СПЕКТРОСКОПИЯ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ

УДК 551.593.5.531.521.3

Построение параметризаций молекулярного поглощения в нижней и средней атмосфере Земли в ИК-диапазоне

И.В. Мингалев, Е.А. Федотова, К.Г. Орлов*

Полярный геофизический институт РАН 184209, Мурманская обл., г. Апатиты, ул. Академгородок, 26a

Поступила в редакцию 19.03.2018 г.

Представлены новый алгоритм построения параметризаций молекулярного поглощения в атмосфере Земли, который учитывает изменение газового состава атмосферы с высотой и имеет ряд других достоинств, а также построенная с помощью этого алгоритма параметризация в диапазоне частот от 10 до 2000 см⁻¹ в интервале высот от поверхности Земли до 76 км. Проведено сравнение результатов расчетов поля собственного излучения атмосферы Земли, выполненных с использованием этой параметризации, с результатами эталонных расчетов (*line-by-line*), которое показало, что представленная параметризация имеет хорошую точность в нижней и средней атмосфере как при отсутствии облаков, так и при наличии облачных слоев с большой оптической толщиной.

Ключевые слова: параметризация молекулярного поглощения, собственное излучение атмосферы, расчет поля излучения; parameterization of molecular absorption, atmosphere radiation, calculation of radiation field.

Введение

Расчет поля собственного ИК-излучения атмосферы необходим в различных физических приложениях, в частности для интерпретации данных дистанционного зондирования атмосферы, а также для расчета нагрева атмосферы собственным ИК-излучением при моделировании общей циркуляции атмосферы Земли. При этом возникает проблема скорости проведения таких вычислений. Для гарантированного достижения точности 1% и ниже при расчетах интенсивности излучения разрешение по частоте должно составлять примерно 0,001 см⁻¹. Расчеты с таким высоким разрешением по частоте называются эталонными (*line-by-line*). Они требуют очень больших вычислительных затрат и по этой причине не могут использоваться в моделях общей циркуляции атмосферы в настоящее время и в обозримом будущем.

Для решения указанной проблемы разработаны методы быстрого расчета поля излучения. Основная идея этих методов состоит в том, что реальная зависимость коэффициента молекулярного поглощения от частоты заменяется на модельную зависимость, более удобную для расчетов. При этом узкие спектральные каналы по определенному алгоритму объединяются в группы, каждая из которых заменяется на один широкий модельный канал. В результате несколько миллионов узких спектральных каналов заменяются на несколько десятков или несколько сотен модельных каналов, для каждого из которых проводится численное решение уравнения переноса излучения. Процедуру построения указанных модельных каналов называют построением параметризации молекулярного поглощения. Для проверки точности построенной параметризации результаты расчета поля излучения в модельных каналах сравниваются с результатами эталонных расчетов. Отметим, что на высотах 0–70 км нужно учитывать изменение газового состава атмосферы с высотой. Ниже высоты 15 км вклад водяного пара в коэффициент молекулярного поглощения является существенным, а вклад озона мал. Выше уровня 20 км снижается роль водяного пара и возрастает вклад озона. Поэтому спектры поглощения на малых и больших высотах не коррелируют.

Одним из методов построения параметризации является метод *k*-корреляции [1-17], который, в свою очередь, является одним из вариантов метода лебеговского осреднения сечений поглощения по частоте [18]. В методе *k*-корреляции функция пропускания для выбранных частотного и заданного интервалов высот представляется в виде суммы ряда экспонент, каждому слагаемому этого ряда ставится в соответствие свой модельный канал. Также используются два предположения: 1) при решении уравнения переноса излучения достаточно знать функцию распределения коэффициента поглощения (k-распределение); 2) функция распределения коэффициентов поглощения незначительно меняется с высотой. Последнее предположение нарушается для диапазона высот 0-70 км.

Ранее было создано большое число различных параметризаций молекулярного поглощения в атмосфере Земли в частотном диапазоне 10–3000 см⁻¹, которые

^{*} Игорь Викторович Мингалев (mingalev_i@pgia.ru); Екатерина Алфеевна Федотова (godograf87@mail.ru); Константин Геннадьевич Орлов (orlov@pgia.ru).

[©] Мингалев И.В., Федотова Е.А., Орлов К.Г., 2018

содержат от нескольких десятков до 150-200 модельных каналов [5–17]. Общая особенность этих параметризаций заключается в том, что все они обеспечивают хорошую точность (в пределах 0,5 К/сут) расчетов скоростей нагрева-выхолаживания атмосферы за счет собственного излучения на высотах тропосферы и нижней стратосферы (примерно до 20 км). На высотах более 25 км точность этих параметризаций существенно ухудшается. Способ построения параметризации, предложенный в работе [13], обеспечивает наилучшую точность при заданном числе модельных каналов, но является достаточно трудоемким в реализации, поскольку требуется проводить большой объем подгоночных расчетов для каждого модельного канала. Отметим, что из-за роста быстродействия компьютеров в настоящее время приемлемым быстродействием будут обладать параметризации, содержащие 500-1500 модельных каналов.

