

УДК 551.521.3, 535.343.4, 551.581.212

Спектроскопические факторы, влияющие на точность моделирования атмосферного радиационного переноса в полосах поглощения метана в ближнем ИК-диапазоне

Т.Ю. Чеснокова*

*Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН
634021, г. Томск, пл. Академика Зуева, 1*

Поступила в редакцию 22.02.2013 г.

Сделан анализ основных спектроскопических факторов, влияющих на моделирование атмосферного радиационного переноса в полосах поглощения метана в ближнем ИК-диапазоне, которые используются в задачах определения общего содержания метана в атмосфере по данным измерений атмосферных солнечных спектров. Рассмотрены влияние неопределенности параметров линий поглощения метана и водяного пара в современных спектроскопических банках данных и различия в моделях внеатмосферного спектра солнечного излучения. Сделано сравнение с измеренными атмосферными спектрами.

Ключевые слова: атмосферный радиационный перенос, метан, линии поглощения; atmospheric radiative transfer, methane, absorption lines.

Введение

Наблюдающееся в настоящее время увеличение глобальной температуры Земли связывают с ростом концентрации парниковых газов в атмосфере, таких как углекислый газ CO_2 , метан CH_4 , оксид азота N_2O [1]. Несмотря на то что концентрация CH_4 в атмосфере почти в 200 раз меньше, чем содержание CO_2 , метан вносит значительный вклад в удержание тепла Земли и атмосферы. Так, потенциал глобального потепления CH_4 в 21 раз выше, чем у CO_2 [2]. Мониторинг общего содержания (ОС) метана в атмосфере ведется спектроскопическими методами. Одним из эффективных методов определения ОС метана является измерение спутниковыми или наземными спектрометрами солнечного излучения, прошедшего через атмосферу в сильных полосах поглощения метана 2,2–2,4 и 1,62–1,67 мкм. Например, в данных спектральных диапазонах проводятся измерения содержания метана Фурье-спектрометром TANSO-FTS на японском спутнике GOSAT [3, 4], широкой сетью наземных Фурье-спектрометров TCCON, созданной для мониторинга основных парниковых газов [5].

Точность определения ОС метана из измеренных атмосферных спектров непосредственно зависит от исходной информации по линиям поглощения атмосферных газов, которые используются при моделировании атмосферного радиационного переноса. На международной конференции «Спектроскопия метана и производных молекул для атмосферных и планетарных приложений», проходив-

шей в г. Доле (Франция) 26–28 ноября 2012 г., обсуждалось, что проводимые в настоящее время в мире теоретические и экспериментальные исследования спектра поглощения метана значительно улучшают спектроскопические знания, но точность параметров линий поглощения метана в современных банках данных все еще не достаточна для атмосферных приложений, особенно для тетрадекады (полосы 1,67 мкм). В данной полосе имеется лишь частичная идентификация линий поглощения метана, параметры уширения определены с невысокой точностью. Кроме того, в докладе Н. Tran [6] было отмечено, что при расчете спектров пропускания атмосферных газов наряду с интенсивностью, положением центра, сдвигом центра линий и коэффициентами уширения необходимо учитывать и интерференцию линий, искажающую результирующий спектр.

В работе [4] показано, что имеются значительные различия между величиной ОС метана, восстановленной из спектров, измеренных спектрометром на спутнике GOSAT, с использованием спектроскопической базы данных HITRAN-2008 [7] и банка данных CH_4 , разработанного для обработки GOSAT-измерений. Это подтверждается и нашими исследованиями [8,9] при сравнении атмосферных спектров, измеренных наземным Фурье-спектрометром, и спектров, вычисленных с использованием банков данных HITRAN-2008 и GOSAT.

При восстановлении ОС метана по данным измерений наземных и спутниковых спектрометров в диапазоне спектра 1,63–1,67 мкм не учитывают в прямой задаче поглощение излучения этиленом, так как информация по линиям поглощения C_2H_4 отсутствует в спектроскопической базе данных HITRAN [7], которая обычно используется в атмо-

* Татьяна Юрьевна Чеснокова (ches@iao.ru).

сферных расчетах. Это может приводить к завышению восстановленной величины ОС метана на 30% и более в атмосфере с большим содержанием этилена, например для случая лесных пожаров [10, 11].

Другим источником погрешности моделирования атмосферного радиационного переноса в ближнем ИК-диапазоне является неточное задание внеатмосферного спектра солнечного излучения [8]. При определении ОС газов из атмосферных спектров, полученных спутниковыми спектрометрами, одновременно измеряется внеатмосферный спектр солнечного излучения, что позволяет скорректировать модель. При определении ОС метана из наземных измерений атмосферных солнечных спектров возможности точного учета спектра Солнца являются более ограниченными, и в расчетах часто используются модельные спектры Солнца, например [12], что может приводить к погрешности определения ОС метана.

Спектроскопические параметры линий поглощения метана

Несмотря на наблюдающийся в последние годы значительный прогресс в спектроскопии метана, область 1,65 мкм ($6000\text{--}6200\text{ см}^{-1}$) еще недостаточно изучена. Отсутствует идентификация большого числа линий, параметры уширения известны недостаточно точно для атмосферных приложений. В 2010 г. были опубликованы новые банки данных линий поглощения метана в области тетрадекады: банк, созданный для обработки данных измерений спутникового спектрометра GOSAT [13]; низкотемпературные банки данных метана и изотопологической модификации метана [14, 15]. Экспериментальные исследования полосы поглощения метана 1,6–1,7 мкм [13] для обработки измерений Фурье-спектрометра TANSO-

FTS, расположенного на спутнике GOSAT, позволили улучшить согласие между измеренными и расчетными спектрами метана, но расхождения все еще остаются. Недавно был создан эмпирический банк данных параметров линий метана WKMC [16], предназначенный для планетарных приложений. В этом банке данных параметры линий метана определены при температурах 80 и 296 К в диапазоне $5854\text{--}7919\text{ см}^{-1}$ (1,71–1,26 мкм).

В университете г. Дижона (Франция) в настоящее время проводятся теоретические исследования молекулы метана, создан пакет программ STDS [17] на основе метода эффективных гамильтонианов [18, 19], позволяющий предсказать интенсивности, центры линий и нижний уровень энергии для большого числа линий поглощения метана, включая многочисленные слабые линии, которые не открыты пока экспериментально. Точность предсказания положения центра линий и полуширин линий CH_4 для области тетрадекады 1,65 мкм в банке данных STDS пока еще недостаточна для определения ОС метана в атмосфере Земли из атмосферных солнечных спектров высокого разрешения. Расхождения между положением центров сильных линий в банке STDS и экспериментальными данными могут достигать $0,02\text{ см}^{-1}$ (таблица). Тем не менее наличие многочисленных слабых линий в расчетном банке данных STDS позволяет улучшить моделирование спектров поглощения метана в атмосферах других планет, где проводятся измерения с более низким спектральным разрешением. В работах [20–22] из лабораторных измерений спектров поглощения метана в широком диапазоне давлений уширяющих газов на оптико-акустическом и фотометрическом диодных лазерных спектрометрах определены параметры линий поглощения мультиплетов R5 и R9 полосы $2\nu_3$ метана.

