

РАСЧЕТ РАДИАЦИОННЫХ ПОТОКОВ, ОБУСЛОВЛЕННЫХ УГЛЕКИСЛЫМ ГАЗОМ, В ИНФРАКРАСНОЙ ОБЛАСТИ СПЕКТРА*

О. Б. Родимова, Ю. В. Богданова

Институт оптики атмосферы СО РАН, Томск, Россия

e-mail: rod@iao.ru, wert@academ.tsc.ru

Method of obtaining the one-parametric approximation formulas for the atmospheric transmission functions in arbitrary spectral regions is developed making use the exact expressions for the expansion coefficients of the functions under study into series of exponents. We made an attempt to automate the derivation of the approximation formulas for some regions of the $15 \mu\text{m}$ CO₂ band spectrum. To quantitatively estimate the effect of the spectral line wing shape on the radiation fluxes in the chosen spectral region, we use the line shape which fits well the experimental data by Burch et al and has the functional form followed from the line wing theory instead of the Voigt line shape cut at some distance from the line centre.

Введение

В последние десятилетия line-by-line расчеты коэффициента поглощения при исследовании переноса радиации практически полностью вытеснили широко употреблявшиеся ранее с этой целью модели полос поглощающих в атмосфере газов. Однако при всех преимуществах в точности line-by-line метода по сравнению с моделями полос (при использовании правильной формы контура спектральных линий) он требует существенно большего времени для своей реализации, поэтому проблема сокращения вычислительного времени постоянно обсуждается в литературе. Наиболее распространенным способом ускорения и стандартизации расчетов при сохранении точности line-by-line метода в радиационных блоках климатических моделей является применение разложений радиационных характеристик в ряды экспонент [1, 2]. Как правило, эта техника применяется в приближении ck -корреляции, иными словами, соответствующие разложения находятся отдельно для каждого из атмосферных слоев, и различиями в зависимости $g \leftrightarrow \omega$ в слоях с различными термодинамическими условиями пренебрегается.

Чаще всего коэффициенты таких разложений находят с помощью методов минимизации (см., например, [3]), причем точки ряда экспонент и коэффициенты при членах ряда получаются из чисто вычислительной процедуры. Кроме того, существует способ,

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 05-05-64256).

© Институт вычислительных технологий Сибирского отделения Российской академии наук, 2006.

дающий точные аналитические выражения для коэффициентов при членах ряда экспонент в случае задания спектрального интервала, числа членов ряда и типа квадратурной формулы [4].

Имеются успешные попытки вернуться на новом уровне к выражениям, напоминающим в некотором смысле модели полос. Так, однопараметрические аппроксимационные формулы для атмосферных функций пропускания, полученные Chou с соавторами [5], включают в себя выражения для поглощающих масс, приводящие их к некоторым средним температуре и давлению, и в то же время представляют собой сумму членов экспоненциального вида. Представленные в форме, пригодной для непосредственного применения в климатических моделях, они очень удобны в радиационных блоках благодаря их простоте и универсальности.

Ранее нами было предложено получать однопараметрические аппроксимационные формулы для атмосферных функций пропускания в произвольных спектральных интервалах, используя точные выражения для коэффициентов разложения исследуемых функций в ряды экспонент [6]. При этом аппроксимационные выражения для поглощающих масс, приводящие их к некоторым средним температуре и давлению, переносятся на коэффициенты разложения в ряд экспонент. Пробные расчеты, проведенные для стандартной модели атмосферы лета средних широт в спектральном интервале $720\dots800\text{ см}^{-1}$ в случае поглощения CO_2 , а также в спектральном интервале $980\dots1100\text{ см}^{-1}$ в случае поглощения O_3 показали принципиальную возможность получать подобные выражения систематическим образом. В данной работе предпринята попытка автоматизировать вывод аппроксимационных формул на примере спектральных интервалов в полосе 15 мкм CO_2 .

В line-by-line расчетах в интервале $720\dots800\text{ см}^{-1}$ для количественной оценки влияния формы контура в крыле линии на радиационные потоки в выбранном спектральном интервале помимо контура Фойгта, обрываемого на некотором расстоянии от центра линии, используется также контур с крылом линии, правильно описывающим экспериментальные данные Берча [7] и имеющим функциональную форму, следующую из теории крыльев линий [8].