В данной работе предложен новый алгоритм построения параметризации молекулярного поглощения, который отличается от метода *k*-корреляции, учитывает изменение газового состава атмосферы с высотой, не требует проведения подгоночных расчетов для каждого модельного канала и относительно прост в программной реализации по сравнению с другими алгоритмами. Созданная авторами программа, реализующая этот алгоритм, позволяет менять число модельных каналов параметризации в широких пределах. Представлена построенная с помощью этой программы параметризация молекулярного поглощения в атмосфере Земли, которая обладает хорошей точностью в диапазоне высот 0—76 км как при отсутствии облачных слоев, так и при их наличии.

Точность построенной параметризации проверялась с помощью эталонных расчетов, выполненных с разрешением по частоте 0,001 см⁻¹. Коэффициенты молекулярного поглощения атмосферных газов рассчитывались с использованием спектроскопической базы данных HITRAN2012 [19] по стандартной теории, согласно которой суммируются вклады различных линий поглощения при обрезании крыльев линий на расстоянии 25 см⁻¹ от центра линии, и с учетом континуального поглощения водяного пара и углекислого газа, которое было задано с помощью эмпирической модели МТ СКD [20]. Для проверки точности авторы провели сравнение результатов этих расчетов с результатами эталонных расчетов, выполненных другими научными группами в рамках международного проекта CIRC (Continual Intercomparison of Radiation Codes, www.https://circ.gsfc.nasa.gov). На рис. 1 представлены восходящий и нисходящий потоки собственного излучения атмосферы Земли в частотном интервале 10–3000 см⁻¹, полученные с помощью эталонных расчетов нами и другими авторами в рамках проекта CIRC при одинаковых оптических параметрах атмосферы. Видно, что потоки совпадают с высокой точностью не ниже 1%.

Алгоритм построения параметризации

Для построения параметризации весь участок спектра разбивается на интервалы шириной 90–125 см⁻¹,



Рис. 1. Восходящий (*a*) и нисходящий (*б*) потоки собственного излучения атмосферы Земли в интервале 10–3000 см⁻¹, полученные при эталонных расчетах

которые далее будем называть интервалами осреднения. В каждом интервале осреднения узкие спектральные каналы по различным алгоритмам объединяются в широкие модельные каналы, которые также называют носителями резонансов [18]. Основная идея нового алгоритма состоит в том, чтобы построение модельных каналов проводить в два этапа. На первом этапе выбирается высота первой сортировки в диапазоне 5-17 км, чтобы учесть линии поглощения водяного пара. Все узкие каналы из интервала осреднения разбиваются на N₁ групп так, чтобы коэффициенты молекулярного поглощения узких каналов внутри каждой группы были достаточно близки между собой на этой высоте, а также на высотах 0-20 км. На втором этапе выбирается высота второй сортировки в диапазоне 40-55 км для учета линии поглощения озона. Каждая полученная после первой сортировки группа узких каналов разбивается на N₂ подгрупп так, чтобы коэффициенты молекулярного поглощения узких каналов внутри каждой подгруппы были достаточно близки между собой на этой высоте и на высотах 0–76 км. Узкие каналы, вошедшие в одну подгруппу, объединяются в один модельный канал. В итоге получается N_1N_2 модельных каналов на один интервал осреднения.

Обозначим через T и P температуру и давление атмосферного газа, v – частота, h – высота от поверхности Земли, $K^{\text{мол}}(T, P, v)$ – объемный коэффициент молекулярного поглощения атмосферного газа, который при заданном молекулярном составе этого газа является функцией температуры, давления и частоты и который следует рассчитывать по стандартной теории с использованием спектроскопической базы данных HITRAN2012 [19] и с учетом континуального поглощения водяного пара и углекислого газа, которое можно задать с помощью эмпирических моделей, например МТ СКD [20].

В данной работе использовался следующий алгоритм построения модельных каналов. Рассмотрим интервал осреднения [v_{min}, v_{max}] шириной от 50 до 125 см⁻¹. Делим его на узкие каналы с частотой v_i, внутри которых оптические параметры можно считать постоянными. Затем выбираем некоторые средние зависимости температуры T(h), давления P(h) атмосферного газа и парциальных давлений водяного пара $P^{(\mathrm{H}_2\mathrm{O})}(h)$ и озона $P^{(\mathrm{O}_3)}(h)$ от высоты. Далее строим сетку по высоте h_k , в которой нумерация начинается на верхней границе атмосферы, и сетку по давлению $P_k = P(h_k)$, $P_0 < \dots < P_k < P_{k+1} < \dots < P_{\max}$ и задаем значения среднего профиля температуры атмосферного газа в узлах этой сетки: $T_{k,0} = T(h_k) = T(P_k)$. Отметим, что выбор шагов сетки по давлению должен обеспечивать приемлемую точность интерполяции оптических параметров. Проведенные авторами расчеты показали, что для достижения хорошей точности достаточно использовать шаги сетки по высоте 200 м на высотах менее 10 км и 400 м на высотах более 10 км.

