

И.В. Пташник^{1,2}, К.П. Шайн¹

Влияние обновления спектроскопической информации на расчет потоков солнечной радиации в атмосфере

¹ Университет г. Рединга, Англия

² Институт оптики атмосферы СО РАН, г. Томск, Россия

Поступила в редакцию 13.01.2003 г.

Для оценки влияния неоднозначности, существующей в настоящее время в выборе спектроскопической информации по водяному пару, на погрешность моделирования потоков солнечной радиации в атмосфере были выполнены line-by-line расчеты в спектральном интервале 2 000–20 000 см⁻¹ (0,5–5 мкм). Проведено также сравнение двух моделей континуума воды СКД-1 и СКД-2.4. Показано, что максимальная погрешность при расчете потоков солнечной радиации вследствие рассмотренных факторов может достигать 5,9 Вт/м² для лета средних широт и зенитного угла солнца 30°. Это составляет ~ 0,8% от величины нисходящего потока радиации у поверхности земли и ~ 3,3% от величины полного поглощения радиации в атмосфере. Показано, что основной вклад в погрешность среди рассмотренных факторов дают слабые линии поглощения, не включенные в HITRAN.

Введение

Точность расчета переноса радиации в атмосфере по-прежнему остается серьезной проблемой в задачах моделирования глобального климата. В работе [1], выполненной более 10 лет назад, было выявлено существенное разногласие, существующее между различными радиационными кодами даже в простом случае учета поглощения только водяным паром. Среднее отклонение варьировалось от 1 до 3% для величины нисходящего потока на поверхности земли и от 6 до 11% для величины полного поглощения в атмосфере. Ситуация мало изменилась за прошедшее время. Например, в работе [2], посвященной исследованию вопроса об аномальном поглощении в атмосфере, было показано, что разница в количестве поглощенной в атмосфере солнечной энергии, рассчитанной на основе двух разных радиационных моделей, достигает 12%.

Одним из источников разногласия в приведенных случаях является разница в исходной спектроскопической информации, используемой разными программами.

Данный фактор становится все более существенным в последние годы вследствие значительных изменений, происходящих в теоретической и экспериментальной спектроскопии высокого разрешения и соответственно в спектральных базах данных.

Так, например, только за шесть последних лет появились три новые модификации широко используемой спектральной базы данных HITRAN: HITRAN-96 [3], HITRAN-2000 (или HITRAN-2k) [4] и недавняя модификация для некоторых газов – HITRAN v.11 (см. <http://www.hitran.com>).

Большие изменения произошли в спектроскопических данных по водяному пару. В дополнение к 51 000 спектральных линий в HITRAN-96 параметры около полумиллиона «слабых» линий (база данных для

комнатной температуры) были рассчитаны *ab initio* в работе Партриджа и Швенке [5]. Только небольшая часть этих линий была включена в HITRAN v.11. Кроме того, несколько модификаций модели континуума водяного пара Clough–Kneizys–Davies (CKD) [6] появилось в течение последних восьми лет (<http://www.aer.com/scienceResearch/rc/rc.html>) [7].

Основная цель данной работы – оценить, какая неопределенность в моделировании потока солнечной радиации для безоблачного неба может быть обусловлена использованием разных модификаций базы данных HITRAN, разных версий СКД континуума и учетом (неучетом) «слабых» линий Партриджа–Швенке (Partridge–Schwenke Weak Lines (PSWL)). Здесь и далее термин «слабые линии» означает линии базы Партриджа–Швенке, отсутствующие в HITRAN-2k.

В наших расчетах учитывались только поглощение водяным паром и молекулярное рассеяние. Поскольку поглощение H₂O является доминирующим в рассматриваемом спектральном диапазоне, вклад в поглощение другими газами не повлияет существенно на полученные результаты.

Используемые данные и коды программ

Для оценки влияния разных спектроскопических данных были проведены line-by-line расчеты солнечной радиации у поверхности земли в спектральном диапазоне 2 000–19 900 см⁻¹. Все расчеты были выполнены для модели лета средних широт (Midlatitude Summer (MLS)), использовавшейся в [1]. Данная модель соответствует общему содержанию водяного пара в вертикальном столбе атмосферы 30 кг/м². Зенитный угол солнца полагался равным 30°.

Для расчета оптической толщи атмосферных слоев использовался быстрый line-by-line код LBL [8].

