

СПЕКТРОСКОПИЯ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ

УДК 535.33.34

Ю.В. Богданова, О.Б. Родимова**О термодинамических зависимостях коэффициентов разложения радиационных характеристик в ряды экспонент***Институт оптики атмосферы СО РАН, г. Томск*

Поступила в редакцию 17.12.2007 г.

Предложенный ранее метод получения однопараметрических аппроксимационных формул для атмосферных функций пропускания в заданных спектральных интервалах использовал точные выражения для коэффициентов разложения исследуемых функций в ряды экспонент и ориентировался на высотное распределение температур и давлений, характерное для стандартных моделей атмосферы. В данной статье найдена аппроксимация коэффициентов разложения в ряд экспонент в зависимости от температуры и давления для всего диапазона температур и давлений, наблюдаемых в атмосфере, которая далее может быть применена к произвольному высотному распределению термодинамических параметров. Возможности аппроксимации иллюстрируются примерами расчета радиационных потоков, обусловленных поглощением CO_2 в области полосы 15 мкм.

Введение

До появления массовых расчетов *line-by-line* при расчете радиационных потоков широко использовались модели полос поглощения и различные способы замены поглощения на неоднородных трассах поглощением на эквивалентных однородных трассах.

При всех преимуществах в точности метода *line-by-line* (при использовании правильной формы контура спектральных линий) по сравнению с моделями полос он требует существенно большего времени для своей реализации. Поэтому в радиационных блоках климатических моделей коэффициенты поглощения, рассчитанные методом *line-by-line* для разных давлений и температур, используются, как правило, для нахождения коэффициентов разложений функций пропускания в ряды экспонент с небольшим числом членов [1, 2], которые далее применяются для расчета радиационных характеристик и неявно содержат информацию о термодинамических зависимостях коэффициента поглощения.

Другим вариантом учета зависимости коэффициентов разложения в рядах экспонент от температуры и давления является получение для них аппроксимационных формул, означающих в какой-то мере возвращение к моделям поглощения на эквивалентных однородных трассах. Подобный вариант реализован в работах Chou et al. [3], получивших так называемые однопараметрические аппроксимационные формулы для пропускания, являющегося функцией только приведенной поглащающей массы. Эти формулы представляют собой суммы экспоненциальных членов, которые не связаны напрямую с упомянутыми разложениями радиационных величин в ряды экспонент. Они, однако, оказались очень удобны для применения в радиационных блоках благодаря простоте и универсальности и, в частности, используются в климатической модели Института

вычислительной математики РАН [4]. Формулы [3] недостаточно хорошо описывают поглощение на больших высотах в связи с трудностями расчета пропускания при низких давлениях. Также авторам [5] не удалось получить подобные формулы для озона в области полосы 9,6 мкм, так что в этом случае они применяли интерполяционные таблицы. Кроме того, хотелось бы иметь более адекватные формулы для оценки поглощения, обусловленного крыльями линий в некоторых участках спектра, в частности в интервале 8–20 мкм H_2O .

В предыдущих работах [6, 7] мы показали возможность получения однопараметрических аппроксимационных формул для коэффициентов разложения радиационных характеристик в ряды экспонент в произвольных спектральных интервалах для заданного высотного распределения термодинамических параметров в рамках стандартных моделей атмосферы.

В данной статье исследуется возможность существования аппроксимации коэффициентов разложения в ряд экспонент в зависимости от температуры и давления, применимой для произвольного высотного распределения термодинамических параметров.

