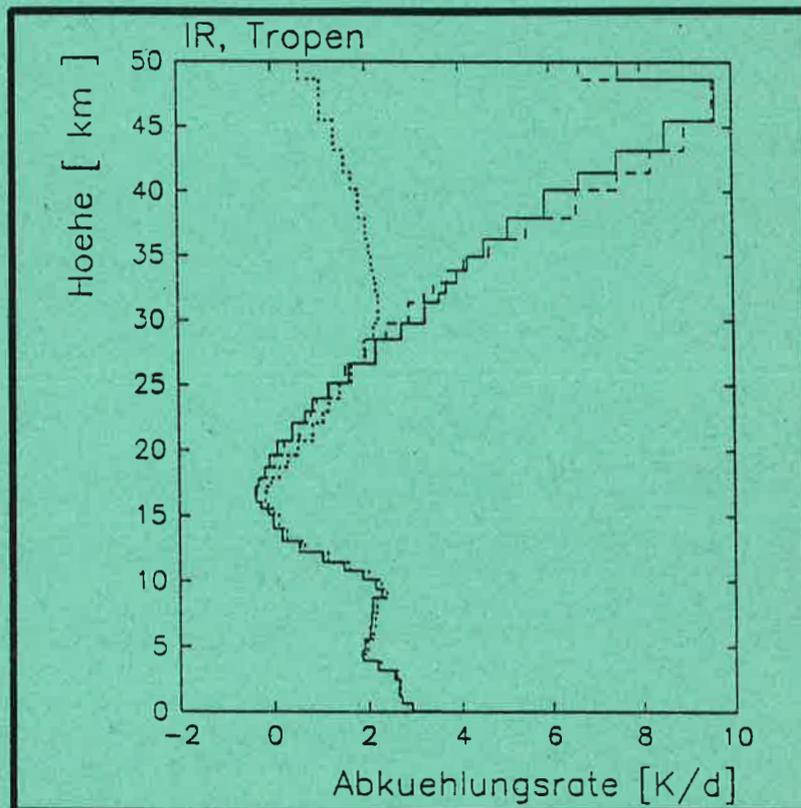




Max-Planck-Institut für Meteorologie

EXAMENSARBEIT Nr. 12



STRAHLUNGSÜBERTRAGUNG IN KLAREN ATMOSPHÄREN IM IR MIT k -VERTEILUNGS- UND LINIE-FÜR-LINIE MODELLEN

von

HEINZ-DIETER HOLLWEG

HAMBURG, MÄRZ 1991

DOKTORARBEIT

AUTOR:

HEINZ-DIETER HOLLWEG

UNIVERSITÄT HAMBURG
BUNDESSTRASSE 55
2000 HAMBURG 13

TITELBILD: Legende siehe Abbildung 36, Seite 103

MAX-PLANCK-INSTITUT
FÜR METEOROLOGIE
BUNDESSTRASSE 55
D-2000 HAMBURG 13
F.R. GERMANY

Tel.: (040) 4 11 73-0
Telex: 211092 mpime d
Telemail: MPI.METEOROLOGY
Telefax: (040) 4 11 73-298

Strahlungsübertragung in klaren Atmosphären im IR
mit k-Verteilungs- und Linie-für-Linie Modellen

Dissertation
zur Erlangung des Doktorgrades
der Naturwissenschaften im Fachbereich
Geowissenschaften
der Universität Hamburg

vorgelegt von

Heinz-Dieter Hollweg

aus
Driftsethe

Hamburg

1991

ISSN 0938-5177

Als Dissertation angenommen vom Fachbereich Geowissenschaften
der Universität Hamburg

auf Grund der Gutachten von Prof. Dr. H. Hinzpeter
und Prof. Dr. H. Graßl
und Prof. Dr. W. G. Zdunkowski

Hamburg, den 8. 2. 1991

Prof. Dr. M. Dunst
Sprecher
des Fachbereichs Geowissenschaften

Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit werden zwei k -Verteilungsmodelle zur Approximation infraroter Strahlungsübertragung für klare Atmosphären bis 50 km Höhe diskutiert. Zur Entwicklung und Beurteilung der Güte der Approximation sind Linie-für-Linie Modelle herangezogen worden, deren Genauigkeit selbst erörtert wird. Im einzelnen ergibt sich für die drei Modellarten:

- Linie-für-Linie: Die Fehler der spektralen Absorptionskoeffizienten betragen aufgrund zeitsparender Näherungen im ungünstigsten Fall 1 % im Abstand einiger Halbwertsbreiten von den Zentren starker Linien. Fehler aufgrund der spektralen Auflösung treten für große Spektralintervalle praktisch nicht auf. Die nicht exakt bekannten Linienflügel lassen Fehler in der Größenordnung von ± 3 % für die abwärtsgerichtete Strahlungsflußdichte (F^{\downarrow}) und ± 5 % für die Abkühlungsraten in der Troposphäre des Sommers in mittleren Breiten erwarten. Die Annahme fehlerbehafteter Linienstärken und Halbwertsbreiten von ± 10 % ergibt Ungenauigkeiten der aufwärtsgerichteten Strahlungsflußdichte (F^{\uparrow}) von ca. $\pm 1,5$ % in der Stratosphäre und für F^{\downarrow} von ca. ± 1 % am Boden. Die Abkühlungsraten sind in der Stratosphäre auf ± 10 % und am Boden auf ± 4 % genau bestimmbar.
- k -Verteilungen herkömmlicher Art mit spezieller Berücksichtigung der Temperaturabhängigkeit der Linienstärken und der multivariaten Häufigkeitsverteilung: Die Güte der Näherung ist stark abhängig vom verwendeten Referenzdruck, für den die k -Verteilung erstellt wird. Für den Druck 500 hPa ergeben sich Abweichungen von Linie-für-Linie Rechnungen für F^{\downarrow} in einer tropischen Atmosphäre bis -5 W/m^2 in der Stratosphäre und $1,6$ W/m^2 am Boden und für F^{\uparrow} von ca. 5 W/m^2 in der Stratosphäre. Mit diesem Modell sind Abkühlungsraten nur in der Troposphäre gut approximierbar; die Abweichungen betragen ca. $-0,02$ K/d am Boden und ca. $0,2$ K/d an der Tropopause.
- k -Verteilungen mit berücksichtigter Druckabhängigkeit der Absorptionskoeffizienten in den Linienzentren: Die Absorptionskoeffizienten sind aufgeteilt in die Beiträge aus den Flügel- und aus den Zentralbereichen der Spektrallinien. k -Verteilungen aus diesen Koeffizienten und die angenäherte Berücksichtigung der bei unterschiedlichen Höhen jeweils dominierenden Linien verbessert die Approximation der Strahlungsübertragung deutlich. Die Abweichungen des F^{\downarrow} von Linie-für-Linie Ergebnissen sind für die Tropen am Boden kleiner als $0,2$ W/m^2 . Für F^{\uparrow} ergeben sich in der gesamten Atmosphäre Abweichungen zwischen $-0,6$ und $0,3$ W/m^2 . Die Abweichungen der Abkühlungsraten sind in der Troposphäre kleiner als $\pm 0,03$ K/d und in Höhen bis 45 Km kleiner als $\pm 0,9$ K/d.

Inhaltsverzeichnis

	Seite	
1	Einleitung	1
	Teil 1: Grundlagen der Strahlungsübertragung	
2	Strahlungsübertragungsgleichung	5
3	Bestimmung der optischen Dicke	9
3.1	Atmosphärenprofile	9
3.2	Absorptionskoeffizient	11
3.2.1	Absorption im Zentralbereich von Spektrallinien	12
3.2.2	Absorption in den Flügeln von Spektrallinien	14
3.3	Integration der Gleichung für die differentielle optische Dicke	15
3.3.1	Einfluß der Numerik auf die Berechnung der Absorptionskoeffizienten	18
	Teil 2: Linie-für-Linie Modelle	
4	Spektrale Auflösung	22
4.1	Einteilung des infraroten Spektrums	22
4.2	Variation der Ordnung der spektralen Gauß Quadratur	27
5	Strahlungsübertragung im IR	31
5.1	Vergleich mit der ICRCCM Studie	32
5.2	Strahlungsflußdichte- und Abkühlungsratenprofile für drei Standardatmosphären im IR	36
	Teil 3: k-Verteilungsmodelle	
6	Grundlagen der k-Verteilungen	38
6.1	Einfluß der Klassenbreite auf die mittlere Transmission	41
6.2	Multivariate k-Verteilungen	45
7	Temperatur- und Druckabhängigkeit von k-Verteilungen	50
7.1	Far-Wing-Scaling Approximation	52
7.1.1	Abschätzung der Flügelnäherung mit einem L-f-L Modell	54
7.1.2	Approximation der Temperaturabhängigkeit der Linienstärken	56

7.2	Modifizierte FWS Approximation in k-Verteilungsmodellen	59
7.2.1	Abschätzung des Einflusses der repräsentativen effektiven LSE	60
7.2.2	Abhängigkeit der Flügelnäherung vom Referenzdruck	61
7.3	Approximation der Planckfunktion	63
7.4	Kontinuumabsorption in k-Verteilungsmodellen	66
8	Berücksichtigung der Linienzentren in k- Verteilungsmodellen	67
8.1	Betrachtungen über den Wechsel der Druckabhängigkeit der Absorptionskoeffizienten	67
8.1.1	Anwendung des Dominanzfaktors	73
8.2	Spaltung der repräsentativen Absorptionskoeffizienten in Zentralbereichs- und Flügelanteil	76
	Teil 4: Ergebnisse der Strahlungsübertragungsmodelle	
9	Fehlerabschätzung	80
9.1	Einfluß fehlerbehafteter Linienparameter	80
9.2	Auswirkung abgeschnittener Linien	83
10	Betrachtungen über den Rechenaufwand	85
10.1	Einfluß der numerischen Integration über den Zenitwinkel	87
10.2	Auswirkung vernachlässigter Absorption	89
10.2.1	Einfluß der Wasserdampflinien im atmosphärischen Fenster	90
10.2.2	Vernachlässigung von Absorbern	91
10.2.3	Einfluß von Absorptionsbanden	93
11	Einfluß von Absorbermengen	96
11.1	Einfluß der Wasserdampfdichte im Bereich der Tropopause	96
11.2	Einfluß der Konzentration von Spurengasen	98
11.2.1	a) Rechnungen mit dem L-f-L Modell	99
11.2.2	b) Rechnungen mit dem k-V-II Modell	101
12	Schlußbetrachtungen	103
13	Danksagung	107
14	Symbol- und Abkürzungsverzeichnis	108
15	Literaturverzeichnis	111

1

Einleitung

In vielen Bereichen der Geowissenschaften muß die Wechselwirkung von Strahlung und Atmosphäre berücksichtigt werden. So sind z.B. Untersuchungen zum Verständnis des Klimas sowie die Fernerkundung des Erdbodens und der Atmosphäre nur denkbar, wenn die Strahlungsprozesse hinreichend genau bekannt sind. Die direkte Anwendung der Strahlungstheorie geschieht mit Linie-für-Linie (im folgenden als L-f-L abgekürzt) Strahlungsübertragungsmodellen in denen jede Absorptionslinie jedes Absorbers berücksichtigt wird.

L-f-L Modelle erfordern jedoch sehr viel Rechenzeit, so daß sie für viele Anwendungen (z.B. Klima- und Fernerkundungsmodelle) nicht in Betracht kommen. Daher sind zahlreiche Näherungsverfahren zur Berechnung des Strahlungstransports entwickelt worden (siehe z.B. den Übersichtsartikel von Stephens, 1984).

Der Rechenzeitbedarf und die erzielte Genauigkeit der approximierenden Modelle ist sehr unterschiedlich. Bei solchen Modellen, die auf hohe Genauigkeit hin entwickelt worden sind, ist der numerische Aufwand für die unmittelbare Anwendung in Klimamodellen und dem routinemäßigen Einsatz in der Fernerkundung ebenfalls zu groß. Hierfür müssen einfachere Modelle verwendet werden, die zwar schneller aber auch ungenauer sind. Ergebnisse der L-f-L Modelle und der approximierenden Modelle mit hoher Genauigkeit dienen jedoch als Eichmaß für vereinfachte, zeitsparende Methoden, um Strahlungstransporte zu bestimmen.

Approximierende Modelle unterscheiden sich u.a. durch ihre Transmissionsfunktion. Neben den Bandenmodellen, die zunächst bevorzugt worden sind, werden zunehmend sogenannte k-Verteilungsmodelle verwendet. In Bandenmodellen werden für relativ große Spektralbereiche mittlere Transmissionen berechnet. k-Verteilungsmodellen liegen Häufigkeitsverteilungen der spektralen Absorptionskoeffizienten zugrunde. Ein repräsentativer Absorptionskoeffizient aus jeder Häufigkeitsklasse kann dann in die monochromatische Strahlungsübertragungsgleichung eingesetzt werden, was bei der Berücksichtigung der Streuung vorteilhaft ist (Goody und Yung, 1989).

Ziel der vorliegenden Arbeit ist die Entwicklung eines approximierenden, auf k-Verteilungen beruhenden Strahlungstransportmodells, das eine hohe Genauigkeit der zu berechnenden Strahlungsflüsse und Abkühlungsraten in der Atmosphäre bis etwa 50 km Höhe liefert. Auf die Rechenschnelligkeit und Kürze der Datensätze wird dabei weniger Wert gelegt. Um die Genauigkeit des k-Verteilungsmodells

abschätzen zu können, wird ebenfalls ein L-f-L Modell entwickelt.

Die Modelle sind für klare, nichtstreuende Modellatmosphären im lokalen thermodynamischen Gleichgewicht im infraroten Spektralbereich (IR) konzipiert. Daher werden die solare Einstrahlung und die Streuprozesse vernachlässigt, so daß der Strahlungsfluß in unabhängig voneinander auf- und abwärtsgerichtete Komponenten aufgeteilt werden kann.

Die Arbeit ist in vier Teile gegliedert:

Teil 1: Zunächst werden die Grundlagen der Strahlungsübertragung bereitgestellt. Die erörterten Gleichungen und ihre numerische Umsetzung werden zumindest in ähnlicher Form in den L-f-L und k-Verteilungsmodellen angewandt. Diskutiert werden die Lösung der differentiellen Strahlungsübertragungsgleichung, die Berechnung der spektralen Absorptionskoeffizienten und der optischen Dicke, die spektrale Auflösung, die Bestimmung der Strahlungsflüsse und Abkühlungsraten, die Integration über den Zenitwinkel und die Verwendung der Modellatmosphären. Im folgenden sind prinzipielle Lösungswege der genannten Punkte aufgeführt, wie sie in der Literatur zu finden sind:

- Die Auflösung des Spektrums kann durch äquidistante Stützstellen erfolgen (Chou und Arking, 1980) oder auch durch nicht äquidistante, die um die Linienzentren angeordnet sind (Kunde und Maguire, 1974). Die Integration kann mit unterschiedlichen, numerischen Integrationsschemata erfolgen. In dieser Arbeit werden beide Arten der spektralen Auflösung und die Anwendung der Gauß Quadratur mit unterschiedlicher Ordnung ausführlich diskutiert.
- Die Bestimmung der Strahlungsschwächung stellt die größten Anforderungen. Die Berechnung der Absorptionskoeffizienten aus den Spektrallinien und die Berücksichtigung der Druck- und Temperaturabhängigkeit erfordert die meiste Rechenzeit. Zudem sind die theoretischen Grundlagen noch nicht vollständig erforscht. Insbesondere betrifft dies die extremen Linienflügel. Um Rechenzeit zu sparen, werden in den meisten L-f-L Modellen die Absorptionslinien bei einer vorgegebenen Entfernung vom Zentrum abgeschnitten. Mit dem gleichen Ziel schlägt Scott (1974) vor, die Absorptionslinien spektral zu verschieben, was mathematische Vereinfachungen erlaubt.
- Die Genauigkeit der Integration über die Höhe hängt davon ab, wie die gegebene Atmosphäre in Schichten unterteilt wird. Da die analytische Integration mit den höhenabhängigen Absorptionskoeffizienten im allgemeinen

nicht möglich ist, werden die Schichten hinreichend dünn festgelegt, so daß die Absorptionskoeffizienten in den einzelnen Schichten als konstant betrachtet werden können.

- Die Integration über den Zenitwinkel erfolgt am genauesten durch numerische Quadratur. Rechenzeiteinsparungen mit Hilfe eines Diffusivitätsfaktors, der als konstanter Wert $\beta = 1,66$ oder als Funktion der optischen Dicke (Liu und Schmetz, 1988) angewandt wird, können zwar erreicht werden, sind aber für L-f-L Modelle im Vergleich zur benötigten Gesamtzeit unbedeutend.

Eine weitere Strategie zur Rechenzeiteinsparung besteht darin, die Transmissionen für eine Reihe von Druck- und Temperaturverteilungen zu bestimmen und tabellarisch niederzulegen, um daraus dann in einem zweiten Schritt durch Interpolation die Strahlungsflüsse und Abkühlungsraten für beliebige Atmosphären zu berechnen. Solche Strahlungscode findet man z.B. bei Fels und Schwarzkopf (1981), die eine modifizierte Version des L-f-L Modells von Drayson (1966) verwenden; bei Scott und Chedin (1981) unter Verwendung des Codes von Scott (1974) sowie bei Chou und Kouvaris (1986), die von Chesters und Arking (1985) berechnete Transmissionen anwenden.

Diese Vorgehensweise ist vorteilhaft, wenn Strahlungsübertragungen für unterschiedliche Atmosphärenprofile berechnet werden sollen, ohne die Eigenschaften von Absorptionslinien zu variieren, auf denen die Bestimmung der Transmissionen beruht. Die in dieser Arbeit benutzten L-f-L Modelle werden dagegen als Hilfsmittel für die Entwicklung approximierender Modelle betrachtet. Daher steht nicht die Berechnung der Strahlungsflüsse für verschiedene Atmosphären mit rechenzeitsparenden L-f-L Modellen im Vordergrund, sondern die Untersuchung des Einflusses verschiedener Formulierungen und Näherungen des Absorptionskoeffizienten.

Teil 2: Ergebnisse von L-f-L Rechnungen werden für drei Standardatmosphären im IR vorgestellt. Insbesondere erfolgt ein Vergleich mit Resultaten aus der ICRCMM Studie (WMO, 1984), in der u.a. Ergebnisse unterschiedlicher L-f-L Modelle diskutiert werden.

Teil 3: Die Approximierung des Strahlungstransports durch k-Verteilungsmodelle wird erörtert. Im Gegensatz zu den in dieser Arbeit verwendeten L-f-L Modellen, die für unterschiedliche Modellatmosphären jeweils eigene Modellläufe benötigen, bestehen die k-Verteilungsmodelle aus zwei Programmen: In dem ersten werden die spektralen Absorptionskoeffizienten berechnet und die k-Verteilungen (auch

e-Reihen genannt) erstellt. In dem zweiten Programm werden die k-Verteilungen angewandt, um für eine beliebige Atmosphäre die Strahlungsflüsse und Abkühlungsraten zu berechnen.

Zunächst werden die Grundlagen der Berechnung von k-Verteilungen und ihre Anwendung auf homogene Atmosphären erläutert. Anschließend wird der Einfluß der Klassenbreiten der Häufigkeitsverteilungen auf die Güte der Ergebnisse diskutiert. Die Berücksichtigung der Überlappung von Absorptionsbanden wird erläutert, wobei zwei Verfahren betrachtet werden: Zum einen die herkömmliche Anwendung der Multiplikatitivität von mittleren Transmissionen aus für unterschiedliche Absorber getrennt vorliegenden k-Verteilungen. Zum anderen die Verwendung multivariater k-Verteilungen.

Im weiteren wird die Abhängigkeit der k-Verteilungen von Druck und Temperatur untersucht. Ausgehend von der Far-Wing-Scaling Approximation (Chou und Arking, 1980) wird eine modifizierte Form angegeben, wobei die Druck- und Temperaturabhängigkeit der Linienprofile und die Temperaturabhängigkeit der Planckfunktion und der Linienstärken dabei approximativ berücksichtigt werden. Schließlich wird ein k-Verteilungsmodell entwickelt, das nicht nur wie bisher auf sämtliche Absorptionskoeffizienten die für die Linienflügel geltende Druck- und Temperaturabhängigkeit anwendet, sondern die Abhängigkeit in den Linienzentren annähert.

Teil 4: Im letzten Teil erfolgen Anwendungen der entwickelten L-f-L und k-Verteilungsmodelle. Zuerst wird prinzipiell untersucht, welchen Einfluß die Verwendung fehlerbehafteter Linienparameter und das Abschneiden der Absorptionslinien hat. Es folgen Betrachtungen über den Rechenaufwand der Modelle. Insbesondere werden zwei Wege, die Rechenzeit zu verkürzen, diskutiert: Zum einen die Verwendung des Diffusivitätsfaktors $\beta = 1,66$ anstelle einer Gauß Quadratur über den Zenitwinkel. Zum anderen die Vernachlässigung von Absorptionslinien, -banden und ganzen Gasen. Abschließend werden Variationen der Konzentration von atmosphärischen Absorbern erörtert. Anhand von Vergleichen mit L-f-L Rechnungen wird abgeschätzt, ob k-Verteilungsmodelle geeignet sind, Strahlungstransporte nicht nur in der gegenwärtigen Atmosphäre zu approximieren, sondern auch in veränderten Klimaten.

Teil 1: Grundlagen der Strahlungsübertragung

2

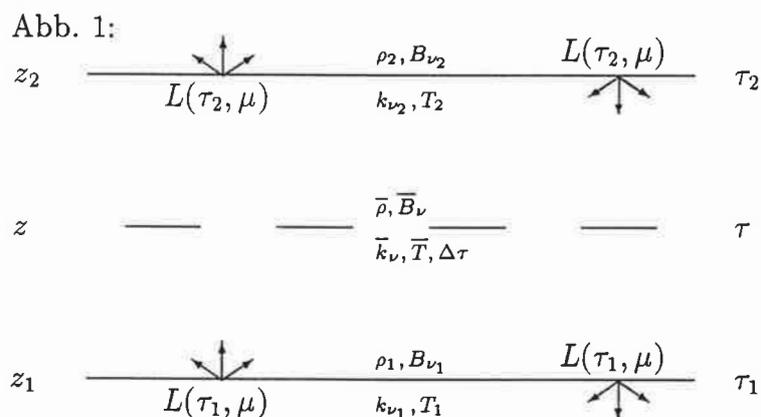
Strahlungsübertragungsgleichung

Ausgangspunkt ist die Strahlungsübertragungsgleichung für planparallele Schichten, wie sie in Standardwerken (z.B. Liou, 1980) zu finden ist.

$$\mu \frac{dL_\nu(\tau_\nu, \mu, \phi)}{d\tau_\nu} = L_\nu(\tau_\nu, \mu, \phi) - J_\nu(\tau_\nu, \mu, \phi) \quad (1)$$

Hier bezeichnet L_ν die spektrale Strahldichte, J_ν die Quellfunktion, τ_ν die optische Dicke (Definition: $d\tau_\nu = -\sum(k_{\nu,i}\rho_i)dz$, mit dem Absorptionskoeffizienten $k_{\nu,i}$, der Dichte ρ_i des i -ten Absorbers und der Höhe z), μ den Kosinus des Zenitwinkels und ϕ den Azimut. Der besseren Übersichtlichkeit wegen wird im folgenden der Index vernachlässigt, der die Abhängigkeit von der Wellenzahl ν anzeigt.

Die Atmosphäre ist in planparallele Schichten eingeteilt. Die Zuordnung der physikalischen Größen zu einer Schicht ist Abb. 1 zu entnehmen. Hierbei ist die obere Schichtgrenze mit dem Index 2, die untere mit dem Index 1 versehen. Querstriche kennzeichnen arithmetische Mittel, die aus den Werten an den Grenzen gebildet sind. Die optische Dicke einer Schicht ergibt sich aus der Differenz der optischen Dicken an den Grenzen: $\Delta\tau = \tau_1 - \tau_2$.