Спектральное разрешение составляло $0,002 \text{ см}^{-1}$. В расчетах учитывалась последняя версия модели континуума водяного пара СКД-2.4 [9]. Полученные спектры оптических толщ для 33 атмосферных слоев модели MLS использовались в качестве входных данных в программе DISORT (Discrete Ordinate) [10], предназначенной для моделирования потоков радиации с учетом многократного рассеяния. Поток солнечной радиации на верхней границе атмосферы со спектральным разрешением 1 см^{-1} был заимствован из последней компиляции [11] (солнечная постоянная $1368,8 \text{ Вт/м}^2$). Альbedo земной поверхности было принято постоянным по спектру и равным $0,14$, что близко к значению альbedo, усредненному по всей поверхности Земли.

Для расчетов были использованы спектральные базы данных HITRAN-96, HITRAN-2k и HITRAN v.11, а также база данных Партриджа-Швенке (PS) для комнатной температуры.

Результаты расчетов

1. Разные версии базы данных HITRAN

На рис. 1, а, б изображены соответственно спектр нисходящего солнечного потока (Flux) на поверхности земли, рассчитанный с использованием базы HITRAN-96, и разница в потоках (ΔFlux) между расчетами, выполненными на основе базы данных HITRAN-96 и HITRAN-2k. Пунктирной кривой показан «кумулятивный» разностный поток ($\Delta\text{Flux}_{\text{cum}}$) (Вт/м^2), т.е.

разностный поток ΔFlux , проинтегрированный по волновому числу от начала спектрального интервала. Разностный поток в спектральном диапазоне $8\,000\text{--}14\,000 \text{ см}^{-1}$ обусловлен в основном поправкой к HITRAN-96, сделанной в [12].

На рис. 1, в аналогичным образом показана разница рассчитанных потоков между HITRAN-96 и v.11. Существенное различие между расчетами с HITRAN-2k и HITRAN v.11 (рис. 1, з) наблюдается только в спектральном интервале около $2\,700 \text{ см}^{-1}$. Такое различие обусловлено примерно 1250 линиями, которые были добавлены в этом спектральном диапазоне в HITRAN v.11 по сравнению с HITRAN-2k (HITRAN v.11 содержит 2500 линий в интервале $2500\text{--}3000 \text{ см}^{-1}$, тогда как HITRAN-2k – только 1250 линий). Наиболее интересным является тот факт, что те же дополнительные (по сравнению с HITRAN-2k) 1250 линий содержатся и в HITRAN-96. Вследствие этого между HITRAN-96 и HITRAN v.11 не наблюдается существенного различия в области около $2\,700 \text{ см}^{-1}$. Это означает, что расчет на основе HITRAN-96 в данном спектральном интервале должен давать более корректный результат, чем более поздняя версия HITRAN-2k.

Как видно из рис. 1, разница в полном потоке на уровне земли составляет $0,8 \text{ Вт/м}^2$ при сравнении HITRAN-96 с HITRAN v.11 и $0,2 \text{ Вт/м}^2$ при сравнении HITRAN-96 с HITRAN-2k. Меньшая величина разности обусловлена знакопеременным характером разностного потока для этого случая.