Для каждого узла сетки по давлению P_k строим равномерную сетку значений температуры с шагом ΔT по формуле

$$T_{k,l} = T_{k,0} + l \cdot \Delta T, \ l = -L, \ ..., \ L,$$
(1)

причем шаг ΔT и число L выбираются так, чтобы все возможные значения температуры атмосферного газа при давлении P_k попадали внутрь отрезка $[T_{k,0} - L \cdot \Delta T, T_{k,0} + L \cdot \Delta T]$ и обеспечивалась приемлемая точность интерполяции оптических параметров по температуре. Расчеты показали, что для выполнения перечисленных условий в нижней и средней атмосфере достаточно взять $\Delta T = 10$ К и L = 10. Если взять $\Delta T = 5$ К, то точность интерполяции практически не меняется, а если взять $\Delta T = 20$ К, то эта точность заметно ухудшается на высотах более 20 км. Для каждого узла сетки по давлению и температуре P_k , $T_{k,i}$ вводится дополнительная сетка значений парциальных давлений водяного пара $P_{k,l,n}^{(H_2O)}$ и озона $P_{k,l,q}^{(O_3)}$. Сначала выбираем высоту первой сортировки h_{C1} в интервале от 5 до 15 км, на которой производится объединение узких каналов в такие группы, что одинаковые оптические параметры вошедших в одну группу узких каналов близки между собой в нижней атмосфере. Проведенные расчеты показали, что наилучшая точность достигается при выборе h_{C1} в интервале от 10 до 15 км. На этой высоте для фиксированных значений $P(h_{C1})$, $T(h_{C1})$, $P^{(H_2O)}(h_{C1})$, $P^{(O_3)}(h_{C1})$ рассчитываем минимальное и максимальное значения коэффициента молекулярного поглощения по всем узким каналам из интервала осреднения: $K_{C1,min} = \min_{i} K^{MOT}(h_{C1}, v_i)$, $K_{C1,max} =$ $= \max_{i} K^{MOT}(h_{C1}, v_i)$. На отрезке $[K_{C1,min}, K_{C1,max}]$ вводим сетку значений объемного коэффициента моле

дим сетку значении объемного коэффициента молекулярного поглощения, равномерную в логарифмическом масштабе и заданную формулами

$$K_{C1,0} = K_{C1,\min}, \quad K_{C1,N_1} = K_{C1,\max},$$

$$K_{C1,j} = (K_{C1,0})^{(1-j/N_1)} (K_{C1,N_1})^{(j/N_1)}.$$
 (2)

Эта сетка делит отрезок на N_1 частей. После ее построения осуществляется сортировка узких каналов на группы, которые объединяются в широкие модельные каналы по следующему правилу. Все узкие каналы, для которых выполняется условие $K^{\text{мол}}(h_{C1}, v_i) \in (K_{C1,j-1}, K_{C1,j}]$, объединяются в группу с номером j. Обозначим через N_j число узких каналов, вошедших в эту группу; $\Omega_j = (i_{j,1}, ..., i_{j,N_j})$ список номеров этих узких каналов, записанных в порядке возрастания.

Далее выбираем высоту второй сортировки h_{C2} в интервале от 40 до 55 км, на которой производится объединение узких каналов в такие модельные каналы, что одинаковые оптические параметры узких каналов, вошедших в один модельный канал, близки между собой не только в нижней, но и в средней атмосфере. Проведенные расчеты показали, что наилучшая точность достигается при выборе h_{C2} в интервале от 45 до 50 км. На этой высоте сортировки каждую группу узких каналов, полученную при первой сортировке, делим на подгруппы. Для фиксированных значений $P(h_{C2})$, $T(h_{C2})$, $P^{(H_2O)}(h_{C2})$, $P^{(O_3)}(h_{C_2})$ рассчитываем минимальное и максимальное значения коэффициента молекулярного поглощения по всем узким каналам, вошедшим в множество Ω_j : $K_{C2,\min}(j) = \min_{i \in \Omega_j} K^{\text{мол}}(h_{C2}, v_i), \quad K_{C2,\max}(j) =$ = $\max_{i \in \Omega_j} K^{\text{мол}}(h_{C2}, v_i)$. На отрезке [$K_{C2, \min}, K_{C2, \max}$] вводим сетку, равномерную в логарифмическом масштабе и заданную формулами

$$K_{C2, j,0} = K_{C2, \min}(j), \quad K_{C2, j, N_2} = K_{C2, \max}(j),$$

$$K_{C2, j, m} = (K_{C2, j, 0})^{(1 - m/N_2)} (K_{C2, j, N_2})^{(m/N_2)}.$$
 (3)

Эта сетка делит отрезок на N_2 частей. После ее построения все узкие каналы из множества Ω_j , для которых выполняется условие $K^{\text{мол}}(h_{C2}, v_i) \in (K_{C2, j, m-1}, K_{C2, j, m}]$, объединяются в модельный

Построение параметризаций молекулярного поглощения в нижней и средней атмосфере Земли...

канал с индексами j, m. Обозначим через $N_{j,m}$ число узких каналов, вошедших в этот модельный канал, а через $\Omega_{j,m} = (i_{j,1}, ..., i_{j,N_{j,m}})$ — список номеров этих узких каналов, записанных в порядке возрастания.