1. Аппроксимационные формулы

Выражения для радиационных потоков в случае плоской стратифицированной атмосферы через коэффициенты разложения в ряды экспонент $s_i^{(k)}$ функций пропускания, взвешенных с функцией Планка [4, 9] (N — число слоев, j — номер слоя, m — число членов разложения, i — номер члена разложения) могут быть представлены как

$$F^{\text{up}}(j) = B(j) - 2 \sum_{i=1}^m b_i \left[\sum_{k=2}^j (B(k) - B(k-1)) E_3 \left(\sum_{q=k}^j l_q s_i^{(q)} \right) \right] - \\ - 2B(1) \sum_{i=1}^m b_i E_3 \left(\sum_{k=1}^j l_k s_i^{(k)} \right) - 2 \sum_{i=1}^m b_i \left[B(1) E_3 \left(\sum_{k=1}^j l_k s_i^{(k)} \right) \right], \quad j = 1, \dots, N-1; \quad (1)$$

$$F^{\text{down}}(j) = B(j+1) - 2 \sum_{i=1}^m b_i \left[B(N) E_3 \left(\sum_{k=j+1}^N l_k s_i^{(k)} \right) \right] + \\ + 2 \sum_{i=1}^m b_i \left[\sum_{k=j+1}^{N-1} (B(k+1) - B(k)) E_3 \left(\sum_{q=j+1}^{k-1} l_q s_i^{(q)} \right) \right], \quad j = 1, \dots, N-2. \quad (2)$$

В схеме [5] радиационные потоки имеют вид

$$\begin{aligned} F^{\text{up}}(j_1) &= B(1) + B(1)\tau(1, j_1 - 1) + B(j_1)(1 - \tau(j_1 - 1, j_1 - 1)) + \\ &+ \sum_{\substack{j_2=2 \\ j_1 \neq 1, 2}}^{j_1-1} B(j_2)(\tau(j_2, j_1 - 1) - \tau(j_2 - 1, j_1 - 1)); \end{aligned} \quad (3)$$

$$F^{\text{down}}(j_1) = B(j_1 + 1)(1 - \tau(j_1, j_1)) + \sum_{j_2=j_1+2}^{N-1} B(j_2)(\tau(j_1, j_2 - 1) - \tau(j_1, j_2 - 2)). \quad (4)$$

Здесь

$$\tau(j_2; j_1) = \sum_{i=1}^m c_i \exp(-1.66k_i^{(j_s)} w(j_2, j_1)) \quad (5)$$

есть функция пропускания от слоя j_1 до слоя j_2 , считаемая с помощью k -распределения, $k_i^{(j_s)} = n^{(j_s)} k_{i-1}^{(j_s)}$, а $w(j_2, j_1)$ — соответствующая поглощающая масса. Для поглощающих масс CO_2 в [5] используются аппроксимационные формулы вида

$$w = u(p/p_r)^m f(T, T_r), \quad (6)$$

где p_r и T_r — некоторые средние давление и температура; u — количество поглощающего вещества; p и T — давление и температура рассматриваемого атмосферного слоя;

$$f(T, T_r) = 1 + a(T - T_r) + b(T - T_r)^2. \quad (7)$$

Коэффициенты в (6), (7) найдены в [5] при заданном разбиении ИК-диапазона на 10 спектральных интервалов, $j_s = 1, \dots, 10$ для каждого из этих интервалов.

Подобие формул (3), (4) и формул с разложением в ряды экспонент для радиационных потоков (1), (2), а также то, что коэффициенты разложения $s_i^{(k)}$ ведут себя гладко с высотой (рис. 1, расчет с контуром Фойгта, обрезанным на 10 см^{-1}), позволило надеяться, что коэффициенты разложения в различных слоях могут быть связаны между собой посредством относительно простых формул.