1. Однопараметрические аппроксимационные формулы для пропускания

В работах Chou et al. (см., например, [3]) однопараметрическое масштабирование сводит неоднородную трассу к эквивалентному однородному пути с выделенным давлением p_r и температурой T_r . Пропускание вдоль такой трассы зависит только от приведенного количества вещества. Коэффициент поглощения при произвольном давлении и температуре экстраполируется от коэффициента поглощения при выделенном давлении и температуре:

$$k_v(p, T) = k_v(p_r, T_r)(p/p_r)^m f(T, T_r), \quad (1)$$

где m – положительное число, близкое к 1; f – множитель, учитывающий изменение температуры. Пропускание слоя с произвольными p , T и поглощающей массой u , усредненное по зенитному углу θ ($\theta = \cos^{-1}\mu$), дается формулой

$$\tau_v(u, p, T) = 2 \int_0^1 \exp[-k_v(p, T)u/\mu] \mu d\mu. \quad (2)$$

При однопараметрическом масштабировании пропускание сводится к

$$\tau_v(u, p, T) \approx \tau_v(w) = 2 \int_0^1 \exp[-k_v(p_r, T_r)w/\mu] \mu d\mu, \quad (3)$$

где w есть приведенная поглощающая масса:

$$w = u(p, p_r)^m f(T, T_r). \quad (4)$$

Из сравнения (1) и (4) видно, что масштабирование коэффициента поглощения эквивалентно масштабированию поглощающей массы.

Функции пропускания от слоя j_1 до слоя j_2 , используемые в расчете радиационных потоков [3], имеют вид сумм экспоненциальных членов

$$\tau(j_2; j_1) = \sum_{i=1}^m c_i \exp(-1,66 k_i^{(j_s)} w(j_2, j_1)), \quad (5)$$

где $k_i^{(j_s)} = n^{(j_s)} k_{i-1}^{(j_s)}$ – константы; $w(j_1, j_2)$ – соответствующая поглощающая масса. Для поглощающих масс CO_2 в [3] используются аппроксимационные формулы вида (4), где u – количество поглощающего вещества; p и T – давление и температура рассматриваемого атмосферного слоя;

$$f(T, T_r) = 1 + a(T - T_r) + b(T - T_r)^2. \quad (6)$$

Численные коэффициенты в (4)–(6) были найдены в [3] для каждого из спектральных интервалов при заданном разбиении ИК-диапазона на 10 спектральных интервалов $j_s = 1, \dots, 10$.

2. Аппроксимационные формулы для коэффициентов разложения функций пропускания в ряды экспонент

Разложение функций пропускания в ряды экспонент для однородной трассы означает существование выражения [1, 2]:

$$P(x) = \frac{1}{\Delta\omega} \int_{\omega'}^{\omega''} e^{-x\kappa(\omega)} d\omega = \sum_v b_v e^{-xs(g_v)}. \quad (7)$$

Коэффициенты разложений в ряды экспонент находят чаще всего с помощью методов минимизации, причем абсциссы ряда экспонент и коэффициенты при членах ряда получаются из чисто вычис-

лительной процедуры (см., например, [8]). Наряду с этим существует способ, дающий точные аналитические выражения для параметров ряда экспонент в случае задания спектрального интервала, числа членов ряда и типа квадратурной формулы [9], причем от термодинамических параметров зависят только $s(g)$. Так, для функции пропускания в случае однородной среды (7) выражение для функции $g(s)$, обратной $s(g)$, имеет вид

$$g(s) = \frac{1}{\Delta\omega} \int_{\kappa(\omega) \leq s} d\omega, \quad \omega \in [\omega', \omega''], \quad (8)$$

удобный для численной реализации. Точные теоретические выражения для коэффициентов разложения исследуемых функций в ряды экспонент $g(s)$ получены для неоднородных трасс, перекрывающихся спектров, интегралов с функцией источника и радиационных потоков.

Наличие точных формул разложения радиационных характеристик в ряды экспонент позволяет обратиться к аппроксимации термодинамических зависимостей коэффициентов разложения. Коэффициенты разложения $s(g)$ ведут себя гладко с высотой (рис. 1), что позволяет надеяться, что коэффициенты разложения в различных слоях могут иметь относительно простые зависимости от температуры и давления.