Hergeleitet werden nun die auf- und abwärtsgerichteten Strahldichten an den Grenzen der einzelnen Schichten einer klaren, nichtstreuenden Atmosphäre, die sich im lokalen thermodynamischen Gleichgewicht befindet. Daher kann Gl. 1 in die auf- und abwärtsgerichtete Komponente getrennt werden. Die Integration über die optische Dicke liefert die Gleichungen (2) und (3).

$$L^\uparrow(\tau_2, \mu) = L^\uparrow(\tau_1, \mu)e^{-\Delta\tau/\mu} + \int_{\tau_2}^{\tau_1} B(T)e^{-(\tau'-\tau_2)/\mu} \frac{d\tau'}{\mu} \quad (2)$$

$$L^\downarrow(\tau_1, \mu) = L^\downarrow(\tau_2, \mu)e^{-\Delta\tau/\mu} + \int_{\tau_2}^{\tau_1} B(T)e^{-(\tau_1-\tau')/\mu} \frac{d\tau'}{\mu} \quad (3)$$

B ist die von einem schwarzen Körper isotrop abgegebene Strahldichte, die durch die Planckfunktion bestimmt ist.

$$B_\nu(T) = \frac{2hc^2\nu^3}{\exp\{\frac{hc\nu}{kT}\} - 1} \quad (4)$$

Hierbei ist c die Lichtgeschwindigkeit im Vakuum, h die Planck-, k die Boltzmannkonstante und T die Temperatur des Körpers.

Die auftretenden Integrale sind nicht allgemein lösbar, jedoch ist mit der Annahme, daß die Planckfunktion linear von der optischen Dicke abhängt (z.B. Zdunkowski et al., 1974),

$$B(\tau) := B_0 + B^*\tau \quad (5)$$

$$B^* = \frac{B_1 - B_2}{\Delta\tau} \quad \text{und} \quad B_0 = \frac{B_2\tau_1 - B_1\tau_2}{\Delta\tau}$$

eine analytische Integration durchführbar.

$$L^\uparrow(\tau_2, \mu) = L^\uparrow(\tau_1, \mu)e^{-\Delta\tau/\mu} + (B_0 + B^*\mu)(1 - e^{-\Delta\tau/\mu}) + B^*(\tau_2 - \tau_1)e^{-\Delta\tau/\mu} \quad (6)$$

$$L^\downarrow(\tau_1, \mu) = L^\downarrow(\tau_2, \mu)e^{-\Delta\tau/\mu} + (B_0 - B^*\mu)(1 - e^{-\Delta\tau/\mu}) + B^*(\tau_1 - \tau_2)e^{-\Delta\tau/\mu} \quad (7)$$

Es sei noch erwähnt, daß die grob vereinfachende Annahme einer in der ganzen Schicht konstanten Planckfunktion (in den obigen Gleichungen wäre B^* dann Null zu setzen) für geometrisch dünne, jedoch optisch dicke Schichten zu erheblichen Fehlern in den Abkühlungsraten führen würde.

Da Gl. 6 und 7 für die atmosphärischen Schichten ein entkoppeltes Gleichungssystem bilden, können sie unabhängig voneinander gelöst werden. Die aus einer

Schicht austretende Strahldichte geht dabei als einfallende Strahldichte in die angrenzende Schicht ein.

An den Rändern der Atmosphäre müssen die einfallenden Strahldichten bekannt sein. Für die aufwärtsgerichtete Komponente am Boden wird angenommen, daß dieser wie ein Schwarzkörper strahlt, so daß $L^{\uparrow}(\tau_{Boden}, \mu)$ durch die Planckfunktion mit der Bodentemperatur bestimmt ist.

Die einfallende extraterrestrische Strahlung im IR kann praktisch vernachlässigt werden. Da jedoch die Atmosphäre im Modell nicht bis in den Weltraum ausgedehnt ist, sondern bei einer vorgegebenen Höhe abgeschnitten wird, muß der Beitrag des darüberliegenden atmosphärischen Teils zur abwärtsgerichteten Strahldichte berücksichtigt werden. In den hier verwendeten Modellen wird die optische Dicke des vernachlässigten Atmosphärenbereichs gleich dem 1,1-fachen der obersten Modellschicht gesetzt. Die Wahl dieses Wertes ist getroffen worden, weil $\Delta\tau$ des vernachlässigten Atmosphärenteils in den verwendeten Modellen größer ist als der Wert von $\Delta\tau$ der obersten Modellschicht. Die Festlegung $L^{\uparrow}(\tau_{außen}, \mu) = 0$ würde dagegen zu großen Fehlern der Abkühlungsraten in den oberen Schichten führen.

Die Integration der Strahldichte über den Zenit- und den Azimutwinkel (vorausgesetzt wird horizontale Homogenität, so daß die Integration über ϕ den Wert 2π ergibt) liefert die spektrale Strahlungsflußdichte F_{ν}^{\uparrow} . Die Integration von ν_1 bis ν_2 ergibt die Strahlungsflußdichte F^{\uparrow} bzw. F^{\downarrow} in dem Wellenzahlbereich $\Delta\nu$.

$$F^{\uparrow}(\tau) = \int_{\nu_1}^{\nu_2} F_{\nu}^{\uparrow} d\nu = \int_{\nu_1}^{\nu_2} \int_0^{2\pi} \int_0^1 L^{\uparrow}(\nu, \tau, \mu, \phi) \mu d\mu d\phi d\nu \quad (8)$$

Da Gl. 8 nicht analytisch integriert werden kann, wird über μ und ν mit zweifacher Anwendung der Gauß Quadratur integriert. Für die spektrale Integration wird das Gesamtintervall $\Delta\nu$ in Teilintervalle $\delta\nu$ unterteilt, auf die die Gauß Quadratur angewandt wird. Die Summation über die Anzahl N und O der Gewichte g_k und g_l und den dazugehörigen Stützstellen μ_k und ν_l sowie die Summation (M) über die Teilintervalle $\delta\nu$ liefert die Strahlungsflußdichten im Gesamtintervall $\Delta\nu$:

$$F^{\uparrow}(\tau) \approx 2\pi \sum_{j=1}^M \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^O g_k g_l L_{klj}^{\uparrow}(\nu_{lj}, \tau, \mu_k) \mu_k \delta\nu_j \quad (9)$$

(Das Auftreten des Index j bei den Gewichten und Stützstellen für die spektrale Summation besagt, daß die Ordnung der Gauß Quadratur für die einzelnen Teilintervalle $\delta\nu$ in den Modellen dieser Arbeit unterschiedlich gewählt werden kann.)

Die Abkühlungsrate $\partial T/\partial t$ ist proportional der Divergenz des Strahlungsflußdichtevektors. Mit der spezifischen Wärmekapazität bei konstantem Druck c_p und der Schwerebeschleunigung g erhält man

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{g}{c_p} \operatorname{div}_p \vec{F}_{\Delta\nu} . \quad (10)$$

div_p bezeichnet die Divergenz im Druckkoordinatensystem.

Approximierte Abkühlungsraten für die einzelnen Schichten werden aus der Differenz der Nettostrahlungsflußdichten an den Schichtgrenzen gewonnen, wobei die Nettostrahlungsflußdichte durch die Differenz der auf- und abwärtsgerichteten Strahlungsflußdichten gegeben ist.

3

Bestimmung der optischen Dicke

Zur Berechnung von Strahlungsflüssen und Abkühlungsraten müssen Formulierungen bereitgestellt werden, die die Wechselwirkung zwischen Strahlung und Materie längs des durchstrahlten Weges beschreiben. Für planparallele, nichtstreuende Schichten ist die differentielle optische Dicke durch Gl. (11) gegeben, wobei k_{ν_i} der Absorptionskoeffizient des i -ten Absorbers, z die Höhe, ρ_i die Absorberdichte, q_i die Absorberkonzentration und g die Schwerebeschleunigung ist.

$$d\tau_{\nu} = - \sum_{i=1}^N k_{\nu_i} \rho_i dz = \sum_{i=1}^N k_{\nu_i} \frac{q_i}{g} dp \quad (11)$$

Zur Bestimmung der optischen Dicke in den einzelnen Schichten ist es erforderlich,

- eine Modellatmosphäre zu entwerfen,
- den Absorptionskoeffizienten zu berechnen
- und schließlich Gl. (11) zu integrieren.

3.1

Atmosphärenprofile

Atmosphärenprofile liegen durch Radiosondenaufstiege oder in Form von Standardatmosphären vor. In der Regel sind die Werte der Temperatur, des Drucks und der Dichten bzw. Konzentrationen in diskreten Höhen gegeben. Um den Vergleich verschiedener Strahlungstransportmodelle zu erleichtern, werden gewöhnlich die von McClatchey et al. (1978) gegebenen Standardatmosphären für die Tropen, den Sommer und Winter der mittleren Breiten sowie den subarktischen Sommer und Winter verwendet. Die Atmosphären sind in 1 km Schritten bis 25 km Höhe und oberhalb davon in 5 km Schritten aufgelöst. Die Profile der Temperatur und der Dichten für Luft, Wasserdampf und Ozon sind für drei dieser Atmosphären in Abb. 2 dargestellt.

Da in den vorliegenden Strahlungstransportmodellen die Schichtgrenzen auf fest vorgegebene Druckniveaus gelegt werden, müssen Temperatur und Dichte auf diese Niveaus interpoliert werden und wenn möglich als Funktionen des Drucks ausgedrückt werden.

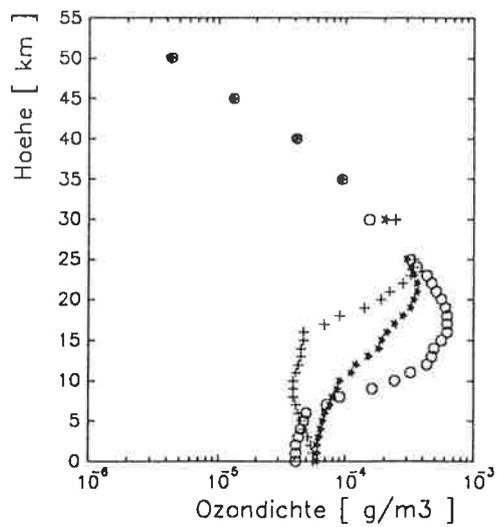
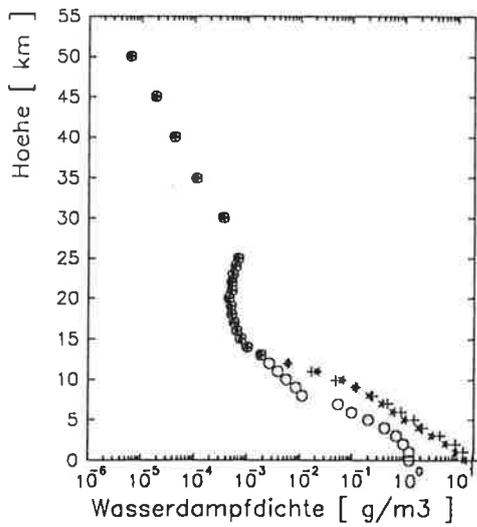
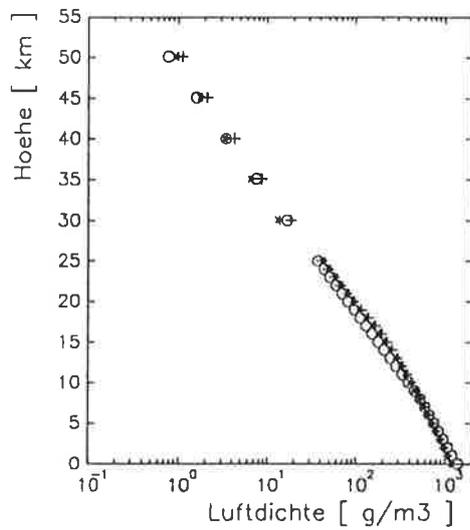
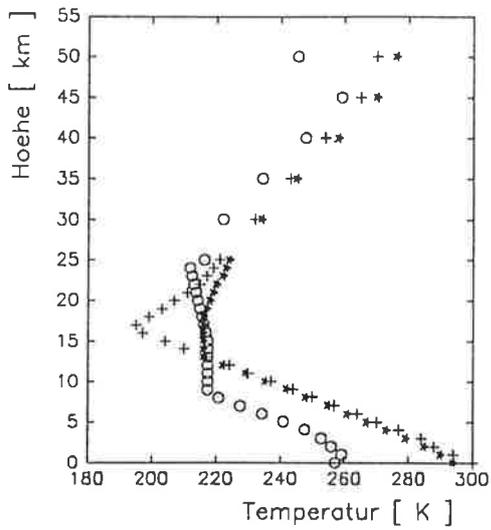


Abb. 2: Vertikalprofile von Temperatur, Luft-, Wasserdampf- und Ozondichte nach McClatchey et al. (1978) für die Tropen (Kreuze), den Sommer der mittleren Breiten (Sterne) und den subarktischen Winter (Kreise).

Der Einfluß von Dicke und Anzahl der Schichten auf die Abkühlungsraten ist von Morcrette und Fouquart (1985) untersucht worden. Sie sind zu dem Ergebnis gekommen, daß sowohl die Troposphäre als auch die Stratosphäre in mindestens zwanzig Schichten unterteilt werden sollte.

Für die Rechnungen dieser Arbeit ist die Atmosphäre in etwa 45 Schichten eingeteilt worden. Die genaue Anzahl ist von der Größe des Bodendrucks abhängig. Ist dieser höher als 1000 hPa, dann liegen die Grenzen der unteren beiden Schichten beim Bodendruck, bei 1000 hPa und bei 940 hPa. Ist der Bodendruck kleiner als 1000 hPa, dann liegen die Grenzen der untersten Schicht bei dem Bodendruck und bei 940 hPa. Die weiteren Druckdifferenzen zwischen den Grenzen der Schichten sind dann von unten nach oben (in hPa): 10×60 , 2×30 , 6×25 , 9×10 , 5×5 , $2 \times 2,5$, 7×1 und schließlich so viele 0,5 hPa Schritte bis der Atmosphärendruck von 1 hPa unterschritten wird.

Die Höhen zu den vorgegebenen Drücken der Modellatmosphäre werden aus der Standardatmosphäre mit der barometrischen Höhenformel interpoliert, wobei zwischen zwei aufeinanderfolgenden Niveaus der Standardatmosphäre die mittlere virtuelle Temperatur berücksichtigt wird. Der Temperaturgradient wird zwischen zwei Höhen der Standardatmosphäre als konstant angenommen. Die Luftdichte wird mit der Gasgleichung bestimmt. Schließlich ist die Höhenabhängigkeit von Wasserdampf- und Ozondichte in jeder Schicht exponentiell vorausgesetzt.

3.2

Absorptionskoeffizient

Der Absorptionskoeffizient k_ν einer einzelnen Spektrallinie wird durch das Produkt der lediglich temperaturabhängigen Linienstärke S mit der Linienform f gebildet (siehe z.B. Goody und Yung, 1989).

$$k_\nu(p, T) = S(T)f(\Delta\nu, p, T)$$

Hierbei bezeichnet $\Delta\nu$ den Abstand vom Linienzentrum. Die Summe der Koeffizienten aller Linien eines Absorbers ergibt den spektralen Absorptionskoeffizienten.

Die Temperaturabhängigkeit der Linienstärke ist gegeben durch

$$S(T) = S(T_0) \frac{Q_r(T_0) Q_v(T_0)}{Q_r(T) Q_v(T)} \exp\left\{\frac{hc}{k} E\left(\frac{1}{T_0} - \frac{1}{T}\right)\right\}, \quad (12)$$

wobei E der Energieterm (in cm^{-1}) des unteren Energieniveaus beim Quantensprung, Q_r und Q_v die Rotations- bzw. Vibrationszustandssumme ist. Nach

Herzberg (1945) ist der Quotient aus den Rotationszustandssummen bei unterschiedlichen Temperaturen in guter Näherung durch den Ausdruck

$$\frac{Q_r(T_0)}{Q_r(T)} \approx \left(\frac{T_0}{T}\right)^j$$

gegeben, wobei die Potenz j von der Anzahl und der Struktur der Moleküle abhängt. Werte für j und für die Vibrationszustandssummen für ausgewählte Temperaturwerte sind in Tabelle 1 aufgeführt. Die Linienstärke für eine Referenztemperatur T_0 wird aus quantenmechanischen Überlegungen und spektroskopischen Messungen bestimmt (siehe z.B. Unsöld, 1968).

Tabelle 1:

Vibrationszustandssummen für verschiedene Moleküle und Temperaturen aus McClatchey et al., 1973. Hinzugefügt ist der Temperaturabhängigkeitsparameter n der Lorentzhalbwidthsbreite (Gl. 15) aus Rothman et al., 1987.

Molekül	j	Temperatur	Vibrationszustandssummen							n
			175	200	225	250	275	296	325	
H ₂ O	1.5		1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.001	.64
CO ₂	1.0		1.0095	1.0192	1.0327	1.0502	1.0719	1.0931	1.1269	.75
O ₃	1.5		1.004	1.007	1.013	1.022	1.033	1.046	1.066	.76
N ₂ O	1.0		1.017	1.030	1.048	1.072	1.100	1.127	1.170	.75
CO	1.0		1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	.69
CH ₄	1.5		1.000	1.000	1.001	1.002	1.004	1.007	1.011	.75
O ₂	1.0		1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.001	.50

3.2.1

Absorption im Zentralbereich von Spektrallinien

Unter atmosphärischen Bedingungen wird die Absorptionslinienform im wesentlichen durch die Stoßdämpfung und den Dopplereffekt bestimmt. Im allgemeinen werden Absorptionslinien asymmetrisch verbreitert und frequenzverschoben. Jedoch ist eine allgemeingültige Theorie der Stoßdämpfung nicht bekannt. Dies gilt insbesondere für Flügelbereiche, die weiter als einige hundert Halbwertsbreiten vom Zentrum entfernt sind. In Zentrumsnähe bei ν_0 ist die stoßgedämpfte Linienform durch das Lorentzprofil gegeben, wobei α_L die Halbwertsbreite der Linie bezeichnet:

$$k_\nu(p, T) = \frac{S(T)}{\pi} \frac{\alpha_L(p, T)}{(\nu - \nu_0)^2 + \alpha_L^2(p, T)} \quad (13)$$

Bei geringem Luftdruck überwiegt die Dopplerverbreiterung, die durch die Bewegung der Moleküle entsprechend der Maxwell-Boltzmann-Geschwindigkeitsverteilung verursacht wird. Die Faltung von Lorentz- und Dopplerprofil ergibt schließlich das Voigtprofil (z.B. Armstrong, 1967).

$$k_\nu(p, T) = k_0 \frac{y}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-t^2}}{y^2 + (x - t)^2} dt, \quad (14)$$

mit

$$k_0 = \frac{S(T)}{\alpha_D(T)} \left(\frac{\ln 2}{\pi} \right)^{1/2},$$

$$y = \frac{\alpha_L(p, T)}{\alpha_D(T)} (\ln 2)^{1/2} \quad \text{und} \quad x = \frac{\nu - \nu_0}{\alpha_D(T)} (\ln 2)^{1/2}.$$

Die druck- und temperaturabhängige Lorentzhalbwidthsbreite und die temperaturabhängige Dopplerhalbwidthsbreite (mit der Molekülmasse m) sind gegeben durch

$$\alpha_L(p, T) = \alpha_L(p_0, T_0) \frac{p}{p_0} \left(\frac{T_0}{T} \right)^n \quad \text{und} \quad \alpha_D = \frac{\nu_0}{c} \left(\frac{2kT}{m} \ln 2 \right)^{1/2}, \quad (15)$$

wobei der Parameter n für unterschiedliche Absorber in Tabelle 1 aufgeführt ist. Hierbei ist n ein Mittelwert, der die von Linie zu Linie variierende, und nur für wenige Fälle bereits gemessene Temperaturabhängigkeit der Lorentzhalbwidthsbreite angenähert beschreibt (Davies und Oli, 1978 sowie Rothman et al., 1987).

Strenggenommen ist die Anwendung des Voigtprofils nur gerechtfertigt, wenn Druck- und Dopplerverbreiterung unabhängig voneinander sind. Für eine hochauflösende Spektroskopie mögen tiefergehende Überlegungen nötig sein. Hier sei nur der Artikel von Herbert (1974) über das sogenannte "collisional narrowing" von Dopplerprofilen im Grenzfall "sanfter" Stöße genannt, welches auf das Galatryprofil führt. Jedoch zeigt Rodgers (1976), daß bei der Bestimmung der Äquivalentbreite von Spektrallinien die maximale Abweichung von 0,3 % nicht überschritten wird, falls anstatt des Galatry- das Voigtprofil benutzt wird. Angesichts der Fehler, die man aufgrund spektraler und vertikaler Integration bei der Berechnung von Strahlungsflüssen und Abkühlungsraten tolerieren muß, sind die Fehler aufgrund der Verwendung des Voigtprofils vernachlässigbar.

Die für die Berechnung der Absorptionskoeffizienten notwendigen Parameter der einzelnen Spektrallinien, d.h. die Position des Zentrums, die Linienstärke zu einer gegebenen Temperatur, die Halbwidthsbreite zu gegebener Temperatur und Druck und der Energieterm des unteren Energieniveaus werden für diese Arbeit der Linienparametersammlung "HITRAN database: 1986 edition" (Rothman et al., 1987) entnommen.

3.2.2

Absorption in den Flügeln von Spektrallinien

Eine Vielzahl von Messungen hat für die extremen Linienflügel ergeben, daß es keine genügende Übereinstimmung zwischen theoretisch berechneten und experimentell bestimmten Absorptionskoeffizienten gibt. Weder die Abhängigkeit des Absorptionskoeffizienten in den Flügeln von der Wellenzahl, noch seine Abnahme mit zunehmender Temperatur in Abhängigkeit vom Partialdruck, wie sie von Bignell (1970) für Wasserdampf festgestellt worden ist, wird von der Theorie hinreichend genau wiedergegeben.

Wie Burch und Gryvnak (1980) diskutieren, sind selbst- und fremdverbreiterte Absorptionslinienflügel, die durch Stöße des absorbierenden Moleküls mit einem Molekül der eigenen Art bzw. einem Stoßpartner anderer Art verursacht werden, unterschiedlich.

Zerlegt man den spektralen Absorptionskoeffizienten in den Beitrag k_{lokal} , der aus den zentrumsnahen Bereichen der Absorptionslinien resultiert, und in den Beitrag der sogenannten Kontinuumabsorption k_{kont} , der aus den Flügelbereichen stammt, so ist

$$k = k_{\text{lokal}} + k_{\text{kont}} = k_{\text{lokal}} + C_s^0 p_s + C_f^0 p_f \quad (16)$$

Die bezüglich des Drucks normierten Größen sind mit dem Index 0 gekennzeichnet, p_s ist der Partialdruck des absorbierenden Gases und p_f derjenige des strahlungs-inaktiven Gases. C_s^0 und C_f^0 sind der selbst- bzw. fremdverbreiterte Koeffizient bei der Kontinuumabsorption.

Eine elementare Umformung führt zu einem Ausdruck für den Koeffizienten der Kontinuumabsorption in Gl. 16

$$k_{\text{kont}}(\nu, p, p_s, T) = C_s^0(\nu, T)[p_s + \gamma(p - p_s)] \quad (17)$$

wobei γ das Verhältnis des fremd- zum selbstverbreiterten Koeffizienten und p der Gesamtdruck ist.

Für die Kontinuumabsorption von Wasserdampf im Fenster zwischen 8 – 12 μm fanden Roberts et al. (1976) die empirische Beziehung

$$C_s^0(\nu, T) = C_*^0(\nu) \exp\left\{T_0\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{296}\right)\right\} \quad (18)$$

$$C_*^0(\nu) = a + b \exp\{-\beta\nu\} \quad ,$$

mit den Konstanten $a = 4.18 \text{ cm}^2\text{g}^{-1}\text{atm}^{-1}$, $b = 557.8 \text{ cm}^2\text{g}^{-1}\text{atm}^{-1}$, $\beta = 0.00787 \text{ cm}$, $\gamma = 0.001$, und $T_0 = 1800 \text{ K}$.

Die Abschätzung von γ ist laut Roberts et al. (1976) unsicher; sie geben einen Wert zwischen 0 und 0,001 an. Die vereinfachende Annahme, daß γ spektral konstant ist, hat zur Folge, daß die Flügelformen für Selbst- und Fremdverbreiterung gleich sind.