Положение центра линий мультиплетов CH_4 полосы $2\nu_3$ с интенсивностью более $10^{-22}\text{ см}^2/\text{мол}$

Номер линии	GOSAT [13]	WKMC [16]	HITRAN [7]	STDS [17]	IAO-2012 [21, 22]	IAO-2007 [20]	Frankenberg [23]
<i>Мультиплет R5</i>							
1	6067,08186	6067,08090	6067,0816	6067,09280	6067,08187	6067,0817	6067,0816
2	6067,09982	6067,09890	6067,0997	6067,11284	6067,09998	6067,0998	6067,0997
3	6067,14848	6067,14740	6067,1485	6067,15319	6067,14814	6067,1483	6067,1485
4	6067,15554	6067,15600	6067,1570	6067,16169	6067,15703	6067,1565	6067,1570
<i>Мультиплет R6</i>							
1	6076,927	6076,927	6076,928	6076,94033			6076,9280
2	6076,93501	6076,93501	6076,935	6076,94799			6076,935
3	6076,95383	6076,95383	6076,954	6076,97350			6076,954
4	6077,02907	6077,02907	6077,0283	6077,03364			6077,0283
5	6077,047	6077,047	6077,0466	6077,05206			6077,0466
6	6077,06291	6077,06291	6077,0636	6077,06741			6077,0636
<i>Мультиплет R9</i>							
1	6105,62573	6105,62573	6105,6259	6105,62789	6105,62573	6105,62573	6105,6259
2	6105,62573	6105,62573	6105,6261	6105,63068	—	—	6105,6261
3	6106,037	6106,037	—	6106,04546	—	—	—
4	6106,040	6106,040	6106,0402	6106,05561	6106,03861	6106,03718	6106,0402
5	6106,055	6106,055	6106,0505	6106,07569	6106,05020	6106,04913	6106,0505
6	6106,22072	6106,22072	6106,2205	6106,22294	6106,22066	6106,22064	6106,2205
7	6106,25035	6106,25035	6106,252	6106,25406	6106,25169	6106,25168	6106,252
8	6106,28383	6106,28383	6106,2841	6106,28380	6106,28313	6106,28312	6106,2841

На рис. 1 приведено сравнение интенсивностей сильных линий метана в различных банках данных для мультиплетов полосы $2\nu_3$.

Мультиплеты R5, R6 и R9 выбраны для анализа, так как они достаточно часто используются в атмосферных спектроскопических измерениях концентрации метана. На рис. 1 представлены линии с интенсивностью больше 10^{-22} см/мол, положение центра которых приведено в таблице согласно номерам линий и мультиплетов метана. Как видно из рис. 1, даже для сильных линий, параметры которых могут быть определены экспериментально, наблюдаются значительные отличия. Для линий мультиплет R5 расхождения в данных интенсивности достигают 20, R6 – 10%. Ситуация с линиями R9 более сложная. В данных GOSAT [13], WKMC [16] и STDS [17] имеется сильная линия, которая отсутствует в других банках данных. Кроме того, в измерениях [20, 21] две близко расположенные линии (с центрами 6105,6259 и 6105,6261 см^{-1} по HITRAN-2008) определены параметрами одной линии, интенсивность которой в 2 раза больше. Величина интенсивности более слабых линий в вышеперечисленных банках параметров линий может отли-

чаться в несколько раз для одной и той же линии. В базе данных HITRAN-2008 отсутствуют многочисленные слабые линии CH_4 , которые были зарегистрированы экспериментально. Планируется выход версии HITRAN-2012, в которой данные по параметрам линий метана будут обновлены.

Для того чтобы выявить влияние неопределенностей в параметрах спектральных линий метана, был проведен расчет атмосферного пропускания методом *line-by-line* [24] на наклонной трассе для метеомодели лета средних широт. Был рассмотрен случай 10%-й систематической погрешности параметров линий метана. Учитывалось поглощение основными атмосферными газами на основе атласа спектральных линий HITRAN-2008. Профиль высотного распределения концентрации CH_4 задавался согласно измерениям MIPAS для средних широт [25]. На рис. 2 представлены абсолютные и относительные различия в атмосферном пропускании, вызванные увеличением интенсивностей и полуширин линий CH_4 на 10%. При спектральном разрешении 0,01 см^{-1} различия в пропускании за счет изменения интенсивности достигают по абсолютной величине 0,035.