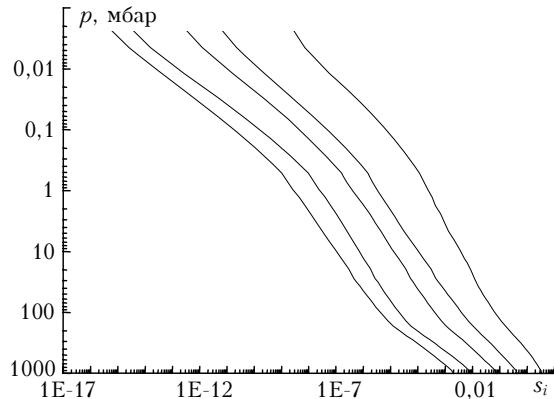


Рис. 1. Поведение коэффициентов разложения в рядах экспонент в зависимости от высоты для CO_2 в атмосфере лета средних широт в спектральном интервале $720\text{--}800 \text{ см}^{-1}$ (5 членов разложения). Шаг по частоте в расчете *line-by-line* $\Delta\omega = 0,01 \text{ см}^{-1}$

Можно предполагать [6], что коэффициенты разложения $s_i^{(j_r)}$ в слое j_r при некоторых средних давлениях p_r и температуре T_r могут быть использованы для нахождения $s_i^{(j)}$ в остальных слоях с помощью формул, подобных (4):

$$s_i^{(j)} = s_i^{(j_r)} A \rho_{\text{CO}_2}(j) (1 + 0,0184(T_j - T_r) + 0,000112(T_j - T_r)^2) (p_j/p_r)^{0,5}, \quad (9)$$

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

На рис. 2 представлены результаты расчета с использованием формулы (9) с $A = 1,25$ в сравнении с другими способами расчета. Рис. 2 показывает приемлемое согласие между различными способами расчета до высот около 50 км.

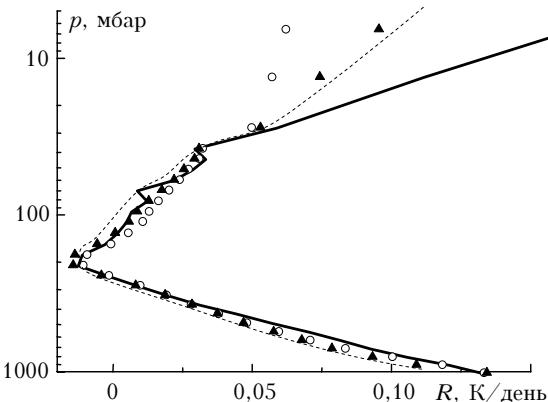


Рис. 2. Скорость выхолаживания R для CO_2 в интервале $720\text{--}800 \text{ см}^{-1}$, полученная с помощью различных способов расчета для атмосферы лета средних широт (33 слоя): — расчет *line-by-line* с шагом $0,002 \text{ см}^{-1}$; о — расчет с помощью рядов экспонент (8) с 5 членами ряда; ----- — расчет по формулам [3]; ▲ — расчет по аппроксимационным формулам (9) с $A = 1,25$

В дальнейшем для подбора параметров в коэффициентах разложения использовалась программа нелинейной минимизации суммы квадратов отклонений. Аппроксимирующее выражение задавалось в виде функции, зависящей от параметров k_1, k_2, \dots и переменных $s_i^{(j_L)}$. Было найдено предпочтительным аппроксимировать не сами коэффициенты разложения, а их логарифмы.