Для каждого узла сетки по давлению и температуре и для каждого модельного канала с индексами j, m вычисляются средние значения функции Планка B(T, v) по формуле

$$B_{j,m}^{\text{MOD}}(T_{k,l}) = \frac{1}{N_{j,m}} \sum_{i \in \Omega_{j,m}} B(T_{k,l}, v_i), \qquad (4)$$

объемного коэффициента поглощения (суммы молекулярного и аэрозольного):

$$K_{j,m}^{\text{MOQ}}(T_{k,l}, P_k, P_{k,l,n}^{(\text{H}_2\text{O})}, P_{k,l,q}^{(\text{O}_3)}) = \frac{1}{B_{j,m}^{\text{MOQ}}(T_{k,l})N_{j,m}} \times \sum_{i \in \Omega_{j,m}} K(T_{k,l}, P_k, P_{k,l,n}^{(\text{H}_2\text{O})}, P_{k,l,q}^{(\text{O}_3)}, \nu_i) B(T_{k,l}, \nu_i), \quad (5)$$

объемного коэффициента рассеяния (суммы молекулярного и аэрозольного):

$$\alpha_{j,m}^{\text{MOD}} \Big(T_{k,l}, P_k, P_{k,l,n}^{(\text{H}_2\text{O})}, P_{k,l,q}^{(\text{O}_3)} \Big) = \frac{1}{B_{j,m}^{\text{MOD}} (T_{k,l}) N_{j,m}} \times \sum_{i \in \Omega_{j,m}} \alpha \Big(T_{k,l}, P_k, P_{k,l,n}^{(\text{H}_2\text{O})}, P_{k,l,q}^{(\text{O}_3)}, \nu_i \Big) B(T_{k,l}, \nu_i), \quad (6)$$

альбедо однократного рассеяния:

$$\begin{split} & \omega_{j,m} \Big(T_{k,l}, P_k, P_{k,l,n}^{(\mathrm{H}_2\mathrm{O})}, P_{k,l,q}^{(\mathrm{O}_3)} \Big) = \\ & = \alpha_{j,m}^{\mathrm{MOR}} \Big(T_{k,l}, P_k, P_{k,l,n}^{(\mathrm{H}_2\mathrm{O})}, P_{k,l,q}^{(\mathrm{O}_3)} \Big) \times \\ & \times \Big[K_{j,m}^{\mathrm{MOR}} \Big(T_{k,l}, P_k, P_{k,l,n}^{(\mathrm{H}_2\mathrm{O})}, P_{k,l,q}^{(\mathrm{O}_3)} \Big) + \\ & + \alpha_{j,m}^{\mathrm{MOR}} \Big(T_{k,l}, P_k, P_{k,l,n}^{(\mathrm{H}_2\mathrm{O})}, P_{k,l,q}^{(\mathrm{O}_3)} \Big) \Big]^{-1}. \end{split}$$
(7)

Индикатриса рассеяния в модельном канале с индексами j, m вычисляется по формуле

$$\chi_{j,m}^{\text{MOR}} \Big(T_{k,l}, P_k, P_{k,l,n}^{(\text{H}_2\text{O})}, P_{k,l,q}^{(\text{O}_3)}, u \Big) =$$

$$= \sum_{i \in \Omega_{j,m}} \chi \Big(T_{k,l}, P_k, P_{k,l,n}^{(\text{H}_2\text{O})}, P_{k,l,q}^{(\text{O}_3)}, \mathbf{v}_i, u \Big) \times$$

$$\times \alpha \Big(T_{k,l}, P_k, P_{k,l,n}^{(\text{H}_2\text{O})}, P_{k,l,q}^{(\text{O}_3)}, \mathbf{v}_i \Big) B(T_{k,l}, \mathbf{v}_i) \times$$

$$\times \Big[\alpha_{j,m}^{\text{MOR}} \Big(T_{k,l}, P_k, P_{k,l,n}^{(\text{H}_2\text{O})}, P_{k,l,q}^{(\text{O}_3)} \Big) B_{j,m}^{\text{MOR}}(T_{k,l}) N_{j,m} \Big]^{-1}. \quad (8)$$

На этом процесс объединения узких каналов в широкие модельные и процесс вычисления средних значений оптических характеристик в узлах сетки по давлению и температуре для широких модельных каналов выполнен. Таким образом, сотни тысяч узких спектральных каналов из интервала осреднения заменяются на десятки или сотни (в зависимости от требуемой точности и скорости расчетов) широких модельных каналов.

