

Прогресс в атмосферной спектроскопии и «эталонные» расчеты для тестирования радиационных блоков климатических моделей

Б.А. Фомин¹, В.А. Фалалеева^{2*}

¹ Центральная аэрологическая обсерватория
141700, г. Долгопрудный Московской обл., ул. Первомайская, 3
² Московский физико-технический институт (государственный университет)
141701, г. Долгопрудный Московской области, Институтский пер., 9

Поступила в редакцию 14.04.2009 г.

Исследованы эволюция спектроскопических данных с 1999 по 2009 г. и ее влияние на *Line-by-Line* (LBL)-расчеты для тестирования радиационных блоков климатических моделей. Во всех численных экспериментах авторы использовали стандартную атмосферу лета средних широт. Вычисления интегральных потоков длинноволновой радиации с текущей версией базы (2008 г.) и с предыдущей базой HITRAN (2002 г.) показали очень хорошее согласие: отличия менее чем на $\sim 0,1$ Вт/м² (учитывались линии и континуум H₂O, CO₂, O₃). Замена последней (MTCKD-2.1) версии предыдущей (СКД-2.4) дала разницу до $\sim 0,9$ Вт/м². Коротковолновые расчеты с одинаковыми базами HITRAN, но текущей и предыдущей моделями континуума, напротив, показали несколько большие отличия: дополнительное поглощение только линиями водяного пара в нисходящих потоках солнечной радиации достигало 2,6 и 1,1 Вт/м² ($\sim 1,5$ и $1,3\%$) для зенитных углов Солнца (ЗУС) 30 и 75° соответственно. Дополнительное поглощение в расчетах с последними и предыдущими базами HITRAN наряду с различными моделями континуума при учете H₂O, CO₂, O₂, O₃ достигало 2,3 и 2,0 Вт/м² для ЗУС 30 и 75° соответственно. Также было обнаружено, что полное пренебрежение интерференцией линий может привести к погрешностям до $\sim 2,5$ Вт/м² ($1,5\%$) в вычислениях интегральных потоков длинноволновой радиации. Однако применение традиционных поправок к фойгтовской форме линии (форм-факторов) и приближение первого порядка в таких расчетах дали удовлетворительную точность: погрешности были менее чем $\sim 0,14$ ($\sim 0,1\%$) и $\sim 0,03$ Вт/м² соответственно.

Ключевые слова: спектральные базы данных, модели континуума, интерференция линий, атмосферная радиация, эталонные расчеты, радиационные блоки климатических моделей.

Введение

В соответствии с последним докладом IPCC-2007 радиационные форсинги, вызванные антропогенным увеличением концентрации парниковых газов, составляют всего лишь $1,5$ Вт/м² для CO₂, $0,5$ Вт/м² для CH₄ и т.д. Однако это привело к очевидному изменению климата, что настоятельно требует его надежного прогнозирования. Поэтому радиационные блоки в моделях климата (общей циркуляции атмосферы) должны быть очень точны и тщательно проверены, по крайней мере *Line-by-Line* (LBL) (полинейными) эталонными расчетами. Но всегда остается важным вопрос: «Какова точность самих LBL-расчетов, зависящая от текущего состояния спектроскопии?» Ответ на этот вопрос можно получить простым путем, сравнивая LBL-расчеты с использованием современных и более ранних спектральных баз.

Подобные сравнения уже проводились в прошлом, в частности одним из авторов примерно

5 лет назад [1]. Но теперь этот вопрос возник снова, потому что наиболее популярная база данных HITRAN была весьма существенно обновлена с 2002 г. (<http://www.hitran.com/>). Например, на сегодняшний день HITRAN содержит информацию о 64123 линиях H₂O и 62913 линиях CO₂ вместо 53127 и 60790 в 2002 г.

Однако главная причина повторения исследований состояла в том, что модель для континуума водяного пара (СКД-модель), которая являлась основным источником неопределенности в предыдущих расчетах [1], недавно была существенно улучшена в ее новой MTCKD-версии: компонент «collision induced» был добавлен к «line shape»-компоненту (<http://rtweb.aer.com/>). Кроме того, стало возможным оценить интерференцию линий CO₂ в таких вычислениях благодаря недавно предложенной «точной» квантово-механической модели [2]. Другими словами, стало возможным оценить точность основного LBL-предположения, что спектр можно рассматривать как суперпозицию независимых линий (two level approach).

В расчетах интегральных потоков длинноволновой радиации, для сопоставления с расчетами

* Борис Алексеевич Фомин (b.fomin@mail.ru); Виктория Александровна Фалалеева.