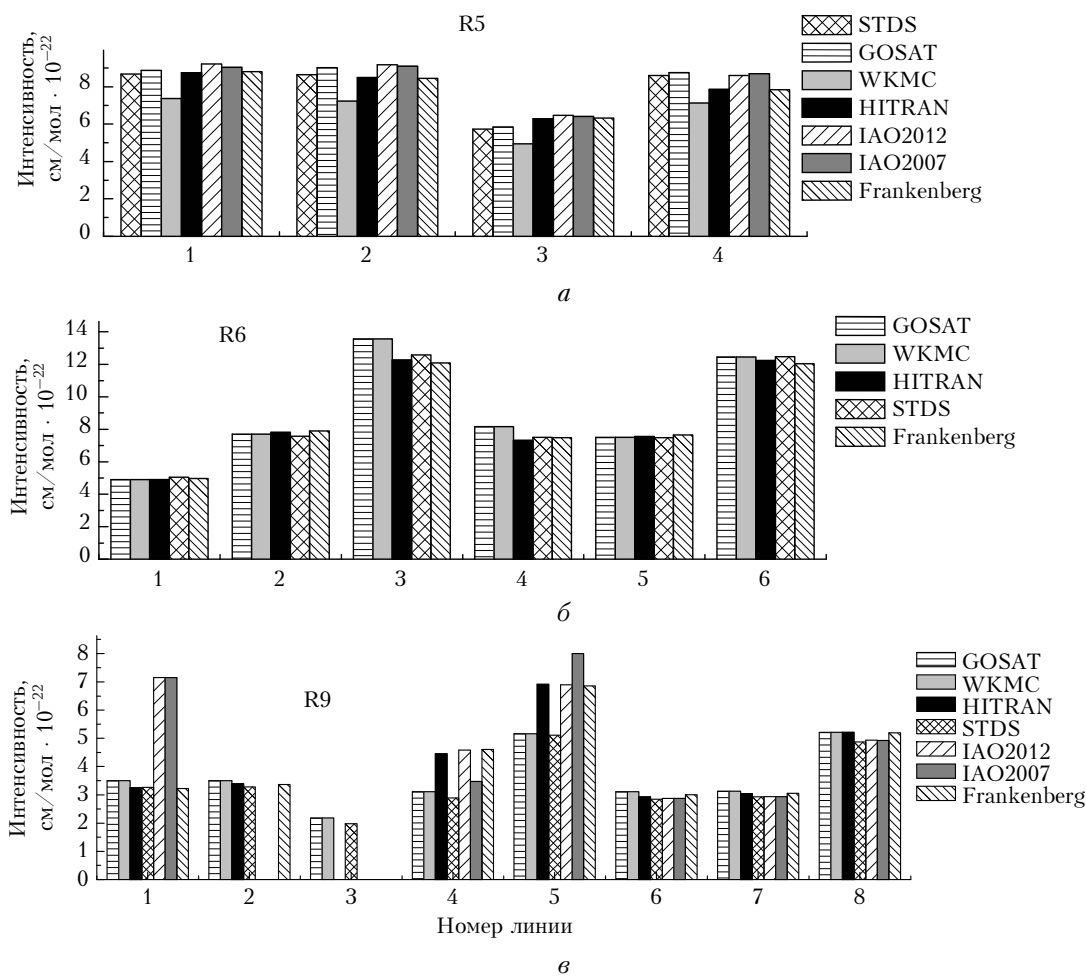


Рис. 1. Интенсивность сильных линий мультиплетов R5 (а), R6 (б) и R9 (в) CH_4 полосы $2\nu_3$ ($>10^{-22}$ см/мол) в различных банках данных параметров линий поглощения. Положение центра линии соответствует номеру линии и мультиплету в таблице

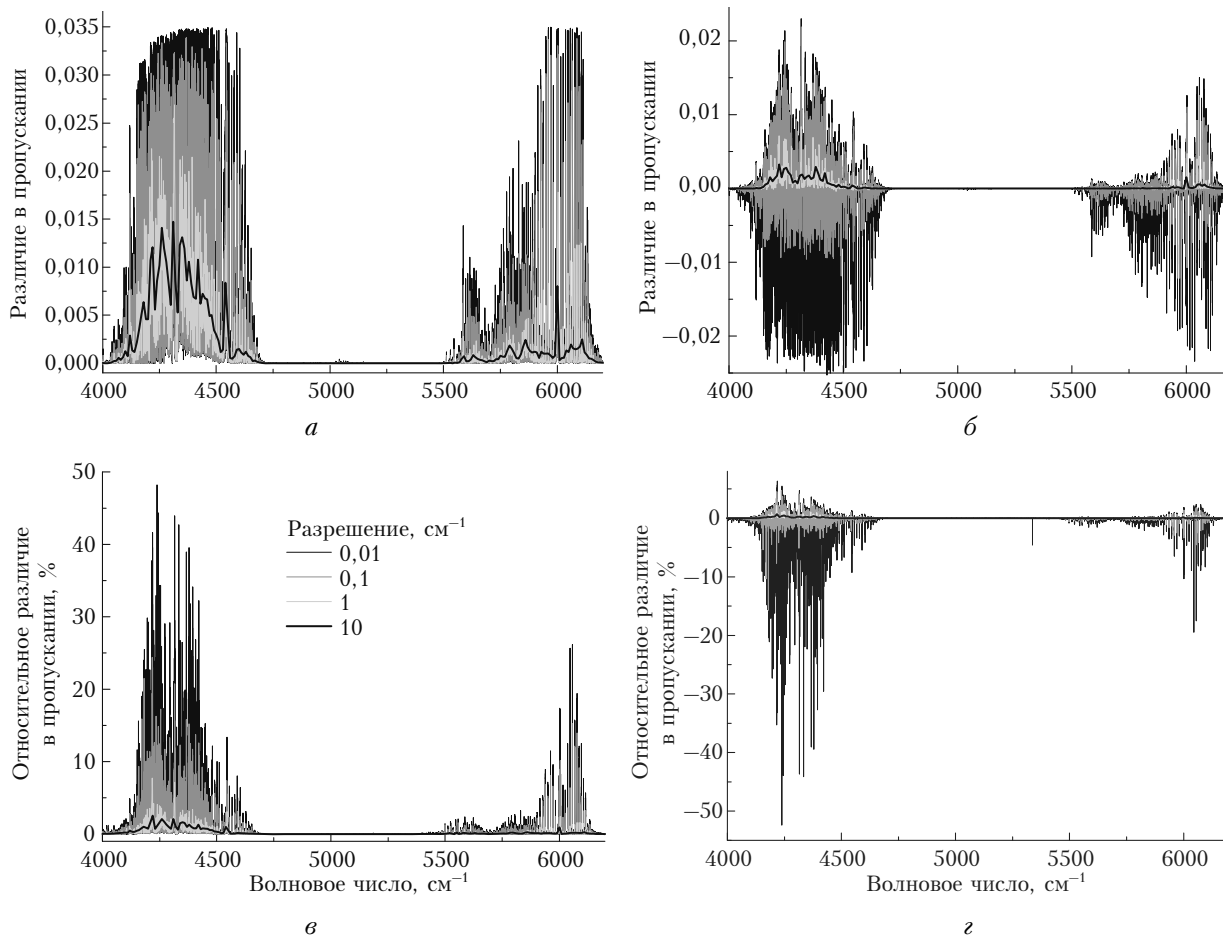


Рис. 2. Влияние 10%-й систематической погрешности параметров линий CH_4 на моделирование атмосферного пропускания на наклонной трассе (*a*, *в* – абсолютное и относительное различие в пропускании за счет увеличения интенсивности линий; *б*, *г* – абсолютное и относительное различие в пропускании за счет увеличения коэффициента уширения воздухом). Зенитный угол Солнца 60° . Метеомодель – лето средних широт

Проведено моделирование атмосферных спектров, вычисленных с использованием различных банков линий поглощения метана, и сделано сравнение с атмосферными солнечными спектрами, измеренными на наземном Фурье-спектрометре с высоким спектральным разрешением на обсерватории Коуровка [26]. Информация о спектрометре и методах измерения солнечного спектра приводится в [27, 28]. В расчетах применялись база данных HITRAN-2008, банк параметров линий CH_4 GOSAT [13], данные Frankenberg, 2008 [23], а также новые параметры линий CH_4 , полученные в Институте оптики атмосферы СО РАН (ИОА) из обработки лабораторных измерений спектра метана на диодных лазерных спектрометрах [21, 22]. Поглощение атмосферными газами вычислялось методом *line-by-line* [24] с использованием контура Фойгта. Внеатмосферный солнечный спектр задавался согласно данным [29]. Для мультиплета метана R5 различие между модельными спектрами достигает 0,024 по абсолютной величине (или 8,5%, рис. 3, *a*).

Наиболее близко к измеренному солнечному спектру в данном диапазоне находятся модельные

спектры с параметрами линий CH_4 из банков HITRAN-2008 и Frankenberg [23]. В целом поглощение в модельных спектрах в мультиплете R5 немного больше, чем в измеренном спектре. Моделирование спектров с использованием нового банка линий CH_4 WKMC [16] не проводилось, так как там присутствует неполная информация, необходимая для расчета атмосферного пропускания. Тем не менее, сравнив интенсивности линий поглощения CH_4 в различных банках данных, можно предположить, что наиболее близкими к атмосферному измеренному спектру в мультиплете R5 могли бы быть вычисления с использованием данных WKMC, так как в этом банке содержатся наименьшие значения интенсивностей по сравнению с другими банками данных (см. рис. 1, *a*).

