

Б.А. Воронин, А.Б. Серебренников, Т.Ю. Чеснокова

Оценка роли слабых линий поглощения водяного пара в переносе солнечного излучения

Институт оптики атмосферы СО РАН, г. Томск

Поступила в редакцию 13.07.2001 г.

Проведен расчет вклада слабых линий поглощения водяного пара в перенос солнечного излучения в газо-во-аэрозольной атмосфере. На данном этапе использовались новая БД HITRAN-2000 и новые результаты *ab initio* расчета Партриджа и Швенке, что позволило получить более полную картину поглощения. «Новые» линии, не учтенные в атласе HITRAN, являются слабыми, но вследствие их большого числа их суммарный вклад в ослабление солнечной радиации достигает 1% при прохождении через всю атмосферу на вертикальной трассе. В микроокнах прозрачности вклад слабых линий является существенным и может достигать нескольких процентов. При оценках радиационного баланса необходимо учитывать совместно с континуальным поглощением и поглощение слабыми линиями водяного пара.

Введение

В последнее время многие исследователи отмечают, что существует расхождение между рассчитанным и экспериментально измеренным радиационным бюджетом атмосферы Земли даже в отсутствие облаков. Для объяснения этих расхождений привлекаются различные гипотезы. Так, например, в [1] избыточное поглощение в облаках объясняется недостаточно корректным учетом эффектов рассеяния в используемых моделях. Согласно [2] коррективы в данную проблему может внести континуальное поглощение, но оно не снимает проблему «избыточного поглощения». В работе [3] высказана гипотеза о том, что дополнительный вклад в поглощение могут дать слабые линии водяного пара, которые не учитываются в современных базах HITRAN, GEISA.

В настоящее время появились новая версия БД HITRAN-2000 и новые *ab initio* расчеты Партриджа и Швенке [4]. Для сравнения, предыдущая БД HITRAN-96 в диапазоне 7600–18000 см^{-1} содержит 11940 линий H_2O , БД HITRAN-2000 – 13575 линий, а *ab initio* вычисления – 216670 линий. «Новые» линии, не учтенные в атласах HITRAN [5], почти все являются слабыми, но вследствие их большого числа их суммарный вклад в ослабление солнечной радиации может быть достаточно заметным для длинных трасс и в случае многократного рассеяния световых квантов.

В данной статье сделаны оценки вклада слабых линий поглощения H_2O в перенос солнечного излучения. Работа является продолжением исследования [3].

1. Параметры спектральных линий и критерии селекции

Базы спектральных данных HITRAN-96, HITRAN-2000 наиболее широко используются для атмосферных приложений. Тем не менее в этих базах содер-

жится неполная информация о линиях поглощения водяного пара ближнем ИК- и видимом диапазонах. В последней версии HITRAN-2000 отсутствуют линии для HDO выше 5507 см^{-1} , для H_2^{16}O – выше 22656 см^{-1} , для H_2^{17}O – выше 13900 см^{-1} и для H_2^{18}O – выше 11143 см^{-1} . Кроме того, в диапазоне 5850–8200 см^{-1} отсутствует информация о всех, в том числе и довольно сильных, линиях поглощения H_2^{17}O и H_2^{18}O с интенсивностью $\sim 10^{-23}$ $\text{см}^2/\text{мол}$.

Банк данных, используемый для оценки вклада слабых линий H_2O , был получен следующим образом. Партридж и Швенке [4] провели *ab initio* расчет поверхности потенциальной энергии и дипольного момента для изотопных модификаций молекулы воды. Далее вариационным методом были рассчитаны все КВ-уровни с энергией до 40000 см^{-1} , центры и интенсивности линий. Параметры функции потенциальной энергии были уточнены подгонкой по методу наименьших квадратов к частотам переходов из базы данных HITRAN-92.

Банк содержит значительно больше линий, чем базы HITRAN. В частности, согласно данным [4] в диапазоне 12900–14300 см^{-1} число линий с интенсивностью менее 10^{-26} $\text{см}^2/\text{мол}$ превышает 19500, тогда как общее число линий с интенсивностью 10^{-30} – 10^{-23} $\text{см}^2/\text{мол}$ составляет 21800. Например, в том же диапазоне в HITRAN-2000 содержится только 2178 линий, а число линий с интенсивностью менее 10^{-26} $\text{см}^2/\text{мол}$ менее 50. База данных [4] включает линии горячих полос, высоких обертонов изгибного колебания, линии поглощения изотопных модификаций воды. Точность расчетов центров и интенсивностей линий достаточна для получения надежных оценок ослабления широкополосного излучения на атмосферных трассах. Среднеквадратическое отклонение расчетных центров от центров линий, приведенных в HITRAN-96, составляет всего 0,1 см^{-1} , среднеквадратическое отклонение интегральных интенсивностей полос – порядка 20%.