в работе [1] и другими аналогичными исследованиями, использовалась стандартная модель атмосферы лета средних широт с учетом поглощения молекул H_2O , CO_2 (300 ppmv) и O_3 в спектральном диапазоне $40-3000\text{ см}^{-1}$ («случай 27» из работы [3]). В вычислениях интегральных потоков коротковолновой радиации использовались спектральный диапазон $100-55000\text{ см}^{-1}$ и та же самая модель атмосферы, где также учитывалось поглощение O_2 (только поглощение – «случай 19» [4]). Та же самая LBL-модель применялась и в предыдущей работе [1], что позволило проследить развитие спектральных баз за 16 лет.

Следует отметить, что результаты похожего исследования недавно были опубликованы в статье [5], но в ней рассматривалась только длинноволновая радиация и использовались иные модели атмосферы: «тропическая» и «субарктическая» зима. Также в статье [5] основное внимание уделялось спектральным вычислениям для задач зондирования атмосферы. Таким образом, работы [1, 5] можно рекомендовать как дополняющие друг друга.

Вычисления интегральных потоков длинноволновой радиации

В табл. 1 представлены длинноволновые восходящие и нисходящие потоки, рассчитанные с версией HITRAN-2008, моделью континуума MTCCKD-2.1 и с учетом интерференции линий CO_2 с помощью квантово-механической модели Niro et al. и др. [2].

В данной статье будем использовать значения из табл. 1 в качестве опорных данных.

Таблица 1

Длинноволновые потоки ($Вт/м^2$) для модели атмосферы лета средних широт (MLS), рассчитанные с использованием версии HITRAN-2008

Потоки							
восходящие				нисходящие			
5 км	13 км	20 км	104 км	0 км	5 км	13 км	20 км
344,7	287,1	281,2	282,6	348,8	160,1	22,5	13,4

Различия в вычислениях при использовании предыдущих версий базы HITRAN отражены в табл. 2, из которой видно, что эти различия уменьшались из года в год и ныне фактически стали незначительными ($< 0,1\text{ Вт/м}^2$) по сравнению с антропогенным форсингом.

В табл. 3 приведены отличия в вычислениях при использовании MTCCKD-2.1 и более ранних моделей континуума. Как видно из результатов, эти отличия также стали меньше, чем были ранее [1].

Значительным достижением атмосферной спектроскопии является довольно точная модель интерференции линий CO_2 , которая стала доступна для практического применения [2]. К сожалению, эта модель медленная и поэтому большой интерес представляет оценка ошибки ее быстрой аппроксимации первого порядка (табл. 4), где остается в силе модель спектра как суперпозиция отдельных линий.

Таблица 2

Расхождения ($Вт/м^2$) между расчетами текущей и предыдущими версиями баз HITRAN

Версия	Потоки							
	восходящие				нисходящие			
	5 км	13 км	20 км	104 км	0 км	5 км	13 км	20 км
HITRAN-2002(11v)	0,05	0,06	0,06	0,06	-0,01	-0,07	0	0
HITRAN-2000(2k)	0,07	0,13	0,09	0,09	-0,07	-0,07	0	0
HITRAN-1996	0,18	0,26	0,26	0,26	-0,46	-0,51	-0,01	-0,01
HITRAN-1992	-0,45	-1,63	-1,65	-2,35	-0,91	2,36	0,16	0,01

Таблица 3

Отличия ($Вт/м^2$) между расчетами с MTCCKD-2.1 и предыдущими моделями континуума водяного пара

Версия	Потоки							
	восходящие				нисходящие			
	5 км	13 км	20 км	104 км	0 км	5 км	13 км	20 км
MTCCKD-1.0	0,01	0,07	0,08	0,09	0	0	0	0
CKD-2.4	0,31	0,65	0,69	0,68	-0,61	-0,91	0,01	0,01
CKD-2.3	-0,35	-1,33	-1,26	-1,27	-0,95	1,98	0,17	0,01

Таблица 4

Расхождения ($Вт/м^2$) в расчетах с различными методами учета интерференции линий

Потоки								Контур линии
восходящие				нисходящие				
5 км	13 км	20 км	104 км	0 км	5 км	13 км	20 км	
0	0	0	0,03	0	-0,01	-0,01	-0,03	Приближение 1-го порядка
0,66	2,13	2,37	2,33	-1,6	-2,35	-0,39	-0,18	Профиль Фойгта
0,01	0,1	0,13	0,12	-0,02	-0,14	-0,09	-0,11	Полинейная модель переноса радиации «LBLRTM» (Line-by-Line Radiative Transfer Model)
0,05	0,25	0,23	0,16	-0,01	-0,26	-0,22	-0,28	Форм-факторы Кюнде (Kunde-Maguire) [6]