Для мультиплета метана R9 наилучшее согласие между измеренными и модельными атмосферными спектрами в случае сильно перекрывающихся линий поглощения метана наблюдалось при использовании параметров линий поглощения CH_4 , определенных из лабораторных измерений в ИОА [21] (рис. 3, *б*).

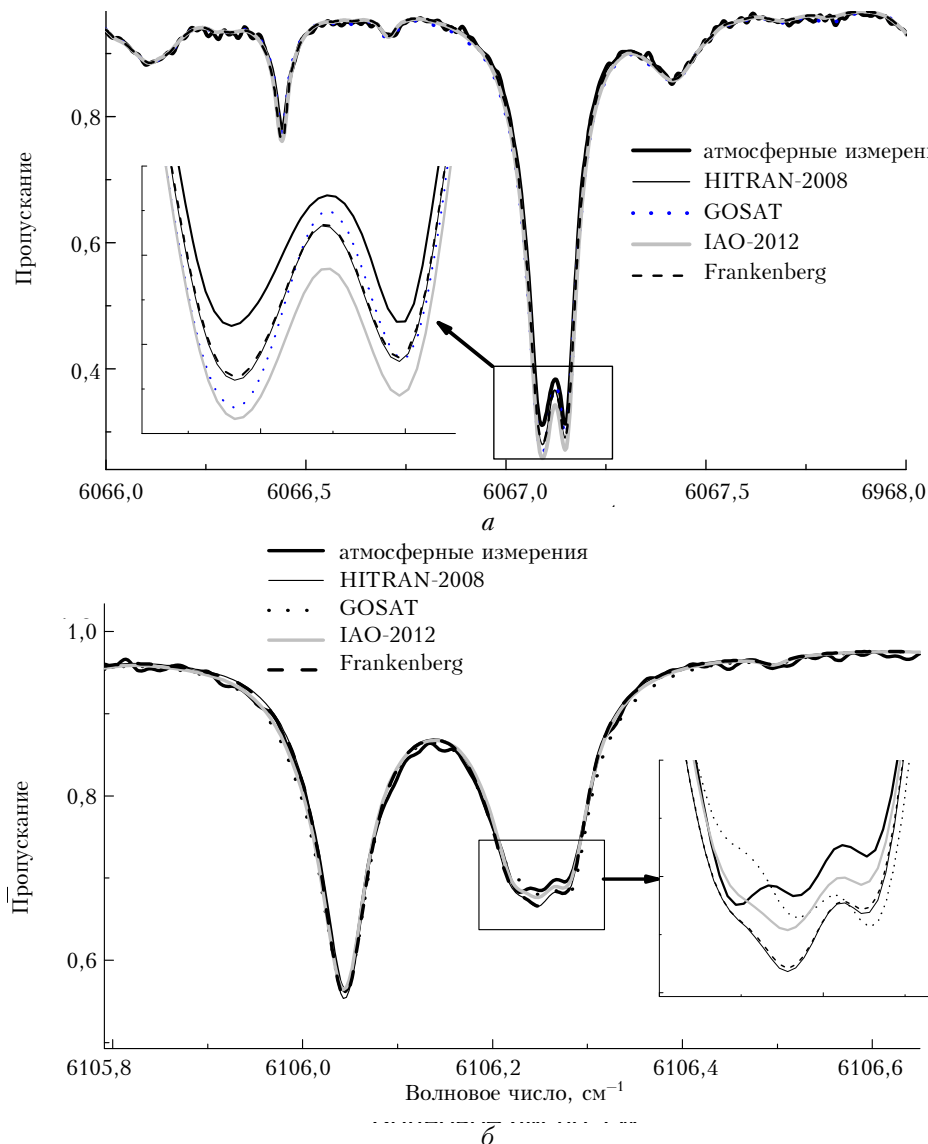


Рис. 3. Сравнение атмосферного спектра, измеренного наземным Фурье-спектрометром [26], и спектров, вычисленных с использованием банков параметров линий поглощения метана HITRAN-2008 [7], GOSAT [13], Frankenberg [23], IAO-2012 [21, 22] для мультиплетов метана R5 (а) и R9 (б) полосы $2\nu_3$. Измерения на ст. Коуровка, 1.07.2010. Зенитный угол Солнца 53°

Контур линий поглощения метана

Параметры линий поглощения метана, содержащиеся в спектроскопических банках данных, которые обычно используются в атмосферных расчетах, основаны на предположении, что в расчетах пропускания применяется контур линии поглощения Фойгта. Исследования спектров поглощения метана [6, 21, 22, 30] показывают, что этих параметров недостаточно для точного описания атмосферных и лабораторных спектров. В области средних давлений 0,05–0,4 атм наблюдается эффект столкновительного сужения линий Дике. В случае сильно перекрывающихся линий происходит спектральный обмен — интерференция линий, что также приводит к искажению контура и переопределению его параметров.

В работах Н. Tran [6], J.-M. Hartman et al. [30] было показано, что неучет интерференции в диапазоне 1,6–1,7 мкм приводит к погрешности восстановления ОС метана 0,05 ppm и более при больших зенитных углах Солнца. Теоретические расчеты интерференции метана затруднены тем, что в отличие от молекулы CO_2 , у которой интерференция линий поглощения может непосредственно учитываться в атмосферных расчетах, у метана достаточно большое количество линий пока еще не имеет квантовой идентификации в области тетрадекады и в более высоких полиадах. Одним из способов решения проблемы является использование в атмосферных расчетах эффективных коэффициентов уширения и сдвига линий поглощения, определенных из лабораторных спектров поглощения метана при разных давлениях. Эффективные коэффициенты включают в себя интерференцию

линий. Такой способ был предложен в работе Frankenberg [23] для обработки измерений ОС метана со спутникового спектрометра SCIAMACHY.

На основе лабораторных измерений спектров поглощения метана на оптико-акустическом и фотометрическом диодных лазерных спектрометрах определены параметры перекрывающихся линий поглощения мультиплетов R5 [22] и R9 [21] метана, уширенных азотом и неона при давлениях уширяющих газов 0,005–0,5 атм. Для обработки спектров использовались программа и методика одновременной подгонки нескольких экспериментальных спектров при различных давлениях смеси [31].

В основу многоспектрального анализа спектров поглощения уширенных сильно перекрывающихся линий был положен учитывающий интерференцию и сужение Дике модельный контур Пайна, представленный в работе [32]. Контур Фойгта, Раутиана–Собельмана, Розенкранца получаются из общего контура при фиксации отдельных подгоняемых параметров. Были найдены значения интенсивности, положения центра линий, параметры уширения давлением, сдвига, сужения за счет эффекта Дике и коэффициенты интерференции линий поглощения метана для различных контуров линий поглощения. Анализ лабораторных данных показал в некоторых случаях значительные отклонения формы контура линий от контура Фойгта, который обычно применяется в атмосферном моделировании.

