the 231–794 nm range // J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer. 1999. V. 61. N 4. P. 509–517.
3. Bass A.M., Paur R.J. UV absorption cross sections for ozone: the temperature dependence // J. Photochem. 1981. V. 17. N 1. P. 141.
4. Daumont D., Brion J., Charbonnier J., Malicet C. Ozone UV spectroscopy. I. Absorption cross section at room temperature // J. Atmos. Chem. 1992. V. 15. N 2. P. 145–155.
5. Malicet C., Daumont D., Charbonnier J., Parisse C., Chakir A., Brion J. Ozone UV spectroscopy. II. Absorption cross sections and temperature dependence // J. Atmos. Chem. 1995. V. 21. N 3. P. 263–273.
6. Brion J., Chakir A., Daumont D., Malicet J. High-resolution laboratory absorption cross section of O₃. Temperature effect // Chem. Phys. Lett. 1993. V. 213. N 5–6. P. 610–512.

7. Воронина Ю.В., Сулакишина О.Н., Фирсов К.М. Пропускание атмосферы в полосах поглощения озона для УФ-каналов спектрофотометра SP-6 // Оптика атмосфер. и океана. 2006. Т. 19. № 8. С. 727–730.
8. Molina L.T., Molina M.J. Absolute absorption cross sections of ozone in the 185 to 350 nm wavelength range // J. Geophys. Res. D. 1986. V. 91. N 13. P. 14500–14508.
9. Сакерин С.М., Кабанов Д.М., Ростов А.П., Турчинович С.А., Турчинович Ю.С. Система сетевого мониторинга радиационно-активных компонент атмосферы. Часть I. Солнечные фотометры // Оптика атмосфер. и океана. 2004. Т. 17. № 4. С. 354–360.
10. [ftp://climate.gsfc.nasa.gov/pub/wiscombe/Multiple Scatt/](ftp://climate.gsfc.nasa.gov/pub/wiscombe/Multiple%20Scatt/)
11. Сулакишина О.Н., Борков Ю.Г. Анализ температурной зависимости сечений поглощения молекулы озона в области 280–340 нм // Оптика атмосфер. и океана. 2005. Т. 18. № 1–2. С. 28–31.
12. Vigroux E. Absorption d'ozone dans le domain spectral situe au-dessous de 3130 Å effect de la temperature // Comptes Rendus. 1952. V. 234. P. 2439–2440.
13. Davenport J.E. Parameters for Ozone Photolysis as a Function of Temperature at 280–330 nm // FAA-EE-80-44 R. 1982
14. Orphal J. A critical review of the absorption cross-sections of O₃ and NO₂ in the ultraviolet and visible // J. Photochem. and Photobiol. A: Chemistry. 2003. V. 157. N 2–3. P. 185–209.
15. Rothman L.S., Jacquemart D., Barbe A., Benner C.D., Birk M., Brown L.R., Carleer M.R., Chackerian C., Jr., Chance K., Coudert L.H., Dana V., Devi V.M., Flaud J.-M., Gamache R.R., Goldman A., Hartmann J.-M., Jucks K.W., Maki A.G., Mandin J.-Y., Massie S.T., Orphal J., Perrin A., Rinsland C.P., Smith M.A.H., Tennyson J., Tolchenov R.N., Toth R.A., Vander Auwera J., Varanasi P., Wagner G. The HITRAN-2004 Molecular Spectroscopy Database // J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer. 2005. V. 96. N 2. P. 139–204.
16. Coquart B., Jenouvrier A., Merienne M.F. The NO₂ Absorption Spectrum. II. Absorption Cross Sections at Low Temperatures in the 400–500 nm Region // J. Atmos. Chem. 1995. V. 21. N 3. P. 251–261.
17. Davidson D., Cantrell C.A., McDaniel A.H., Shetter R.E., Madronich S., Calvert J.G. Visible-Ultraviolet Absorption Cross Sections for NO₂ as a Function of Temperature // J. Geophys. Res. D. 1988. V. 93. N 6. P. 7105.
18. Schneider W., Moortgat G.K., Tyndall G.S., Burrows J.P. Absorption Cross-Sections of NO₂ in the UV and Visible Region (200–700 nm) at 298 // J. Photochem. Photo-biol. 1987. V. 40. P. 195–217
19. 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, AFGL (OPI), Hanscom AFB, MA 01736.
20. Henyey L., Greenstein J. Diffuse radiation in the galaxy // Astrophys. J. 1941. V. 93. P. 70–83.
21. Stephens G.L. Radiation profiles in extended water clouds // J. Atmos. Sci. 1978. V. 35. N 11. P. 2111–2132.
22. Hu Y.X., Stamnes K. An accurate parameterization of the radiative properties of water clouds suitable for use in climate models // J. Climate. 1993. V. 6. N 4. P. 728–742.
23. Stamnes K., Slusser J., Brown M. Derivation of Total Ozone Abundance and Cloud Effects from Spectral Irradiance Measurements // Appl. Opt. 1991. V. 30. N 30. P. 4418–4426.
24. Voronina Yu.V., Chesnokova T.Yu., Sulakshina O.N., Firsov K.M. Modeling of downward solar fluxes in the UV region // XIV Int. Symp. «Atmospheric and ocean optics. Atmospheric physics». Buryatiya, Russia. 24–29 June 2007. P. 51.
25. Dahlback A., Stamnes K. A new spherical model for computing the radiation field available for photolysis and heating at twilight // Planet. Space Sci. 1991. V. 39. N 5. P. 671–683.

T.Yu. Chesnokova, Yu.V. Voronina. Influence of spectroscopic information quality on modeling of downward solar fluxes in the UV region.

The downward solar fluxes in the 280–370 nm spectral region are modeled on basis of different experimental data of NO₂ and ozone absorption cross sections. This spectral interval is of interest for the problem of ozone column amount retrieval at the atmosphere from spectral measurements of the solar radiation, incoming to the Earth surface. The O₃, NO₂ absorption, molecular, aerosol and cloud scattering and absorption are taken into account in the calculations. It is shown that the spectral fluxes, calculated with spectral resolution of 1 nm on basis of three most popular ozone cross section data sets, differ by 8% and more. The values of ozone column amount, retrieved from the solar photometer measurements, can differ by 2%. The difference between fluxes, calculated with three most popular NO₂ cross section data, is 0.3%.