На рис. 3 приведены значения скоростей выхолаживания, полученные с помощью выражения

$$\log_{10} s_i^{(j_L)} = (i+1) i^{k_1} (p_{j_L}/p_r)^{(k_2 i^2 + k_3 i + k_4)} \times \\ \times (1 + (T_{j_L} - T_r)^2). \quad (10)$$

Значения $p_r = 300$ мбар, $T_r = 250$ К были оставлены, как в [3]. Температурный множитель не имеет при этом существенного значения. Хотя желаемой по точности аппроксимации тогда добиться не удалось,

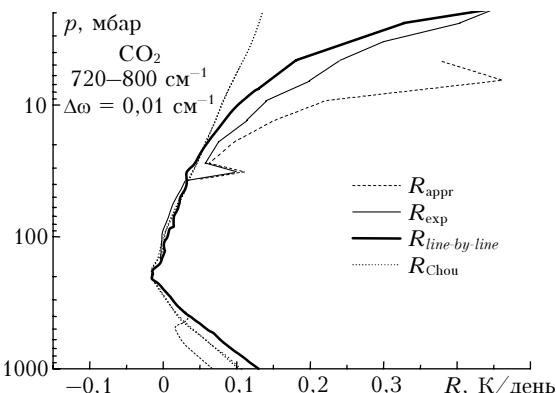


Рис. 3. Поведение скорости выхолаживания с высотой при различных способах расчета. Расчет *line-by-line* с контуром Фойгта, обрезанным на 10 см^{-1}

характер изменения скорости выхолаживания с высотой качественно отражает таковой для расчета *line-by-line*.

3. Аппроксимационные формулы для $s(g)$ с произвольной зависимостью от температуры и давления

Полученные ранее результаты показали возможность получать однопараметрические аппроксимационные формулы для коэффициентов разложения в ряды экспонент в произвольных спектральных интервалах для определенных моделей атмосферы. При этом аппроксимационные выражения для поглощающих масс, приводящие их к некоторым средним температуре и давлению, переносятся на коэффициенты разложения в ряд экспонент:

$$s(g, p, T) = F(p, T, p_r, T_r) s(g, p_r, T_r), \quad (11)$$

где $s(g, p_r, T_r)$ — коэффициенты разложения при фиксированных температуре и давлении; $s(g, p, T)$ — коэффициенты при произвольных температуре и давлении.

Если построить таблицу коэффициентов поглощения для ряда значений температур и давлений в данном спектральном интервале, найти соответствующие коэффициенты разложения s_i и по этим s_i построить удачные аппроксимационные формулы, последние должны быть применимы для любых моделей атмосферы.

Таблица коэффициентов поглощения и соответствующих s_i была построена для температур от 170 до 370 К (41 значение) и давлений от 1000 до $5 \cdot 10^{-6}$ мбар (32 значения). Однако в этом случае подгонка оказалась не слишком хорошей. Поэтому из таблицы были удалены некоторые пары «температура — давление», нехарактерные для атмосферы Земли. Количество точек по температуре и давлению уменьшилось при этом с 1312 до 336: для каждого из выбранных 28 значений давления находились 12 значений температур с шагом 5 К, которые перекрывали разброс температур, характерный для моделей атмосферы. На рис. 4 приведены значения наибольшей и наименьшей температур, использованных для каждой высоты, на фоне стандартных модельных температур [10].

Для аппроксимации значений s_i , полученных в рамках описанной таблицы, было найдено удобным использовать следующее выражение:

$$s_i(p, T) = 10^f \left(Q(T) / Q(T_r) \right) s_i(p_r, T_r), \quad (12)$$

где

$$f = K_0 + \frac{K_2}{T_s} + \frac{K_1 \log p_s}{\log 10} - x_i \left(K_6 + \frac{K_8}{T_s} + \frac{K_7 \log p_s}{\log 10} \right) - \\ - \frac{\log x_i}{\log 10} \left(K_3 + \frac{K_5}{T_s} + \frac{K_4 \log p_s}{\log 10} \right). \quad (13)$$

В (13) $T_s = T/T_r$; $p_s = p/p_r$; $Q, Q(T_r)$ — относительные статсуммы для соответствующих температур; x_i — абсциссы гауссовых точек. Коэффициенты K_0, \dots, K_8