In den Modellen dieser Arbeit wird nur die Kontinuumabsorption des Wasserdampfs im atmosphärischen Fenster bei $10 \mu\text{m}$ berücksichtigt. Die Kontinuumabsorption von H_2O in dem Fenster bei $4 \mu\text{m}$ wird nicht berücksichtigt, weil sie nur einen geringen Beitrag zum Strahlungsfluß im IR liefert.

3.3

Integration der Gleichung für die differentielle optische Dicke

Die Diskussion über die Absorptionskoeffizienten hat deutlich gemacht, daß die analytische Integration der differentiellen optischen Dicke nach der allgemeinen Form von Gl. 11 über eine Schicht nicht durchführbar ist. Wenn jedoch z.B. durch Verwendung genügend dünner Schichten sichergestellt wird, daß die Absorptionskoeffizienten nicht zu stark mit Temperatur und Druck innerhalb einer Schicht variieren, kann angenommen werden, daß $k_\nu = \bar{k}_\nu$ in der betreffenden Schicht konstant ist. Ist dies der Fall, dann ist die Durchführbarkeit der analytischen Integration lediglich eine Frage der Höhenabhängigkeit der Konzentration der Absorber.

Der einfachste Fall tritt auf für Gase mit konstanter Konzentration. Die Integration von Gl. 11 liefert dann

$$\Delta\tau = \bar{k}_\nu \frac{\bar{q}}{g} (p_1 - p_2) . \quad (19)$$

Für Gase mit variabler Konzentration läge die einfachste Vorgehensweise in einer ähnlichen Behandlung, indem eine mittlere Konzentration angewandt werden würde; doch dies ist nicht nötig. Unter der Voraussetzung, daß sowohl die Konzentration als auch die Luftdichte in einer Schicht exponentiell von der Höhe abhängt, dieses ist besonders für H_2O realistischer als die Verwendung eines Mittelwertes, kann mit den Definitionen

$$h := \frac{d \ln q}{dz} \simeq \frac{\Delta \ln q}{\Delta z} \quad ; \quad r := \frac{d \ln \rho}{dz} \simeq \frac{\Delta \ln \rho}{\Delta z} \quad (20)$$

die Integration analytisch vorgenommen werden.

Zunächst wird h zwischen z und z_2 integriert. Einsetzen in Gl. 11 ergibt dann

$$d\tau = \bar{k}_\nu \frac{q_2}{g} e^{h(z-z_2)} dp .$$

Mit der weiteren Annahme, daß für die Schicht das hydrostatische Gleichgewicht gilt (mit Einsetzen des zwischen z und z_2 integrierten r)

$$dp = -\rho g dz = -\rho_2 g e^{r(z-z_2)} dz , \quad (21)$$

ist nach Integration und Potenzieren

$$\left[-\frac{r}{\rho_2 g}(p - p_2) + 1\right]^{h/r} = e^{h(z-z_2)} . \quad (22)$$

Mit den Substitutionen

$$a = -\frac{r}{\rho_2 g} ; \quad n = \frac{h}{r} ; \quad b = -ap_2 + 1 ; \quad D = a(p_1 - p_2) + 1$$

wird die integrale Gleichung für die optische Dicke umgeformt.

$$\int_{\tau_2}^{\tau_1} d\tau = \int_{p_2}^{p_1} \bar{k}_\nu \frac{q_2}{g} [ap' + b]^n dp' \quad (23)$$

Schließlich erhält man die optische Dicke der Schicht, wobei zwei Fälle zu beachten sind.

$$n \neq -1 : \quad \Delta\tau = \bar{k}_\nu \frac{q_2}{g} \frac{1}{a(n+1)} (D^{n+1} - 1) \quad (24)$$

$$n = -1 : \quad \Delta\tau = \bar{k}_\nu \frac{q_2}{g} \frac{1}{a} \ln(D) \quad (25)$$

Für die Kontinuumabsorption des Wasserdampfs erhält man die optische Dicke einer Schicht, indem die Gleichungen (11) und (17) kombiniert werden, wobei mit e der Partialdruck des Wasserdampfs bezeichnet ist:

$$d\tau = C_s^0(\nu, T) \{e + \gamma(p - e)\} \frac{q}{g} dp \quad (26)$$

Für die Berechnung des Koeffizienten C_s^0 muß nur vorausgesetzt werden, daß T in der Schicht konstant ist. Die Druckabhängigkeit hingegen kann explizit berücksichtigt werden.

Indem wieder eine exponentielle Höhenabhängigkeit von Konzentration und Luftdichte angenommen wird und die Näherung $e \simeq qp/0,622$ angewandt wird, ergibt sich ähnlich zum vorherigen:

$$\Delta\tau \approx s(1 - \gamma) \int_{p_2}^{p_1} p' [ap' + b]^{2n} dp' + t \int_{p_2}^{p_1} p' [ap' + b]^n dp' , \quad (27)$$

mit

$$s = C_s^0(\nu, \bar{T}) \frac{q_2^2}{0.622g} \quad \text{und} \quad t = C_s^0(\nu, \bar{T}) \frac{\gamma q_2}{g} .$$

Es sind vier Fälle zu beachten und man erhält die Differenz der optischen Dicke der Schicht entsprechend Gleichung (28), (29), (30) bzw. (31).

$$n \neq -1, \neq -2, \neq -\frac{1}{2}$$

$$\begin{aligned} \Delta\tau \approx & \frac{s(1-\gamma)}{a^2} \left\{ \frac{1}{2n+2} (D^{2n+2} - 1) - \frac{b}{2n+1} (D^{2n+1} - 1) \right\} \\ & + \frac{t}{a^2} \left\{ \frac{1}{n+2} (D^{n+2} - 1) - \frac{b}{n+1} (D^{n+1} - 1) \right\} \end{aligned} \quad (28)$$

$$n = -1 :$$

$$\begin{aligned} \Delta\tau \approx & \frac{s(1-\gamma)}{a^2} \left\{ \ln(D) + b \left(\frac{1}{D} - 1 \right) \right\} \\ & + \frac{t}{a^2} \left\{ a(p_1 - p_2) - b \ln(D) \right\} \end{aligned} \quad (29)$$

$$n = -2 :$$

$$\begin{aligned} \Delta\tau \approx & \frac{s(1-\gamma)}{a^2} \left\{ \frac{1}{2n+2} (D^{2n+2} - 1) - \frac{b}{2n+1} (D^{2n+1} - 1) \right\} \\ & + \frac{t}{a^2} \left\{ \ln(D) + b \left(\frac{1}{D} - 1 \right) \right\} \end{aligned} \quad (30)$$

$$n = -\frac{1}{2} :$$

$$\begin{aligned} \Delta\tau \approx & \frac{s(1-\gamma)}{a^2} \left\{ a(p_1 - p_2) - b \ln(D) \right\} \\ & + \frac{t}{a^2} \left\{ \frac{1}{n+2} (D^{n+2} - 1) - \frac{b}{n+1} (D^{n+1} - 1) \right\} \end{aligned} \quad (31)$$

Obwohl die hier erläuterte Bestimmung der optischen Dicke einer Schicht kompliziert zu sein scheint, ist sie für einen Computerlauf nicht unökonomisch, da sie für alle Schichten im voraus berechnet werden kann. Lediglich die Koeffizienten \bar{k}_ν und $C_s^0(\nu, \bar{T})$ sind abhängig von der Wellenzahl.

3.3.1

Einfluß der Numerik auf die Berechnung der Absorptionskoeffizienten

Die Integration des Voigtprofils in Form von Gl. 14 ist sehr zeitaufwendig, so daß unterschiedliche, approximierende Algorithmen vorgeschlagen worden sind. Der Algorithmus von Armstrong (1967) ist bis zur sechsten Kommastelle genau, aber auch zeitaufwendig. Von Armstrongs Arbeit ausgehend haben Drayson (1976) und Pierluissi et al. (1977) schnellere Algorithmen vorgeschlagen, die aber auch ungenauer sind. Andere Methoden mit teilweise intuitiven Annahmen sind von Whiting (1968) und Matveyev (1972) entwickelt worden.

Um die erwähnten Algorithmen hinsichtlich der Rechenzeit sowie der Genauigkeit zu vergleichen, sind verschiedene Computerläufe durchgeführt worden. Dazu sind für alle Algorithmen eigene Programm-Unterroutinen eingerichtet worden, wobei die aus den Veröffentlichungen von Armstrong und Drayson stammenden Programmanweisungen modifiziert worden sind. Solche Teile, die nur zur Initialisierung benötigt werden, sind herausgenommen und im voraus berechnet worden.

Die Rechnungen erfolgten für eine künstliche Spektrallinie bei $\nu_0 = 2400 \text{ cm}^{-1}$, wobei beim Linienzentrum beginnend bis zu der Entfernung vom Zentrum $\Delta\nu=1 \text{ cm}^{-1}$ der Absorptionskoeffizient an einer vorgegebenen Anzahl von Stützstellen berechnet worden ist. Zwei Läufe sind mit $T = 300 \text{ K}$ und mit $p = 1 \text{ hPa}$ bzw. $p = 1000 \text{ hPa}$ durchgeführt worden. Die benötigte Rechenzeit ist für jeden Algorithmus (inklusive des Aufrufs der Unterroutinen) bestimmt worden. Der Quotient aus den einzelnen Rechenzeiten und der von Armstrongs Algorithmus benötigten Zeit ist berechnet worden und in Tabelle 2 aufgelistet. Zum Vergleich ist der Quotient aus der Rechenzeit für das Lorentzprofil mit aufgenommen worden.

Tabelle 2:
Quotient von Rechenzeiten zur Bestimmung des Voigtprofils
bezogen auf Armstrongs Algorithmus.

Autoren	$p = 1 \text{ hPa}$	$p = 1000 \text{ hPa}$
Armstrong (1968)	1.000	1.000
Drayson (1976)	0.403	0.334
Pierluissi et al. (1977)	0.459	0.271
Matveyev (1972)	0.607	0.701
Whiting (1968)	0.402	0.448
Lorentzprofil	0.151	0.174

In Abb. 3 ist die relative Abweichung der Absorptionskoeffizienten der einzelnen Näherungen von Armstrongs Näherung in Abhängigkeit von der Entfernung vom Linienzentrum aufgetragen. Für alle Abstände ist eine sehr gute Übereinstimmung mit Draysons Algorithmus vorhanden. Ähnliches gilt für den Algorithmus von Pierluissi et al. bis auf einen engen Bereich beim Abstand $\Delta\nu = 0,014 \text{ cm}^{-1}$, wo die Abweichung Werte bis zu -28% erreicht. Aus diesem Grund wird für die Berechnung des Voigtprofils in den Modellen Draysons Algorithmus angewandt, da zudem der Rechenzeitbedarf der Algorithmen von Drayson und Pierluissi et al. in etwa gleich groß ist.

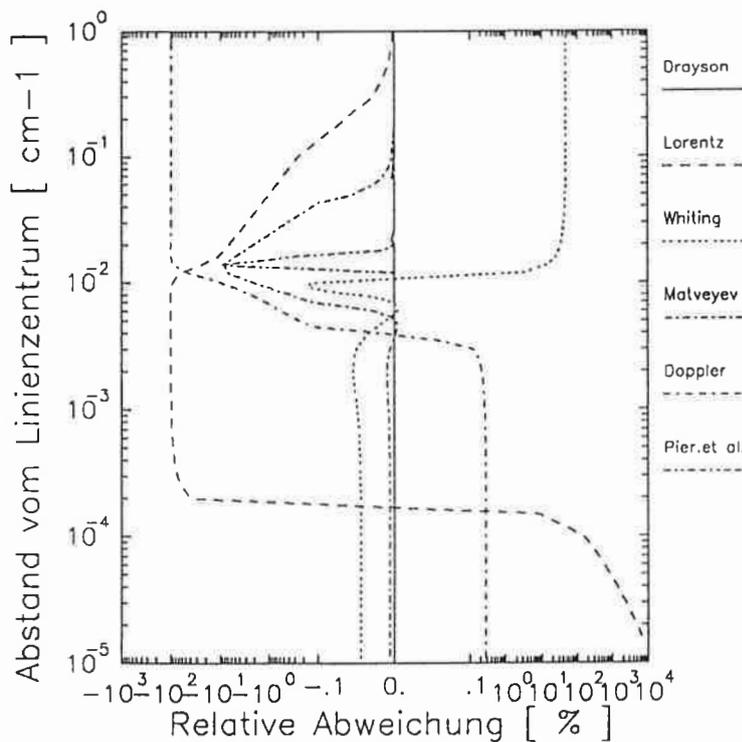


Abb. 3: Relative Abweichung der Absorptionskoeffizienten unterschiedlicher Näherungen des Voigtprofils von der Näherung nach Armstrong (1967) in Abhängigkeit von der Entfernung vom Zentrum einer künstlichen Linie bei $\nu_0 = 2400 \text{ cm}^{-1}$, $p = 1 \text{ hPa}$ und $T = 320 \text{ K}$.

Die Rechenzeit für das Lorentzprofil ist gegenüber Draysons Algorithmus um etwa den Faktor 2 günstiger, so daß die Verwendung der Lorentzform vorteilhaft ist, wann immer dies seitens der erzielten Genauigkeit möglich ist. Aus Abb. 3 ist ersichtlich, daß das Lorentzprofil für Entfernungen größer als 1 cm^{-1} vom Zentrum, wo die Annäherung zwischen beiden Profilen bereits weit fortgeschritten ist, eine ausreichend gute Übereinstimmung mit dem Voigtprofil liefert.

Um den größtmöglichen Fehler im IR abzuschätzen, der entstehen würde, wenn das Lorentz- anstelle des Voigtprofils Anwendung fände, sind für einen Vergleich die atmosphärischen und spektralen Bedingungen so gewählt worden, daß die Annäherung beider Profile möglichst weit vom Linienzentrum entfernt liegt. Wie Testrechnungen gezeigt haben, ist dies der Fall für hohe Temperaturen, geringe Drücke und hohe Wellenzahlen. Die Abhängigkeit von der Lorentzhalbwidthbreite ist dabei von untergeordneter Rolle.

Die Abschätzungen sind für alle sieben atmosphärischen Hauptabsorber getrennt durchgeführt worden, wobei künstliche Linien mit einer Wellenzahl aus der im IR jeweils kurzwelligsten Bande verwendet worden sind. Die resultierenden prozentualen Abweichungen zwischen beiden Profilen sind für $T = 320 \text{ K}$ und $p = 1 \text{ hPa}$ in Abb. 4 dargestellt.

Der Abstand vom Linienzentrum, für den die relative Abweichung zwischen dem Lorentz- und dem Voigtprofilflügel kleiner als 1 % ist und wegen der Annäherung der Profile im Flügel für größere Abstände auch kleiner bleibt, ist in Tabelle 3 aufgeführt.

Für größere Entfernungen als den in Tabelle 3 angegebenen wird in den Modellen dieser Arbeit das Lorentz- anstelle des Voigtprofils benutzt, wobei aufgrund der oben durchgeführten Diskussion der Fehler bei der Berechnung des Absorptionskoeffizienten einer starken Linie im ungünstigsten Fall 1 % betragen kann. Aufgrund der Überlappung aller Linien ist der Fehler jedoch bei den meisten spektralen Absorptionskoeffizienten kleiner.

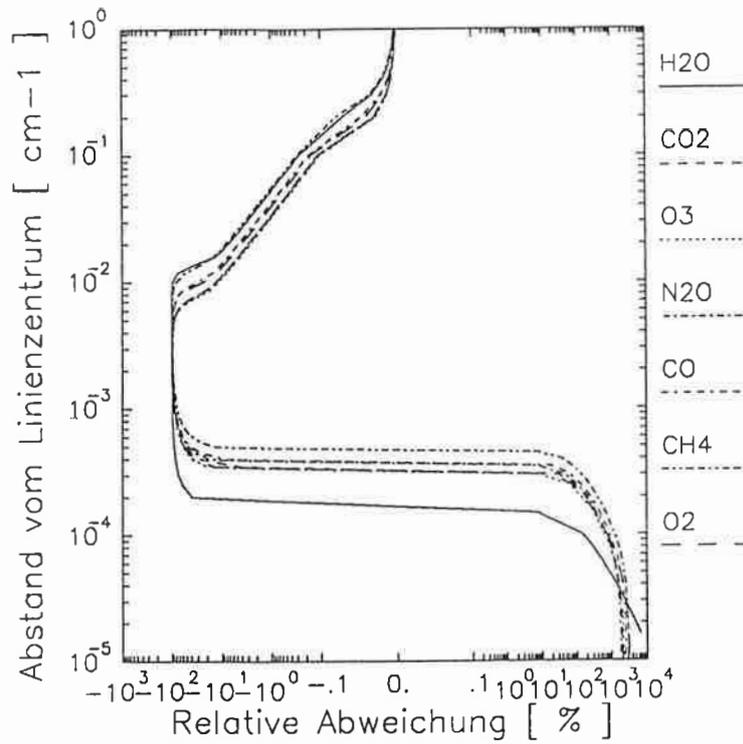


Abb. 4 : Relative Abweichung der Absorptionskoeffizienten zwischen dem Lorentz- und dem Voigtprofil für die angegebenen Moleküle als Funktion der Entfernung von den Zentren künstlicher Absorptionslinien an den Spektralstellen ν_0 aus Tabelle 3.

Tabelle 3:

Abstand $\Delta\nu$ vom Linienzentrum ν_0 , bei dem die Abweichung zwischen dem Lorentz- und dem Voigtprofil $< 1\%$ ist.

	ν_0 [cm ⁻¹]	$\Delta\nu$ [cm ⁻¹]
H ₂ O :	2300	.052
CO ₂ :	2400	.036
O ₃ :	2300	.032
N ₂ O :	2500	.036
CO :	2400	.044
CH ₄ :	2500	.060
O ₂ :	1700	.030

Teil 2: Linie-für-Linie Modelle

4

Spektrale Auflösung

Die Genauigkeit der berechneten Strahlungsflüsse und Abkühlungsraten hängt nicht nur davon ab, wie exakt die Absorptionskoeffizienten bestimmt werden, sondern auch von einer geeignet gewählten spektralen Auflösung. Im folgenden wird der Einfluß der Einteilung des Spektrums und der Ordnung des verwendeten, numerischen Integrationschemas untersucht.

4.1

Einteilung des infraroten Spektrums

Die einfachste spektrale Auflösung besteht in einer Unterteilung des IR in sehr kleine Intervalle konstanter Breite. Falls z.B. als numerische Integrationsmethode die Trapezregel angewandt werden würde, müßten einige Millionen Stützstellen berücksichtigt werden. Wobei erreicht wird, daß in den zentralen Bereichen jeder Linie mindestens zwei Stützstellen liegen, so daß die Teilintervalle für stratosphärische Bedingungen eine Breite von etwa 10^{-4} cm^{-1} für große Wellenlängen und etwas größere Teilintervalle für kleinere Wellenlängen haben (aufgrund der Frequenzabhängigkeit der Voigthalbwertsbreite).

Im folgenden wird ein spektrales Auflösungschema beschrieben, bei dem die Stützstellenabstände variabel sind. Die Bereiche nahe der Linienzentren werden hoch aufgelöst, Flügelbereiche hingegen niedrig. Hierdurch wird die Anzahl der Stützstellen gegenüber einer hohen Auflösung mit sehr kleiner, konstanter Schrittweite verringert. Dieses Verfahren wird als ASLV-Auflösung bezeichnet (Auflösung des Spektrum entsprechend der spektralen LinienVerteilung).

Die ASLV-Auflösung erfolgt jedoch nicht für alle Absorptionslinien, da dies eine zu große Stützstellenanzahl zur Folge hätte. Vielmehr wird das IR unterteilt und für jeden Teilbereich werden die Absorptionsbanden angegeben, deren Linien zur Bestimmung der Stützstellen herangezogen werden sollen. Für jede dieser Banden werden dann die Stützstellen entsprechend der ASLV-Auflösung bestimmt. Erfolgt in einem Teilbereich die Angabe von mehr als einer Absorptionsbande, so werden die Stützstellen aller benutzt, die sich aus der ASLV-Auflösung für die einzelnen Banden ergeben. Für die Berechnung der Transmission werden jedoch

der Transmission werden jedoch auch die Absorptionsbanden herangezogen, die zur Bestimmung der Stützstellen nicht verwendet werden.

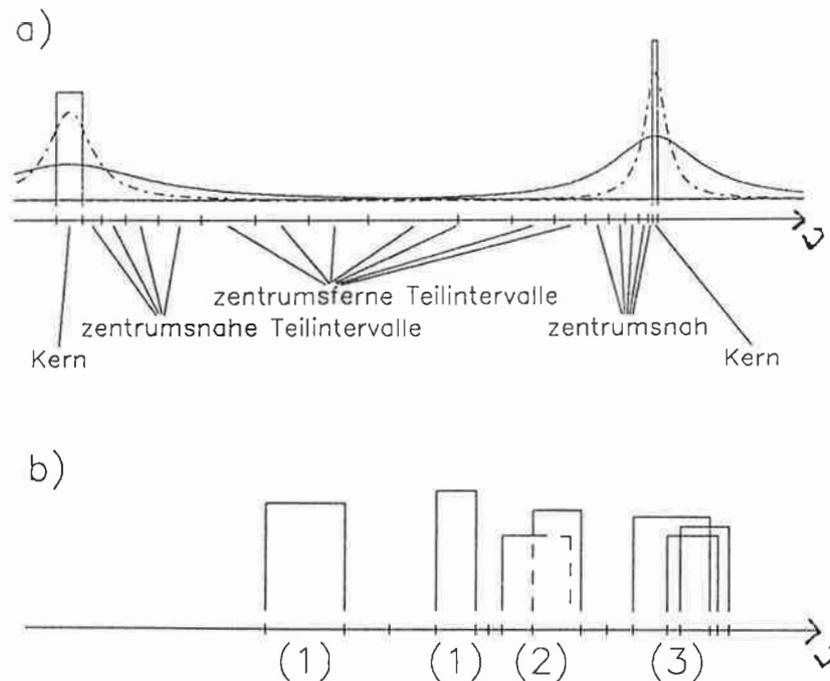


Abb. 5: Stützstellen bei der ASLV-Auflösung.

a) Schematische Darstellung der Spektralauflösung zwischen zwei Absorptionslinien. Die durchgezogene Kurve symbolisiert Profile bei hohem Druck, die punktgestrichelte bei niedrigem Druck. Die beiden Rechtecke kennzeichnen die Kerne.

b) Schematische Darstellung der Stützstellen aufgrund der Überlappung unterschiedlich vieler Linienkerne mit isolierten Kernen (1), paarweiser Überlappung (2) und Überlappung von mehr als zwei Kernen (3). Markierungen auf der Achse bezeichnen die resultierenden Stützstellen.

Zunächst wird erläutert, wie der Bereich zwischen zwei Absorptionslinien in drei Typen von Teilintervallen gegliedert wird (Abb. 5 a):

- **Linienkerne:** Unmittelbar um das Linienzentrum liegt der Linienkern. Die Breite des Kerns ist prinzipiell frei wählbar. Fels (1979) schlägt vor, daß der Zentralbereich von Voigtprofilen näherungsweise durch ein Rechteck beschrieben werden kann. Im folgenden wird als Kernbreite das Zweifache der Voigthalbwertsbreite für die Druck- und Temperaturbedingungen am

Oberrand der Modellatmosphäre verwendet. Nach Posener (1959) ist die Voigthalbwertsbreite näherungsweise gegeben durch

$$\alpha_v \approx (\alpha_L^2 + \alpha_D^2)^{\frac{1}{2}} . \quad (32)$$

(Die Annahme, daß das Voigtprofil in dem Zentralbereich eine nahezu rechteckige Form besitzt, trifft lediglich für große Wellenzahlen zu [siehe auch Abb. 23 auf Seite 77]. Im IR werden die Linienkerne jedoch bereits in der Stratosphäre mit zunehmendem Druck immer breiter, dies gilt insbesondere für die Rotationslinien des Wasserdampfs.)