При моделировании общей циркуляции атмосферы необходимо рассчитывать поле излучения в модельных каналах для вертикальных распределений концентраций и температуры поглощающих газов и распределений аэрозольных частиц над каждым узлом пространственной сетки на поверхности Земли. Поскольку над каждым из этих узлов в заданный момент времени имеется свое вертикальное распределение концентраций и температуры поглощающих газов и распределений аэрозольных частиц, то для каждого из этих распределений необходимо быстро рассчитывать вертикальные профили оптических параметров для каждого модельного канала. Для выполнения этих расчетов используется следующий прием. Каждый из пяти оптических параметров, заданных формулами (3)-(8), в любом модельном канале является функцией давления, температуры и парциальных давлений газов, удельное содержание которых в воздухе существенно меняется с высотой. В нашем примере это парциальные давления водяного пара $P^{(\text{H}_2\text{O})}$ и озона $P^{(\text{O}_3)}$. Для каждого узла сетки по давлению и температуре $P_k, T_{k,i}$ вводится дополнительная сетка значений парциальных давлений водяного пара $P_{k,l,n}^{(\mathrm{H}_2\mathrm{O})}$ и озона $P_{k,l,q}^{(O_3)}$. Значения каждого оптического параметра как функции $f(P, T, P^{(H_2O)}, P^{(O_3)})$ рассчитываются в узлах этой сетки и хранятся в памяти компьютера. Для расчета значений этой функции между узлами сетки P_k , $T_{k,i}$, $P_{k,l,n}^{(\mathrm{H_2O})}$, $P_{k,l,q}^{(\mathrm{O_3})}$ используется полилинейная интерполяция по четырем переменным. Шаги сетки по парциальным давлениям следует подбирать так, чтобы обеспечить нужную точность интерполяции при минимальном числе узлов сетки.

Описанная методика позволяет быстро рассчитывать оптические параметры в каждом модельном канале для произвольных вертикальных распределений концентраций и температуры поглощающих газов и распределений аэрозольных частиц. При этом необходимо хранить в оперативной памяти массивы значений всех оптических параметров в узлах сетки по температуре и давлению для каждого модельного канала.

Можно провести следующую теоретическую оценку точности представленного алгоритма построения параметризации. Для эталонных расчетов вводится сетка по высоте (оптической толщине) и зенитному углу. Интенсивность собственного излучения атмосферы в каждом узком спектральном канале с частотой v_i в узлах этой сетки запишем в виде одномерного вектора $I(v_i)$. После дискретизации уравнения переноса излучения по высоте и зенитному углу [4, 21] получается система линейных алгебраических уравнений для вектора $I(v_i)$, которую можно записать в виде

$$\mathbf{A}(\mathbf{v}_i)\mathbf{I}(\mathbf{v}_i) = \mathbf{b}(\mathbf{v}_i),\tag{9}$$

где $\mathbf{A}(v_i)$ — матрица коэффициентов, элементы которой выражаются через значения в узлах сетки по высоте коэффициента экстинкции, альбедо однократного рассеяния и индикатрисы рассеяния; $\mathbf{b}(v_i)$ вектор правых частей. Решая систему (9), вектор $\mathbf{I}(v_i)$ можно представить в виде $\mathbf{I}(v_i) = \mathbf{A}^{-1}(v_i)\mathbf{b}(v_i)$, где $\mathbf{A}^{-1}(v_i)$ — матрица, обратная к матрице $\mathbf{A}(v_i)$. Пусть N — число узких каналов в интервале осреднения, а Δv — ширина узких спектральных каналов. Тогда вектор потоков излучения в узлах сетки по высоте и зенитному углу в этом интервале осреднения, полученный с помощью эталонных расчетов, можно записать как

$$\mathbf{I}_{\text{\tiny 9T}} = \Delta \mathbf{v} \sum_{i=1}^{N} \mathbf{A}^{-1}(\mathbf{v}_i) \, \mathbf{b}(\mathbf{v}_i) =$$
$$= \Delta \mathbf{v} \sum_{j=1}^{N_1} \sum_{m=1}^{N_2} \sum_{i \in \Omega_{j,m}} \mathbf{A}^{-1}(\mathbf{v}_i) \, \mathbf{b}(\mathbf{v}_i). \tag{10}$$

Для модельного канала с индексами j, m вычисляются осредненные оптические параметры по формулам (4)–(8). Эти параметры задают матрицу осредненных коэффициентов $\mathbf{A}_{\rm cp}(j,m)$ и обратную к ней матрицу $\mathbf{A}_{\rm cp}^{-1}(j,m)$. Вектор потоков излучения в узлах сетки по высоте и зенитному углу в интервале осреднения, полученный с помощью параметризации, можно представить в виде

$$\mathbf{I}_{\text{map}} = \Delta \mathbf{v} \sum_{j=1}^{N_1} \sum_{m=1}^{N_2} \mathbf{A}_{\text{cp}}^{-1}(j,m) \sum_{i \in \Omega_{j,m}} \mathbf{b}(\mathbf{v}_i).$$
(11)

Вычитая (11) из (10), получим формулу для разности между вектором потоков, полученным с помощью эталонных расчетов, и вектором потоков, полученным с помощью параметризации:

$$\mathbf{I}_{\text{эт}} - \mathbf{I}_{\text{пар}} = \Delta \mathbf{v} \sum_{j=1}^{N_1} \sum_{m=1}^{N_2} \sum_{i \in \Omega_{j,m}} \left(\mathbf{A}^{-1}(\mathbf{v}_i) - \mathbf{A}_{\text{cp}}^{-1}(j,m) \right) \mathbf{b}(\mathbf{v}_i).$$
(12)

Видно, что точность параметризации определяется нормой разности матриц $A^{-1}(v_i) - A^{-1}_{cp}(j, m)$ для узких каналов, входящей в модельный канал с индексами j, m. Эта норма тем меньше, чем ближе между собой во всем диапазоне высот оптические параметры узких каналов, входящих в один модельный канал. Представленный алгоритм построения параметризации как раз обеспечивает необходимую близость этих параметров во всем диапазоне высот. Этот алгоритм отличается от метода kкорреляции. В нем не используется функция распределения коэффициента поглощения.