На рис. 1 показано соотношение суммарных интенсивностей линий в диапазоне 7000–22000 см^{-1} для

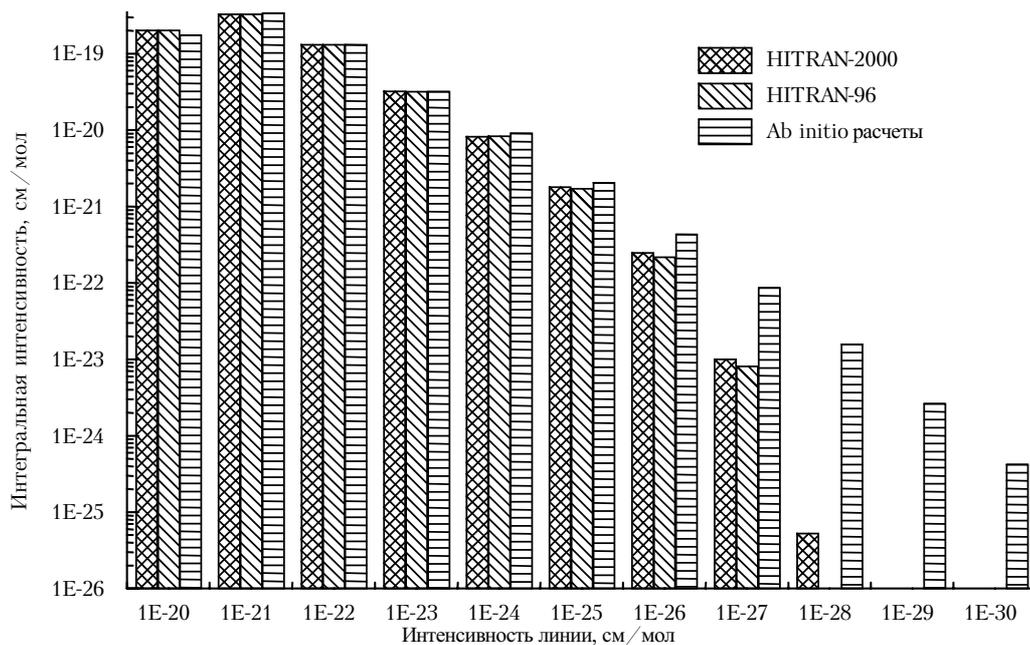


Рис. 1. Суммарная интенсивность линий на одну декаду изменения интенсивности, представленная в базах данных HITRAN-96, HITRAN-2000 и банках Парtridge и Швенке

HITRAN-96, HITRAN-2000 и ab initio расчетов. Из рисунка видно, что в HITRAN-96 отсутствуют линии с интенсивностью менее 10^{-27} см/мол, в HITRAN-2000 – линии с интенсивностью менее 10^{-28} см/мол. Почти все линии, имеющиеся в [4], но отсутствующие в атласах HITRAN, можно отнести к слабым линиям поглощения H_2O .

Для расчета атмосферного переноса солнечного излучения в диапазоне $7000\text{--}22000$ см $^{-1}$ из банка Парtridge–Швенке [4] мы исключили линии, которые присутствуют в базе данных HITRAN-2000 (17031 линия). Сопоставление линий в этих двух БД производилось по квантовым числам и нижним уровням энергии. Оставшиеся 270145 линий в банке дан-

ных [4] в том же спектральном диапазоне в большинстве являются слабыми.

2. Расчет функций поглощения

Расчет функций поглощения проводился методом line-by-line с разрешением 20 см $^{-1}$ для горизонтальной трассы. Длина трассы подбиралась так, чтобы поглощение было близко к неоднородной трассе, проходящей через всю атмосферу под углами 0 , 60 , 70° . Использовалась метеомодель AFGL «лето средних широт».