- **Zentrumsnahe Teilintervalle:** Bezeichnung für Teilintervalle, die zwischen der Flanke des Kerns und der Lorentzhalbhwertsbreite bei $p = 1013 \text{ hPa}$ und $T = 296 \text{ K}$ liegen.
- **Zentrumsferne Teilintervalle:** Bezeichnung für Teilintervalle, die in den Linienflügeln außerhalb von $\alpha_L(1013 \text{ hPa}, 296 \text{ K})$ liegen.

Im Modell werden die Stützstellen der ASLV-Auflösung für einen Absorber in folgenden Schritten bestimmt:

- a) Die Wellenzahl der Zentren wird aus dem Linienparameterkatalog herausgelesen und die jeweiligen Voigthalbwertsbreiten werden für den Druck und die Temperatur am Oberrand der Modellatmosphäre bestimmt.
- b) Der Abstand der Flanken vom Zentrum der Linienkerne ist durch die Voigthalbwertsbreite gegeben.
- c) Es wird unterschieden, ob die Flanken zu isolierten Kernen, zu zwei sich überlappenden Kernen oder zu mehr als zwei überlappenden Kernen gehören. Die Wellenzahlen der Flanken von isolierten Kernen werden als Stützstellen verwendet. Die paarweise überlappenden Kerne werden durch drei Stützstellen aufgelöst, wobei die Flanken des Kerns mit der größeren Linienstärke zwei Stützstellen liefert und der schwächere Kern eine Stützstelle durch die nichtüberlappte Flanke (siehe Abb. 5 b). Bei mehr als zwei überlappenden Kernen werden alle Flanken als Stützstellen verwendet. Solche Anordnungen von Kernen sind im IR selten und der rechnerische Aufwand, die Anzahl der Stützstellen entsprechend der Linienstärken zu reduzieren, wäre größer als die Verwendung aller Kernflanken.

d) Tritt bei zwei benachbarten Kernen keine Überlappung auf, dann wird der Bereich zwischen ihnen halbiert und die Stützstellen werden wie folgt ermittelt (siehe Abb. 5 a): Der Abstand der an die Kerne rechts bzw. links anschließenden Stützstellen wird bestimmt, indem der Logarithmus der jeweiligen Kernbreite um ein für alle Linien konstantes Inkrement vergrößert wird. Der Abstand der folgenden Stützstellen wird dann analog bestimmt bis die Mitte zwischen den Kernen erreicht ist. Um zu verhindern, daß zu große Stützstellenabstände entstehen, wird im Modell ein maximaler Stützstellenabstand von $0,1 \text{ cm}^{-1}$ vorgeschrieben.

Bei der Bestimmung der Breiten der Linienkerne muß man sich nicht notwendigerweise auf das Zweifache der Voigthalbwertsbreiten beschränken. Eine wesentlich höhere Auflösung der Zentralbereiche der Spektrallinien wird erreicht, wenn z.B. die Breite gleich dem Zweifachen der Lorentzhalbwidthbreite bei geringem Druck gesetzt wird.

Ein Vergleich ist zwischen der ASLV-Auflösung und der spektralen Auflösung mit konstanter Schrittweite innerhalb von L-f-L Rechnungen für drei verschiedene Spektralbereiche durchgeführt worden: Teil der Rotationsbande des Wasserdampfs ($400 - 410 \text{ cm}^{-1}$; nur H_2O Linien sind berücksichtigt), Teil der $15 \mu\text{m}$ Bande des Kohlendioxids ($620 - 630 \text{ cm}^{-1}$; CO_2 und H_2O) und Teil der $9.6 \mu\text{m}$ Bande des Ozons ($1000 - 1010 \text{ cm}^{-1}$; O_3 , CO_2 , und H_2O inklusive der Kontinuumabsorption).

Alle Linien sind bei der Entfernung von $\Delta\nu = 10 \text{ cm}^{-1}$ von ihrem Zentrum abgeschnitten worden (d.h. außerhalb dieses Bereichs ist $k_\nu = 0$ angenommen). Für die numerische Integration über den Zenitwinkel ist eine Gauß Quadratur vierter und über die Wellenzahl achter Ordnung angewandt worden. Die Rechnungen erfolgten für den Sommer der mittleren Breiten.

In Abb. 6 sind die relativen Abweichungen der abwärtsgerichteten Strahlungsflüsse und der Abkühlungsraten aufgrund unterschiedlicher Auflösungen von den Ergebnissen mit der ASLV-Auflösung mit der Kernbreite $2\alpha_L$ ($p=1\text{hPa}$, $T=296\text{K}$) dargestellt. Hierbei führt die ASLV-Auflösung mit der Kernbreite $2\alpha_\nu$ auf die gestrichelten Kurven, die Auflösung mit dem konstanten Stützstellenabstand von $0,001 \text{ cm}^{-1}$ auf die durchgezogenen und mit dem konstanten Abstand von $0,01 \text{ cm}^{-1}$ auf die gepunkteten.

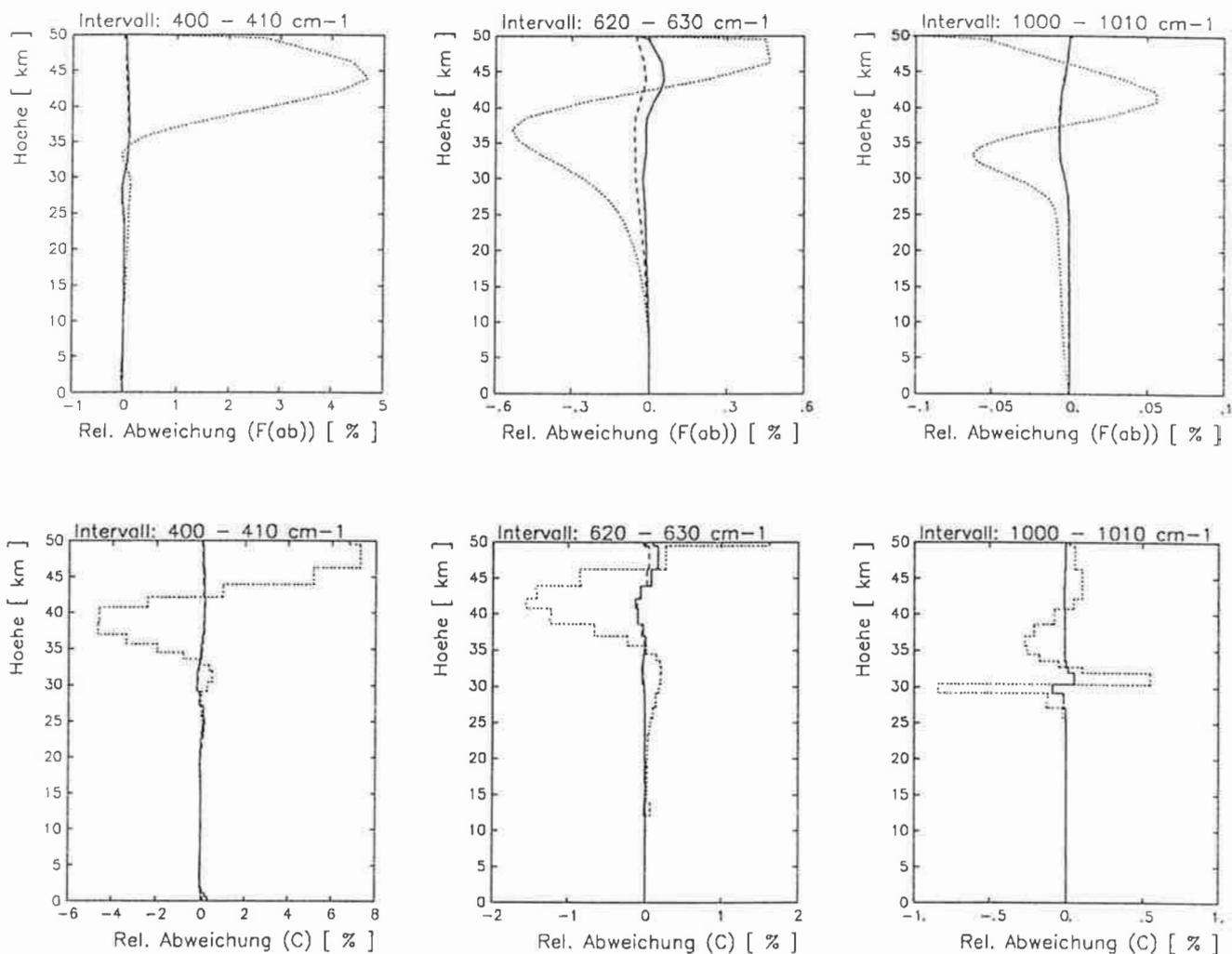


Abb. 6: Vergleich unterschiedlicher Methoden, das Spektrum aufzulösen. Relative Abweichungen der abwärtsgerichteten Strahlungsflüsse $F(ab)$ (oben) und Abkühlungsraten C (unten) bezogen auf die ASLV-Auflösung mit $2\alpha_L(p = 1hPa, T = 296K)$ als Linienkernbreite. Die Integration zwischen den Stützstellen erfolgte in allen Fällen mit der Gauß Quadratur achter Ordnung.

- Auflösung mit dem konstanten Stützstellenabstand von $0,001\text{ cm}^{-1}$
- - - - ASLV-Auflösung mit $2\alpha_v$ als Kernbreite am Atmosphärenoberrand
- Auflösung mit dem konstanten Abstand von $0,01\text{ cm}^{-1}$

Die Übereinstimmung der Ergebnisse in der Troposphäre ist für alle Auflösungsschemata sehr gut. Dies gilt auch in der Stratosphäre, mit Ausnahme für die Auflösung mit dem konstanten Stützstellenabstand von $0,01 \text{ cm}^{-1}$ (gepunktete Kurve), wobei die größten Abweichungen im Bereich der Rotationsbande des Wasserdampfs ($400 - 410 \text{ cm}^{-1}$) mit Werten bis zu 5 % für F^{\downarrow} und 8 % für die Abkühlungsraten auftreten. Der Einfluß des Wasserdampfs in der Stratosphäre ist jedoch von untergeordneter Bedeutung, da Strahlungsflußänderungen und Abkühlungsraten im IR in der Stratosphäre von Kohlendioxyd und Ozon dominiert werden. Der Bereich mit CO_2 Linien von $620 - 630 \text{ cm}^{-1}$ weist jedoch in der Stratosphäre bei der Auflösung mit dem Abstand von $0,01 \text{ cm}^{-1}$ maximale Abweichungen von weniger als $\pm 0,6 \%$ für den Strahlungsfluß und von weniger als $\pm 1,5 \%$ für die Abkühlungsraten auf, was tolerierbar erscheint.

4.2

Variation der Ordnung der spektralen Gauß Quadratur

Wie bereits erwähnt, wird die Genauigkeit berechneter Strahlungsflüsse und Abkühlungsraten durch die Ordnung der Gauß Quadratur beeinflusst. Dabei werden die Bereiche zwischen den im vorherigen Abschnitt erläuterten Stützstellen entsprechend der Ordnung der Quadratur mit weiteren Stützstellen versehen. Würde für bestimmte Spektralbereiche eine Quadratur mit niedriger Ordnung ausreichen, so hätte die Anwendung einer hohen Ordnung unnötig viele Stützstellen zur Folge.

Mit dem L-f-L Modell mit der ASLV-Auflösung wird eine Reduzierung der Rechenzeit angestrebt, indem auf die Linienkerne, die zentrumsnahen und zentrumsfernen Teilintervalle (Abb. 5 a) unterschiedliche Ordnungen der Quadratur angewandt werden. Da die Absorptionslinienprofile in den Kernen und in den zentrumsfernen Teilintervallen bei unveränderter Temperatur und konstantem Druck spektral wenig variabel sind, kann man davon ausgehen, daß dort eine niedrige Ordnung genügt. Die Profile in den zentrumsnahen Teilintervallen sind jedoch spektral stark variabel, so daß hier eine hohe Ordnung nötig ist.

Für die drei Teilintervalltypen sind mit L-f-L Rechnungen mit der ASLV-Auflösung (Kernbreite $2\alpha_v$ in ca. 50 km Höhe) verschiedene Ordnungen der Gauß Quadratur getestet worden. Dabei ist in den jeweils nicht getesteten Teilintervalltypen die Gauß Quadratur achter Ordnung angewandt worden. In Abb. 7 sind die Abweichungen der Ergebnisse mit der Anwendung der fünften Ordnung für die

Kerne als durchgezogene Kurven, für die zentrumsnahen Teilintervalle gestrichelt und für die zentrumsfernen gepunktet von den Ergebnissen mit der Anwendung der achten Ordnung dargestellt worden.

Aus Abb. 7 ist ersichtlich, daß die zentrumsnahen Teilintervalle die größte Empfindlichkeit gegenüber Änderungen der Ordnung bei der Gauß Quadratur aufweisen. Dies ist leicht verständlich, da in diesen Entfernungen von den Linienzentren sich die steilen Flanken der Absorptionslinienprofile befinden. Falls also an Strahlungstransportrechnungen hohe Anforderungen hinsichtlich der Genauigkeit gestellt werden, ist für die zentrumsnahen Teilintervalle eine hohe Ordnung bei der Gauß Quadratur erforderlich. Jedoch sollten für breite Spektralbereiche die hier auftretenden Abweichungen von weniger als 0,5 % bei F^1 und weniger als 0,7 % bei den Abkühlungsraten infolge der Anwendung der Gauß Quadratur fünfter Ordnung genügen.

Die Variation des Ordnungsgrades der Gauß Quadratur in den zentrumsfernen Teilintervallen ergibt im Spektralbereich $400 - 410 \text{ cm}^{-1}$ Abweichungen (gepunktete Kurven), die für F^1 kleiner als 0,1 % und für die Abkühlungsraten kleiner als $\pm 0,4 \%$ sind. In den beiden anderen Spektralbereichen kann keine Aussage über den Einfluß getroffen werden, da dort aufgrund der hohen spektralen Liniendichte der Abstand zwischen zwei Linien in der Regel klein ist, so daß kaum zentrumsferne Teilintervalle vorhanden sind.

Die durchgezogenen Kurven in Abb. 7 zeigen, daß für die Linienkerne keine nennenswerten Abweichungen zwischen den Ergebnissen bei Anwendung der achten und der fünften Ordnung in den dargestellten Spektralbereichen existieren.

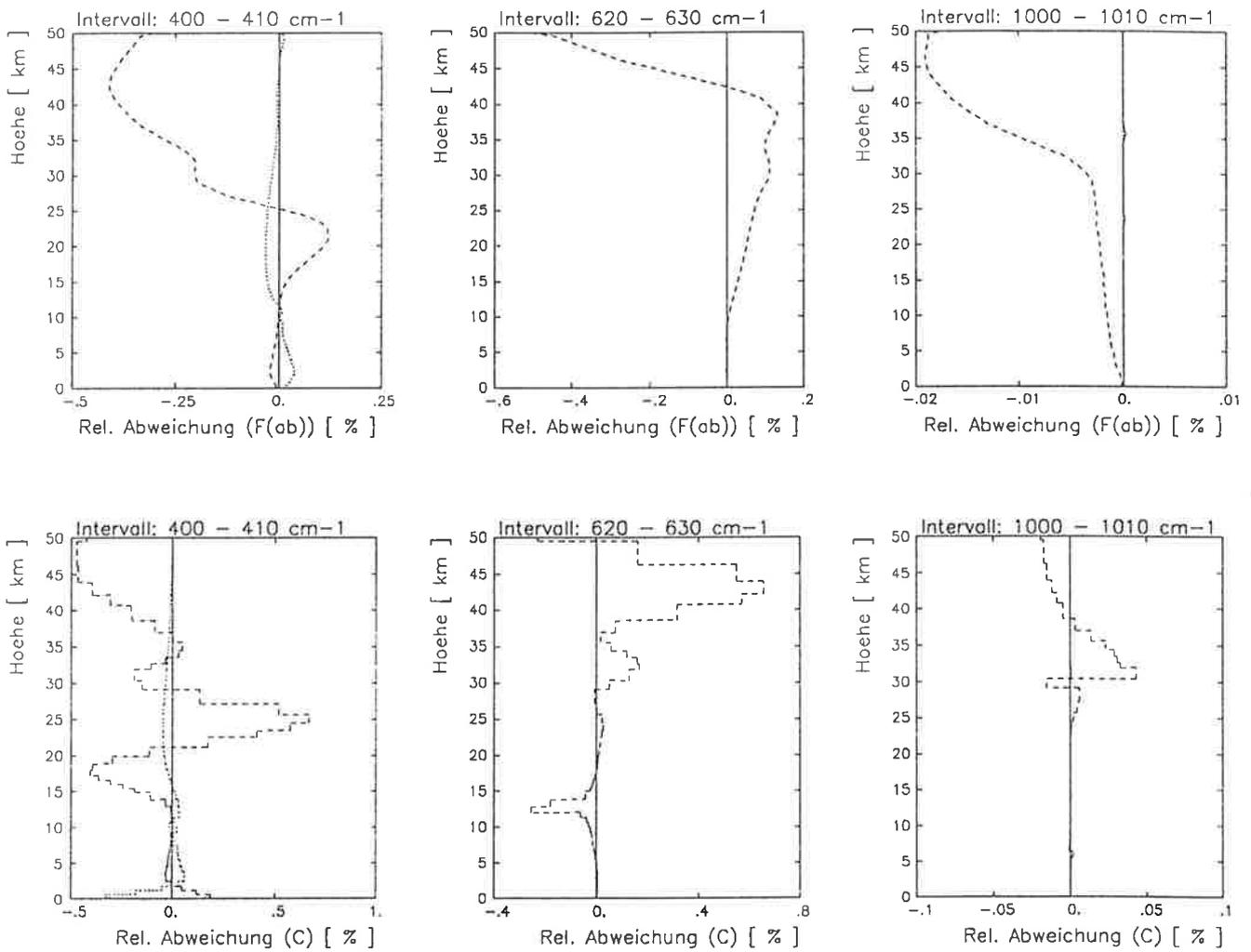


Abb. 7: Variation der Ordnung der Gauß Quadratur (OGQ) für Kerne, zentrumsnahe und zentrumsferne Teilintervalle: Darstellung relativer Abweichungen von abwärtsgerichteten Strahlungsflußdichten $F(ab)$ und Abkühlungsraten C mit der Anwendung der achten Ordnung in allen Teilintervallen: durchgezogene Kurve mit OGQ(Kern: 5, nah: 8, fern: 8), gestrichelt mit OGQ(8,5,8) und gepunktet mit OGQ(8,8,5).

Bisher ist der Einfluß unterschiedlicher Auflösungen bei hoher Ordnung der Gauß Quadratur bzw. variierter Ordnung bei hoher Auflösung für drei kleine Spektralbereiche diskutiert worden. In einem größeren Spektralbereich (1100 – 1500 cm^{-1}) sind Rechnungen mit der Anwendung der ASLV-Auflösung mit der Kernbreite $2\alpha_v$ in ca. 50 km Höhe mit der Gauß Quadratur fünfter Ordnung in den Kernen, achter in den zentrumsnahen und fünfter in den zentrumsfernen Teilintervallen durchgeführt worden. Der Vergleich mit Rechnungen bei Anwendung der Auflösung mit dem konstanten Stützstellenabstand von $0,01 \text{ cm}^{-1}$ mit der Gauß Quadratur achter Ordnung ergibt für die Strahlungsflüsse und Abkühlungsraten keine nennenswerten Unterschiede. Daher wird im folgenden die spektrale Auflösung mit dem konstanten Stützstellenabstand von $0,01 \text{ cm}^{-1}$ und der Gauß Quadratur achter Ordnung verwendet.

Für Betrachtungen in sehr engen Spektralbereichen mit notwendiger hoher Auflösung, wie sie z.B. bei Anwendung von Lasern in der Meteorologie gegeben sind, kann jedoch die Anwendung der ASLV-Auflösung ökonomisch von Interesse sein.

5

Strahlungsübertragung im IR

Für die Strahlungstransportrechnungen, deren Ergebnisse im folgenden betrachtet werden, sind die im L-f-L Modell vorgenommenen Festlegungen der physikalischen Größen und die numerischen Umsetzungen der Gleichungen noch einmal zusammengefaßt :

- Die Berücksichtigung des Voigtprofils erfolgt durch die in Abschnitt 3.3.1 erläuterten Approximationen. Sämtliche Spektrallinien werden bei der Entfernung von 10 cm^{-1} vom Linienzentrum abgeschnitten.
- In dem atmosphärischen Fenster zwischen 8 und $14 \mu\text{m}$ wird der Kontinuumabsorptionskoeffizient des Wasserdampfs nach Roberts et al. (1976) zusätzlich zu dem L-f-L berechneten Absorptionskoeffizienten berücksichtigt.
- Die numerische Integration über den Kosinus des Zenitwinkels wird mit der Gauß Quadratur vierter Ordnung durchgeführt.
- Die spektrale Auflösung erfolgt mit Stützstellen mit dem konstanten Abstand von $0,01 \text{ cm}^{-1}$. Die Integration dazwischen erfolgt mit der Gauß Quadratur achter Ordnung.
- Die Atmosphäre ist in planparallele Schichten aufgeteilt, wobei die in Abschnitt 3.1 aufgeführten Drücke an den Schichtgrenzen verwendet werden. Die Dichten des Wasserdampfs und des Ozons werden der jeweils zugrundeliegenden Modellatmosphäre (d.h. für die Tropen, den Sommer der mittleren Breiten oder den subarktischer Winter nach McClatchey et al., 1978) entnommen. Für die Gase mit konstantem Mischungsverhältnis werden folgende Konzentrationen angewandt: CO_2 : 300 ppm; N_2O : 0,28 ppm; CO: 0,75 ppm; CH_4 : 1,75 ppm, und O_2 : 20,95 %.
- Die optische Dicke von Gasen mit konstanter Konzentration wird mit Gl. (19) und von Wasserdampf und Ozon mit Gl. (24) und (25) berechnet, wobei eine exponentielle Höhenabhängigkeit der Konzentrationen in jeder Schicht vorausgesetzt wird. Die optische Dicke der Kontinuumabsorption des Wasserdampfs wird mit den Gleichungen (28) bis (31) bestimmt.

5.1

Vergleich mit der ICRCCM Studie

In der ICRCCM Studie (InterComparison of Radiation Codes in Climate Models; WMO 1984) werden unter anderem die Ergebnisse von verschiedenen L-f-L Modellen für unterschiedliche Atmosphären und Absorber diskutiert. Der Vergleich mit den Ergebnissen des in dieser Arbeit vorgestellten L-f-L Modells (MPI. Bezeichnungen der L-f-L Modelle siehe Fußnoten 2 - 6 in Tabelle 4) wird beschränkt auf Strahlungsflußdichten für den Sommer der mittleren Breiten mit der Absorption von a) H₂O (nur Linien), b) CO₂ (nur Linien), c) O₃ (nur Linien) und d) mit der gesamten Absorption im IR durch CO₂, O₃, H₂O (mit Kontinuumabsorption), CH₄ und N₂O.

Aus Tabelle 4 geht hervor, daß die Übereinstimmung der Strahlungsflußdichten zwischen allen L-f-L Modellen gut ist, wenn jeweils nur ein Absorber wirkt. Lediglich die vom MPI Modell berechnete abwärtsgerichtete Strahlungsflußdichte der 14 μ m Bande des Ozons am Boden weicht von den Werten aus der ICRCCM Studie ab. Jedoch benutzen die L-f-L Modelle verschiedene Linienparameterdateien. Zwischen der AFGL Version von 1980, die von GLAS und GFDL benutzt worden ist, und der im MPI Modell verwendeten Version von 1986, sind Modifizierungen bestehender Parameter vorgenommen und u.a. eine neue Ozonbande hinzugefügt worden.

Der Vergleich der Strahlungsflußdichten für den Fall, daß nur Wasserdampflinien ohne Kontinuumabsorption angewandt werden, zeigt, daß das MPI mit dem GLAS Modell wesentlich besser übereinstimmt als mit dem LMD Modell. Dies ist möglicherweise darauf zurückzuführen, daß im MPI und GLAS Modell numerisch über den Zenitwinkel integriert wird und die Absorptionslinien beim Abstand von 10 cm⁻¹ vom Linienzentrum abgeschnitten werden. Im LMD Modell wird dagegen der Diffusivitätsfaktor $\beta = 1,66$ und das Abschneidekriterium $800 \times \alpha_L$ verwendet, d.h. die Reichweite der Wasserdampflinien mit großer Halbwertsbreite (ca. 0,1 cm⁻¹) beträgt in der unteren Troposphäre bis zu 80 cm⁻¹.