Результаты расчетов

Мы провели эталонные расчеты поля собственного излучения атмосферы Земли в приближении горизонтальной однородной атмосферы с разрешением по частоте 0,001 см⁻¹ и расчеты этого поля с использованием параметризаций оптических характеристик атмосферы Земли в интервале высот от поверхности Земли до 76 км. Расчеты проводились для различного числа модельных каналов, на разных высотах сортировки. Для численного решения уравнения переноса излучения применялся вариант метода дискретных ординат, детально описанный в работе [21]. В расчетах использовались равномерная сетка по высоте с шагом 200 м и равномерная сетка по зенитным углам с шагом менее 9°, учитывались молекулярное и аэрозольное рассеяния [1–4, 22].

Использовались вертикальные профили температуры и концентраций основных атмосферных газов, вычисленные по эмпирической модели NRLMSISE-00 для условий июля над Северной Атлантикой на широте 55°; вертикальные профили объемных долей малых газовых составляющих, нормированный коэффициент экстинкции, альбедо однократного рассеяния и параметр асимметрии для аэрозольных частиц в облаках, построенные по экспериментальным данным [1], а также приведенная в [23] зависимость от высоты коэффициента экстинкции в верхнем, среднем и нижнем облачных слоях при длине волны 0,5 мкм. Оптическая толщина облачных слоев была взята большой и близкой к максимально наблюдаемой для проверки точности параметризации. В атмосфере рассматриваются три типа фоновых аэрозолей: континентальные, морские и стратосферные. Их оптические параметры взяты из работы [24].

Результаты эталонных расчетов сравнивались с результатами расчетов, в которых применялась следующая параметризация. Весь диапазон 10–2000 см⁻¹ делится на 4 части: 10–500, 500–1000, 1000–1500 и 1500–2000 см⁻¹. В диапазоне 10–500 см⁻¹ использовались 5 интервалов осреднения: 10–100, 100–200, 200–300, 300–400, 400–500 см⁻¹, на каждом из которых сначала выделялись 4 канала с помощью первой сортировки, которая проводилась на высоте 15 км, а затем в каждом из этих 4 каналов выделялись 8 подканалов с помощью второй сортировки, которая проводилась на высоте 50 км (всего 160 модельных каналов).

В диапазоне 500—1000 см⁻¹ использовались 5 интервалов осреднения: 500—600, 600—700, 700—800, 800—900, 900—1000 см⁻¹, на каждом из которых сначала выделялись 4 канала с помощью первой сортировки, которая проводилась на высоте 15 км, а затем в каждом из этих 4 каналов выделялись 12 подканалов с помощью второй сортировки, которая проводилась на высоте 46 км (всего 240 модельных каналов).

В диапазоне 1000—1500 см⁻¹ использовались 4 интервала осреднения: 1000—1125, 1125—1250, 1250— 1375, 1375—1500 см⁻¹, на каждом из которых сначала выделялись 4 канала с помощью первой сортировки на высоте 15 км, а затем в каждом из этих 4 каналов выделялись 8 подканалов с помощью второй сортировки на высоте 47 км (всего 128 модельных каналов).

В диапазоне 1500—2000 см⁻¹ использовались 4 интервала осреднения: 1500—1625, 1625—1750, 1750— 1875, 1875—2000 см⁻¹, на каждом из которых сначала выделялись 4 канала с помощью первой сортировки на высоте 15 км, а затем в каждом из этих 4 каналов выделялись 6 подканалов с помощью второй сортировки на высоте 50 км (всего 96 модельных каналов).

Построение параметризаций молекулярного поглощения в нижней и средней атмосфере Земли...

Таким образом, 1990000 узких спектральных каналов, используемых при эталонных расчетах, заменяются на 528 модельных каналов.

На рис. 2 представлены потоки восходящего и нисходящего собственного излучения в частотном диапазоне 10–2000 см⁻¹ в безоблачной атмосфере и скорости нагрева/охлаждения атмосферного газа за счет этих потоков, полученные с помощью эталонных расчетов, а также с помощью расчетов, когда использовалась параметризация. Из рис. 2 видно, что скорость нагрева/охлаждения атмосферного газа, рассчитанная с использованием параметризации, очень близка к этой же скорости, полученной с помощью эталонных расчетов. Наибольшее отклонение между этими скоростями достигается на высоте 48 км и составляет около 0,2 К/сут. Потоки восходящего



Рис. 2. Потоки восходящего и нисходящего собственного излучения в частотном диапазоне 10–2000 см⁻¹ (*a*) и скорость нагрева/охлаждения атмосферного газа за счет этих потоков в безоблачной атмосфере (*б*): расчеты с использованием параметризации (кривые 1, 2 и 5); эталонные расчеты (кривые 3, 4 и 6)

и нисходящего излучения, рассчитанные с использованием параметризации, совпадают с результатами эталонных расчетов, с относительной погрешностью меньше 1%.