Вклад слабых линий H_2O в поглощение представлен на рис. 2.

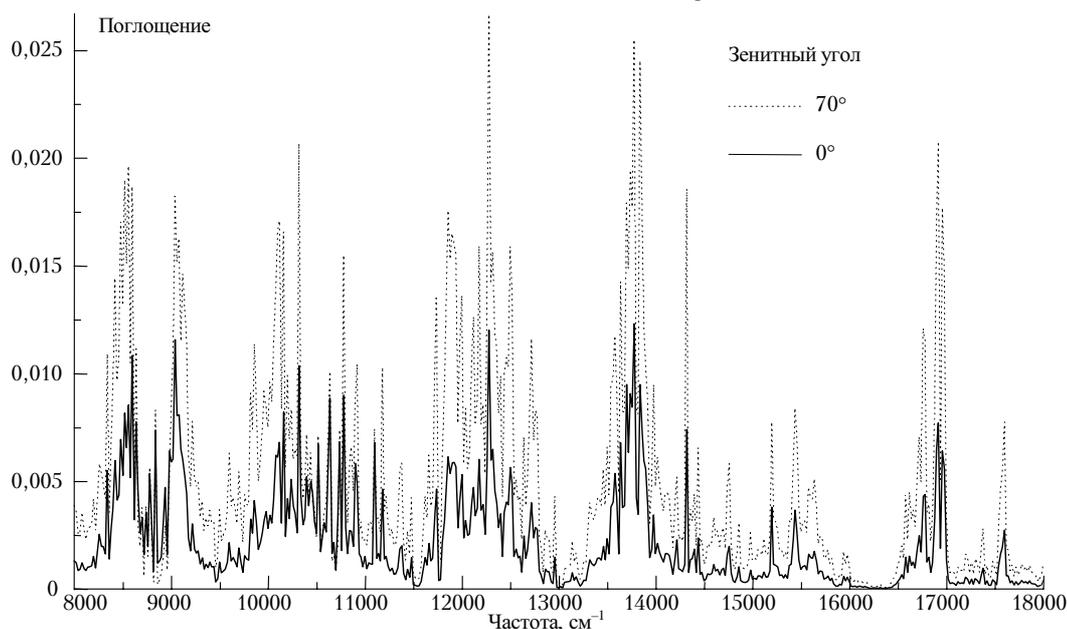


Рис. 2. Поглощение слабыми линиями водяного пара для трассы, проходящей через всю атмосферу под разными зенитными углами

Результаты расчета показывают, что с увеличением длины трассы (изменение угла наклона трассы от 0 до 70°) поглощение слабыми линиями возросло более чем в 2 раза, что становится существенным по отношению к поглощению всеми линиями H₂O. Относительный вклад слабых линий, как правило, составляет несколько процентов и увеличивается в области слабых полос поглощения.

Нисходящие потоки солнечного излучения, вычисленные на основе данных line-by-line без учета рассеяния, для метеомодели «лето средних широт» приведены в таблице. На вертикальной трассе, проходящей

Потоки солнечного излучения в диапазоне 7000–22000 см⁻¹, дошедшие до поверхности Земли через нерассеивающую атмосферу

Линии поглощения	Зенитный угол, град		
	0	60	70
Все линии Парtridge и Швенке (ПШ), Вт/м ²	852,22	410,91	274,44
Линии ПШ, аналогичные HITRAN-2000, Вт/м ²	853,98	412,40	275,77
Абсолютный вклад слабых линий в поток, Вт/м ²	1,76	1,49	1,33
Относительный вклад слабых линий в поток, %	0,21	0,36	0,5

через всю атмосферу, вклад слабых линий водяного пара в поглощение солнечного излучения составил почти 2 Вт/м². Относительный вклад слабых линий в перенос излучения, представленный в таблице и на рис. 3, возрастает с увеличением длины трассы, в то время как его абсолютная величина уменьшается.