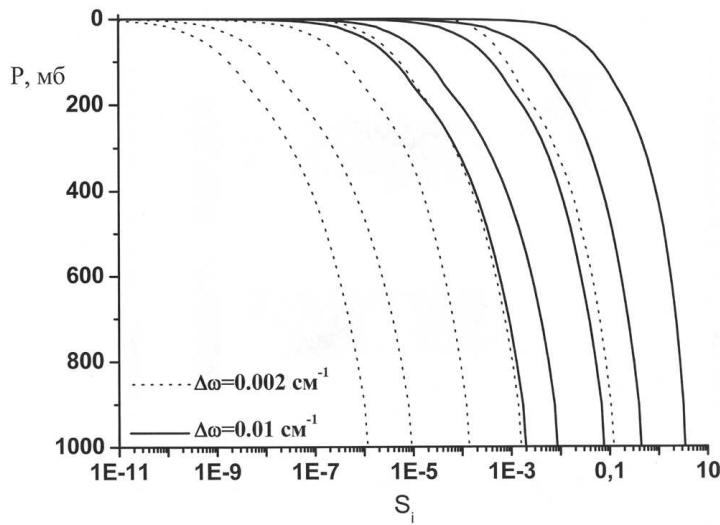


Рис. 1. Поведение коэффициентов разложения в рядах экспонент в зависимости от высоты для CO_2 в атмосфере лета средних широт в спектральном интервале $720\dots800 \text{ см}^{-1}$.

2. Результаты расчета

В случае CO₂ (720...800 см⁻¹) в [5] предложено в выражении

$$w = u(p/p_r)^m (1 + a(T - T_r) + b(T - T_r)^2) \quad (8)$$

использовать следующие значения параметров:

$$m = 0.5, \quad a = 0.0184, \quad b = 0.000112, \quad p_{\text{ref}} = 300 \text{ мб}, \quad T_{\text{ref}} = 250 \text{ К.}$$

Первоначально мы полагали [6], что коэффициенты разложения $s_r^{(i)}$ в слое r при некоторых средних давлении p_r и температуре T_r могут быть использованы для нахождения $s_i^{(k)}$ в остальных слоях с помощью формул, подобных (8):

$$s_i^{(j)} = s_i^{(j_r)} A \rho_{\text{CO}_2}(j) (1 + a(T_j - T_r) + b(T_j - T_r)^2) (p_j/p_r)^m. \quad (9)$$

Здесь $s_i^{(j)}$ — коэффициенты разложения в ряды экспонент, функций пропускания, взвешенных с функцией Планка; j — номер слоя; i — номер члена разложения; A — варьируемый параметр.

Наши расчеты для получения аппроксимационных формул проведены для стандартной 50-слойной модели атмосферы лета средних широт [9] в ИК-области спектра. Значения потоков, полученные с помощью выражения (9) с $A = 1.25$, хорошо согласуются со значениями line-by-line потоков, и значения скоростей имеют тот же характер, что и значения скоростей, полученные в [5]. Однако выше 40 мб значения скоростей в [5] начинают расходиться со значениями line-by-line и синхронно изменяются значения, полученные по (9).

В настоящей работе подбор параметров для коэффициентов разложения производился с помощью нелинейной минимизации суммы квадратов отклонений. Аппроксимирующее выражение задавалось в виде функции, зависящей от параметров k_1, k_2, \dots и переменных $s_i^{(j_L)}$. Найдено предпочтительным аппроксимировать не сами коэффициенты разложения, а их логарифмы. Аппроксимирующее выражение первоначально выбиралось подобным (9) и затем корректировалось для получения наилучшей аппроксимации.

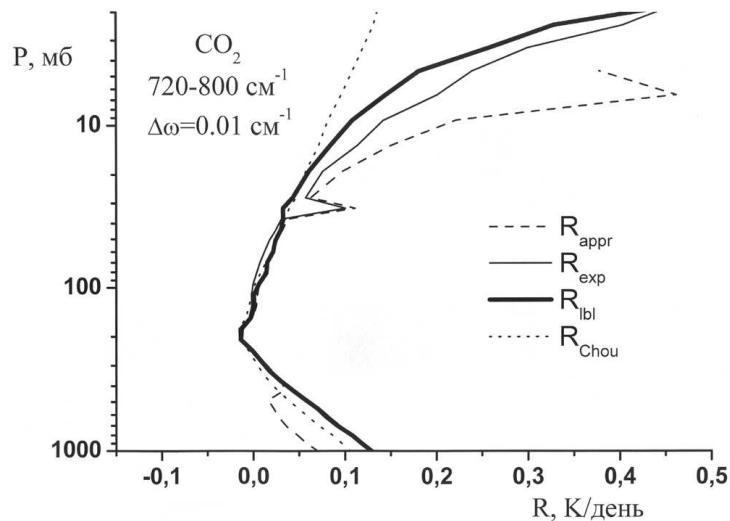


Рис. 2. Поведение скорости выхолаживания с высотой при различных способах расчета. Расчет line-by-line с контуром Фойгта, обрезанным на 10 см⁻¹.