Как видно, эти ошибки незначительны для данного типа расчетов. Кроме того, в табл. 4 представлены результаты, полученные для различных профилей формы линии CO₂. Численный эксперимент был проведен с профилем Фойгта (программа Себастьяна Паяна (LPMAA)), с давно применяемыми форм-факторами Кюнде (Kunde–Maguire) [6], а также с моделью для формы линии в известном коде LBLRTM (<http://rtweb.aer.com/>). Расчеты с профилем Фойгта показали значительные ошибки в данных интегральных расчетах потоков длинноволновой радиации (иногда более чем 2 Вт/м²), которые сопоставимы с вышеупомянутыми антропогенными форсингами. Однако из табл. 4 следует, что подобно аппроксимации первого порядка модель формы линии LBLRTM и даже старая аппроксимация Кюнде могут успешно использоваться в таких вычислениях (вторая более предпочтительна, чем третья). Это также подтверждает применимость основных предположений LBL-моделей для интегральных эталонных вычислений.

Вычисления интегральных потоков коротковолновой радиации

Вычисления интегральных потоков коротковолновой радиации, в отличие от длинноволновой, с текущей (2008 г.) и предыдущей (2002 г.) версиями HITRAN показали довольно значимые различия, иногда даже большие, чем ранее. В качестве вычисляемой величины ниже использовалась разность в потоках прямой солнечной радиации на верхней и нижней границах атмосферы.

В табл. 5 показано изменение этой величины в зависимости от разных версий HITRAN при учете только линий водяного пара (профиль Фойгта, линии обрезаются на 25 см⁻¹ от центра). Здесь вычисления с последней версией HITRAN использовались как базовые: поглощение прямого солнечного излучения в атмосфере 176,59 и 72,16 Вт/м² для зенитных углов Солнца (ЗУС) 30 и 75° соответственно.

Таблица 5

Различия между расчетами поглощения в нисходящих потоках (Вт/м²) с последней версией базы HITRAN и предыдущими

Версия	Зенитный угол Солнца, град	
	30	75
HITRAN-2004(12v)	0,2	0,1
HITRAN-2002(11v)	2,6	1,1
HITRAN-2000(2k)	3,2	1,5
HITRAN-1997(96c)	2,5	1,2
HITRAN-1992(92)	3,4	1,4

Однако дополнительное поглощение линиями H₂O частично компенсируется уменьшением поглощения континуума H₂O в модели MTCKD (табл. 6).

Расчеты с учетом линий и континуума H₂O, CO₂, O₂, O₃ представлены в табл. 7. Как видно, расхождения в расчетах при использовании раз-

личных версий HITRAN и моделей континуума достигают 2,3 и 2,0 Вт/м² для ЗУС 30 и 75° соответственно, но с 2004 г. стали незначительными в данном практическом приложении.

Таблица 6

Только континуум водяного пара. Поглощение в нисходящих потоках (Вт/м²), рассчитанное с MTCKD- и SKD-моделями

Модель	Зенитный угол Солнца, град	
	30	75
MTCKD-1.0	69,11	31,68
SKD-2.4	80,97	36,45
SKD-2.3	84,12	38,8

Таблица 7

Поглощение нисходящего потока (линии H₂O и континуум, CO₂, O₂, O₃), рассчитанное с учетом последних спектроскопических данных (2008 г.) и расхождения (Вт/м²) с расчетами для предыдущих версий (2004, 2001 и 2006 гг.)

Годы	Зенитный угол Солнца, град	
	30	75
2008	226,4	98,2
2008–2004	0,1	0,1
2008–2002	2,3	2
2008–1996	3,3	1,9

Заключение

Интегральные расчеты потоков длинноволновой радиации дали следующие результаты:

- вычисления с последней (2008 г.) и более ранними (2004 и 2002 гг.) версиями HITRAN показали хорошее согласие (несоответствия менее чем ~0,1 Вт/м², тогда как до 1996–2002 гг. максимальные различия были ~0,5 Вт/м²);

- вычисления потоков с MTCKD-2.1- и SKD-2.4-моделями континуума выявили расхождения до ~0,9 Вт/м² (отличия между SKD-2.4 и SKD-2.3 были ~2–3 Вт/м²);

- полное пренебрежение эффектом интерференции линий может привести к ошибкам более чем 2 Вт/м² (1–2 %) в расчетах интегрального потока. Тем не менее применение аппроксимации первого порядка или известных поправок к фойгтовскому контуру в виде форм-факторов дало удовлетворительные результаты (ошибки менее неопределенностей, связанных со спектральными базами данных).

