

А.Д. Быков, Б.А. Воронин, О.В. Науменко, Л.Н. Сеница, К.М. Фирсов, Т.Ю. Чеснокова

**ВКЛАД СЛАБЫХ ЛИНИЙ ПОГЛОЩЕНИЯ ВОДЯНОГО ПАРА В ОСЛАБЛЕНИЕ
КОРОТКОВОЛНОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ***Институт оптики атмосферы СО РАН, г. Томск*

Поступила в редакцию 12.07.99 г.

Рассмотрен вклад очень слабых линий поглощения водяного пара, обычно не учитываемых при оценках атмосферного поглощения, в атмосферное поглощение излучения ближнего инфракрасного и видимого диапазонов. Расчеты проведены на основе базы данных HITRAN-96 и спектра поглощения воды, полученного в результате «глобальных» *ab initio* вычислений Партриджа и Швенке [4]. Расчеты показали, что вклад слабых линий в интегральное поглощение составляет 2–4% для горизонтальных трасс различной протяженности и наиболее значим в видимой области спектра.

Введение

В последние годы все большее количество исследований посвящается проблеме радиационного баланса атмосферы и роли слабых эффектов поглощения, тем или иным образом связанных с атмосферным водяным паром [1–3]. Проблема заключается в том, что существует значительное расхождение между рассчитанным и измеренным радиационным бюджетом Земли даже в безоблачной, чистой атмосфере, причем измеренное значение атмосферного поглощения превышает рассчитанное (см., например, [2, 3]). Как указано в [2], это избыточное поглощение коррелирует с концентрацией водяного пара, но не коррелирует с облачностью. Для объяснения расхождения привлекаются различные гипотезы. Так, например, в [1] избыточное поглощение в облаках объясняется недостаточно корректным учетом эффектов рассеяния в используемых моделях, в [2] показано, что существенные коррективы в рассчитываемое интегральное поглощение может внести непрерывное поглощение, а в [3] высказана гипотеза, что дополнительный вклад в общее поглощение водяного пара в ближней инфракрасной и видимой областях могут дать слабые линии, не учитываемые в современных базах данных HITRAN и GEISA.

В данной статье представлен прямой расчет вклада слабых линий поглощения водяного пара в общее атмосферное поглощение в диапазоне 7000–18000 см⁻¹. Основная идея, как и в [3], заключается в том, что число слабых линий значительно превосходит число сильных линий и их суммарный вклад может быть заметным. Однако в отличие от работы [3], в которой число и интенсивности слабых линий определены интерполяцией из данных HITRAN-96, здесь используются спектральные данные (положения и интенсивности линий), полученные на основе высокоточного расчета *ab initio* [4]. Это позволяет дать более точные оценки роли слабых линий.

Параметры спектральных линий и метод расчета

База спектральных данных HITRAN-96, одна из наиболее широко используемых для атмосферных приложений,

содержит 15803 линии молекулы H₂¹⁶O с интенсивностью более 10⁻²⁷ см/мол в спектральном диапазоне 7600–18000 см⁻¹. Кроме того, в базу частично включены данные о линиях изотопных модификаций H₂¹⁷O, H₂¹⁸O.

База данных получена на основе высокоточных *ab initio* расчетов внутримолекулярной потенциальной функции и функции дипольного момента H₂O Партриджа и Швенке [4] и вариационного расчета колебательно-вращательных уровней энергии, частот и интенсивностей переходов. Она содержит значительно больше линий, чем HITRAN-96. В частности, в том же диапазоне 7600–18000 см⁻¹ согласно [4] имеется более 400000 линий с интенсивностью более 10⁻³⁰ см/мол. Отметим также, что для диапазона 12900–14300 см⁻¹ число линий с интенсивностью менее 10⁻²⁶ см/мол превышает 19500, тогда как общее число линий с интенсивностью 10⁻³⁰–10⁻²³ см/мол составляет 21800. Например, в том же диапазоне в HITRAN-96 содержится только 2100 линий, а число линий с интенсивностью менее 10⁻²⁶ см/мол менее 200. База данных [4] включает линии горячих полос, высоких обертонов изгибного колебания, параметры линий поглощения изотопных модификаций воды.

Точность расчетов центров и интенсивностей линий достаточно велика для проведения оценочных расчетов. Среднеквадратическое отклонение расчетных центров от центров линий, приведенных в HITRAN-96, составляет всего 0,1 см⁻¹, среднеквадратическое отклонение интегральных интенсивностей полос – порядка 20%. Отметим, что в [4] расчетные центры линий уточнялись подгонкой параметров потенциальной функции к данным HITRAN (30092 линии), но интенсивности получены только на основе *ab initio* вычислений.