На рис. 2 приведены значения скоростей выхолаживания, полученные с помощью выражения

$$\log_{10} s_i^{(j_L)} = (i+1)i^{k_2} (p_{j_L}/p_r)^{(k_9 i^2 + k_3 i + k_6)} (1 + (T_{j_L} - T_{\text{ref}})^2). \quad (10)$$

Значения $p_{\text{ref}} = 300$ мб, $T_{\text{ref}} = 250$ К оставлены, как в [5]. Температурный множитель не имеет при этом существенного значения. Хотя желаемой по точности аппроксимации пока добиться не удалось, характер изменения скорости выхолаживания с высотой качественно отражает таковой для line-by-line расчета.

3. Учет крыльев линий

Поглощение в крыльях линий дает незначительный вклад в суммарные ИК-потоки и скорости выхолаживания. Однако в ограниченных спектральных интервалах его роль может быть существенна. Экспериментальные данные Берча [7] в крыле полосы 15 мкм CO₂ удовлетворительно описываются с помощью теории крыльев линий [10, 11] (рис. 3). В радиационных схемах при line-by-line расчете поглощения CO₂, как правило, используют фойгтовский контур линии, обрезанный на фиксированном расстоянии от центра (см., например, [5]).

При расчетах радиационных потоков и скоростей выхолаживания крыла полосы 15 мкм CO₂ в интервале 720...800 см⁻¹ основной вклад происходит от поглощения CO₂ при уширении N₂ по сравнению с поглощением при самоуширении. Контур линии CO₂, уширенного азотом, взят подобным контуру для CO₂ при самоуширении с понижающим множителем. Рассчитанные таким образом коэффициенты поглощения показаны на рис. 4 для нескольких отдельных частот в зависимости от высоты. Этот рисунок демонстрирует также и возможное нарушение приближения *ck*-корреляции на больших высотах.

В наших расчетах радиационных потоков использовался контур Фойгта и контур, описывающий правильное спектральное поведение коэффициента поглощения в далеких крыльях линий. Учет правильного поведения контура в крыле линии незначительно сказыва-

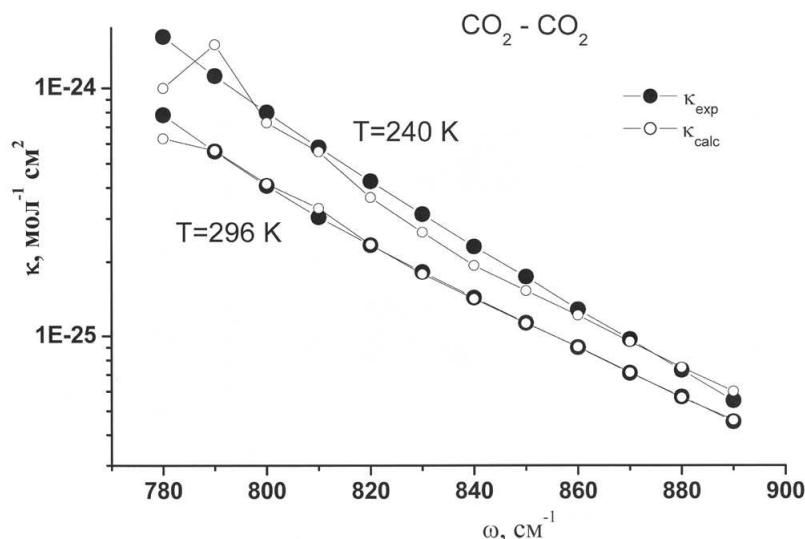


Рис. 3. Коэффициент поглощения в крыле полосы 15 мкм CO₂ при $T = 296$ и 240 К в сравнении с экспериментальными данными [7].