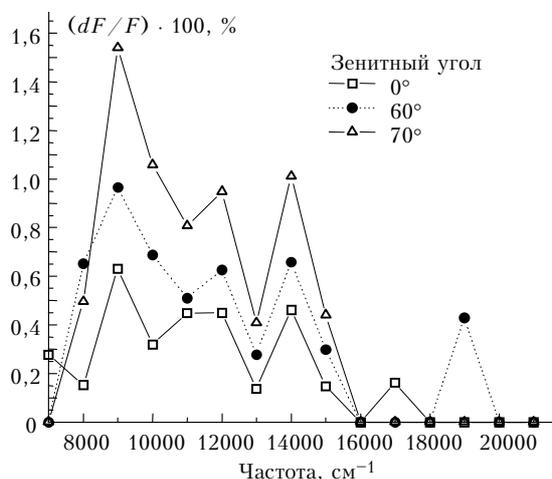


Рис. 3. Относительный вклад слабых линий водяного пара в поток F солнечного излучения у поверхности Земли

3. Расчет освещенности земной поверхности

Для расчета освещенности земной поверхности была выбрана плоскостратифицированная модель системы «атмосфера – подстилающая поверхность». Предполагалось, что солнечное излучение падает на верхнюю границу атмосферы перпендикулярно к ней.

Интегральные оптические свойства молекулярно-аэрозольной атмосферы моделировались набором высотных профилей коэффициентов рассеяния и поглощения. Индикатрисы рассеяния задавались таблично, как «взвешенные» аэрозольно-газовые, определенные по формуле [6]:

$$g(\theta) = \frac{\beta_{\text{sct}}^a}{\beta_{\text{sct}}} g^a(\theta) + \frac{\beta_{\text{sct}}^m}{\beta_{\text{sct}}} g^m(\theta),$$

где β_{sct}^a , β_{sct}^m – значения коэффициентов аэрозольного и молекулярного рассеяния в j -м слое, $\beta_{\text{sct}} = \beta_{\text{sct}}^a + \beta_{\text{sct}}^m$; $g(\theta)$ – «взвешенная», $g^a(\theta)$ – аэрозольная, $g^m(\theta)$ – молекулярная индикатрисы рассеяния.

Были выбраны две модели оптических свойств атмосферы, в которых доля компоненты, образованной рассеянной радиацией в полной освещенности, составила 27 и 88%. Это модель городского аэрозоля с метеорологической дальностью видимости в приземном слое аэрозольной атмосферы, равной 5 км, и модель адвективного тумана с метеорологической дальностью видимости 2 км [7].

Численная имитация методом Монте-Карло процесса распространения излучения в молекулярно-аэрозольной атмосфере осуществлена прямым моделированием. Этот выбор обусловлен простотой метода и его низкой трудоемкостью при расчетах освещенности земной поверхности на заданной длине волны λ [8].

Для ускорения расчетов при учете молекулярного поглощения использовался метод «к-распределения» [9], что потребовало проведения вычисления только 10 оценок освещенности E_j (вместо 10000 оценок, если бы использовался метод line-by-line с тем же разрешением) методом Монте-Карло для каждого из 55 интервалов длиной 100 см⁻¹ по формуле

$$\hat{E} = \Delta\lambda \sum_{j=1}^n C_j E_j S_{\lambda_j},$$

где C_j – коэффициенты параметризации; S_{λ} – солнечная постоянная; $\Delta\lambda = 100$ см⁻¹; n – число квадратур Гаусса ($n = 10$).

Результаты расчета представлены на рис. 4.

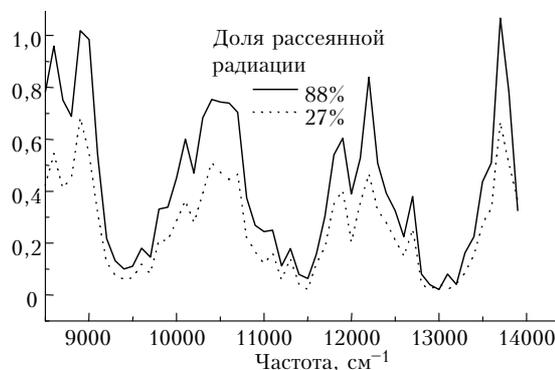


Рис. 4. Относительный вклад слабых линий водяного пара в освещенность поверхности Земли (%) солнечным излучением в диапазоне 7000–22000 см⁻¹ для разных атмосферных условий аэрозольного и молекулярного рассеяния

Относительный вклад слабых линий поглощения H_2O в освещенность земной поверхности на отдельных интервалах шириной 100 см^{-1} может превышать 1% в области слабых полос поглощения, на более узких интервалах его значение может существенно возрастать. По всему диапазону $8500\text{--}14000\text{ см}^{-1}$ суммарный вклад составляет менее 0,5%.