Полуширины линий воды при уширении воздухом брались как средние для данного значения вращательного квантового числа J нижнего уровня. Для линий с $J > 12$ полуширина бралась равной 0,005 см⁻¹/атм.

Функция поглощения с разрешением 20 см⁻¹ рассчитывалась прямым методом *line-by-line* [5], при этом учитывалось поглощение тремя изотопами водяного пара, контур линии предполагался лоренцевским, обрывание контура проводилось при отстройке от резонансной частоты 25 см⁻¹, непрерывное поглощение не учитывалось. Для расчетов

применялась метеомодель AFGL для тропических широт [6]. Горизонтальная трасса на высоте 0 выбиралась таким образом, чтобы поглощающая масса H_2O была близка к таковой на неоднородной трассе, проходящей через всю атмосферу по углам 0, 60 и 70°.

Результаты расчетов и обсуждение

Поскольку «слабыми» могут считаться линии с различной интенсивностью, в зависимости от диапазона или наличия соответствующих данных в атласе HITRAN, то для оценки их роли предварительно были отобраны сильные линии, содержащиеся в атласе Партриджа и Швенке таким образом, чтобы их количество было таким же, как и в базе данных HITRAN-96. Поглощение слабыми линиями при этом оценивалось как разница между поглощением, рассчитанным с учетом всех линий, и поглощением, вычисленным только при учете наиболее сильных линий. Вычисления проводились для спектрального интервала 7000–18000 cm^{-1} . Результаты представлены на рис. 1–4.

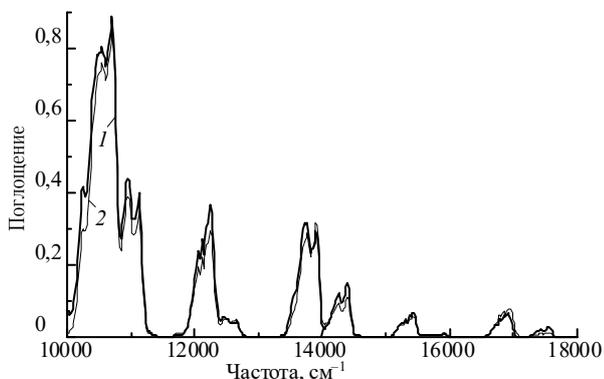


Рис. 1. Спектральная зависимость поглощения водяного пара: 1 – расчет с базой данных [4]; 2 – с данными HITRAN-96

Проведенные расчеты показали, что слабые линии водяного пара дают вклад в интегральное поглощение 2–4% на горизонтальных трассах длиной 2,1–6,2 км. Такое добавочное поглощение является достаточно заметным, и, очевидно, им нельзя пренебречь при оценках интегрального поглощения солнечного излучения атмосферой.

Отметим (см. рис. 1), что для ряда участков спектра, например в области 10300 cm^{-1} , различие достаточно большое – поглощение увеличивается от 0,3 до 0,4. По-видимому, это говорит о необходимости уточнения и дополнения данных HITRAN-96 и о необходимости более точного расчета интенсивностей слабых линий. Очевидно, такой расчет должен учитывать все сложности внутримолекулярной динамики H_2O .

На рис. 2 приведены результаты расчета поглощения коротковолнового излучения водяным паром в диапазоне 7600–18000 cm^{-1} , полученного с данными [4]. Отдельно показан вклад слабых линий поглощения. Видно, что вклад слабой части спектра поглощения водяного пара, как правило, составляет несколько процентов, однако его относительный вклад достаточно большой в области слабых полос поглощения. На рис. 3 отдельно приведены спектральная зависимость поглощения только слабыми линиями и его относительная роль в диапазоне 8000–26000 cm^{-1} для трех различных атмосферных трасс. Видно, что относительная величина вклада слабых линий быстро возрастает

при переходе в видимую часть спектра. Более того, поглощение сильно зависит от длины трассы.

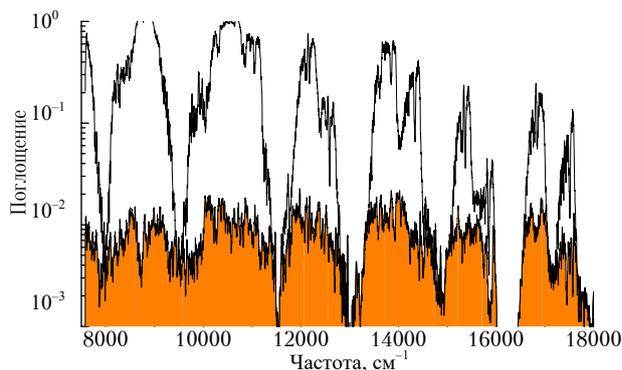


Рис. 2. Спектральная зависимость поглощения H_2O . Вклад слабых линий – заштрихованная область