Использование контура Раутиана–Собельмана позволило с погрешностью меньше 1% описать экспериментальные спектры [21]. Преимущество подгонки с использованием контура Раутиана–Собельмана по сравнению с контуром Фойгта присуще среднему диапазону давлений от 0,2 до 0,3 атм для одиночно расположенных линий, испытывающих эффект Дике. Для групп линий с сильным перекрыванием в исследованиях [33, 34] был использован новый профиль Кочанова [35], который включает в себя эффекты столкновительного сужения Дике, зависимость от скорости столкновений и эффект интерференции, что также уменьшает различия между лабораторными и модельными спектрами поглощения метана по сравнению с контуром Фойгта.

Перекрывание линий поглощения атмосферных газов с линиями поглощения метана в ближнем ИК-диапазоне

Полосы поглощения метана 1,6–1,7 и 2,2–2,4 мкм, используемые для определения ОС метана в атмосфере из наземных и спутниковых измерений атмосферных солнечных спектров, перекрываются с линиями поглощения H₂O, CO₂, N₂O, C₂H₄. В работе [36] отмечено, что неопределенность в параметрах линий поглощения H₂O в базе данных HITRAN является дополнительным источником погрешности определения ОС метана из спутниковых измерений, так как эта погрешность коррелирует с содержанием водяного пара в атмосфере и становится минимальной в измерениях над

пустыней Сахара. Использование уточненного экспериментального банка данных Vx1 [37] по линиям поглощения H₂O позволило уменьшить эту погрешность и улучшить согласие между измеренными и модельными спектрами для тропической атмосферы с большим содержанием водяного пара.

В нашей работе [38] было проведено моделирование атмосферных спектров солнечного излучения в диапазоне 1,6–2,4 мкм (4200–6200 см⁻¹) с применением спектроскопических параметров линий H₂O из базы данных HITRAN-2008, экспериментальных параметров линий H₂O Vx1 [37] и банка линий H₂O UCL-2008 [39]. Банк данных UCL-2008 содержит линии поглощения H₂O в диапазоне 750–20000 см⁻¹ (0,5–13,3 мкм) и является компиляцией параметров линий из HITRAN-2008, экспериментальных данных Vx1 [37] и теоретических расчетов VT2 [40].

Результаты сравнения расчетных спектров и атмосферного спектра, измеренного на наземном Фурье-спектрометре на ст. Коуровка, показали, что использование в расчетах банка линий H₂O Vx1 за счет уточнения интенсивности позволяет улучшить согласие между измеренными атмосферными и модельными спектрами по сравнению с данными HITRAN-2008 и UCL-08, например вблизи 4363, 5914, 6039 см⁻¹ и др. Однако имеются и спектральные интервалы, где банк данных Vx1 дает большее расхождение с измерениями, чем HITRAN-2008. В основном это вызвано неточностями в экспериментальном определении полуширины и сдвига линий H₂O в банке данных Vx1. Расчет с банком параметров линий UCL-08 приводит почти к таким же результатам, как HITRAN в рассматриваемом спектральном диапазоне [38].

В настоящее время при определении ОС метана в атмосфере из измеренных атмосферных спектров солнечного излучения в ближнем ИК-диапазоне не учитывают поглощение излучения этиленом, так как информация по линиям поглощения C₂H₄ пока еще отсутствует в спектроскопической базе данных HITRAN, которая обычно используется в атмосферных расчетах. Тем не менее этилен присутствует в атмосфере в количествах, которые могут заметно влиять на радиационный перенос (например, при лесных пожарах). В Институте оптики атмосферы на диодном лазерном спектрометре был зарегистрирован спектр поглощения этилена [41], а в 2010 г. были сделаны новые измерения спектра поглощения этилена на Фурье-спектрометре [42], что позволило уточнить данные предыдущих работ. В наших работах [10, 11] было проведено моделирование пропускания атмосферы методом *line-by-line* в спектральных диапазонах 4000–4500 и 6000–6200 см⁻¹ с различным спектральным разрешением и различными высотными профилями распределения концентрации метана и этилена. При спектральном разрешении 0,01 см⁻¹ относительный вклад линий поглощения этилена может достигать 6% в диапазоне 6000–6200 см⁻¹ и 3% в диапазоне 4000–4500 см⁻¹, что сравнимо по величине с изменением пропускания от удвоения концентрации

метана в атмосфере. Показано, что если спутниковые измерения метана проводятся в столбе атмосферы с большим содержанием этилена (например, над территорией лесных пожаров), то линии этилена следует учитывать в расчетах пропускания солнечного излучения. Их неучет в данном случае может привести к погрешности в определении содержания метана свыше 30% [10, 11].

Внеатмосферный солнечный спектр

При решении обратной задачи определения ОС метана из измеренных атмосферных солнечных спектров необходимо знать внеатмосферный спектр излучения Солнца. В настоящее время при моделировании атмосферного радиационного переноса используются разные данные спектра излучения Солнца, которые различаются спектральным разрешением, абсолютной величиной и расположением спектральных линий излучения, что вносит дополнительную неопределенность в восстановленную величину ОС метана. В настоящее время достаточно популярным в атмосферных расчетах является теоретический спектр Kurucz [12], рассчитанный с высоким спектральным разрешением. Например, он применяется в известном пакете MODTRAN [43].

В последние годы появляются модели спектра Солнца, основанные на компиляции измеренных и расчетных данных. Так, Международный комитет по наблюдению Земли со спутников (CEOS) рекомендовал использовать в атмосферном моделировании в качестве стандартного внеатмосферного солнечного спектра данные Thuillier [44], которые основаны на спутниковых измерениях ATLAS3 и EURECA. На основе спутниковых, самолетных и наземных измерений с высоким разрешением и расчетных данных

был разработан и предложен в качестве стандарта внеатмосферный солнечный спектр ASTM [45]. В 2008 г. для обработки данных спектроскопических измерений со спутника GOSAT был модифицирован модельный спектр Kurucz в некоторых спектральных интервалах ближнего ИК-диапазона. На рис. 4 представлено сравнение внеатмосферных спектров излучения Солнца в спектральной области 1,62–1,67 мкм ($6000\text{--}6200\text{ см}^{-1}$), которая используется для определения ОС CH_4 . Спектры Kurucz [12, 29] имеют наиболее высокое спектральное разрешение (0,001 нм). Спектр ASTM [45] прописан с разрешением 0,5 нм, Thuillier [44] — 0,3–0,5 нм. Как видно из рис. 4, имеются заметные различия в спектрах. В нашей работе [8] было показано, что различие между этими четырьмя спектрами, приведенными к одинаковому спектральному разрешению 10 см^{-1} , достигает 10% в области 1,62–1,67 мкм.