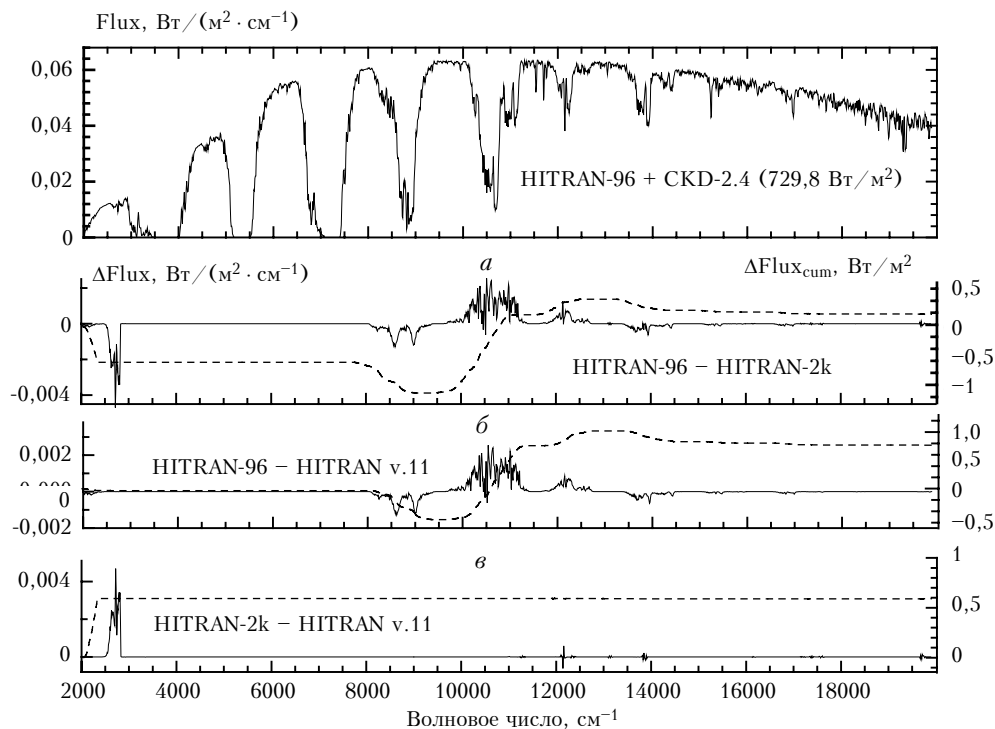


Рис. 1. Спектр нисходящего солнечного потока на поверхности земли, рассчитанного с использованием базы данных HITRAN-96 (а). Разностный поток (ΔFlux) (сплошная линия, левая ось ординат) между расчетами на основе разных версий HITRAN (б – з). Пунктирная линия (правая ось ординат) показывает кумулятивный разностный поток ($\Delta\text{Flux}_{\text{cum}}$), интегрируемый от $2\,000 \text{ см}^{-1}$

2. СКД-1 и СКД-2.4 версии континуума H₂O

С 1994 г. появились, по крайней мере, 4 новые модификации модели СКД континуума водяного пара [7]. В этой связи представляется весьма интересным выяснить, какая вариация рассчитанного потока радиации может быть обусловлена использованием той или иной из этих версий. В работе [13] было показано, что разница в величине радиации, поглощаемой за счет континуума, может достигать 100% между расчетами с моделями СКД-0 [6] и СКД-2.4 [9] (19,5 и 7,7 Вт/м² соответственно для зенитного угла солнца, равного 30°, метеомодели MLS и спектрального диапазона 1 000–22 700 см⁻¹).

На рис. 2 и 3 показаны результаты сравнения двух более близких версий СКД континуума воды – СКД-1 (1994 г.) и СКД-2.4 (1999 г.). На рис. 2 приведена оптическая толщина вертикального слоя атмосферы, обусловленная континуальным поглощением. Видно, что в крыльях полос поглощения H₂O разница между этими двумя версиями континуума может достигать порядка величины. На рис. 3, а, б показано проявление этого эффекта для величины потока радиации на поверхности Земли. Разница в полном потоке достигает в данных условиях 1,8 Вт/м², что составляет примерно 25% от общего поглощения солнечной радиации за счет континуума СКД-2.4 в данном спектральном диапазоне (7,2 Вт/м², рис. 3, в). Для расчетов «без континуума» («No_CKD» на рис. 3, в) был использован профиль Фойгта, обрываемый на расстоянии 25 см⁻¹ от центра линии.

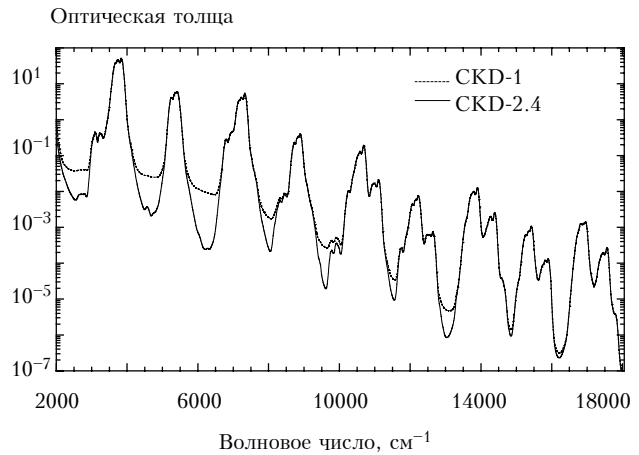


Рис. 2. Вертикальная оптическая толщина атмосферы, обусловленная континуальным поглощением

3. Слабые линии Парtridge–Швенке (PSWL)

Существует несколько работ, в которых проводились оценки влияния PSWL на расчет потока солнечной радиации [13–15], но только в [13] был исследован достаточно широкий интервал (1 000–22 700 см⁻¹). В работах [14, 15] учет влияния PSWL был ограничен интервалами 13 200–22 200 и 7 000–22 200 см⁻¹ соответственно, хотя, как будет показано ниже, около 30% от полного вклада PSWL в поток дает спектральный интервал 2 000–7 000 см⁻¹.