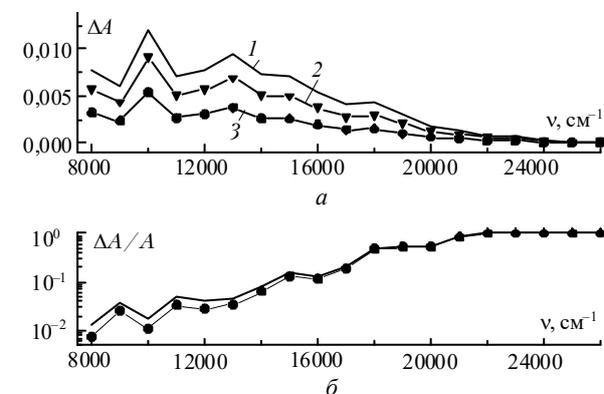


Рис. 3. Поглощение слабыми линиями H_2O , спектральное разрешение 1000 cm^{-1} : а – абсолютная величина поглощения; б – относительная величина поглощения. Кривые 1, 2 и 3 соответствуют горизонтальным трассам длиной 2,1; 4,2 и 6,2 км

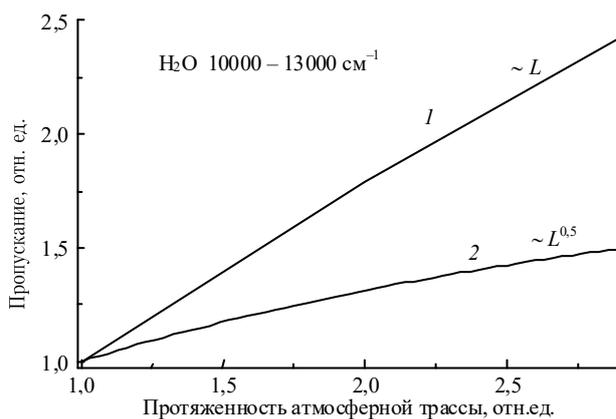


Рис. 4. Зависимость величины поглощения от длины трассы

Необходимо отметить, что роль слабых линий в атмосферном поглощении возрастает вследствие более быстрого увеличения их вклада при удлинении трассы. В качестве примера на рис. 4 представлены зависимости поглощения в области 10000–13000 cm^{-1} слабыми (1) и сильными (2) линиями от длины трассы L . Как известно, поглощение сильными линиями увеличивается пропорционально $L^{0,5}$, в то же

время поглощение слабыми линиями оказывается прямо пропорциональным длине трассы. Таким образом, роль слабых линий должна быть сравнительно большой на длинных горизонтальных трассах.

Проведенные расчеты приводят к следующим выводам. Во-первых, слабые линии поглощения водяного пара могут давать заметное увеличение общего поглощения и оно должно быть учтено при оценках радиационного баланса наряду с другими факторами – континуальным поглощением, поглощением димерами воды и т.д. Во-вторых, относительная роль слабых линий зависит от спектрального диапазона, типа и длины трассы. Наибольший вклад слабых линий необходимо ожидать на горизонтальных трассах большой протяженности.

Авторы выражают благодарность члену-корреспонденту РАН С.Д. Творогову за многочисленные плодотворные обсуждения работы и финансовую поддержку

в рамках гранта президента Российской Федерации №96-15-98476, Школа.

1. Кондратьев К.Я., Бибенко В.И., Мельникова И.Н. Поглощение солнечной радиации облачной и безоблачной атмосферой // Метеорология и гидрология. 1996. № 2. С. 14–23.
2. Vogelman A.M., Ramanathan V., Conant W.C., Hanter W.E. Observational constraints on non-lorentzian continuum effects in the near-infrared solar spectrum using ARM ARESE data // JQSRT. 1998. V. 54. № 2. P. 231–246.
3. Lerner R.C.M. The copacity of atmosphere. An estimate of the contribution due to unknown, weak absorption lines in the water spectrum // Report on Water Conference, Paris, 1998.
4. Partridge H., Schwenke D. // J.Chem.Phys. 1997. V. 106. P.4618–4639.
5. Mitsel A.A., Firsov K.M. A fast line-by-line method // JQSRT. 1995. V. 54. P. 548–557.
6. 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. 1986. AD A175173 (2).

A.D. Bikov, B.A. Voronin, O.V. Naumenko, L.N. Sinitsa, K.M. Firsov, T.Yu. Chesnokova. **Weak Water Vapor Lines Contribution into Shortwave Radiation Attenuation.**

The weak water vapor lines contribution to the total atmospheric absorption was studied. It was found that the magnitude of additional absorption reaches 2–4% of the overall water vapor absorption and can not be neglected in estimates of the atmospheric solar radiation attenuation.