Проведено моделирование атмосферных солнечных спектров с использованием внеатмосферных спектров высокого разрешения [12, 29], и сделано сравнение со спектрами, измеренными наземным Фурье-спектрометром [26]. Сравнение показало, что применение теоретического спектра Kurucz [12] в области 1,62–1,67 мкм приводит к значительному расхождению с измеренным атмосферным спектром. В теоретическом спектре Kurucz [12] отсутствуют отдельные солнечные линии, которые определяются в атмосферном спектре и присутствуют в внеатмосферном спектре для GOSAT [29], а также в теоретическом спектре [12] имеются ошибочные линии, которых нет в атмосферном спектре, измеренном наземным Фурье-спектрометром. На рис. 5 приведен характерный пример, иллюстрирующий вышесказанное.

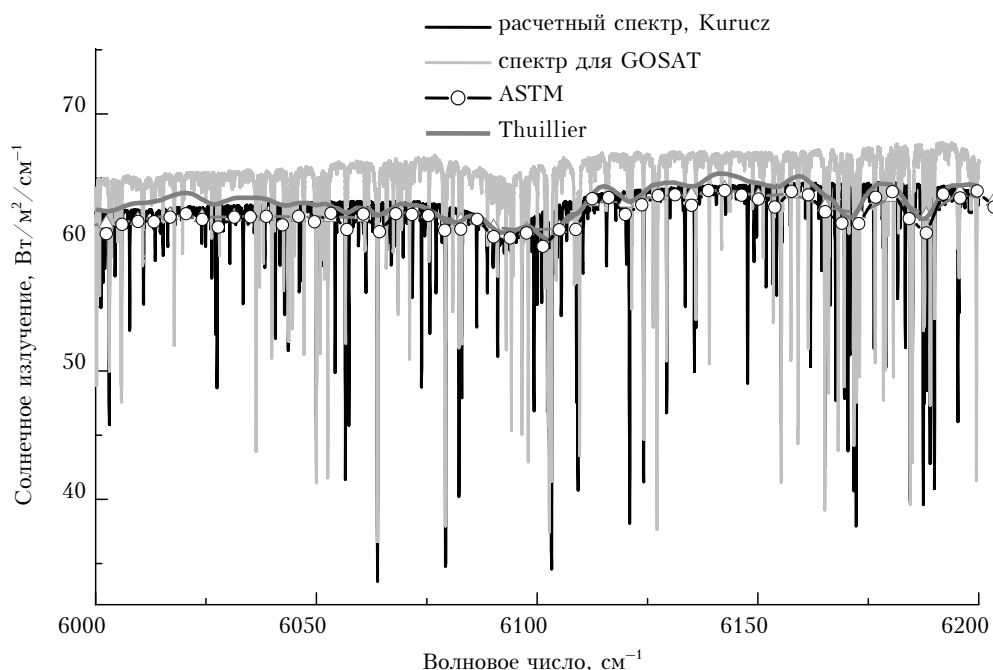


Рис. 4. Внеатмосферные спектры излучения Солнца: теоретические расчеты Kurucz [12], солнечный спектр, созданный для обработки данных GOSAT [29], стандартный спектр ASTM [45] и спектр Thuillier [44]

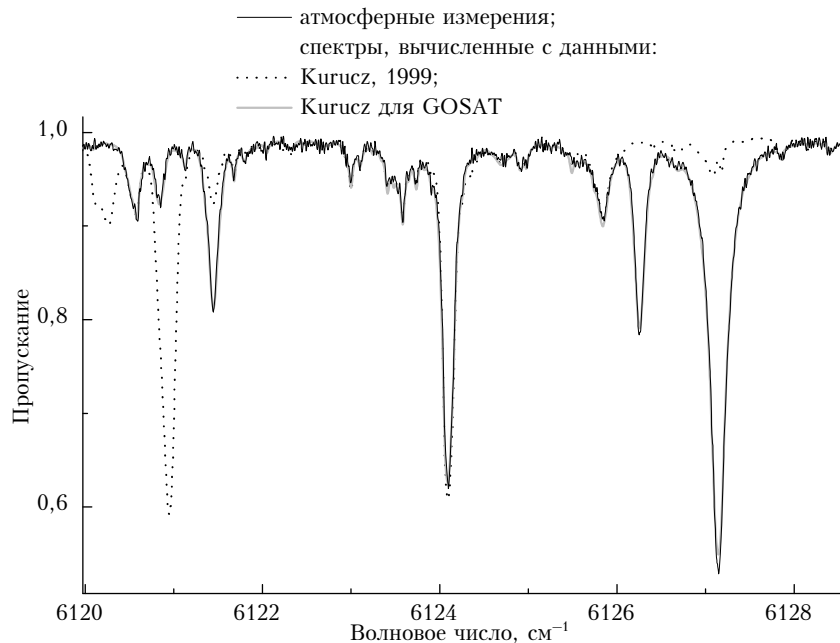


Рис. 5. Сравнение атмосферного спектра, измеренного наземным Фурье-спектрометром, и спектров, вычисленных с использованием внеатмосферных спектров солнечного излучения: расчетного спектра Kurucz [12] и спектра, созданного для обработки данных GOSAT [29]. Измерения на ст. Коуровка, 1.07.2010. Зенитный угол Солнца 53°

Заключение

Для повышения точности моделирования атмосферного радиационного переноса солнечного излучения в полосах поглощения метана следует использовать новые экспериментальные данные по параметрам линий поглощения CH_4 , а также учитывать эффекты интерференции и сужения линий поглощения метана. Для обработки атмосферных измерений солнечного излучения в диапазоне 1,6–1,7 мкм с высоким спектральным разрешением не рекомендуется применять модельный внеатмосферный спектр Солнца Kurucz [12], так как в данном спектральном диапазоне этот спектр неточно описывает линии излучения Солнца. В спектре отсутствуют некоторые солнечные линии, положение центра ряда линий определено с большой погрешностью. В ситуациях с повышенным содержанием этилена в атмосфере (например, в случае лесных пожаров) следует учитывать его вклад в атмосферное пропускание в задачах определения ОС метана в спектральном диапазоне 1,6–1,7 мкм, что можно сделать, используя данные о сечениях поглощения C_2H_4 , представленные в работах [41, 42]. Дальнейшее повышение точности моделирования переноса солнечного излучения в диапазонах 2,2–2,4 и 1,6–1,7 мкм возможно также за счет появления уточненных спектроскопических данных по параметрам линий поглощения CH_4 и H_2O , которые будут содержаться в новой версии базы данных HITRAN-2012.

Автор выражает благодарность В.И. Захарову и К.Г. Грибанову за предоставленные атмосферные спектры солнечного излучения, измеренные на наземном Фурье-спектрометре на обсерватории Коуровка, г. Екатеринбург.