Tabelle 4

Vergleich L-f-L berechneter Strahlungsflußdichten (W/m^2)
der ICRCCM Studie mit Ergebnissen des MPI Modells.

Atmosphäre: Sommer der mittleren Breiten

Modell	F_{Boden}^{auf}	F_{Boden}^{ab}	F_{Boden}^{netto}	$F_{Trop.p.1}^{auf}$	$F_{Trop.p.}^{ab}$	$F_{Trop.p.}^{netto}$	F_{oben}^{auf}
Nur CO ₂ Linien. CO ₂ Konzentration: 300 ppm							
GISS ²⁾	423.57	75.36	348.21			371.49	384.33
GFDL ³⁾	423.57	75.38	348.19			371.96	384.54
LMD ⁴⁾	423.57	76.38	347.19			371.04	383.52
MPI ^{6), 7)}	423.56	75.92	347.64			371.00	384.00
MPI ⁸⁾	422.81	75.92	346.89			370.25	383.25
Nur O ₃ Linien der 9.6 μm und 14 μm Banden							
GLAS ⁵⁾	423.48	5.92	417.56			416.54	412.06
GISS	423.56	6.37	417.19			416.03	411.70
GFDL	421.37	6.07	415.30			414.31	409.82
LMD ⁹⁾	420.98	4.99	415.98			414.43	411.56
MPI ¹⁰⁾	422.81	5.91	416.90			415.99	411.91
Nur O ₃ Linien der 9.6 μm Bande							
GLAS		4.40					
GISS		4.79					
GFDL		4.43					
LMD		4.41					
MPI		4.42					
Nur O ₃ Linien der 14 μm Bande							
GLAS		1.50					
GISS		1.58					
GFDL		1.53					
MPI ¹¹⁾		1.38					

Tabelle 4: Fortsetzung

Modell	F_{Boden}^{auf}	F_{Boden}^{ab}	F_{Boden}^{netto}	$F_{Trop.p.}^{auf}$	$F_{Trop.p.}^{ab}$	$F_{Trop.p.}^{netto}$	F_{oben}^{auf}
Nur H ₂ O Linien, Intervall: 100 – 2600 cm ⁻¹							
LMD	420.98	267.29	153.69			324.71	329.51
GLAS	420.97	263.25	157.73			328.93	334.61
MPI	420.94	263.73	157.21			327.88	334.57
CO ₂ , O ₃ , H ₂ O (mit Kontinuum), CH ₄ und N ₂ O							
LMD ¹²⁾	421.00	341.80	79.20	288.30	20.70	268.00	284.00
GLAS ¹²⁾	421.00	341.30	79.60	288.90	21.20	267.80	283.30
MPI ^{12,13)}	420.94	342.43	78.51	289.69	21.51	268.18	285.16

- 1) Tropopause bei 13 km bzw. 179 hPa.
- 2) Goddard Institute for Space Studies, New York. Spektralbereich: beliebig.
- 3) Geophysical Fluid Dynamics Laboratory, Princeton. Spektralbereich: 0 - 2200 cm⁻¹.
- 4) Laboratoire de Meteorologie Dynamique, Paris. Spektralbereich: 100 - 2600 cm⁻¹.
- 5) Goddard Laboratory for Atmospheres, Greenbelt, Maryland. Spektralbereich: 0 - 3000 cm⁻¹.
- 6) Max-Planck-Institut für Meteorologie, Hamburg.
Spektralbereich: beliebig im IR; speziell hier: 10 - 2500 cm⁻¹.
- 7) Zu den aufwärtsgerichteten Strahlungsflußdichten sind Werte aus den nichtberücksichtigten Spektralbereichen zwischen $\nu = 0$ bis ∞ addiert worden, die sich aus der Planckfunktion mit der Bodentemperatur ergeben
- 8) Ergebnisse für den verwendeten Spektralbereich ohne Korrektur nach ⁷⁾.
- 9) LMD Ergebnisse nur für einen Teil der 14 μm Bande.
- 10) Berücksichtigung aller Ozonlinien im IR.
- 11) GLAS und GFDL verwendeten Linienparameter aus der 1980er Datensammlung. Jedoch ist in der 1982er Version eine weitere Bande enthalten (Rothman et al., 1983). und für die 1986er Version sind Modifizierungen vorgenommen worden.
- 12) LMD und MPI Ergebnisse für 300 ppm CO₂ Konzentration, GLAS Ergebnisse für 330 ppm. Spektralintervall für alle Ergebnisse: 100-2600 cm⁻¹.
- 13) Kontinuumabsorption im Intervall 8 - 14 μm .

Werden die Strahlungsflußdichten verglichen, die unter Berücksichtigung der Linien aller Absorber und der H₂O Kontinuumabsorption berechnet worden sind, so stellt man fest, daß das MPI Modell größere Werte als das LMD und GLAS Modell liefert (mit Ausnahme von F_{Boden}^{auf} und F_{Boden}^{netto}). Die größten, absoluten Abweichungen treten hierbei zwischen den aufwärtsgerichteten Strahlungsflußdichten am Oberrand der Atmosphäre des GLAS und des MPI Modells mit $1,86 \text{ W/m}^2$ auf. Die größten, prozentualen Abweichungen ergeben sich zwischen dem LMD und dem MPI Modell bei der Tropopause für F^\uparrow mit etwa 4 %.

Die gute Übereinstimmung des GLAS mit dem LMD Modell erscheint für den Fall der Berücksichtigung aller Linien und der Kontinuumabsorption schwer verständlich; denn die Strahlungsflußdichten stimmen zwischen beiden Modellen mit Abweichungen von ungefähr 4 W/m^2 für den Fall H₂O (nur Linien) nicht überein, und das Abschneiden der Linien sowie die Integration über den Zenitwinkel wird in beiden Modellen unterschiedlich durchgeführt. Daher muß die Klärung der Unterschiede zwischen den drei L-f-L Modellen zunächst offen bleiben. Nichtsdestoweniger ist die Übereinstimmung zwischen den Modellen gut genug, um mit ihnen approximierende Strahlungstransportmodelle testen zu können.

5.2

Strahlungsflußdichte- und Abkühlungsratenprofile für drei Standardatmosphären im IR

Die atmosphärischen Abkühlungsraten und die auf- bzw. abwärtsgerichteten Strahlungsflußdichten sind im Intervall $10 - 2500 \text{ cm}^{-1}$ für die Tropen, den Sommer der mittleren Breiten und den subarktischen Winter in Abb. 8 dargestellt. In den Rechnungen sind sämtliche im IR liegende Spektrallinien der sieben atmosphärischen Hauptabsorber und die Kontinuumabsorption des Wasserdampfs berücksichtigt worden.

Der vom Boden ausgehende aufwärtsgerichtete Strahlungsfluß wird in der Troposphäre sukzessiv geschwächt und nimmt in 25 - 30 km Höhe ein Minimum an, je nach Modellatmosphäre. In größeren Höhen nimmt F^\uparrow dann wieder zu, bedingt durch die Zunahme der Linienstärke und der Planckfunktion mit der in der oberen Stratosphäre ansteigenden Temperatur. Diese Änderung von F^\uparrow um etwa 2 W/m^2 ist jedoch in Abb. 8 nicht mehr auflösbar.

Die Zunahme der geringen abwärtsgerichteten Strahlungsflußdichten in der Stratosphäre ist in Abb. 8 nur andeutungsweise erkennbar. Jedoch haben die Änderungen der Strahlungsflußdichten (sowohl F^\uparrow als auch F^\downarrow) in der Stratosphäre auf Grund der geringen Luftdichte große Abkühlungsraten zur Folge. Das Maximum der Abkühlungsraten wird oberhalb von 40 km je nach Atmosphärentyp mit 9 bis 11 K/d erreicht. Im Bereich der Tropopause und der unteren Stratosphäre liegen geringe Abkühlungsraten vor (mit Maximalwerten von ca. 0,5 K/d für den subarktischen Winter), teilweise sogar kleine Erwärmungsraten. Die Werte am Boden schließlich betragen für die Tropen ca. 3,5, für den Sommer der mittleren Breiten ca. 2,9 und für den subarktischen Winter ca. 0,4 K/d .

Auf die in Abb. 8 dargestellten Abkühlungsraten und Strahlungsflußdichten wird in der weiteren Arbeit häufig zurückgegriffen, wobei zumeist absolute bzw. relative Abweichungen von modifizierten L-f-L oder mittels k-Verteilungen approximierten Ergebnissen gebildet werden.

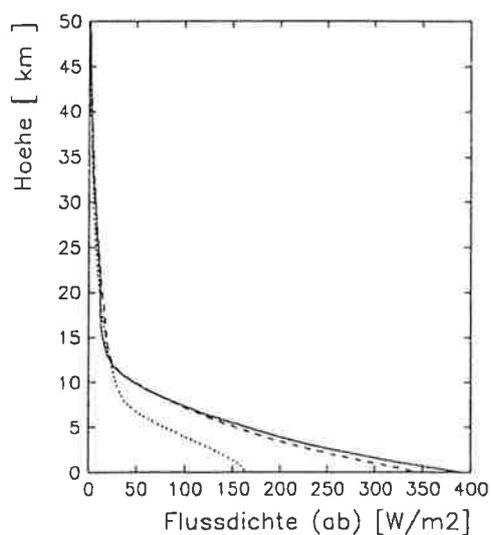
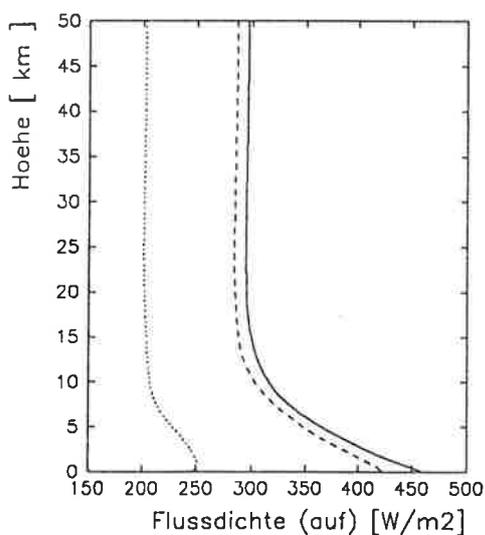
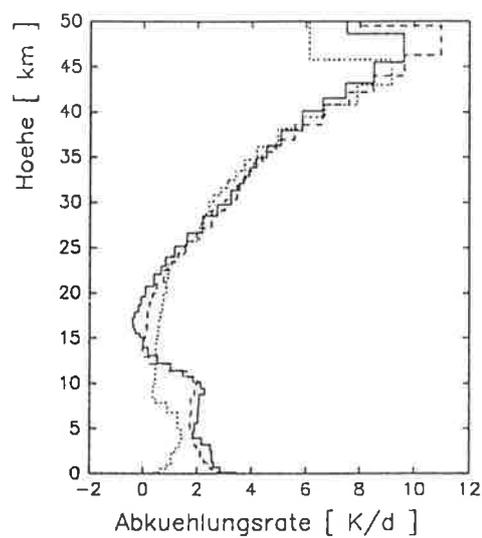


Abb. 8: Abkühlungsraten (oben), F^{\uparrow} (unten links) und F^{\downarrow} (unten rechts) im Intervall $10 - 2500 \text{ cm}^{-1}$ für die Tropen (durchgezogene Kurve), den Sommer der mittleren Breiten (gestrichelt) und den subarktischen Winter (gepunktet).

Teil 3: k-Verteilungsmodelle

6

Grundlagen der k-Verteilungen

Neben den regulären und statistischen Bandenmodellen, die zunächst bei der Entwicklung von Strahlungstransportmodellen bevorzugt wurden, finden seit etwa 1970 vermehrt Modelle Eingang in die Meteorologie, die als k-Verteilungs- bzw. e-Reihenmodelle bezeichnet werden.

Wird in der gewohnten Betrachtungsweise die mittlere Transmission \bar{T} in dem Wellenzahlintervall $\Delta\nu$ für einen homogenen Weg mit der Absorbermenge u durch Integration über die Wellenzahl gewonnen

$$\bar{T} = \frac{1}{\Delta\nu} \int_{\Delta\nu} \exp\{-k_\nu u\} d\nu \quad , \quad (33)$$

so erfolgt bei der e-Reihentechnik die Integration über den Absorptionskoeffizienten k als Integrationsvariable

$$\bar{T} = \int_0^\infty f(k) \exp\{-ku\} dk \quad . \quad (34)$$

Die auf eins normierte k-Verteilungsfunktion $f(k)$ ist die relative Häufigkeit des Absorptionskoeffizienten zwischen k und $k + dk$ im Wellenzahlintervall $\Delta\nu$. $f(k)$ ist durch die inverse Laplace Transformation von \bar{T} gegeben.

$$f(k) = \mathcal{L}^{-1}(\bar{T}) \quad (35)$$

Dieser Zusammenhang wird z.B. von Hansen et al. (1983) genutzt, indem die mittlere Transmissionsfunktion des Malkmus Modells angewandt wird.

Eine weitere Methode wird von Arking und Grossman (1972) vorgeschlagen, um die k-Verteilung für beliebige, spektrale Verläufe des Absorptionskoeffizienten (z.B. durch das Voigtprofil gegeben) zu bestimmen. Diese ist unabhängig davon, ob die inverse Laplace Transformation analytisch durchführbar ist. Hierzu wird der Wertebereich des spektralen Absorptionskoeffizienten in Absorptionsklassen eingeteilt. Der Wellenzahlbereich wird in so kleine Intervalle $\delta\nu$ unterteilt, daß in ihnen der Absorptionskoeffizient näherungsweise konstant ist. Die relative Klassenhäufigkeit a_i (auch als Gewicht bezeichnet) gibt an, welcher Anteil des Wellenzahlbereichs $\Delta\nu$ mit der Anzahl M von Absorptionskoeffizienten besetzt ist, die zu der i-ten Klasse gehören.

Das Gewicht der i -ten Klasse wird berechnet mit

$$a_i = \left(\sum_{j=1}^M \delta\nu_j \right) / \Delta\nu \quad . \quad (36)$$

Aus den Absorptionskoeffizienten, die zu einer Klasse gehören, wird durch Mittelung ein repräsentativer Absorptionskoeffizient k_i gebildet.

$$k_i = \left(\sum_{j=1}^M k_{\nu_j} \delta\nu_j \right) / \sum_{j=1}^M \delta\nu_j \quad (37)$$

Die mittlere Transmissionsfunktion nach Gl. 34 wird dann angenähert durch

$$\bar{T}(u) \approx \sum_{i=1}^N a_i e^{-k_i u} \quad , \quad (38)$$

wobei N die Anzahl der Absorptionsklassen ist. Diese Methode wird in dieser Arbeit verwendet, um die k -Verteilungen zu erstellen.

Die k -Verteilungen werden bei der Berechnung der Strahlungsübertragung angewandt, indem die repräsentativen Absorptionskoeffizienten der Absorptionsklassen anstelle der monochromatischen eingesetzt werden. Damit werden anstatt der monochromatischen Strahldichten (siehe Kapitel 2) repräsentative Strahldichten bestimmt. Anstelle der Integration der monochromatischen Strahldichten (Gl. 8) über die Wellenzahl werden die repräsentativen Strahldichten gewichtet und aufsummiert. Hierbei müssen jedoch Verfahren verwendet werden, die die Planckfunktion in k -Verteilungsmodellen berücksichtigen. Zwei solche Verfahren werden in Abschnitt 7.3 erörtert.

Um zu verdeutlichen, daß die Verwendung von k -Verteilungen im Vergleich zu L-f-L Rechnungen wesentlich ökonomischer sein kann, ist in Abb. 9 (mitte) der spektrale Absorptionskoeffizient für H_2O bei $p = 100$ hPa sowie $T = 250$ K aufgetragen. Die daraus resultierende k -Verteilung ist in Abb. 9 (unten) für Klassenbreiten dargestellt, die durch $\Delta \lg k = \lg k_{i+1} - \lg k_i$ festgelegt sind, wobei der Index i eine Klassengrenze bezeichnet (siehe Abschnitt 6.1). Bei L-f-L Rechnungen muß die spektrale Variabilität der Absorptionskoeffizienten, die in Abb. 9 (mitte) nur andeutungsweise wiedergegeben ist, durch eine entsprechend hohe Auflösung berücksichtigt werden. Werden Häufigkeitsverteilungen erstellt, entsteht hingegen nur eine geringe Anzahl von Termen, für die dann quasi-monochromatische Berechnungen des Strahlungstransports durchzuführen sind.

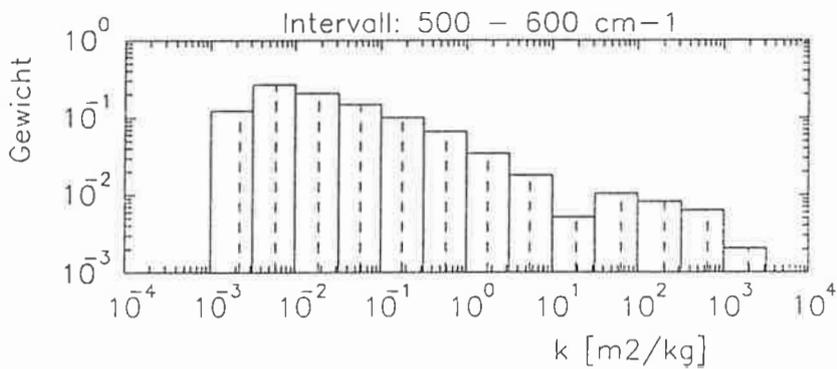
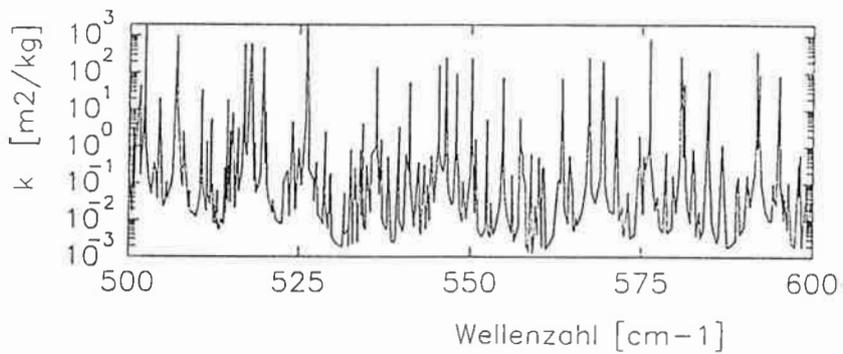
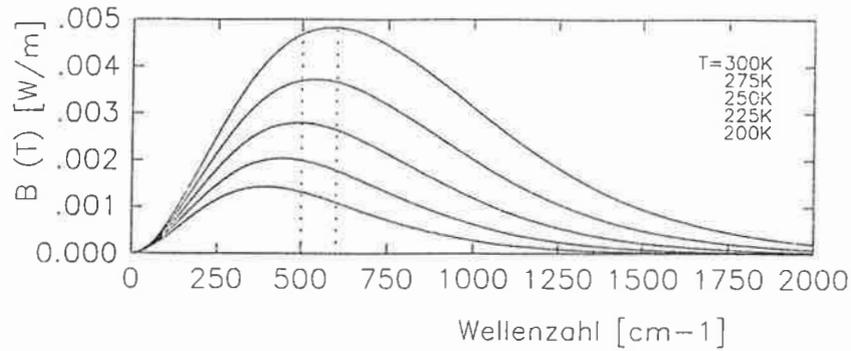


Abb. 9: Oben: Spektrale Strahldichte nach der Planckfunktion für die angegebenen Temperaturen. Gepunktet ist der Wellenzahlbereich zwischen 500 und 600 cm^{-1} dargestellt.

Mitte: Spektraler Absorptionskoeffizient des Wasserdampfs für $p = 100 \text{ hPa}$ und $T = 250 \text{ K}$.

Unten: Histogramm der im mittleren Bild dargestellten Absorptionskoeffizienten. Das arithmetische Mittel der spektralen Absorptionskoeffizienten, die zu einer Häufigkeitsklasse gehören, ist gestrichelt eingezeichnet.

Nicht zuletzt der Umstand, daß die für monochromatische Strahlung geltenden physikalischen Gesetzmäßigkeiten genutzt werden können (wichtig für eventuelle Berücksichtigung von Streuprozessen), lassen Goody und Yung (1989) beim Abwägen der Vor- und Nachteile zwischen Banden- und k -Verteilungsmodellen zu dem Schluß gelangen, daß die Anwendung von k -Verteilungen den Bandenmodellen vorzuziehen sei, falls es gelänge, die Druck- und Temperaturabhängigkeit der spektralen Absorptionskoeffizienten in k -Verteilungsmodellen zu berücksichtigen.

Schließlich sei noch eine Methode genannt, mit der e -Reihen aus vorliegenden empirischen oder aus Modellrechnungen bestimmten Transmissionsfunktionen erstellt werden können. Wiscombe und Evans (1977) geben einen Algorithmus an, der mittels der Methode der kleinsten Quadrate e -Reihen in Form von Gl. 38 liefert. Das Verfahren stellt sicher, daß Konvergenz zu der besten Anpassung mit den geringsten Abweichungen existiert und daß negative Gewichte nicht vorkommen, was aus physikalischen Gründen zu fordern ist.

6.1

Einfluß der Klassenbreite auf die mittlere Transmission

Im vorherigen Abschnitt ist erläutert worden, wie die spektralen Absorptionskoeffizienten, die zu einer Klasse gehören, zu einem repräsentativen Absorptionskoeffizienten zusammengefaßt werden; sei es in Form des arithmetischen Mittels oder auch durch stärkere Betonung der kleineren Absorptionskoeffizienten durch das geometrische bzw. der größeren durch das quadratische Mittel. Dadurch geht in die Rechnungen ein Fehler ein, der umso gravierender ausfallen sollte, je breiter die Klassen gewählt werden. Jedoch muß eine gewisse Ungenauigkeit hingenommen werden, da die Wahl zu kleiner Klassenbreiten, die zu einer großen Anzahl von Klassen führt, ökonomisch nicht vertretbar ist.

Prinzipiell ist die Klassenbreite frei wählbar. So könnte z.B. der Wertebereich der Absorptionskoeffizienten in unterschiedlich breite Klassen eingeteilt werden. In dieser Arbeit wird der dekadische Logarithmus der Absorptionskoeffizienten zur Festlegung der Klassenbreiten herangezogen. Für eine k -Verteilung wird dann die konstante Klassenbreite $\Delta \lg k$ verwendet:

$$\Delta \lg k = \lg k_{i+1} - \lg k_i , \quad (39)$$

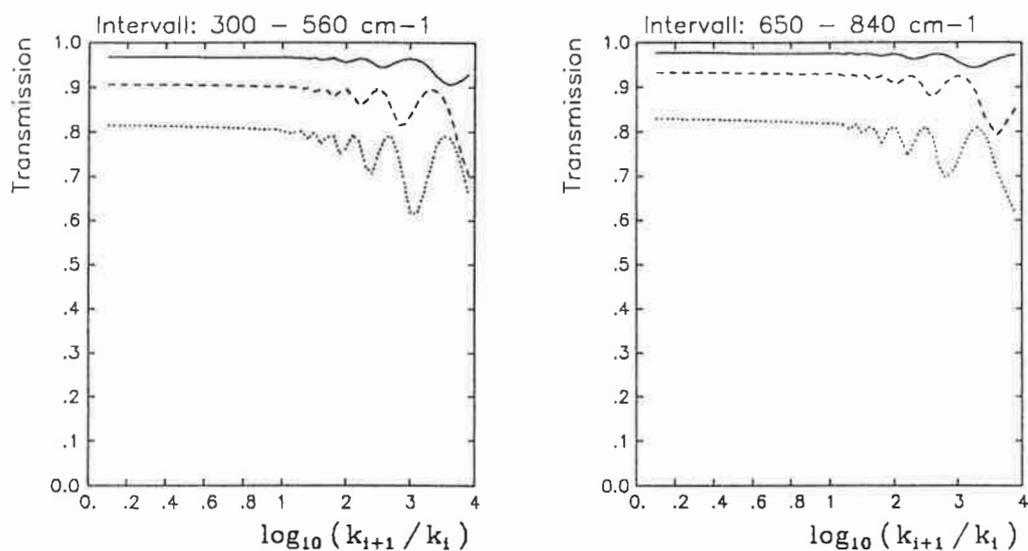


Abb. 10: Mittlere Transmission in Abhängigkeit von der Klassenbreite.