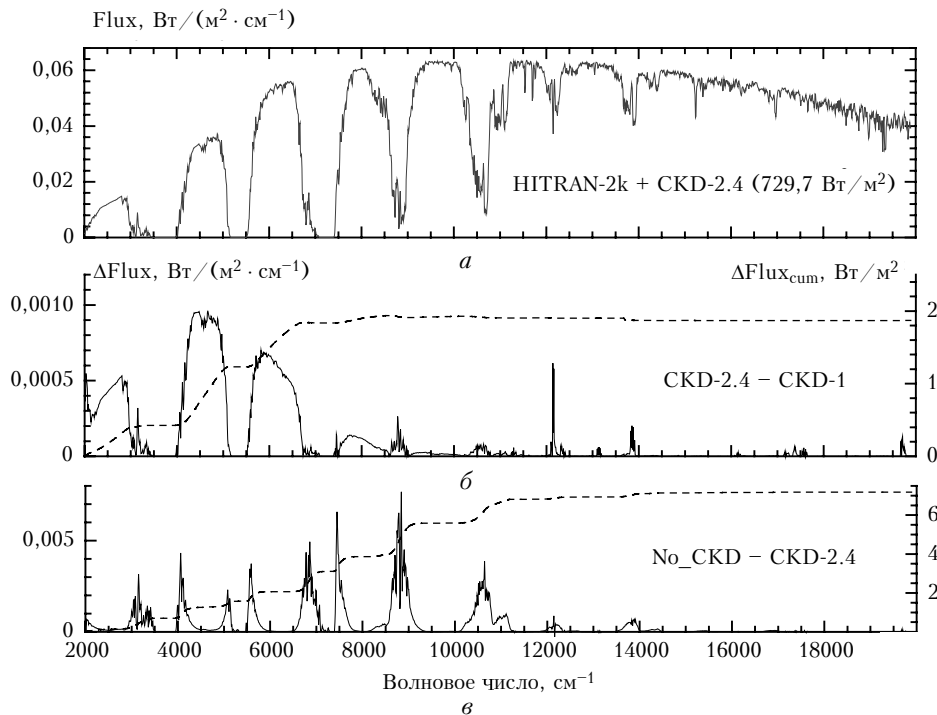


Рис. 3. Поток солнечной радиации на поверхности земли (а). Разностный поток (ΔFlux) (сплошная линия, левая ось ординат) между расчетами с использованием: СКД-2.4 и СКД-1 версий континуума (б); для случая СКД-2.4 и без учета континуума (No_CKD) (в). Пунктирная линия (правая ось ординат) показывает кумулятивный разностный поток ($\Delta\text{Flux}_{\text{cum}}$), интегрируемый от 2 000 см⁻¹

Для оценки влияния PSWL мы использовали три разных подхода.

а) HITRAN-2k – PS

На рис. 4, б представлен спектр разностного потока между расчетами с помощью HITRAN-2k и базой PS. Интегральная разница в потоке составляет $6,2 \text{ Вт/м}^2$. Этот подход учета влияния PSWL, однако, является весьма грубым, поскольку, как известно, база данных PS дает в среднем менее точные значения интенсивностей и полуширин линий, чем HITRAN [5, 16]. Вследствие этого полученная разница в потоках не может быть приписана только слабым линиям PS. Данный подход тем не менее может быть полезен для сравнения.

б) HITRAN-2k – (HITRAN-2k + PSWL)

Отдельная база слабых спектральных линий была получена удалением линий HITRAN-2k из базы PS. Линии сравнивались по их квантовым числам. Примерно для 7 000 линий (всего 52 000) из HITRAN-2k в базе PS не были найдены линии с аналогичными квантовыми индексами. Это обусловлено, по-видимому, как ошибками, так и разной идентификацией данных линий в этих двух базах. Большая часть этих линий (около 5 000) была тем не менее идентифицирована с соответствующими линиями PS на основе одновременного сравнения типов симметрии нижнего и верхнего уровней, положения их центров и их интенсивностей. Около 2 000 линий из HITRAN-2k не удалось идентифицировать с какими-либо линиями PS, поэтому они не были удалены из базы PS и, следовательно, вошли в созданную базу слабых линий.