На рис. З представлены те же самые профили, что и на рис. 2, только рассчитанные при наличии в интервале высот от 3 до 6 км среднего облачного слоя с большой оптической толщиной, параметры которого приведены в [23]. Этой толщиной обусловлены большие значения скорости нагрева/охлаждения воздуха внутри облачного слоя. На рисунке видно, что скорость нагрева/охлаждения атмосферного газа и восходящий и нисходящий потоки, рассчитанные с использованием параметризации и с помощью эталонных расчетов, совпадают с хорошей точностью.



Рис. 3. Потоки восходящего и нисходящего собственного излучения в частотном диапазоне 10–2000 см⁻¹ (*a*) и скорость нагрева/охлаждения атмосферного газа за счет этих потоков при наличии среднего облачного слоя с большой оптической толщиной (*б*). Обозначение кривых те же, что и на рис. 2

Отклонение между потоками, полученными при эталонных расчетах и при расчетах с использованием параметризации, вне и внутри облачного слоя меньше 1%, а отклонение между скоростями нагрева не превышает 0,2 К/сут вне облачного слоя и 0,5 К/сут внутри этого слоя. В случаях наличия нижнего или верхнего облачных слоев с большой оптической толщиной точность параметризации оказалась такой же.

Авторы исследовали влияние высот первой и второй сортировки на точность параметризации. Высоту первой сортировки меняли в пределах от 5 до 20 км. Выяснилось, что высота 15 км близка к оптимальной. При выборе другой высоты первой сортировки точность параметризации при сохранении числа модельных каналов не улучшается. Высоту второй сортировки также меняли в широких пределах от 35 до 60 км. Оказалось, что выбранные в представленной параметризации высоты второй сортировки близки к оптимальным. Их изменение не улучшало точность параметризации. Также результаты расчетов показали, что при увеличении числа модельных каналов, по сравнению с их числом в представленной параметризации, точность параметризации улучшается незначительно, а при уменьшении этого числа эта точность ухудшается более существенно. Ширина интервалов осреднения в диапазоне 100-125 см⁻¹ является оптимальной.

Заключение

Проведенный анализ показал, что в диапазоне высот 0–76 км как в безоблачной атмосфере, так и при наличии облачных слоев с большой оптической толщиной в частотном интервале от 10 до 2000 см⁻¹ потоки восходящего и нисходящего собственного излучений и скорости нагрева атмосферного газа за счет этих потоков, полученные с помощью эталонных расчетов, мало отличаются от этих же потоков и скоростей нагрева, рассчитанных с помощью описанной в данной работе параметризации. В частности, отклонение между скоростями нагрева не превышает 0,2 К/сут вне облачных слоев и 0,5 К/сут внутри облачных слоев с большой оптической толщиной, что говорит о хорошей точности предложенной параметризации.

Оказалось, что учет фоновых атмосферных аэрозолей незначительно влияет (не более 0,5 К/сут) на скорость нагрева/охлаждения воздуха за счет переноса излучения в интервале частот от 10 до 2000 см^{-1} на высотах менее 3 км и практически не влияет на высотах более 3 км. При отсутствии облаков учет молекулярного рассеяния в дальнем ИКдиапазоне слабо влияет на потоки излучения и нагрев атмосферного газа.

Предложенный алгоритм построения параметризации учитывает изменение газового состава атмосферы с высотой, обеспечивает хорошую точность, не требует проведения подгоночных расчетов для каждого модельного канала, относительно прост в программной реализации и позволяет менять число модельных каналов параметризации в широких пределах. Авторы выражают благодарность Б.А. Фомину за полезные советы и помощь в работе.