Заключение

Из проведенных расчетов можно сделать следующие выводы:

- учет слабых линий водяного пара в диапазоне $7000\text{--}22000\text{ см}^{-1}$ дает дополнительный вклад в поглощение до 1% (в поток до 2 Вт/м^2) на вертикальной трассе через всю атмосферу;
- в микроокнах прозрачности вклад слабых линий является существенным и может достигать нескольких процентов;
- с увеличением длины трассы роль слабых линий в поглощении заметно возрастает;
- учет слабых линий может только частично объяснить избыточное поглощение в атмосфере;
- при оценках радиационного баланса необходимо учитывать совместно с континуальным поглощением и поглощение слабыми линиями водяного пара.

Авторы выражают благодарность совету молодых ученых и администрации Института оптики атмосферы за поддержку данной работы, К.М. Фирсову, А.Д. Быкову и В.В. Белову за консультации и полезные обсуждения.

Работа выполнена при поддержке научной школы член-кор. РАН С.Д. Творогова – грант президента РФ для поддержки научных школ № 00-15-98589 и Миннауки (контракт № 108-5(00)-П).

1. *Stephens G.L., Tsay S.-C.* On the cloud absorption anomaly // *Quart. J. Roy. Meteorol. Soc.* 1990. V. 116. P. 671–704.
2. *Несмелова Л.И., Пхалагов Ю.А., Родимова О.Б., Творогов С.Д., Ужегов В.Н., Щелканов Н.Н.* К вопросу о природе атмосферного аномального поглощения коротковолновой радиации // *Оптика атмосфер. и океана.* 1999. Т. 12. № 3. С. 288–293.
3. *Быков А.Д., Воронин Б.А., Науменко О.В., Синица Л.Н., Фирсов К.М., Чеснокова Т.Ю.* Вклад слабых линий поглощения водяного пара в ослабление коротковолнового излучения // *Оптика атмосфер. и океана.* 1999. Т. 12. № 9. С. 787–789.
4. *Partridge H., Schwenke D.W.* The determination of an accurate isotope dependent potential energy surface for water from extensive ab initio calculations and experimental data // *J. Chem. Phys.* 1997. V. 106. № 11. P. 4618–4639.
5. *Rothman L.S., Rinsland C.P., Goldman A., Massie S.T., Edwards D.P., Flaud J.-M., Perrin A., Camy-Peyret C., Dana V., Mandin J.-Y., Schroeder J., Mccann A., Gamache R.R., Wattson R.B., Yoshino K., Chance K.V., Jucks K.W., Brown L.R., Nemtchinov V., Varanasi P.* The HITRAN molecular spectroscopic database and hawks (hitran atmospheric workstation) // *J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer.* 1998. V. 60. № 6. P. 665–710.
6. *Зуев В.Е., Белов В.В., Веретенников В.В.* Теория систем в оптике дисперсных сред. Томск: Изд-во СО РАН, 1997. 402 с.
7. *Kneizys F.X. et al.* User Guide to LOWTRAN 7, AFGL-TR-86-01777. ERP N 1010 / Nanscom AFB, MA01731.
8. *Метод Монте-Карло в атмосферной оптике* / Под общей редакцией акад. Г.И. Марчука. Новосибирск: Наука, 1976. 216 с.
9. *Фирсов К.М., Чеснокова Т.Ю.* Новый метод учета перекрывания полос поглощения атмосферных газов при параметризации уравнения переноса // *Оптика атмосфер. и океана.* 1998. Т. 11. № 4. С. 410–415.

B.A. Voronin, A.B. Serebrennikov, T.Yu. Chesnokova. Estimate of water vapor weak absorption lines in the solar radiation transfer.

Contribution of weak absorption lines of water vapor into the solar radiation attenuation in the gas-aerosol atmosphere is estimated. This work is a continuation of the study [1]. The new database HITRAN-2000 and ab initio calculation of Partridge and Schwenke (PS) [2] allowed us to get more complete absorption picture. Almost all «new» lines, which were neglected in the atmospheric HITRAN database, appear to be weak ones, but their total contribution into the solar radiation attenuation may reach 1% along vertical atmospheric paths. The weak lines' contribution can be essential for microwindows giving rise up to several percents. Weak water vapor lines should be taken into account together with the water continuum.