Links: Für H₂O mit den Absorbermengen 0,01 g/cm² (durchgezogen), 0,1 g/cm² (gestrichelt) und 5 g/cm² (gepunktet).

Rechts: Für CO₂ mit den Absorbermengen 0,01 g/cm² (durchgezogen), 0,1 g/cm² (gestrichelt) und 1 g/cm² (gepunktet).

wobei der Index i eine Klassengrenze bezeichnet.

Um den Einfluß der Klassenbreite $\Delta \lg k$ abzuschätzen, sind für zwei relativ große Spektralbereiche die mittleren Transmissionen berechnet worden, und zwar für den Bereich 300 bis 560 cm⁻¹ für Wasserdampf und 650 bis 840 cm⁻¹ für Kohlendioxyd. Hierbei ist $\Delta \lg k$ von 0,1 bis 4 variiert worden. Die Rechnungen sind für unterschiedliche Absorbermengen durchgeführt worden (für H₂O: 0,01 ; 0,1 und 5 g/cm² sowie für CO₂: 0,01 ; 0,1 und 1 g/cm²), um die Abhängigkeit von der Absorbermenge zu berücksichtigen. Wie man in Abb. 10 sieht, hat die Festlegung von $\Delta \lg k$ zwischen 0,1 und 1 nur einen geringen Einfluß auf die mittlere Transmission. Für größere Breiten kommt es jedoch zu starken Schwankungen der Transmission. Die kleinste Klassenbreite von 0,1 kann a priori als diejenige angesehen werden, die zu den geringsten Abweichungen von L-f-L berechneten mittleren Transmissionen führt. Die relativen Abweichungen zwischen den mittleren Transmissionen bei der Klassenbreite 1 und 0,1 sind in Tabelle 5 aufgeführt. Es wird deutlich, daß sich Abweichungen bis ca. 1 % für große Absorbermengen ergeben. Anzumerken ist jedoch, daß die Absorbermengen von 5 g/cm² für H₂O

sowie 1 g/cm^2 für CO_2 bereits in der Größenordnung der Gesamtmenge in der Atmosphäre liegen.

Tabelle 5:

Prozentuale Abweichung der mittleren Transmissionen aus Abb. 10 zwischen den Klassenbreiten $\Delta \lg k = 1$ und $\Delta \lg k = 0,1$ bei Variation der Absorbermengen

Absorbermenge [g/cm^2]	H_2O :	0,01	0,1	5
Abweichung [%]		0,19	0,63	1,00
Absorbermenge [g/cm^2]	CO_2 :	0,01	0,1	1
Abweichung [%]		1,0	1,0	1,01

Für andere Spektralbereiche mit isolierten Absorptionsbanden ist die Abhängigkeit der mittleren Transmission von der Klassenbreite und der Absorbermenge ähnlich wie in Abb. 10. Für Spektralbereiche mit sich überlappenden Banden verschiedener Absorber sind die Fehler der mittleren Transmission durch die Verwendung von Absorptionsklassen jedoch größer. Analog zu der Multiplikation der monochromatischen Transmissionen der einzelnen Absorber, die die gesamte monochromatische Transmission ergibt, werden bei k -Verteilungen multiplikative Verfahren benutzt (Näheres dazu im nächsten Abschnitt). Dies hat zur Folge, daß der Gesamtfehler bei der Multiplikation von mittleren Transmissionen aus repräsentativen Absorptionskoeffizienten vergrößert wird. Sei der exakte Absorptionskoeffizient k_i des i -ten von N Absorbern durch die Summe aus dem approximierten Koeffizienten k_i^* und der Abweichung k_i' gegeben, so ist die Gesamttransmission T für homogene Verhältnisse mit der Absorbermenge u_i gegeben durch

$$\begin{aligned}
 T &= \prod_{i=1}^N T_i = \prod_{i=1}^N \exp\{-(k_i^* + k_i')u_i\} \\
 &= \left(\prod_{i=1}^N e^{-k_i^* u_i}\right) \left(\prod_{i=1}^N e^{-k_i' u_i}\right) = T^* T' .
 \end{aligned}
 \tag{40}$$

Die relative Abweichung der approximierten Transmission T^* von der exakten erhält man aus

$$\frac{T^* - T}{T} = \frac{1}{T'} - 1 = \prod_{i=1}^N e^{k_i' u_i} - 1 .
 \tag{41}$$

Die k'_i können negativ sein. Der Absolutbetrag der relativen Abweichung von der exakten Transmission ist bei konstantem Fehler der genäherten Absorptionskoeffizienten um so größer, je größer die Absorbermengen sind. Bei Gasen mit relativ großer Absorbermenge (H_2O und CO_2) sind daher kleinere Klassen zu verwenden als bei Gasen mit geringer Absorbermenge (O_3 , N_2O und CH_4).

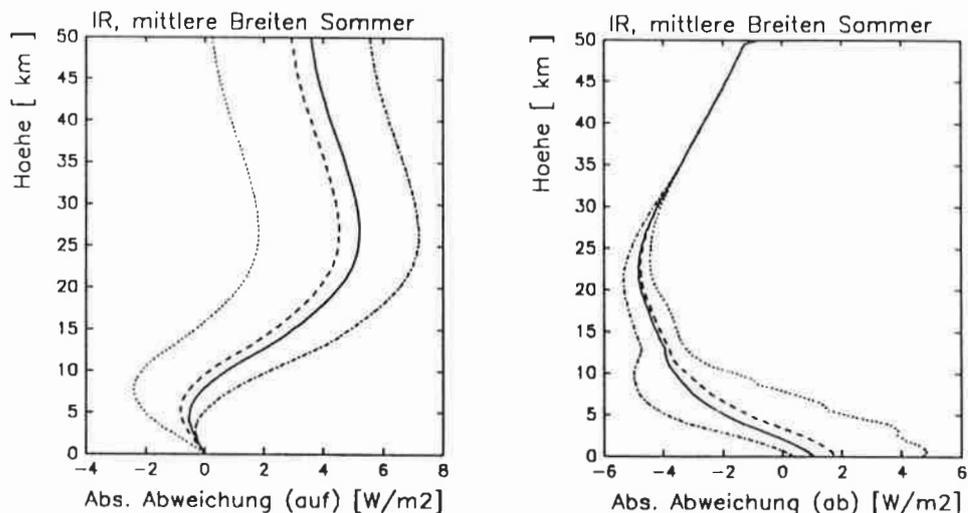


Abb. 11: Absolute Abweichungen approximierter, aufwärtsgerichteter (links) und abwärtsgerichteter (rechts) Strahlungsflußdichten von entsprechenden L-f-L Ergebnissen aufgrund unterschiedlicher Klassenbreiten. Durchgezogene Kurven für $\Delta \lg k = 0,25$, gestrichelte für $\Delta \lg k = 0,5$ und gepunktete für $\Delta \lg k = 1$. Die Anwendung der Flügelnäherung im L-f-L Modell führt auf die punktgestrichelte Kurven.

Der Einfluß der Klassenbreiten ist im folgenden auch für inhomogene Atmosphären abgeschätzt worden, indem L-f-L berechnete Ergebnisse mit denen von k -Verteilungsmodellen verglichen worden sind. In Abb. 11 sind die Abweichungen unter Verwendung der Klassenbreite $\Delta \lg k = 0,25$ durchgezogen, mit $\Delta \lg k = 0,5$ gestrichelt und mit $\Delta \lg k = 1$ gepunktet dargestellt. Jedoch muß bei der Bewertung von approximierten Strahlungsflüssen berücksichtigt werden, daß mehrere Näherungsverfahren verwendet werden. Die größten Fehler verursacht hierbei die sogenannte Flügelnäherung (Erläuterungen in Abschnitt 7.1). Die Flügelnäherung kann in L-f-L Modellen eingesetzt und getestet werden. Die daraus resultierenden Abweichungen von exakten L-f-L Rechnungen sind in Abb. 11 punktgestrichelt

ingezeichnet. Hätte die Verwendung von Absorptionsklassen keine Fehler zur Folge, dürften sich die Kurven aufgrund variiertes Klassenbreite in Abb. 11 nicht unterscheiden und sollten die punktgestrichelte Kurve in etwa wiedergeben.

In Abb. 11 geben die Kurven unter Verwendung der beiden kleinen Klassenbreiten die mit der Flügelnäherung L-f-L berechneten Abweichungen am besten wieder. Es zeigt sich, daß die Unterschiede aufgrund der Verwendung von $\Delta \lg k = 0,25$ und $\Delta \lg = 0,5$ relativ gering sind. Die Differenz zwischen den entsprechenden Kurven ist für F^{\uparrow} und F^{\downarrow} kleiner als 1 W/m^2 . Zwischen den Kurven, die aus der Verwendung von $\Delta \lg = 0,25$ und $\Delta \lg = 1$ resultieren, betragen die Abweichungen hingegen bis zu 4 W/m^2 . Der Abbildung nach zu urteilen, ergeben große Klassenbreiten zu geringe aufwärtsgerichtete und zu große abwärtsgerichtete Strahlungsflußdichten. Für F^{\uparrow} ist auffällig, daß sich die Fehler aufgrund der Flügelnäherung im k-Verteilungsmodell und aufgrund der Verwendung der Klassenbreite $\Delta \lg k = 1$ kompensieren, so daß am Oberrand der Atmosphäre die Abweichungen nahezu verschwinden.

6.2 Multivariate k-Verteilungen

Die Berücksichtigung der Überlappung von Absorptionsbanden in k-Verteilungsmodellen bereitet, entgegen der Aussage von Goody und Yung (1989, S. 176, 177), keine prinzipiellen Schwierigkeiten. Sind mehrere Absorber zu berücksichtigen, geht Gl. 34 in eine Mehrfachintegration bzw. Gl. 38 in eine Mehrfachsummation über, wobei die Anzahl der Integrale bzw. Summen durch die Anzahl der Absorber gegeben ist. Für zwei Absorber führt somit Gl. 38 auf

$$\bar{T}(u_1, u_2) \approx \sum_{i=1}^{N_1} \sum_{j=1}^{M_2} a_{ij} e^{-(k_{1i} u_1 + k_{2j} u_2)} \quad , \quad (42)$$

wobei die Indizes 1 und 2 die beiden Absorber kennzeichnen. N und M geben die im allgemeinen unterschiedliche Anzahl von Absorptionsklassen an, die die "Fläche" der bivariaten Häufigkeitsverteilung der beiden Absorptionskoeffizienten aufspannen.

Um dies anschaulich zu machen, ist in Abb. 12 (links) die bivariate k-Verteilung von H_2O und CO_2 für das Spektralintervall 500 bis 600 cm^{-1} dargestellt, wobei die Berechnung für $p = 100 \text{ hPa}$ und $T = 250 \text{ K}$ sowie der Klassenbreite $\Delta \lg k = 1$

für beide Absorber erfolgte. Die Absorptionsklassen sind durch das Raster am Boden des offenen Quaders eingeteilt. Die Spitzen der senkrechten Striche geben die Gewichte der repräsentativen Absorptionskoeffizienten an. Die Fußpunkte, die aus den arithmetischen Mitteln der spektralen Absorptionskoeffizienten berechnet worden sind, bezeichnen die Position in der Absorptionsklasse.

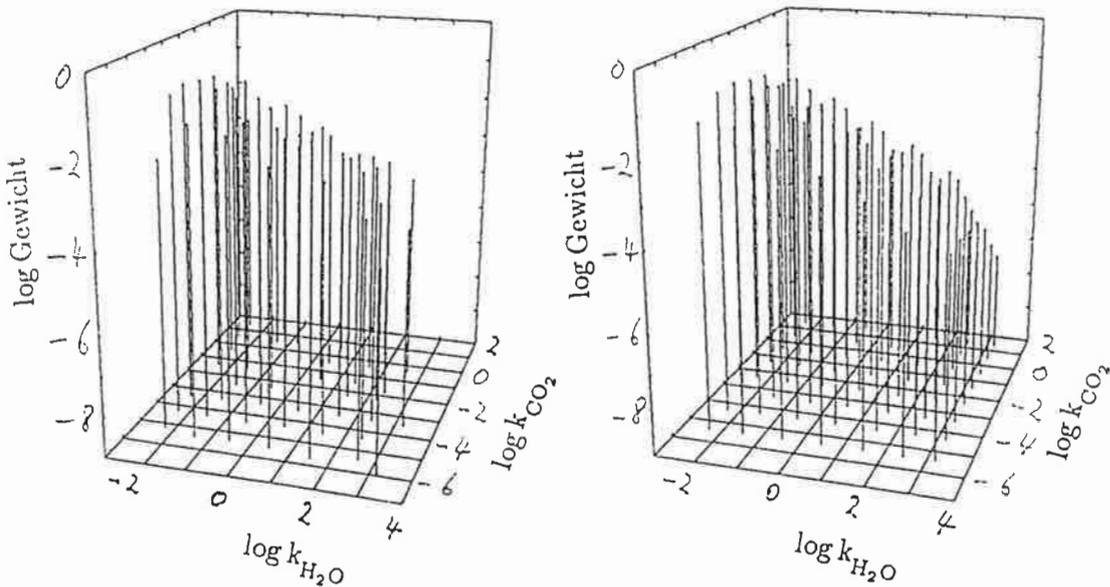


Abb. 12: Häufigkeitsverteilungen (perspektivische Darstellung) im Spektralintervall $500 - 600 \text{ cm}^{-1}$ zur Berücksichtigung der Überlappung der Absorptionslinien von H_2O und CO_2 . Die Spitzen der Striche geben das Gewicht und die Fußpunkte die Position in den Absorptionsklassen an.

Links: Bivariate k -Verteilung.

Rechts: Kombinierte k -Verteilung aus der Multiplikativität der mittleren Transmissionen beider Absorber aus den einzelnen k -Verteilungen.

Für die praktische Anwendung ist es jedoch zweckmäßig Gl. 42 so umzuformen, daß jedem Gewicht ein Satz von Absorptionskoeffizienten¹ zugeordnet ist. Es ist dann

$$\bar{T}(u_1, \dots, u_P) \approx \sum_{l=1}^O a_l \exp\left\{-\sum_{m=1}^P k_{lm} u_m\right\} \quad , \quad (43)$$

wobei hier bereits verallgemeinernd eine multivariate Darstellung für eine beliebige Anzahl P von Absorbern benutzt wird; O ist die Anzahl aller Gewichte aus der mehrdimensionalen Matrix, die ungleich Null sind. k -Verteilungen für einen Absorber ($P=1$) werden im folgenden als monovariat bezeichnet.

Ein weiteres Verfahren, \bar{T} angenähert zu bestimmen, beruht auf der Multiplikatивität monochromatischer Transmissionen und dem empirischen Befund, daß für Bandenmodelle in endlichen Spektralbereichen die Multiplikatивität der mittleren Transmissionen der einzelnen Absorber näherungsweise die "exakte" mittlere Transmission aller Absorber ergibt, sofern die Linienspektren nahezu unkorreliert sind (Goody und Yung, 1989). Es stellt sich die Frage, ob nicht auch für k -Verteilungen eine solche Näherung für mittlere Transmissionen vorgenommen werden kann. Für zwei Absorber (wieder mit den Indizes 1 und 2) hieße dies dann

$$\begin{aligned} \bar{T}(u_1, u_2) &\approx \left(\sum_{i=1}^N a_i e^{-k_i u_1}\right) \left(\sum_{j=1}^M a_j e^{-k_j u_2}\right) \\ &\approx \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M a_i a_j e^{-(k_i u_1 + k_j u_2)} \end{aligned} \quad (44)$$

In Abb. 12 (rechts) sind die Gewichte, die Absorptionsklassen und -koeffizienten aufgetragen, die sich aus der Multiplikatивität der mittleren Transmissionen aus den monovariaten k -Verteilungen für H_2O und CO_2 im Intervall $500 - 600 \text{ cm}^{-1}$ ergeben. Aufgrund der Multiplikation der Gewichte der monovariaten k -Verteilungen sind alle Absorptionsklassen besetzt, auch solche Kombinationen von Koeffizienten, die im Spektrum nicht vorkommen. Der Vergleich mit der bivariaten k -Verteilung (Abb. 12 links) zeigt, daß hierdurch insbesondere Klassen mit großen Absorptionskoeffizienten erzeugt werden. Die Gewichte dieser "künstlichen" Absorptionskoeffizienten sind jedoch verglichen mit denen aus den Klassen der bivariaten k -Verteilung, die mit großen Absorptionskoeffizienten besetzt sind, kleiner.

¹In multivariaten Verteilungen können auch Variablen mit unterschiedlichen Einheiten kombiniert werden. So kann z.B. die spektrale Solarkonstante in k -Verteilungen einbezogen werden.

Da aus Abb. 12 nicht hervorgeht, ob beide Verfahren gleichwertige Resultate liefern, sind für beide Methoden Strahlungstransportrechnungen im IR durchgeführt worden. Die Abweichungen der damit erzielten Strahlungsflußdichten von L-f-L berechneten sind in Abb. 13 links für F^\uparrow und rechts für F^\downarrow dargestellt. In den Rechnungen sind alle Linien der Absorber H_2O , CO_2 , O_3 , N_2O und CH_4 im IR berücksichtigt worden. Die Klassenbreite beträgt für alle Absorber $\Delta \lg k = 0,5$. Das IR ist in 15 unterschiedlich große Spektralbereiche gegliedert, für die separate k-Verteilungen erstellt worden sind. Die Festlegung dieser Intervalle ergibt sich, wenn der Wertebereich der Planckfunktion bei der Temperatur 250 K in gleich große Klassen aufgeteilt wird (Näheres dazu in Abschnitt 7.3). Für jedes Intervall ist pro Schichtgrenze ein mittlerer Wert der Planckfunktion verwendet worden. Die Anwendung der multivariaten k-Verteilungen führt auf die durchgezogenen Kurven, das Verfahren mit der Multiplikativität der mittleren Transmissionen auf die gestrichelten. Außerdem sind die Abweichungen aufgrund der Anwendung der Flügelnäherung im L-f-L Modell (Abschnitt 7.1) gepunktet eingezeichnet.

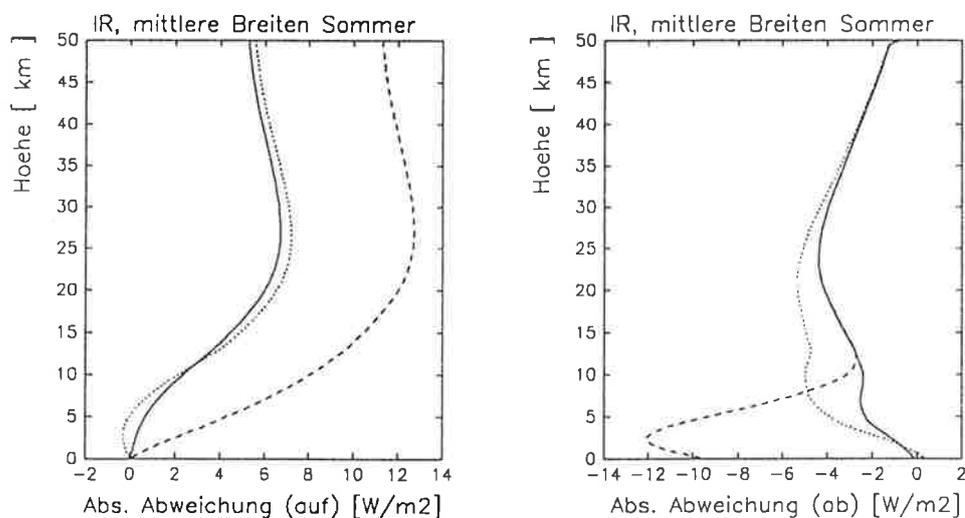


Abb. 13: Abweichungen von L-f-L Rechnungen mit den durchgezogenen Kurven aus der Anwendung multivariater k-Verteilungen. Die gestrichelten Kurven beruhen auf der Multiplikativität mittlerer Transmissionen aus monovariaten k-Verteilungen. Die Anwendung der Flügelnäherung im L-f-L Modell führt auf die gepunkteten Kurven. Links: Abweichungen für F^\uparrow . Rechts: Abweichungen für F^\downarrow .

Die Anwendung der multivariaten k -Verteilungen reproduziert die L-f-L (mit Flügelnäherung) berechneten Ergebnisse relativ gut, außer für F^\uparrow in der oberen Troposphäre, wo Abweichungen von 2 bis 3 W/m^2 auftreten. Die Anwendung der Multiplikativität der mittleren Transmissionen verursacht dagegen sehr große Abweichungen von den L-f-L (mit Flügelnäherung) berechneten Strahlungsflußdichten: für F^\uparrow am Oberrand der Atmosphäre bis zu 6 W/m^2 und für F^\uparrow in der unteren Troposphäre bis zu - 10 W/m^2 . Während also die Fehler aufgrund der Anwendung der multivariaten k -Verteilungen im Vergleich zu den Fehlern mit der Flügelnäherung noch akzeptabel sind, hat die Anwendung der Multiplikativität der mittleren Transmissionen erheblichen Einfluß auf die Genauigkeit approximierter Strahlungsflüsse.

Zugunsten der multivariaten k -Verteilungen spricht auch die kleinere Anzahl von Termen, für die die Strahlungstransportrechnung durchzuführen ist. Den Rechnungen mit den multivariaten k -Verteilungen liegen ca. 10.000 Terme zugrunde. Bei der Anwendung der Multiplikativität der mittleren Transmissionen sind es über 400.000 Terme, die sich aus der Multiplikation der monovariaten k -Verteilungen in den jeweiligen 15 Spektralbereichen ergeben. Es muß jedoch hinzugefügt werden, daß hier ca. dreiviertel aller Terme aus dem Intervall 1380 - 2400 cm^{-1} stammt. In diesem Intervall sind alle Absorber mit Banden vertreten, die sich nur z.T. überlappen. Bei der Multiplikativität der mittleren Transmissionen werden sämtliche in einem Spektralbereich liegende Absorptionsbanden miteinander verknüpft. Bei der Aufteilung des IR muß daher darauf geachtet werden, daß nur sich überlappende Absorptionsbanden im selben Spektralbereich liegen. Bei der Verwendung der multivariaten k -Verteilungen ist es hingegen egal, ob sich Banden überlappen oder nicht.

Eine Aufteilung des IR entsprechend der Bandenverteilung würde die Anzahl der Terme und die Abweichungen in Abb. 13 (gestrichelte Kurven) bei Anwendung der Multiplikativität der mittleren Transmissionen verringern. Wie Rechnungen gezeigt haben, sind aber auch dann Abweichungen von den Ergebnissen mit angewandten multivariaten k -Verteilungen bis zu 2 W/m^2 für F^\uparrow am Boden vorhanden.

7

Temperatur- und Druckabhängigkeit von k -Verteilungen

Mit den im vorherigen Abschnitt beschriebenen k -Verteilungen können Strahlungstransportrechnungen für homogene atmosphärische Bedingungen durchgeführt werden, deren Genauigkeit im wesentlichen von der Wahl der Klassenbreite abhängt.

Für inhomogene Verhältnisse müssen die für einen Zustand (p_0, T_0) errechneten k -Verteilungen beliebigen Zuständen (p, T) angepaßt werden. Ein Blick auf Abb. 14 macht deutlich, daß im Grunde genommen für jeden atmosphärischen Zustand (p, T) eine eigene k -Verteilung benötigt wird. In der Abbildung sind in der rechten Spalte für sehr kleine Spektralbereiche von 1 cm^{-1} Breite die Absorptionskoeffizienten der dortigen Wasserdampflinien für drei Zustände dargestellt: 1000 hPa und 296 K im oberen, 50 hPa und 250 K im mittleren sowie 1 hPa und 270 K im unteren Bild. Die durchgezogenen Kurven geben den Absorptionskoeffizienten der einzelnen Spektrallinien an und die gestrichelten den spektralen Koeffizienten, der aus allen Linien (auch von außerhalb des dargestellten Bereichs gelegenen) resultiert.