- 1. Тимофеев Ю.М., Васильев А.В. Теоретические основы атмосферной оптики. СПб.: Наука, 2003. 474 с.
- 2. Кондратьев К.Я. Актинометрия. Л.: Гидрометеоиздат, 1965. 692 с.
- Ку-Нан Лису. Основы радиационных процессов в атмосфере. Л.: Гидрометеоиздат, 1984. 376 с.
- Сушкевич Т.А. Математические модели переноса излучения. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2006. 661 с.
- 5. *Творогов С.Д.* Некоторые аспекты задачи о представлении функции поглощения рядом экспонент // Оптика атмосф. и океана. 1994. Т. 7, № 3. С. 315–326.
- 6. *Творогов С.Д., Несмелова Л.И.* О некоторых применениях рядов экспонент для вычисления функции поглощения // Оптика атмосф. и океана. 1996. Т. 9, № 8. С. 1141–1144.
- 7. *Творогов С.Д., Несмелова Л.И., Родимова О.Б.* Представление функций пропускания рядами экспонент /// Оптика атмосф. и океана. 1996. Т. 9, № 3. С. 373–377.
- 8. *Творогов С.Д., Несмелова Л.И., Родимова О.Б.* Расчет функций пропускания в ближней ИК-области спектра с помощью рядов экспонент // Оптика атмосф. и океана. 1997. Т. 10, № 12. С. 1475–1480.
- 9. *Творогов С.Д., Несмелова Л.И., Родимова О.Б.* К вопросу об уточнении интегрирования по частоте при вычислении радиационных характеристик // Оптика атмосф. и океана. 1999. Т. 12, № 9. С. 832–834.
- *Творогов С.Д.* Применение рядов экспонент для интегрирования уравнения переноса излучения по частоте // Оптика атмосф. и океана. 1999. Т. 12, № 9. С. 763–766.
- Творогов С.Д. О построении ряда экспонент непосредственно по информации о функции пропускания // Оптика атмосф. и океана. 2001. Т. 14, № 9. С. 736–739.
- Творогов С.Д., Родимова О.Б. Расчет функций пропускания при малых давлениях // Оптика атмосф. и океана. 2008. Т. 21, № 11. С. 915–921.
- 13. Фомин Б.А. Метод параметризации газового поглощения атмосферной радиации, позволяющий получить *k*-распределение с минимальным числом членов // Оптика атмосф. и океана. 2003. Т. 16, № 3. С. 268– 271.
- 14. Fomin B.A. A k-distribution technique for radiative transfer simulation in inhomogeneous atmosphere: 1. FKDM, fast k-distribution model for the longwave // J. Geophys. Res. 2004. V. 109. P. D02110.
- Fomin B.A., Correa P.M. A k-distribution technique for radiative transfer simulation in inhomogeneous atmosphere: 2. FKDM, fast k-distribution model for the shortwave // J. Geophys. Res. 2005. V. 110. P. D02106.
- Mlawer E.J., Taubman S.J., Brown P.D., Iacono M.J., Clough S.A. Radiative transfer for inhomogeneous atmospheres: RRTM, a validated correlated-k model for the longwave // J. Geophys. Res. D. 1997. V. 102, N 14. P. 16.663–16.682.
- Hogan R.J. The full-spectrum correlated-k method for longwave atmospheric radiative transfer using an effective Planck function // J. Atmos. Sci. 2010. V. 67. P. 2086-2100.
- Шильков А.В., Герцев М.Н. Верификация метода лебеговского осреднения // Матем. моделирование. 2015. Т. 27, № 8. С. 13–31.
- Rothman L.S., Gordon I.E., Babikov Y., Barbe A., Benner C.D., Bernath P.F., Birk M., Bizzocchi L., Boudon V., Brown L.R., Campargue A., Chance K., Cohen E.A., Coudert L.H., Devi V.M., Drouin B.J., Faytl A., Flaud J.-M., Gamache R.R., Harrison J.J.,

Построение параметризаций молекулярного поглощения в нижней и средней атмосфере Земли...

Hartmann J.-M., Hill C., Hodges J.T., Jacquemart D., Jolly A., Lamouroux J., Le Roy R.J., Li G., Long D.A., Lyulin O.M., Mackie C.J., Massie S.T., Mikhailenko S., Müller H.S.P., Naumenko O.V., Nikitin A.V., Orphal J., Perevalov V., Perrin A., Polovtseva E.R., Richard C., Smith M.A.H., Starikova E., Sung K., Tashkun S., Tennyson J., Toon G.C., Tyuterev Vl.G., Wagner G. The HITRAN2012 molecular spectroscopic database // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2013. V. 130. P. 4–50.

- Mlawer E.J., Payne V.H., Moncet J.-L., Delamere J.S., Alvarado M.J., Tobin D.C. Development and recent evaluation of the MT CKD model of continuum absorption // Phylos. Trans. R. Soc. A. 2012. V. 370, N 1968. P. 2520–2556.
- 21. Игнатьев Н.И., Мингалев И.В., Родин А.В., Федотова Е.А. Новый вариант метода дискретных ординат для расчета собственного излучения в горизонтально

однородной атмосфере // Журн. вычислит. матем. и матем. физ. 2015. Т. 55, № 10. С. 109–123.

- 22. Fomin B.A. Effective interpolation technique for lineby-line calculations of radiation absorption in gases // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 1995. V. 53. P. 663-669.
- 23. Мингалев И.В, Федотова Е.А., Орлов К.Г. Влияние оптически толстых слоев на нагрев атмосферы собственным излучением // Современные проблемы дистанционного зондирования Земли из космоса. 2017. Т. 14, № 5. С. 100–108.
- 24. McClatchey R.A., Bolle H.-J., Kondratyev K.Ya. A preliminary cloudless standard atmosphere for radiation computation // World Climate Research Programme. International Association For Meteorology And Atmospheric Physics, Radiation Commission. 1986. Ser. WCP. V. 112, N 24. 60 p.

I.V. Mingalev, E.A. Fedotova, K.G. Orlov. Construction of the parameterization of the molecular absorption in the lower and middle atmosphere of the Earth in the infrared range.

The paper presents a new algorithm for constructing parameterizations of molecular absorption in the Earth's atmosphere, which takes into account the change in the atmospheric gas composition with altitude and has a number of other advantages, as well as a parametrization constructed using this algorithm in the frequency range from 10 to 2000 cm⁻¹ in the altitude range from the Earth's surface to 76 km. The comparison of the results of calculations of the field of Earth's atmospheric radiation, carried out using this parametrization, with the results of reference calculations (*line-by-line*) shows that the parametrization suggested has good accuracy in the lower and middle atmosphere in the absence of cloud layers and in the presence of cloud layers with a large optical thickness.