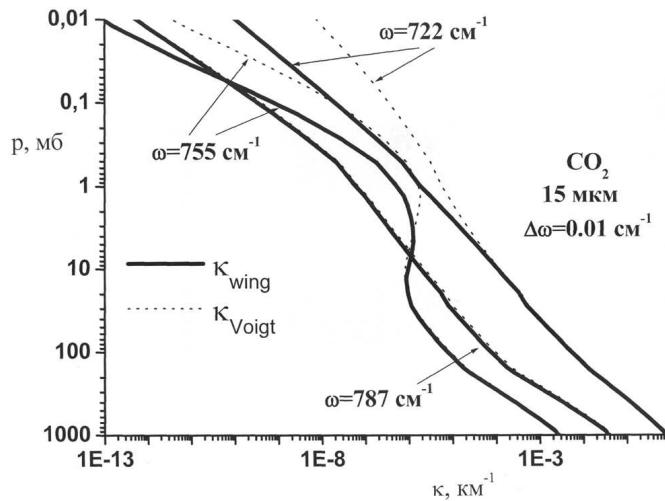


Рис. 4. Коэффициент поглощения в крыле полосы $15 \mu\text{m}$ CO_2 на нескольких частотах в зависимости от высоты при разных способах расчета.

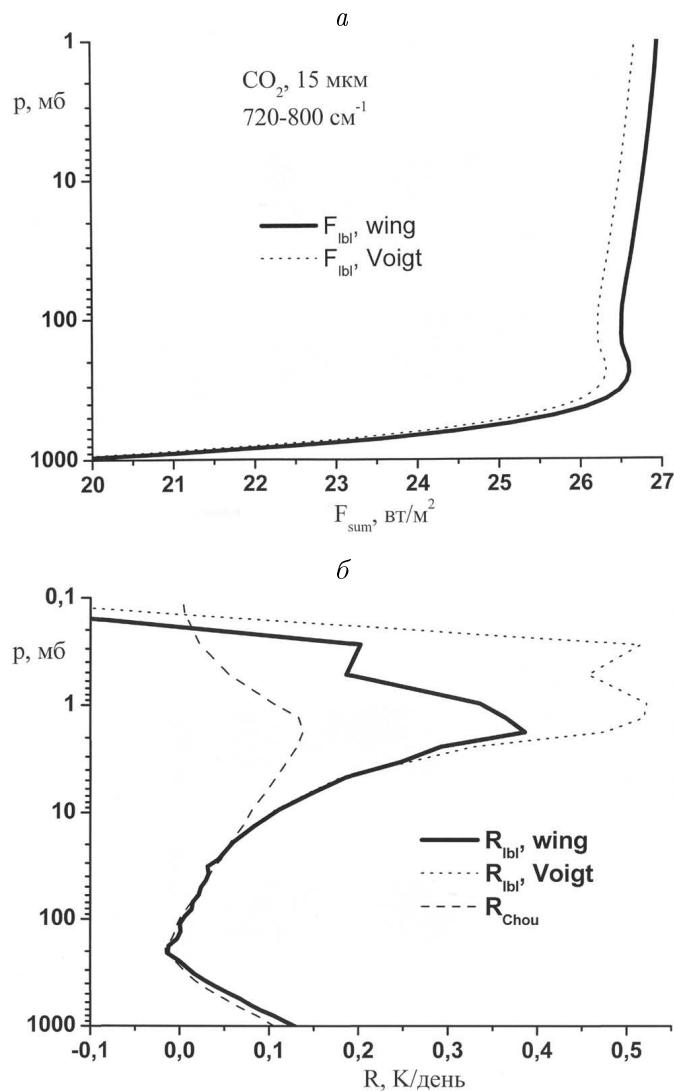


Рис. 5. Изменение суммарных потоков (a) и скорости выхолаживания (б) при рассмотрении крыльев линий.

ется на величине суммарных потоков (рис. 5, а). Заметно уменьшаются при этом значения коэффициента поглощения (см. рис. 4) и скорости выхолаживания (рис. 5, б) на высотах более 35 км.