Интегральные расчеты потоков коротковолновой радиации показали, что вычисления с последней (2008 г.) и более ранней (2002 г.) версиями HITRAN наряду с моделями континуума MTCKD-2.1 и SKD-2.4 дали значимые расхождения в поглощении нисходящих потоков (до ~2 Вт/м², или ~1%). Главная часть этих несоответствий приписана спектральной базе данных. Однако вычисления с последней (2008 г.) и предыдущей (2004 г.) версиями показали удовлетворительное согласие.

Кроме того, мы пришли к заключению, что нет надобности использовать «полную» квантово-механическую модель интерференции линий, отнимающую много компьютерного времени, и пересматривать основное предположение относительно независимости спектральных линий, используемое в LBL-моделях при вычислениях *интегральных* потоков атмосферной радиации для валидации радиационных блоков МОЦА, хотя поправка (форм-факторы) должна быть введена в профиль Фойгта.

Авторы выражают благодарность Себастьяну Паяну (LPMAA) и Жан-Мишэлю Артманну (LISA), Париж, Франция, за предоставление модели интерференции линий, а также признательность Т.А. Сушкевич (Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН) и А.А. Вигасину (Институт физики атмосферы им. А.М. Обухова РАН) за помощь в работе.

Финансовая поддержка была обеспечена Российским фондом фундаментальных исследований (проекты № 08-01-00024, 09-01-00071 и 08-05-00140).

1. Fomin B.A., Udalova T.A., Zhitnitskii E.A. Evolution of spectroscopy information over the last decade and its effect on *line-by-line* calculations for validation of radiation codes for climate models // J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer. 2004. V. 86. P. 73–85.
2. Niro F., Jucks K., Hartmann J.-M. Spectra calculations in central and wing regions of CO₂ IR bands IV: software and database for the computation of atmospheric spectra // J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer. 2005. V. 95. P. 469–481.
3. Ellingson R.G., Ellis J., Fels S. The intercomparison of radiation codes used in climate models: long wave results // J. Geophys. Res. D. 1991. V. 96. N 5. P. 8929–8953.
4. Fourquart Y., Bonnel B. Intercomparing shortwave radiation codes for climate studies // J. Geophys. Res. D. 1991. V. 96. N 5. P. 8955–8968.
5. Kratz D.P. The sensitivity of radiative transfer calculations to the changes in the HITRAN database from 1982 to 2004 year // J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer. 2008. doi:10.1016/j.jqsrt.2007.10.010.
6. Kunde V.G., Maguire W.C. Direct integration transmittance model // J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer. 1974. V. 14. P. 803–901.

B.A. Fomin' V.A. Falaleeva. Recent advance of spectroscopy and its effect on line-by-line calculations for validation of radiation codes for climate models.

The evolution of spectroscopic data from 1992 to 2008 and its effect on *Line-by-Line* (LBL) calculations for validation of radiation codes for climate models is the subject matter of this paper. The authors have made use of the standard mid-latitude summer (MLS) atmosphere in all the numerical experiments. The long-wave calculations with the current (2008) and previous (2002) HITRAN editions revealed a very good agreement: discrepancies are less than ~ 0.1 W/m² in flux calculations (H₂O lines and continuum, CO₂, O₃). The replacement of the latest (MT CKD-2.1) version by the previous one (CKD-2.4) has given the discrepancies of up to ~ 0.9 W/m². The short-wave calculations with the same HITRAN editions, on the contrary, have revealed a disagreement greater than that observed during the previous decade: the additional absorption only by the water vapor lines in downward fluxes reached 2.6 and 1.1 W/m² (~ 1.5 and 1.3%) for the Solar Zenith Angles (SZA) of 30° and 75°, respectively. The additional absorption with the latest and previous HITRAN editions along with the continuum models reached in total 2.3 and 2.0 W/m² for SZA of 30° and 75°, respectively (H₂O lines and continuum, CO₂, O₂, O₃). It has been found that total neglect of the line-mixing effect can produce essential errors: up to ~ 2.5 W/m² (1.5%) in the long-wave flux calculations. Nevertheless, its usual treatment with the use of the line shape correction or the first order approximation gave satisfactory result: errors in the long-wave flux calculations were below ~ 0.14 W/m² ($\sim 0.1\%$) and ~ 0.03 W/m² respectively.