1. *IPCC Fourth Assessment Report: Climate Change 2007: The Physical Science Basis. Contribution of Working Group I to the Fourth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change* / S. Solomon, D. Qin, M. Manning, Z. Chen, M. Marquis, K.B. Averyt, M. Tignor and H.L. Miller (eds.). Cambridge: Cambridge University Press, United Kingdom and New York, USA. 996 p.
2. *United States Environmental Protection Agency. Greenhouse Gases Overview* <http://www.epa.gov/climatechange/ghgemissions/gases.html>
3. *The Greenhouse Gases Observing Satellite «IBUKI» (GOSAT)* <http://www.gosat.nies.go.jp/eng/gosat/page3.htm>
4. Morino I., Uchino O., Inoue M., Yoshida Y., Yokota T., Wennberg P.O., Toon G.C., Wunch D., Roehl C.M., Notholt J., Warneke T., Messerschmidt J., Griffith D.W.T., Deutscher N.M., Sherlock V., Connor B., Robinson J., Sussmann R., Rettinger M. Preliminary validation of column-averaged volume mixing ratios of carbon dioxide and methane retrieved from GOSAT short-wavelength infrared spectra // *Atmos. Measur. Techn. Discuss.* 2010. V. 3, iss. 6. P. 5613–5643.
5. Wunch D., Toon G.C., Blavier J.-F.L., Washenfelder R.A., Notholt J., Connor B.J., Griffith D.W.T., Sherlock V., Wennberg P.O. The total carbon column observing network // *Philosophical Transactions of the Royal Society – Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences.* 2011. V. 369, N 1943. P. 2087–2112, doi:10.1098/rsta.2010.0240.
6. Tran H. The $2\nu_3$ band of CH_4 revisited with line-mixing and consequences for spectroscopy and atmospheric retrievals // *International Workshop: Spectroscopy of methane and derived molecules for atmospheric and planetary applications.* Dole, France, 26–28 November 2012. P. 24.
7. Rothman L.S., Gordon I.E., Barbe A., Benner D.C., Bernath P.F., Birk M., Boudon V., Brown L.R., Campargue A., Champion J.-P., Chance K., Coudert L.H., Dana V., Devi V.M., Fally S., Flaud J.-M., Gama-

- che R.R., Goldman A., Jacquemart D., Kleiner I., Lacombe N., Lafferty W.J., Mandin J.-Y., Massie S.T., Mikhailenko S.N., Miller C.E., Moazzen-Ahmadi N., Naumenko O., Nikitin A.V., Orphal J., Perevalov V.I., Perrin A., Predoi-Cross A., Rinsland C.P., Rotger M., Simecková M., Smith M.A.H., Sung K., Tashkun S.A., Tennyson J., Toth R.A., Vandaele A.C., Vander Auwera J. The HITRAN 2008 molecular spectroscopic database // *J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer*. 2009. V. 110, N 9–10. P. 533–572.
8. Chesnokova T.Yu., Boudon V., Gabard T., Griбанov K.G., Zakharov V.I., Firsov K.M. Chapter 2. Near-Infrared Radiative Transfer Modeling to Retrieve Atmospheric Methane Total Amount // *Solar Radiation: Protection, Management and Measurement Techniques* / Ed. Fatih Onur Hocaoglu. Hauppauge, New York: Nova Science Publishers, 2012. ISBN: 978-1-61470-064-7.
 9. Chesnokova T.Yu., Boudon V., Gabard T., Griбанov K.G., Firsov K., Zakharov V.I. Near-infrared radiative transfer modelling with different CH₄ spectroscopic databases to retrieve atmospheric methane total amount // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*. 2011. V. 112, iss. 17. P. 2676–2682
 10. Chesnokova T.Yu., Voronina Yu.V., Ponomarev Yu.N., Kapitanov V.A. Influence of the overlapping of the atmospheric gas absorption spectra on the retrieval of the total methane content in the atmosphere from the transmission in the 1.6 to 1.7 μm spectral region // *Atmos. and Ocean. Opt.* 2010. V. 23, N 4. P. 322–327.
 11. Воронина Ю.В., Чеснокова Т.Ю., Ченцов А.В., Солодов А.А. Влияние перекрытия спектров поглощения атмосферных газов на определение общего содержания метана в атмосфере спектроскопическими методами // *Изв. вузов. Физ.* 2010. № 9/3. С. 217–221.
 12. Fontenla J., White O.R., Fox P.A., Avertt E.H., Kurucz R.L. Calculation of solar irradiances. I. Synthesis of the solar spectrum // *Astrophys. J.* 1999. V. 518, iss. 1. P. 480–500.
 13. Nikitin A., Lyulin O., Mikhailenko S., Perevalov V., Filippov N., Grigoriev I., Morino I., Yokoba T., Kumazawa R., Watanabe T. GOSAT-2009 methane spectral list in the 5550–6236 cm^{-1} range // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*. 2010. V. 111, N 15. P. 2211–2224.
 14. Lyulin O.M., Kassi S., Sung K., Brown L.R., Campargue A. Determination of the low energy values of ¹³CH₄ transitions in the 2v₃ region near 1.66 μm from absorption spectra at 296 and 81 K // *J. Mol. Spectrosc.* 2010. V. 261, iss. 2. P. 91–100.
 15. Le Wang, Kassi S., Campargue A. Temperature dependence of the absorption spectrum of CH₄ by high resolution spectroscopy at 81 K: (I) The region of the 2v₃ band at 1.66 μm // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*. 2010. V. 111, iss. 9. P. 1130–1140.
 16. Campargue A., Le Wang, Mondelain D., Kassi S., Bezard B., Lellouch E., Coustenis A., Catherine de Bergh, Hirtzig M., Drossart P. An empirical line list for methane in the 1.26–1.71 μm region for planetary investigations ($T = 80\text{--}300\text{ K}$). Application to Titan // *Icarus*. 2012. V. 219, N 1. P. 110–128
 17. Spherical Top Data System. <http://www.icb.cnrs.fr/OMR/SMA/SHTDS/STDS.html>
 18. Champion J.P., Loëte M., Pierre G. Spherical top spectra // *Spectroscopy of the Earth's atmosphere and interstellar medium* / Eds. K. Rao, A. Weber. San Diego: Academic Press Inc., 1992. P. 339–422.
 19. Boudon V., Champion J.P., Gabard T., Loëte M., Michelot F., Pierre G., Rotger M., Wenger Ch., Ray M. Symmetry-adapted tensorial formalism to model rovibrational and rovibronic spectra of molecules pertaining to various point groups // *J. Mol. Spectrosc.* 2004. V. 228, N 2. P. 620–634.
 20. Kapitanov V.A., Ponomarev Yu.N., Tyryshkin I.S., Rostov A.P. Two-channel opto-acoustic diode laser spectrometer and fine structure of methane absorption spectra in 6070–6180 cm^{-1} region // *Spectrochimica Acta. Part A*. 2007. V. 66, N 4–5. P. 811–818.
 21. Kapitanov V.A., Osipov K.Yu., Protasevich A.E., Ponomarev Yu.N. Collisional parameters of N₂ broadened methane lines in the R9 multiplet of the 2v₃ band. Multispectrum fittings of the overlapping spectral lines // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*. 2012. V. 113, N 16. P. 1985–1992.
 22. Osipov K.Yu., Protasevich A.E., Kapitanov V.A., Ponomarev Yu.N. Collision parameters of N₂ – broadened methane lines in R5 multiplet of 2v₃ band. Multispectrum fitting of overlapping spectral lines // *Appl. Phys. B*. 2012. V. 106, N 3. P. 725–732.
 23. Frankenberg C., Warneke T., Butz A., Aben I., Hase F., Spietz P., Brown L.R. Pressure broadening in the 2v₃ band of methane and its implication on atmospheric retrievals // *Atmos. Chem. Phys.* 2008. V. 8, iss. 17. P. 5061–5075.
 24. Mitsel' A.A., Ptashnik I.V., Firsov K.M., Fomin B.A. Efficient technique for line-by-line calculating the transmittance of the absorbing atmosphere // *Atmos. and Ocean. Opt.* 1995. V. 8, N 10. P. 847–850.
 25. CH₄ Profiles and Spectrum <http://www.atm.ox.ac.uk/group/mipas/species/ch4.html>
 26. Atmospheric Fourier Station in Kourouva Astronomical Observatory (Ural State University) http://www.remotesensing.ru/fts_sta.html
 27. Грибанов К.Г., Захаров В.И., Береснев С.А., Рокотян Н.В., Поддубный В.А., Чистяков П.А., Скорик Г.Г., Васин В.В. Зондирование HDO/H₂O в атмосфере Урала методом наземных измерений ИК-спектров солнечного излучения с высоким спектральным разрешением // *Оптика атм. и океана*. 2011. Т. 24, № 2. С. 124–127.
 28. Рокотян Н.В., Захаров В.И., Грибанов К.Г., Jouzel J., Warneke T., Notholt J. О возможности дистанционного зондирования изотопологов углеродсодержащих парниковых газов в атмосфере наземными ИК-Фурье-спектрометрами высокого разрешения // *Оптика атм. и океана*. 2013. Т. 26, № 1. С. 46–51.
 29. Solar spectrum <http://kurucz.harvard.edu/sun/irradiance2008/>
 30. Tran H., Hartmann J.-M., Toon G., Brown L.R., Frankenberg C., Warneke T., Spietz P., Hase F. The 2v₃ band of CH₄ revisited with line mixing: Consequences for spectroscopy and atmospheric retrievals at 1.67 μm // *J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer*. 2010. V. 111, iss. 10. P. 1344–1356.
 31. Protasevich A.E. Certificate of State Registration of the Program for ECM N. 2011612390, 2011.
 32. Pine A.S. Line mixing sum rules for the analysis of multiplet spectra // *J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer*. 1997. V. 57, iss. 2. P. 145–155
 33. Osipov K.Yu., Kapitanov V.A., Protasevich A.E., Chesnokova T.Yu., Ponomarev Yu.N. The comparison of experimental line profile parameters of the CH₄ 2v₃ band R9 multiplet absorption // *International Workshop: Spectroscopy of methane and derived molecules for atmospheric and planetary applications*. Dole, France, 26–28 November 2012. P. 52.
 34. Chesnokova T.Yu., Osipov K.Yu., Griбанov K.G., Zakharov V.I., Firsov K.M. Simulation of the Atmospheric solar spectra with different CH₄ absorption line profiles