Влияние PSWL было оценено затем как разница в нисходящих потоках на уровне земли между расчетами, выполненными на основе базы данных HITRAN-2k и HITRAN-2k с добавлением созданной базы PSWL (HITRAN-2k + PSWL). Результат расчетов представлен на рис. 4, в. Разница в интегральном потоке при таком подходе составляет $3,3 \text{ Вт/м}^2$. Эта оценка влияния PSWL представляется нам гораздо более точной, чем в подходе «а».

в) HITRAN-2k – (PS ← HITRAN-2k)

Чтобы избежать возможного завышения оценки влияния PSWL, обусловленного теми линиями HITRAN-2k, которые остались в базе PSWL в предыдущем подходе (или оценить его), был опробован также третий способ. На рис. 4, г показана разность потоков солнечной радиации у земли между случаями расчета с базами HITRAN-2k и (PS ← HITRAN-2k). Здесь (PS ← HITRAN-2k) означает базу данных PS, в которой каждая линия была заменена ее эквивалентом из HITRAN-2k, если таковой имеется. Таким образом, если HITRAN-2k и база PS имеют одну и ту же линию, но с разными положениями центров и с разными квантовыми числами (так что процесс селекции в подходе «б» не опознал ее и оставил в числе слабых линий), то данный подход, по крайней мере частично, позволит компенсировать (уменьшить) ее вклад в слабые линии. Хотя спектральная зависимость влияния PSWL в данном случае может быть менее точной, чем при подходе «б», интегральный вклад должен быть более корректным.

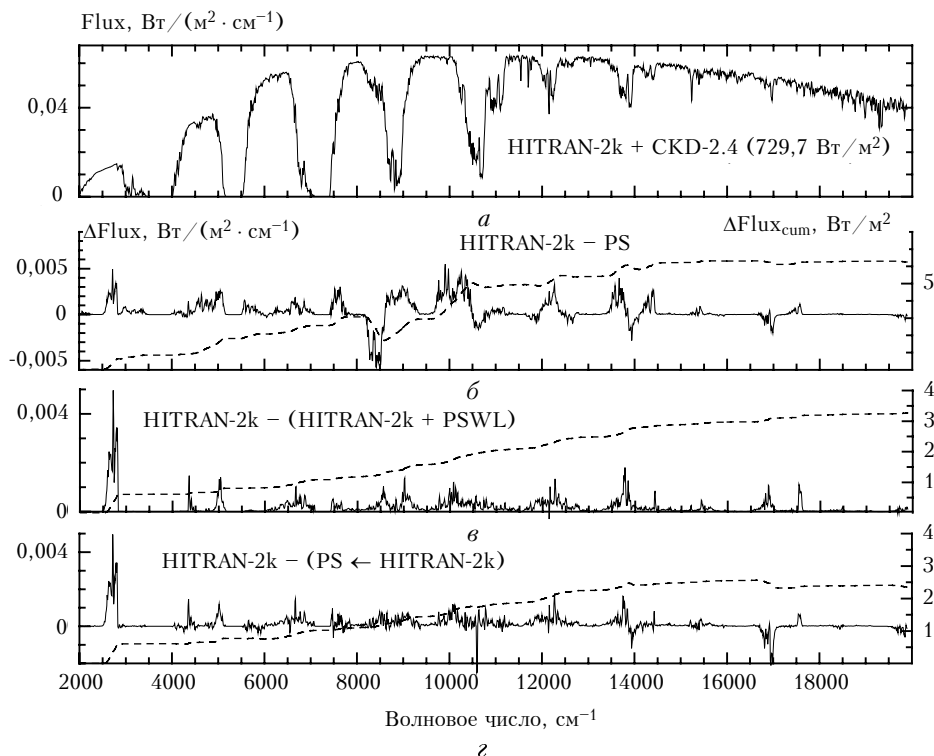


Рис. 4. Поток солнечной радиации на поверхности Земли (а) и разностный поток (ΔFlux) (сплошная линия, левая ось ординат) между расчетами с использованием трех разных подходов для оценки влияния PSWL (б–г). Пунктирная линия (правая ось ординат) показывает кумулятивный разностный поток ($\Delta\text{Flux}_{\text{cum}}$), интегрируемый от $2\,000 \text{ см}^{-1}$

Величина добавочного поглощения в данном подходе составила $2,5 \text{ Вт/м}^2$. Для сравнения: в работе [13] авторы получили значение $2,1 \text{ Вт/м}^2$ для таких же условий, что и в нашей работе, за исключением того, что в [13] была использована база данных HITRAN-96.