Eine k -Verteilung für das obere, rechte Bild, also für hohen Druck, bestünde nur aus einem Term, gebildet aus den Werten der gestrichelten Kurve. Bei $p = 50 \text{ hPa}$ (mittlere, rechte Bild) treten die ersten Linienzentren hervor. Bei $p = 1 \text{ hPa}$ (untere, rechte Bild) ist der Absorptionskoeffizient nahe der Linienzentren spektral stark variabel, was zu mehreren k -Verteilungstermen führen würde. Aber auch hier ist die gestrichelte Kurve für den Absorptionskoeffizienten in den größten Teilen des Spektralbereichs nur gering veränderlich, so daß der entsprechende k -Verteilungsterm das weitaus größte Gewicht hätte.

Die linke Spalte in Abb. 14 zeigt die in drei verschiedenen Spektralbereichen auftretenden CO_2 Linien bei $p = 1 \text{ hPa}$ und $T = 270 \text{ K}$. Hier werden die großen Unterschiede der spektralen Liniendichte deutlich.

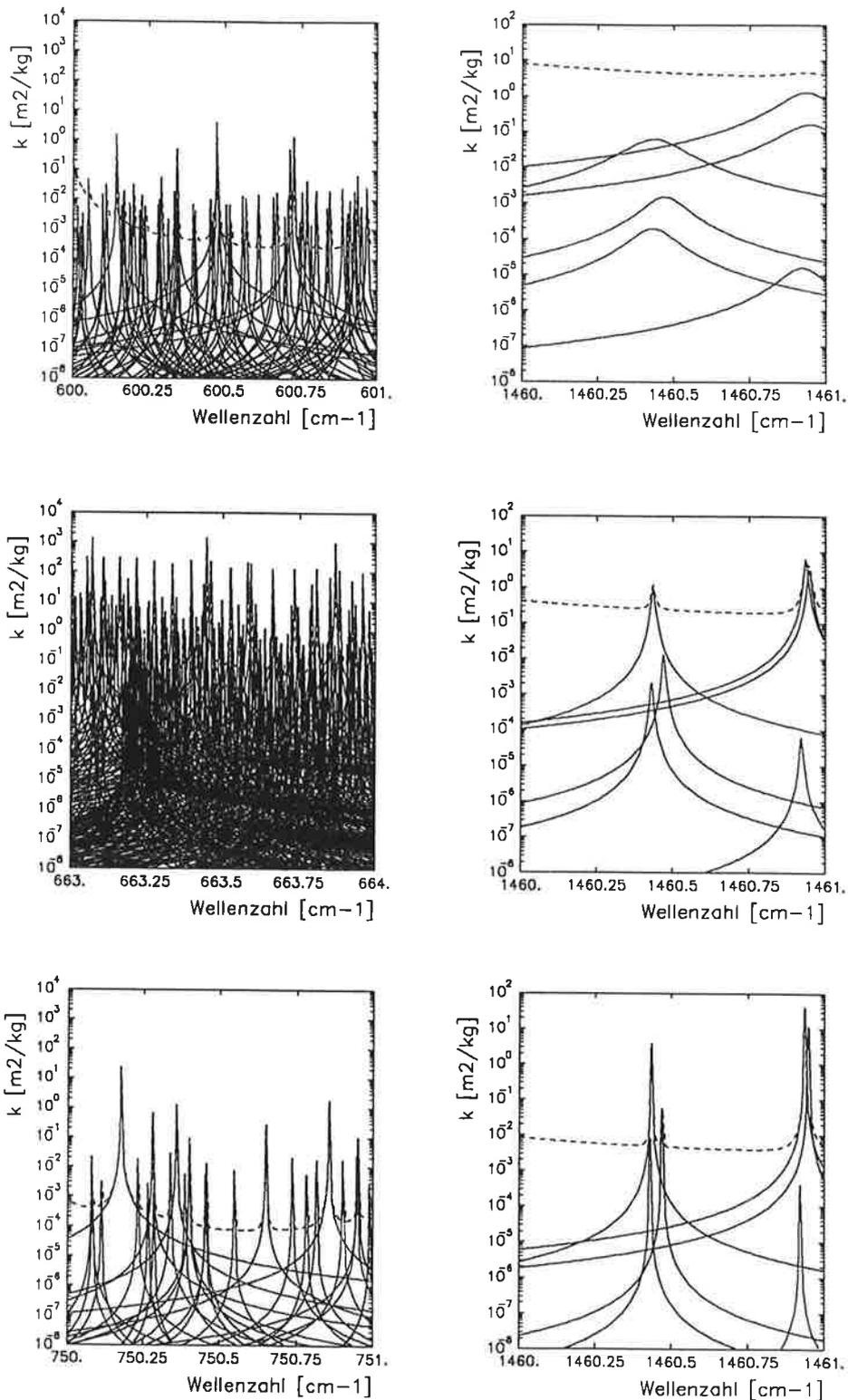


Abb. 14: Verlauf des spektralen Absorptionskoeffizienten aller Linien (gestrichelte Kurve) und der Koeffizient der einzelnen Linien (durchgezogen).
 Linke Spalte: CO₂ für $p = 1$ hPa und $T = 270$ K in unterschiedlichen Spektralbereichen.
 Rechte Spalte: Wasserdampfabsorptionskoeffizient für 1000 hPa und 290 K im oberen, für 50 hPa und 250 K im mittleren und für 1 hPa und 270 K im unteren Bild für den Spektralbereich 1460 – 1461 cm⁻¹.

Zu der Variabilität der Absorptionskoeffizienten, die aus der Abhängigkeit der Linienstärke von der Temperatur, der Lorentzhalbwidthsbreite von Temperatur und Druck sowie der Dopplerhalbwidthsbreite von Wellenzahl und Temperatur gegeben ist, kommt die ebenfalls von Wellenzahl und Temperatur abhängige Planckfunktion, die bereits in Abb. 9 (oben) dargestellt ist. Soll der Strahlungstransport in einer inhomogenen Atmosphäre approximiert werden, müssen diese Abhängigkeiten berücksichtigt werden.

7.1 Far-Wing-Scaling Approximation

Für Bandenmodelle sind nach Goody und Yung (1989) die geläufigsten Methoden, um die Druck- und Temperaturabhängigkeit der Absorptionskoeffizienten zu berücksichtigen, die Ein - Parameter - Skalierung und die van de Hulst - Curtis - Godson (HCG) Approximation. Beide beruhen auf einer Näherung des Absorptionskoeffizienten durch einen Produktansatz mit einem druck- und temperaturabhängigen sowie einem wellenzahlabhängigen Faktor

$$k_\nu(p, T) \approx \phi(p, T)\omega(\nu) \quad (45)$$

Die optische Dicke mit der Absorbermenge u läßt sich dann schreiben als

$$\tau_\nu(p, T) \approx k_\nu(p_0, T_0) \int_{Weg} \frac{\phi(p, T)}{\phi(p_0, T_0)} du \quad (46)$$

Bei der Ein - Parameter - Skalierung werden die Werte von p_0 und T_0 fest vorgegeben. Bei der HCG Approximation wird der Wert von p_0 berechnet (T_0 bekommt im allgemeinen einen festen Wert zugewiesen), für den dann $k_\nu(p_0, T_0)$ bestimmt wird. Die Funktion ϕ hängt von der Linienform ab. Im folgenden wird eine Näherung für Lorentzlinien angegeben.

Der Quotient von zwei Absorptionskoeffizienten zur selben Wellenzahl für die Zustände (p, T) und (p_0, T_0) lautet

$$\frac{k_\nu(p, T)}{k_\nu(p_0, T_0)} \approx \frac{\sum_{i=1}^L \frac{S_i(T)}{\pi} \frac{\eta(p, p_0, T, T_0)\alpha_i(p_0, T_0)}{\Delta\nu_i^2 + \eta^2(p, p_0, T, T_0)\alpha_i^2(p_0, T_0)}}{\sum_{i=1}^L \frac{S_i(T_0)}{\pi} \frac{\alpha_i(p_0, T_0)}{\Delta\nu_i^2 + \alpha_i^2(p_0, T_0)}} \quad (47)$$

mit der Druck- und Temperaturabhängigkeit der Lorentzhalbwidthsbreite von Seite 13

$$\eta(p, p_0, T, T_0) = \frac{p}{p_0} \left(\frac{T_0}{T} \right)^n \quad (48)$$

Die exakte Separation nach Gl. 45 kann nicht vorgenommen werden, da im Nenner des oberen Bruchs von Gl. 47 wellenzahlabhängige Größen (in Form des Linienabstands $\Delta\nu_i$) und die von p und T abhängige Funktion η auftreten. Die Separation kann jedoch mit einer Näherung von Chou und Arking (1980) erreicht werden. Sie argumentieren: Für atmosphärische Verhältnisse wird der größte Teil des Spektrums von Linienflügeln dominiert. In den Linienzentren ist die Transmission sehr gering (gesättigte Absorption), so daß dort selbst große Fehler bei der Berechnung der Absorptionskoeffizienten keine nennenswerten Fehler bei der Transmission verursachen. Die Kenntnis des genauen Wertes von $\phi(p, T)$ ist also bei der Berechnung des Strahlungstransports in Linienzentren nahezu irrelevant. Daher kann auch für die Zentralbereiche der Linien die Druck- und Temperaturabhängigkeit der Linienflügel zur Bestimmung von $\phi(p, T)$ verwendet werden. Für Flügelbereiche mit $\Delta\nu_i \gg \alpha_i$ vereinfacht sich Gl. 47 zu

$$\frac{k_\nu(p, T)}{k_\nu(p_0, T_0)} \approx \eta \frac{\sum_{i=1}^L S_i(T) \frac{\alpha_i(p_0, T_0)}{\Delta\nu_i^2}}{\sum_{i=1}^L S_i(T_0) \frac{\alpha_i(p_0, T_0)}{\Delta\nu_i^2}} = \frac{p}{p_0} R_\nu(T, T_0) \quad (49)$$

Die Vernachlässigung von $\alpha^2(p, T)$ und $\alpha^2(p_0, T_0)$ in den Nennern wird als Flügelnäherung bezeichnet. Die Funktion $R_\nu(T, T_0)$ ändert sich zwar stark mit der Wellenzahl, aber bei weitem nicht in dem Maße wie $k_\nu(p, T)$, so daß die Anwendung eines spektral gemittelten $\bar{R}(T, T_0)$ gerechtfertigt erscheint. Chou und Arking (1980) unterscheiden weiter zwischen Bandenzentren und -flügeln und geben dafür jeweils einen Wert von \bar{R} für die Temperaturen $T_0 - 40$ K sowie $T_0 + 40$ K an. Aus beiden Werten und dem Wert 1 für $T = T_0$ wird \bar{R} für beliebige Temperaturen durch quadratische Anpassung bestimmt. In einer späteren Arbeit (1981) weisen beide Autoren dem Quotienten p/p_0 eine Potenz m als Korrektiv zu, die der "Nicht-Sättigung" in den Linienzentren Rechnung tragen soll. Schließlich gibt Chou (1984) für $\bar{R}(T)$ den Ausdruck

$$\bar{R}(T) = \exp\{c(T - T_0)\}$$

an, wobei der Wert von c für unterschiedliche Bandenbereiche empirisch zu bestimmen ist.

Die Kombination der Approximation der Temperaturabhängigkeit der Linienstärken mit der Flügelnäherung wird von Chou und Arking (1980) als Far-Wing-Scaling Approximation (im folgenden FWS Approximation) bezeichnet. Bei der FWS Approximation in k-Verteilungsmodellen werden anstelle der monochromatischen Absorptionskoeffizienten die repräsentativen genommen. In einem k-Verteilungsmodell dieser Arbeit (im folgenden als k-V-I Modell bezeichnet) ist die FWS Approximation in modifizierter Form (siehe Abschnitt 7.2) angewandt, wobei die Temperaturabhängigkeit der Linienstärke durch ein anderes Verfahren genähert wird.

7.1.1

Abschätzung der Flügelnäherung mit einem L-f-L Modell

Voraussetzung für die Anwendbarkeit der Flügelnäherung ist, dies sei hier noch einmal betont, die Argumentation von Chou und Arking (1980), daß im größten Teil des Spektrums der Absorptionskoeffizient durch Linienflügel dominiert wird und in dem restlichen Teil die Linienzentren solch hohe Koeffizienten aufweisen, daß selbst bei großen Fehlern aufgrund der angegebenen Approximationsvorschrift die Transmission sehr klein bleibt.

Inwieweit die Argumentation tatsächlich zutrifft, ist mit L-f-L Rechnungen abgeschätzt worden, wobei die Flügelnäherung (Gl. 49) bei vollständiger Berücksichtigung der Abhängigkeit der Linienstärken von der Temperatur angewandt worden ist.

Zunächst wird jedoch eine analytische Fehlerabschätzung für den Absorptionskoeffizienten nach dem Lorentzprofil vorgenommen. Bei Anwendung der Flügelnäherung treten die größten Fehler in den Zentren isolierter Linien auf. Der Quotient aus dem mit der FWS Approximation bestimmten Absorptionskoeffizienten $k_{\nu_{appr}}(p, T)$ und dem exakten Koeffizienten $k_{\nu_{exakt}}(p, T)$ der i-ten Linie ist:

$$\frac{k_{\nu_{appr}}(p, T)}{k_{\nu_{exakt}}(p, T)} = \frac{k_{\nu_{exakt}}(p_0, T_0) \eta \frac{S_i(T)}{S_i(T_0)}}{\frac{S_i(T)}{\pi} \frac{\eta \alpha_i(p_0, T_0)}{\Delta \nu_i^2 + \eta^2 \alpha_i^2(p_0, T_0)}} \quad (50)$$

Durch Einsetzen des Lorentzprofils für $k_{\nu_{exakt}}(p_0, T_0)$ ergibt sich eine Beziehung zwischen dem approximierten und dem exakten Absorptionskoeffizienten:

$$k_{\nu_{appr}}(p, T) = k_{\nu_{exakt}}(p, T) \frac{\Delta \nu_i^2 + \eta^2 \alpha_i^2(p_0, T_0)}{\Delta \nu_i^2 + \alpha_i^2(p_0, T_0)} \quad (51)$$

Hieraus ist zu ersehen, daß für $\eta < 1$ der approximierte Absorptionskoeffizient kleiner ist als der exakte und für $\eta > 1$ umgekehrt.

Dieser einfache Zusammenhang für eine Linie wird jedoch durch zwei Effekte verschmiert: a) die Absorptionskoeffizienten in der Stratosphäre werden durch das Voigtprofil beschrieben mit der Voigthalbwertsbreite, die im wesentlichen durch die spektrale Wellenzahl ν_0 bestimmt ist. Zusätzlich ist der aus den Lorentzprofilen gebildete Quotient im allgemeinen ungleich demjenigen, der aus den in der Stratosphäre korrekterweise erforderlichen Voigtprofilen gebildet wird; b) es gibt Wellenzahlbereiche, in denen die Absorptionskoeffizienten zwar bei geringem Druck durch das Zentrum einer Linie bestimmt sind, bei hohem Druck aber von den dann größeren Werten der Flügel anderer Linien dominiert werden.

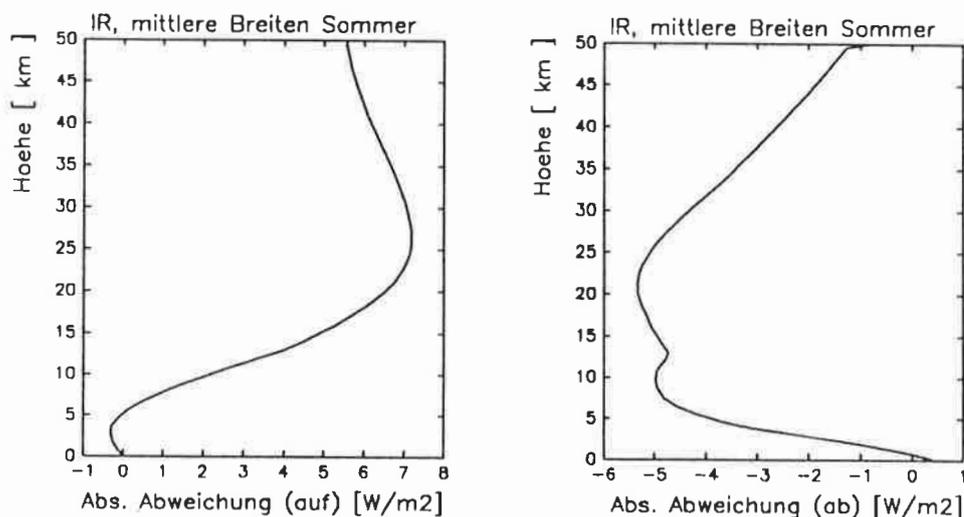


Abb. 15: Vergleich zwischen der Anwendung der Flügelnäherung in einem L-f-L Modell und der exakten L-f-L Rechnung. Links: Absolute Abweichungen von F^{\uparrow} . Rechts: Absolute Abweichungen von F^{\downarrow} .

Die Folgerungen aus der obigen Fehlerabschätzung sind in den Ergebnissen eines L-f-L Modells, mit dem die Flügelnäherung geprüft worden ist, wiederzufinden. Die Abweichungen der genäherten Ergebnisse von den exakten L-f-L Resultaten sind in Abb. 15 dargestellt. Als Referenzdruck und -temperatur sind dabei $p_0 = 500$ hPa und $T_0 = 250$ K verwendet worden; dies entspricht ungefähr

den Verhältnissen in 5 km Höhe. Zum Boden hin ist dann $\eta > 1$ und nach oben hin $\eta < 1$.

Für F^1 (linkes Bild) ergibt sich in der unteren Troposphäre, daß der überschätzte, approximierte Absorptionskoeffizient die vom Boden stammende Flußdichte zunächst zu stark schwächt, so daß negative Abweichungen resultieren. Bei $\eta < 1$ ist es umgekehrt.

In der oberen Stratosphäre sind die abwärtsgerichteten Strahlungsflußdichten (rechtes Bild) gering, so daß die durch die Approximation erzeugten Abweichungen dem Betrage nach klein sind, jedoch werden sie mit zunehmender Tiefe größer. Die stärkste Abweichung wird bei etwa 20 km mit ca. $-5,5 \text{ W/m}^2$ gefunden. In Bodennähe findet man kleine Abweichungen.

7.1.2

Approximation der Temperaturabhängigkeit der Linienstärken

In Kapitel 3 ist erläutert worden, daß der spektrale Absorptionskoeffizient aus den Beiträgen aller Linien aufsummiert wird, wobei der Koeffizient der einzelnen Linien das Produkt aus der temperaturabhängigen Linienstärke und dem Profilmfaktor ist. In diesem Abschnitt wird eine Näherung angegeben, die die Temperaturabhängigkeit der Linienstärke in L-f-L Modellen berücksichtigt, ohne explizit für alle atmosphärischen Schichten die Linienstärken berechnen zu müssen. In Abschnitt 7.2 wird die Anwendung der Näherung in k-Verteilungsmodellen erläutert.

Ausgangspunkt ist der Quotient von zwei monochromatischen Absorptionskoeffizienten zur selben Wellenzahl und unterschiedlichen Zuständen (p_0, T_0) bzw. (p, T) mit den Bezeichnungen von Seite 11.

$$\frac{k_\nu(p, T)}{k_\nu(p_0, T_0)} = \frac{\sum_{i=1}^L S_i(T_0) \left(\frac{T_0}{T}\right)^j \frac{Q_\nu(T_0)}{Q_\nu(T)} \exp\left\{\frac{hc}{k} E_i \left(\frac{1}{T_0} - \frac{1}{T}\right)\right\} f_i(\Delta\nu_i, p, T)}{\sum_{i=1}^L S_i(T_0) f_i(\Delta\nu_i, p_0, T_0)} \quad (52)$$

Das gemeinsame Auftreten des Energieterms des unteren Übergangsniveaus E_i (im folgenden LSE genannt, für "lower state energy") und des Temperaturexpressions in der Exponentialfunktion steht einer Entkopplung von Linienparameter und Temperaturabhängigkeit im Wege. Die Terme, die die Temperaturabhängigkeit der Linienstärke beschreiben, können jedoch vor die Summe gezogen werden,

wenn nicht die E_i aller Linien angewandt werden, sondern eine für alle Linien gemeinsame LSE, die als effektive LSE E'_ν bezeichnet wird. E'_ν wird bestimmt, in dem die E_i mit dem Anteil des Absorptionskoeffizienten der i -ten Linie am spektralen Absorptionskoeffizienten gewichtet und aufsummiert werden.

$$E'_\nu = \frac{\sum_{i=1}^L E_i k_{\nu i}(p_0, T_0)}{\sum_{i=1}^L k_{\nu i}(p_0, T_0)}, \quad (53)$$

wobei L die Anzahl der Linien ist. Die effektive LSE ist abhängig von der Wellenzahl. Der Absorptionskoeffizienten ist dann angenähert durch:

$$k_\nu(p, T) \approx k_\nu(p_0, T_0) \left(\frac{T_0}{T}\right)^j \frac{Q_\nu(T_0)}{Q_\nu(T)} \exp\left\{\frac{hc}{k} E'_\nu \left(\frac{1}{T_0} - \frac{1}{T}\right)\right\} \frac{\sum_{i=1}^L S_i(T_0) f_i(\Delta\nu, p, T)}{\sum_{i=1}^L S_i(T_0) f_i(\Delta\nu, p_0, T_0)} \quad (54)$$

Die Anwendung der effektiven LSE ist gerechtfertigt, wenn die Summe im Zähler von Gl. 52 entweder durch einen Summanden allein bestimmt wird oder durch eine Gruppe von Summanden mit ähnlich großen LSE Werten. Die Dominanz eines Summanden ist in der Nähe starker Linien gegeben. Auch findet man häufig Spektralstellen, wo der Absorptionskoeffizient der Flügel starker Linien (mit ähnlich großen E_i) in der Troposphäre und z.T. in der Stratosphäre deutlich größer ist als der Koeffizient in den Zentren von schwächeren Linien. Lediglich für Spektralbereiche, in denen nicht nur eine Linie dominiert oder in denen die dominierenden Summanden bei geänderten Drucken und Temperaturen wechseln, kann die Verwendung der effektiven LSE zu größeren Fehlern führen.

Ob die Approximation der Temperaturabhängigkeit der Linienstärke geeignet ist, den spektralen Absorptionskoeffizienten zu nähern, kann letztlich nur durch Strahlungstransportrechnungen entschieden werden. Diese sind durchgeführt worden, indem Gl. 54 im L-f-L Modell angewendet worden ist. Die in Abb. 16 dargestellten Abweichungen der approximierten Ergebnisse von den exakten L-f-L berechneten sind dabei einzig auf Fehler durch die Anwendung der effektiven LSE zurückzuführen.

Die Rechnungen sind mit $T_0 = 250$ K und $p_0 = 500$ hPa für alle Absorber für den Sommer in mittleren Breiten durchgeführt worden. Im linken Bild von Abb. 16 sind die absoluten Abweichungen der Strahlungsflußdichten zu sehen, durchgezogen für F^\uparrow und gestrichelt für F^\downarrow . Im rechten Bild sind die absoluten Abweichungen der Abkühlungsraten dargestellt, die bis 40 km Höhe kleiner als $\pm 0,1$ K/d sind und oberhalb davon beträgt die stärkste Abweichung ca. $-0,6$ K/d (ca. -5 %). Die maximale Abweichung liegt für F^\uparrow mit ca. $0,2$ W/m² und für F^\downarrow mit ca. $-0,6$ W/m² in der Troposphäre. Die gefundenen Abweichungen sind akzeptabel, so daß die Temperaturabhängigkeit der Linienstärken in L-f-L Modellen durch die Anwendung der effektiven LSE genähert werden kann.