- in the 1,6–1,7 μm spectral region // International Workshop: Spectroscopy of methane and derived molecules for atmospheric and planetary applications. Dole, France. 26–28 November 2012. P. 22.
35. Kochanov V.P. Line profiles for the description of line mixing, narrowing, and dependence of relaxation constants on speed // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*. 2011. V. 112, iss. 12. P. 1931–1941.
 36. Frankenberg C., Bergamaschi P., Butz A., Houweling S., Meirink J.F., Notholt J., Petersen A.K., Schrjver H., Warneke T., Aben I. Tropical methane emissions: A revised view from SCIAMACHY onboard ENVISAT // *Geophys. Res. Lett.* 2008. V. 35. L15811. doi:10.1029/2008GL034300.
 37. Jenouvrier A., Daumont L., Regali-Jarlot L., Tyuterev V.G., Carleer M., Vandaele A.C., Mikhailenko S., Fally S. Fourier Transform Measurements of Water Vapor Line Parameters in the 4200–6600 cm^{-1} Region // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*. 2007. V. 105, iss. 2. P. 326–355.
 38. Chesnokova T.Yu., Voronin B.A., Voronina Yu.V., Gribanov K.G., Zakharov V.I., Firsov K.M. Simulation of the High Resolution Atmospheric Solar Spectra in the 1,6–2,4 μm Spectral Region // *Proc. XVII Int. Sympos. HighRus-2012*. Tomsk: Publishing House of IAO SB RAS, 2012. P. 59–62.
 39. Shillings A.J.L., Ball S.M., Barber M.J., Tennyson J., Jones R.L. An upper limit for water dimer absorption in the 750 nm spectral region and a revised water line list // *Atmos. Chem. Phys.* 2011. V. 11, iss. 9. P. 4273–4287.
 40. Barber R.J., Tennyson J., Harris G.J., Tolchenov R.N. A high accuracy computed water line list – BT2 // *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* 2006. V. 368, iss. 3. P. 1087–1094.
 41. Kapitanov V.A., Ponomarev Yu.N. High resolution ethylene absorption spectrum between 6035 and 6210 cm^{-1} // *Appl. Phys. B*. 2008. V. 90, N 2. P. 235–241.
 42. Loroño Gonzalez M.A., Boudon V., Loëte M., Rotger M., Bourgeois M.-T., Didriche K., Herman M., Kapitanov V.A., Ponomarev Yu.N., Solodov A.A., Solodov A.M., Petrova T.M. High-resolution spectroscopy and preliminary global analysis of C–H stretching vibrations of C_2H_4 in the 3000 and 6000 cm^{-1} regions // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*. 2010. V. 11, N 15. P. 2265–2278.
 43. Berk A., Anderson G.P., Acharya P.K., Shettle E.P. MODTRAN5.2.0.0 User's Manual // SPECTRAL SCIENCES, INC. 2008. 99 p.
 44. Thuillier G., Hersé M., Labs D., Foujols T., Peetermans W., Gillotay D., Simon P.C., Mandel H. The solar spectral irradiance from 200 to 2400 nm as measured by the SOLSPEC spectrometer from the ATLAS and EURECA missions // *Solar Phys.* 2003. V. 214, iss. 1. P. 1–22.
 45. Reference Solar Spectral Irradiance: ASTM G-173 <http://rredc.nrel.gov/solar/spectra/am1.5/ASTMG173/ASTMG173.html>

T. Yu. Chesnokova. Spectroscopic factors, influencing the accuracy of the atmospheric radiative transfer simulation in the methane absorption bands in the near infrared region.

The analysis of basic spectroscopic factors, influencing atmospheric radiative transfer simulation in the methane absorption IR bands, which are used in the tasks of methane total content retrieval from the atmospheric solar spectra measurements, is carried out. The role of methane and water vapour absorption line parameters uncertainties and difference of extraterrestrial solar spectrum models is considered. A comparison with measured atmospheric spectra is made.