Заключение

Аппроксимационные выражения для поглощающих масс, приводящие их к некоторым средним температуре и давлению, можно перенести на коэффициенты разложения в ряд экспонент.

Аппроксимирующие выражения для $s_i^{(j_L)}$ — коэффициентов разложения потоков в ряд экспонент — задавались в виде функции, зависящей от параметров $p_{\text{ref}} = 300$ мб, $T_{\text{ref}} = 250$ К и номера члена разложения. Для подбора параметров использовалась программа нелинейной минимизации суммы квадратов отклонений. Способ получения аппроксимирующих выражений применим к произвольным спектральным интервалам.

Хотя желаемой по точности аппроксимации пока добиться не удалось, характер изменения скорости выхолаживания с высотой качественно отражает таковой для line-by-line расчета.

В расчетах использовался контур Фойгта, а также контур, описывающий температурное и спектральное поведение коэффициента поглощения в далеких крыльях линий. Учет правильного поведения контура в крыле линии незначительно сказывается на величине суммарных потоков, но приводит к уменьшению значений коэффициента поглощения и скорости выхолаживания на высотах более 35 км.

Список литературы

- [1] LACIS A., OINAS V. A description of the correlated k-distribution method for modeling nongray gaseous absorption, thermal emission, and multiple scattering in vertically inhomogeneous atmospheres // J. Geophys. Res. 1991. Vol. 96, N D5. P. 9027–9063.
- [2] GOODY R., WEST R., CHEN L., CRISP D. The correlated k method for radiation calculations in nonhomogeneous atmospheres // JQSRT. 1989. Vol. 42, N 6. P. 539–550.
- [3] Фомин Б.А. Метод параметризации газового поглощения атмосферной радиации, позволяющий получить К-распределение с минимальным числом членов // Оптика атмосферы и океана. 2003. Т. 16, № 3. С. 268–271.
- [4] TVOROGOV S.D., NESMELOVA L.I., RODIMOVA O.B. k-distribution of transmission function and theory of Dirichlet series // JQSRT. 2000. Vol. 66. P. 243–262.
- [5] CHOU M.-D., RIDGWAY W.L., YAN M.M.-H. One-parameter scaling and exponential-sum fitting for water vapor and CO₂ infrared transmission functions // J. Atmos. Sci. 1993. Vol. 50, N 14. P. 2294–2303.
- [6] Богданова Ю.В., Родимова О.Б. Однопараметрические аппроксимационные формулы для функций пропускания CO₂ в области 15 мкм // Вычисл. технологии. 2005. Т. 10, ч. I. Спецвыпуск. С. 87–93.

- [7] BURCH D.E. Investigation of the Absorption of Infrared Radiation by Atmospheric Gases. Semi-annual Technical Report / Air Force Cambridge Research Lab. Publ. U-4784 under contract N F 19628-69-C-0263 (31 Jan. 1970).
- [8] НЕСМЕЛОВА Л.И., Родимова О.Б., ТВОРОГОВ С.Д. Контур спектральной линии и межмолекулярное взаимодействие. Новосибирск: Наука, 1986. 216 с.
- [9] ТВОРОГОВ С.Д. Применение рядов экспонент для интегрирования уравнения переноса излучения по частоте // Оптика атмосферы и океана. 1999. Т. 12, № 9. С. 763–766.
- [10] Родимова О.Б. Контур спектральных линий CO₂ при самоуширении от центра до далекого крыла // Оптика атмосферы и океана. 2002. Т. 15, № 9. С. 768–777.
- [11] НЕСМЕЛОВА Л.И., Родимова О.Б., ТВОРОГОВ С.Д. и др. Коэффициент поглощения в крыльях полос углекислого газа в спектральном интервале 790–910 см⁻¹ // Изв. вузов. Сер. Физика. 1982. Вып. 5. С. 105–108.
- [12] ANDERSON G.P., CLOUGH S.A., KNEIZYS F.X. ET AL. AFGL Atmospheric Constituent Profiles (0–120 km). AFGL-TR-86-0110: Environmental Research Papers. N 954. Air Force Geophysics Laboratory. Hanscom AFB, Mass. U.S.A. 1986.

Поступила в редакцию 9 ноября 2006 г.