Во всех расчетах с базой PS коэффициент уширения воздухом (Halfwidth at Half Maximum (HWHM)) для спектральных линий этой базы рассчитывался следующим образом:

$$\text{HWHM} = 0,104 - 0,00457J'' \quad [\text{см}^{-1}/\text{атм}] \text{ для } J'' = 0 \div 21,$$

$$\text{HWHM} = 0,008 \quad [\text{см}^{-1}/\text{атм}] \text{ для } J'' > 21,$$

что соответствует, в среднем, зависимости коэффициента уширения линий HITRAN-2k от вращательного квантового числа J'' для нижнего уровня (см. пунктирную линию на рис. 5). Каждая точка на рис. 5 соответствует одной спектральной линии базы HITRAN-2k.

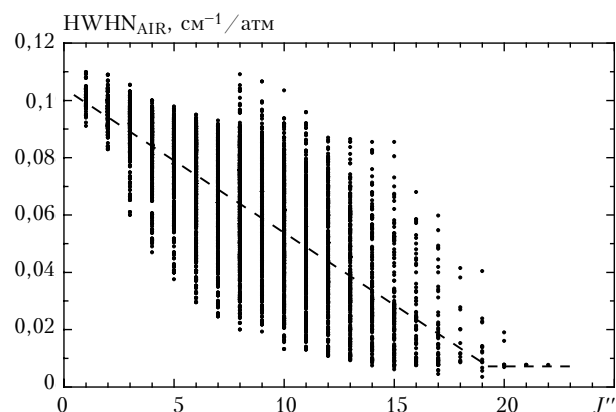


Рис. 5. Зависимость коэффициента уширения воздухом линий водяного пара базы HITRAN-2k от вращательного квантового числа J'' нижнего уровня. Пунктиром показана аппроксимация, принятая в данной работе для линий PS

Было обнаружено, что влияние слабых линий PS на рассчитываемый поток может сильно зависеть от величины HWHM, задаваемой для линий базы PS. Так, например, фиксация коэффициента уширения воздухом на постоянной величине $0,068 \text{ см}^{-1}/\text{атм}$ для всех линий базы PS (эта величина может быть определена, например, усреднением всех коэффициентов уширения линий базы HITRAN-2k) ведет к 100%-му изменению результатов оценки влияния PSWL в подходах «а» и «в». Результат подхода «б» при этом меняется несущественно.

Заключение

Полученные результаты оценки возможного влияния неоднозначности в выборе исходной спектроскопической информации, существующей в настоящее время для водяного пара, а также двух разных моделей СКД континуума воды на точность расчета потоков солнечной радиации, представлены в таблице. Максимальное разногласие в рассчитанном у земной поверхности потоке радиации, обусловленное всеми исследованными факторами, может достигать $5,9 \text{ Вт/м}^2$ в спектральном диапазоне $2\,000\text{--}19\,900 \text{ см}^{-1}$ для зенитного угла солнца 30° и условий лета средних широт.

Это составляет $\sim 0,8\%$ от общего потока радиации на поверхности земли ($\sim 729 \text{ Вт/м}^2$) и $3,3\%$ от величины полного поглощения радиации в атмосфере ($\sim 180 \text{ Вт/м}^2$) для рассмотренных условий. Основным фактором ошибки является неучет слабых линий PS.

Разница в расчетном солнечном потоке на поверхности земли (Вт/м^2) между результатами с использованием разных исходных спектральных данных для водяного пара в интервале $2\,000\text{--}19\,900 \text{ см}^{-1}$

База данных HITRAN:	
HITRAN-96 – HITRAN-2k	0,2
HITRAN-96 – HITRAN v.11	0,8
HITRAN-2k – HITRAN v.11	0,6
СКД континуум:	
СКД-2.4 – СКД-1	1,8
PSWL:	
HITRAN-2k – (HITRAN-2k + PSWL)	3,3
HITRAN-2k – (PS ← HITRAN-2k)	2,5
Суммарная разница (максимально возможная)	
	$\sim 5,9$

Авторы благодарят Совет по исследованию окружающей среды Великобритании (грант NER/T/S/2000/00982) за поддержку, а также признательны Б.А. Фомину за полезные обсуждения и ценные рекомендации.

1. Fouquart Y., Bonnel B. and Ramaswamy V. Intercomparing Shortwave Radiation Codes for Climate Studies // J. Geophys. Res. D. 1991. V. 96. N 5. P. 8955–8968.
2. Arking A. Bringing Climate Models into Agreement with Observations of Atmospheric Absorption // J. Clim. 1999. V. 12. P. 1589–1600.
3. 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., and Varanasi P. The HITRAN Molecular Spectroscopic Database and Hawks (HITRAN Atmospheric Workstation): 1996 edition // J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer. 1998. V. 60. P. 665–710.
4. http://www.arm.gov/docs/documents/technical/conf_0003/giver-lp.pdf
5. Partridge H. and Schwenke D.W. The determination of an accurate isotope potential energy surface for water from extensive ab initio calculation and experimental data // J. Chem. Phys. 1997. V. 106. P. 4618–4639.
6. Clough S.A., Kneizys F.X. and Davies R.W. Line shape and water vapour continuum // Atmos. Res. 1989. V. 23. P. 229–241.
7. (see for ex. http://www.sat.uni-bremen.de/projects/maso/publications/master_ext_fr/wvcont.ps.gz)
8. Mitsel A.A., Ptashnik I.V., Firsov K.M., and Fomin B.A. Efficient technique for line-by-line calculating the transmittance of the absorbing atmosphere // Atmos. Oceanic Opt. 1995. V. 8. N 10. P. 847–850.
9. Mlawer E.J., Clough S.A., Brown P.D., and Tobin D.C. Recent development in the water vapor continuum // Proc. of the Ninth ARM Science Team Meeting. 1999. P. 1–6. Atmospheric Radiation Measurement Program.
10. Stamnes K., Tsay S.C., Wiscombe W., and Jayaweera K. A numerically stable algorithm for Discrete-Ordinate

- Method transfer in multiply scattering and emitting layered media // *Appl. Opt.* 1988. V. 27. P. 2502–2509.
11. *Kurucz R.L.* 1998. <http://cfaku5.harvard.edu/sun/irradiance/irradiancebins.dat>
 12. *Giver L.P., Chackerian C., Jr., and Varanasi P.* Visible and near-infrared H₂¹⁶O line intensity corrections for HITRAN-96 // *J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer.* 2000. V. 66. P. 101–105.
 13. *Zhong W., Haigh J.D., Belmiloud D., Schermaul R., and Tennyson J.* Note on «The impact of new water vapour spectral line parameters on the calculation of atmospheric absorption» // *Quart. J. Roy. Meteorol. Soc.* 2002. V. 128. P. 1387–1388.
 14. *Learner R.C.M., Zhong W., Haigh J.D., Belmiloud D., and Clarke J.* The contribution of unknown weak water vapor lines to the absorption of solar radiation // *Geophys. Res. Lett.* 1999. V. 26. N 24. P. 3609–3612.
 15. *Voronin B.A., Serebrennikov A.B., and Chesnokova T.Yu.* Estimation of the role of weak water vapor absorption lines in solar radiation transfer // *Atmos. Oceanic Opt.* 2001. V. 14. N 9. P. 718–721.
 16. *Schwenke D.W. and Partridge H.* Convergence testing of the analytic representation of an ab initio dipole moment function for water: Improved fitting yields improved intensities // *J. Chem. Phys.* 2000. V. 113. N 16. P. 6592–6597.

I.V. Ptashnik and K.P. Shine. Calculation of solar radiative fluxes in the atmosphere: The effect of updates in spectroscopic data.

Line-by-line calculations in the spectral region 2 000–20 000 cm⁻¹ (0,5–5 μm) were made to assess the impact of a variety of water vapour spectral databases on the accuracy of solar flux calculation in the atmosphere. The CKD-1 and CKD-2.4 continuum models were also compared. The maximum disagreement in the calculated solar surface flux due to all the investigated factors can reach 5,9 W/m² for midlatitude summer atmosphere and the solar zenith angle 30°. This is ~ 0,8% of the total downward solar flux at the surface and ~ 3,3% of the total atmospheric absorption. The dominant cause of this difference is the extra absorption caused by weak lines which are not included on the HITRAN databases.