Nicht unerwähnt bleiben sollen L-f-L Rechnungen, in denen die Temperaturabhängigkeit der Linienstärke unberücksichtigt blieb, indem eine konstante Stärke (für $T = 250$ K) angewandt worden ist. Maximale Abweichungen traten hierbei für F^\uparrow mit 15 W/m² und für F^\downarrow mit -30 W/m² auf.

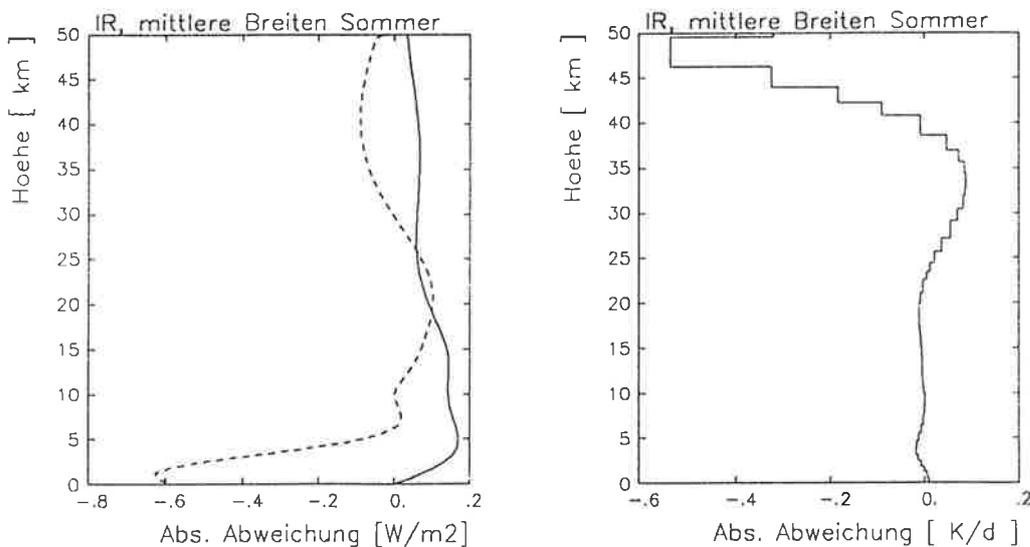


Abb. 16: Abweichungen zwischen Ergebnissen, die mit der effektiven LSE in einem L-f-L Modell berechnet worden sind, und solchen, bei denen im L-f-L Modell die Temperaturabhängigkeit der Linienstärke exakt berücksichtigt worden ist. Links: Absolute Abweichungen von F^\uparrow sind durchgezogen und F^\downarrow gestrichelt dargestellt. Rechts: Absolute Abweichungen der Abkühlungsraten.

7.2

Modifizierte FWS Approximation in k-Verteilungsmodellen

Mit der im vorangegangenen Abschnitt erläuterten Näherung der Temperaturabhängigkeit der Linienstärke durch die Anwendung der effektiven LSE läßt sich die FWS Approximation (Gl. 49) modifizieren zu

$$k_\nu(p, T) \approx k_\nu(p_0, T_0) \eta \left(\frac{T_0}{T}\right)^j \frac{Q_\nu(T_0)}{Q_\nu(T)} \exp\left\{\frac{hc}{k} E'_\nu \left(\frac{1}{T_0} - \frac{1}{T}\right)\right\} \quad (55)$$

Mit dieser Gleichung ist eine einfach zu handhabende Vorschrift hergeleitet worden, um die Druck- und Temperaturabhängigkeit der monochromatischen Absorptionskoeffizienten zu approximieren.

Für die Anwendung der FWS Approximation in k-Verteilungsmodellen muß jedoch die effektive LSE in geeigneter Weise berücksichtigt werden. Hierzu wird jedem repräsentativen Absorptionskoeffizienten eine sogenannte repräsentative effektive LSE E_r zugeordnet. Sie wird folgendermaßen berechnet: Für jeden spektralen Absorptionskoeffizienten k_{ν_j} , der in dem Intervall $\delta\nu_j$ liegt und zu der r-ten Klasse gehört, werden die E'_i Werte der einzelnen Linien mit dem Produkt aus dem Absorptionskoeffizienten der einzelnen Linien und der Breite $\delta\nu_j$ des Intervalls, in dem sie liegen, gewichtet.

$$E_r = \frac{\sum_{j=1}^M \left(\sum_{i=1}^N E'_i k_{\nu_i} \right) \delta\nu_j}{\sum_{j=1}^M \left(\sum_{i=1}^N k_{\nu_i} \right) \delta\nu_j} \quad (56)$$

N ist die Anzahl der Linien, die einen Beitrag k_{ν_i} zum spektralen Absorptionskoeffizienten liefern. M ist die Anzahl der spektralen Absorptionskoeffizienten, die zu der r-ten Klasse gehören.

Die Anwendung von E_r und der Flügelnäherung in k-Verteilungsmodellen wird als modifizierte FWS Approximation bezeichnet. In den nächsten beiden Abschnitten sind die Fehler bei der Anwendung der beiden Näherungsverfahren abgeschätzt.

7.2.1

Abschätzung des Einflusses der repräsentativen effektiven LSE

Der durch die Anwendung der repräsentativen effektiven LSE entstehende Fehler ist mit drei Rechnungen abgeschätzt worden, wobei im k -Verteilungsmodell die Referenztemperatur auf $T_0 = 220$ K, 250 K bzw. 280 K festgelegt worden ist. Die Rechnung mit $T_0 = 250$ K erfolgte für $p_0 = 500$ hPa. Da T_0 auch in der Funktion η in der Flügelnäherung vorkommt, ist für die Rechnungen mit verändertem T_0 der Druck mit Gl. 48 korrigiert worden, um den Einfluß der Flügelnäherung konstant zu halten. Für $T_0 = 220$ K ergibt sich somit für H_2O der Referenzdruck $p_{0H_2O} = 542$ hPa, für die anderen Absorber 550 hPa (Abhängigkeit vom Absorber aufgrund der unterschiedlichen Werte von n aus Tabelle 1 von Seite 12. In den Rechnungen sind CO und O_2 nicht verwendet werden). Für $T_0 = 280$ K ist $p_{0H_2O} = 465$ hPa und für die anderen Absorber 459 hPa. Die Abweichungen der erzielten Ergebnisse von L-f-L Rechnungen sind in Abb. 17 dargestellt, wobei die durchgezogenen Kurven auf $T_0 = 220$ K beruhen, die gestrichelten auf 250 K und die gepunkteten auf 280 K.

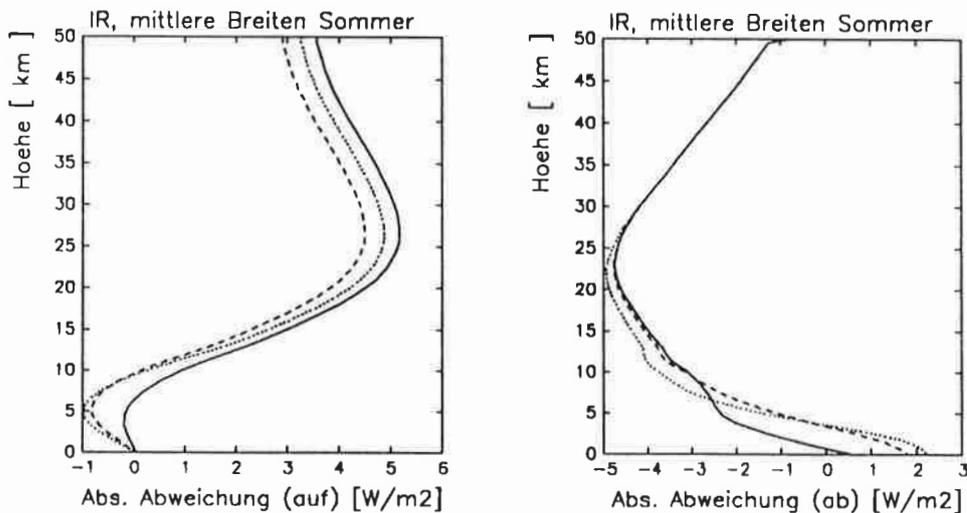


Abb. 17: Abweichungen approximierter Strahlungsflußdichten von L-f-L Ergebnissen aufgrund variiert Referenztemperaturen bei konstantem η . Das k -Verteilungsmodell mit modifizierter FWS Approximation führt mit $T_0 = 220$ K auf die durchgezogene Kurven, mit $T_0 = 250$ K auf die gestrichelten und mit $T_0 = 280$ K auf die gepunkteten für F^{\uparrow} (links) und F^{\downarrow} (rechts).

In Abb. 17 liegen für F^{\uparrow} (linkes Bild) und F^{\downarrow} (rechtes Bild) die drei Kurven relativ eng zusammen und geben im wesentlichen die Abweichungen aufgrund der Flügelnäherung wieder. Die Anwendung von $T_0 = 220$ K ergibt dabei für F^{\downarrow} am Boden die geringsten Abweichungen. Ähnliches haben Rechnungen für die Tropen und den subarktischen Winter ergeben.

Insgesamt verursacht also die Approximation der Temperaturabhängigkeit der Linienstärke durch die Anwendung der repräsentativen effektiven LSE in k -Verteilungsmodellen geringere Fehler als die Flügelnäherung.

7.2.2

Abhängigkeit der Flügelnäherung vom Referenzdruck

In Abschnitt 7.1.1 ist die Flügelnäherung in L-f-L Modellen getestet worden. In diesem Abschnitt wird der Einfluß der Flügelnäherung in k -Verteilungsmodellen untersucht. Insbesondere wird abgeschätzt, welchen Einfluß die Wahl des Referenzdrucks hat, bei dem die k -Verteilungen erstellt werden. In diesem Zusammenhang wird auch auf die atmosphärischen Abkühlungsraten eingegangen, die bisher noch nicht diskutiert worden sind.

Die Flügelnäherung ist geprägt durch die Vernachlässigung der Terme $\alpha^2(p_0, T_0)$ und $\eta^2\alpha^2(p_0, T_0)$ in den Nennern von Gl. 47. Sie ist dabei hauptsächlich abhängig von p und p_0 , da die Temperatur zwischen dem Unter- und Oberrand der Atmosphäre wesentlich geringer variiert. Um den Einfluß des Referenzdrucks abzuschätzen, sind drei k -Verteilungen für unterschiedliche Drücke erstellt und angewandt worden. Dabei ist die Klassenbreite $\Delta \lg k = 0,5$ und die Referenztemperatur $T_0 = 250$ K verwendet worden. Der Einfluß dieser beiden Fehlerquellen ist in den vorangegangenen Abschnitten als zweitrangig abgeschätzt worden. Die Abweichungen der approximierten Strahlungsflußdichten und Abkühlungsraten von entsprechenden L-f-L Rechnungen sind für den Sommer in mittleren Breiten in Abb. 18 für $p_0 = 10$ hPa als durchgezogene Kurve, für 100 hPa gestrichelt und für 500 hPa gepunktet dargestellt. Die Kurven für $p_0 = 500$ hPa geben näherungsweise den Verlauf aus Abb. 15 (Seite 55) wieder, in der ja der Einfluß der Flügelnäherung in L-f-L Rechnungen dargestellt ist.

Mit abnehmendem Referenzdruck unterschätzt das k -Verteilungsmodell mit modifizierter FWS Approximation den aufwärtsgerichteten Strahlungsfluß immer

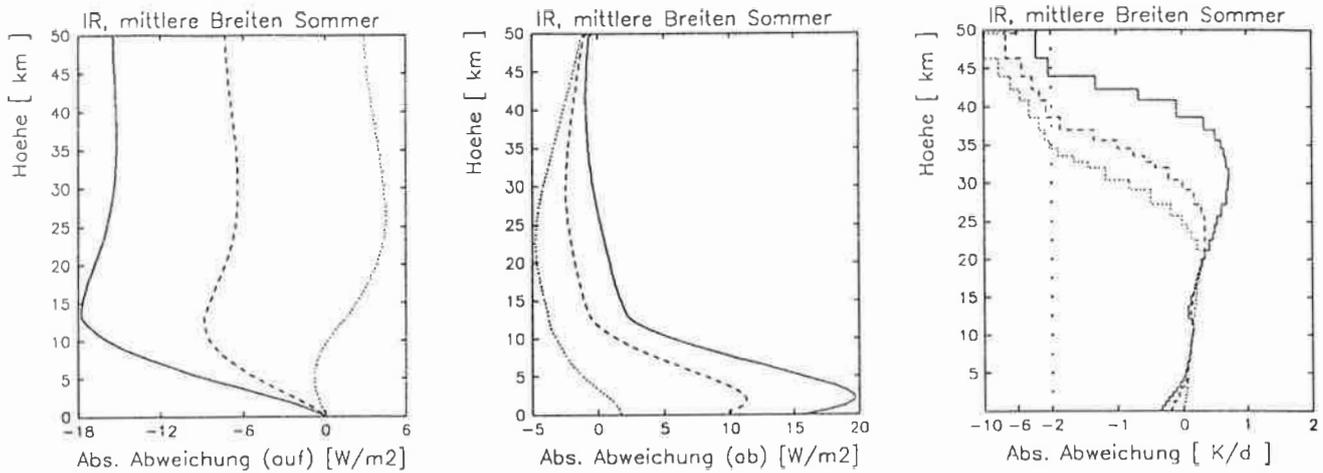


Abb. 18: Variation des Referenzdrucks p_0 in k-Verteilungsmodellen mit modifizierter FWS Approximation mit $p_0 = 10$ hPa (durchgezogene Kurve), 100 hPa (gestrichelt) und 500 hPa (gepunktet). Absolute Abweichung von L-f-L Rechnungen für F^\uparrow im linken, für F^\downarrow im mittleren und für die Abkühlungsraten im rechten Bild.

mehr. Für F^\downarrow ergeben sich bei Abnahme von p_0 hingegen zunehmend zu große Werte. Die Ursache liegt in der Näherung der Absorptionskoeffizienten nahe der Linienzentren. Eine Diskussion hierüber erfolgt im nächsten Kapitel.

Für F^\uparrow lassen sich die geringsten Abweichungen erzielen, wenn für p_0 ein Wert zwischen 500 und 100 hPa genommen wird. Dies hat jedoch für die Näherung von F^\downarrow am Boden eine Verschlechterung zur Folge, da dort für $p_0 > 500$ hPa die geringsten Abweichungen auftreten.

Die Abweichungen der Flußdichten in Abb. 18 erwecken den Eindruck, als sei ein hoher Referenzdruck beim Erstellen der k-Verteilung vorteilhaft. Dies gilt jedoch nur für die Strahlungsflüsse in der Troposphäre. In der Stratosphäre hingegen wird zum einen die in Abschnitt 5.2 erläuterte, geringfügige Zunahme des exakten F^\uparrow nicht wiedergegeben. Zum anderen sind die Werte des exakten und des approximierten F^\downarrow sehr klein, so daß die geringen Abweichungen in der Abbildung darüber hinwegtäuschen, daß in der Stratosphäre F^\downarrow sehr schlecht approximiert wird.

Dies wirkt sich auf die Abkühlungsraten aus, für die die Höhenabhängigkeit

der Nettostrahlungsflußdichten entscheidend ist. Die großen Abweichungen der Abkühlungsraten in der Stratosphäre zeigen, daß der Gradient von zumindest einem der auf- bzw. abwärtsgerichteten Strahlungsflüsse schlecht approximiert wird.

k-Verteilungen mit geringem Referenzdruck repräsentieren in der oberen Stratosphäre die spektralen Absorptionskoeffizienten am besten. Insbesondere gilt dies für die Linienzentren, für die die FWS Approximation bei Anwendung eines hohen Referenzdrucks um einige Zehnerpotenzen zu kleine Absorptionskoeffizienten liefert. Vor allem wird für die Stratosphäre bei Verwendung eines hohen Referenzdrucks die Variabilität der Absorptionskoeffizienten in den dort sehr schmalen Linien nicht erfaßt. Daher werden in der oberen Stratosphäre die Abkühlungsraten bei Verwendung eines niedrigen Referenzdrucks am besten approximiert. Die Abweichung von L-f-L berechneten Abkühlungsraten beträgt für $p_0 = 10$ hPa ca. -3 K/d.

Voraussetzung für die Anwendbarkeit der Flügelnäherung ist gewesen, daß Fehler bei den Absorptionskoeffizienten in den Linienzentren sich bei der Transmission kaum auswirken. Abb. 18 nach zu urteilen, kann diese Argumentation aber nur für die Troposphäre aufrechterhalten werden, wobei ein hoher Referenzdruck verwendet werden muß. In der Stratosphäre ist hingegen eine genaue Näherung der Strahlungsflüsse und Abkühlungsraten durch k-Verteilungsmodelle mit FWS Approximation nicht möglich.

7.3 Approximation der Planckfunktion

Der spektrale Verlauf der Planckfunktion (Gl. 4) ist in Abb. 9 auf Seite 40 dargestellt. Um die Planckfunktion in k-Verteilungsmodellen zu berücksichtigen, wird das IR eingeteilt, wobei für jeden Teilbereich $\Delta\nu$ eine eigene k-Verteilung berechnet wird.

Zur Gliederung des IR wird der spektrale Verlauf der Planckfunktion bei einer vorgegebenen Temperatur T_b herangezogen. Dazu wird der Wertebereich der Planckfunktion in Klassen mit gleicher Breite eingeteilt. Dabei bleiben gleiche Wertebereiche, die zu beiden Seiten des Maximums der Planckfunktion liegen, getrennt. Das Wiensche Verschiebungsgesetz (mit der Boltzmann Konstanten k)

liefert die Wellenzahl des Maximums.

$$\nu_w = \frac{c_w k}{hc} T_b \quad (57)$$

$c_w \simeq 2,82144$ ist durch Iteration bestimmt worden. Mit ν_w wird dann das Maximum der Planckfunktion für T_b berechnet. Aus den Klassengrenzen für die Planckfunktion lassen sich die dazugehörigen Wellenzahlen bestimmen, die die Grenzen der Intervalle $\Delta\nu$ im IR bilden. Abschließend werden die beiden Klassen der Planckfunktionswerte und somit auch die beiden Teilintervalle, die unmittelbar neben dem Maximum der Planckfunktion liegen, zusammengefaßt. Die Unterteilung des Wertebereichs der Planckfunktion in n Teilbereiche liefert also $2n - 1$ Intervalle $\Delta\nu$.

Zunächst wird eine einfache Methode erläutert, um die Planckfunktion in k-Verteilungsmodellen zu berücksichtigen: Im Bereich $\Delta\nu$ wird für jede atmosphärische Schichtgrenze für die dort vorhandene Temperatur die mittlere Planckfunktion

$$\bar{B}_{\Delta\nu}(T) = \frac{1}{\Delta\nu} \int_{\Delta\nu} B_\nu(T) d\nu \quad (58)$$

gebildet, die dann im k-Verteilungsmodell angewandt wird.

Im folgenden wird eine zweite Methode erläutert, die Planckfunktion in k-Verteilungsmodellen zu berücksichtigen. Das IR wird dabei in gleicher Weise wie oben erläutert eingeteilt, wobei ebenfalls eigene k-Verteilungen für jedes $\Delta\nu$ berechnet werden. Die Mittelwerte der Planckfunktion zu den einzelnen Schichtgrenzen werden aber nicht verwendet. Vielmehr wird für jede Absorptionsklasse ein repräsentativer Wert B_r der Planckfunktion zu einer vorgegebenen Temperatur T^* und eine repräsentative Wellenzahl ν_r ermittelt. M bezeichnet die Anzahl der Besetzung in einer Klasse und $\delta\nu_j$ die Breite der dazugehörigen Spektralintervalle. Es wird vorausgesetzt, daß die Planckfunktion im Bereich von $\delta\nu_j$ spektral konstant ist.

$$B_r(T^*) = \left(\sum_{j=1}^M B_{\nu_j}(T^*) \delta\nu_j \right) / \sum_{j=1}^M \delta\nu_j \quad (59)$$

$$\nu_r = \left(\sum_{j=1}^M \nu_{\nu_j} \delta\nu_j \right) / \sum_{j=1}^M \delta\nu_j \quad (60)$$

In den Rechnungen dieser Arbeit ist $T^* = 250$ K angewandt worden. Die Temperaturabhängigkeit der repräsentativen Planckfunktionsterme ist in den k-Verteilungsmodellen genähert durch (Hergeleitet aus dem Quotienten der Planckfunktion bei gleicher Wellenzahl für zwei Temperaturen)

$$B_r(T) = B_r(T^*) \left(e^{\frac{hc}{kT^*} \nu_r} - 1 \right) / \left(e^{\frac{hc}{kT} \nu_r} - 1 \right) \quad (61)$$

Alternativ zu Gl. 61 kann auf die Verwendung der repräsentativen Planckfunktionsterme verzichtet und statt dessen ν_r direkt in die Planckfunktion (Gl. 4) eingesetzt werden. Jedoch haben Rechnungen ergeben, daß dies die Genauigkeit der approximierten Strahlungsflußdichten geringfügig verschlechtert.

Die Mittelung der Planckfunktion nach Gl. 58 und die Verwendung der repräsentativen Planckfunktionsterme nach Gl. 61 sind in dem k -Verteilungsmodell, das im nächsten Kapitel beschrieben ist, verwendet worden, da dies genauer ist als das Modell mit modifizierter FWS Approximation. Der Wertebereich der Planckfunktion ist dabei in acht gleich große Bereiche unterteilt worden, d.h. das IR ist in 15 unterschiedlich große Teilintervalle gegliedert. Die Abweichungen von den entsprechenden L-f-L berechneten Strahlungsflußdichten sind in Abb. 19 dargestellt.

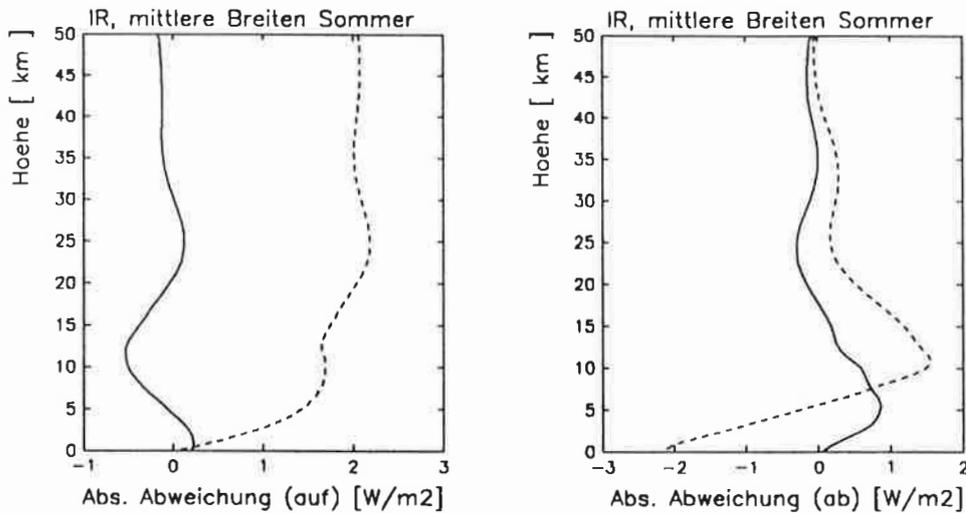


Abb. 19: Vergleich zweier Verfahren, die Planckfunktion in k -Verteilungsmodellen zu approximieren. Darstellung von F^\uparrow (links) und F^\downarrow (rechts) als Abweichungen von L-f-L Rechnungen bei Anwendung des Mittelwertes $\bar{B}_{\Delta\nu}(T)$ (gestrichelte Kurven) und bei Anwendung der repräsentativen Planckfunktionsterme $B_r(T)$ (durchgezogen).

Die Abweichungen für F^\uparrow in Abb. 19 sind bei der Anwendung von $B_r(T)$ in fast allen Teilen der Atmosphäre deutlich geringer als bei der Verwendung der Mittelwerte $\overline{B}_{\Delta\nu}(T)$. In der Stratosphäre beträgt der Unterschied ca. 2 W/m^2 . Nur am Boden ist die Anwendung des Mittelwertes besser, da bei diesem Verfahren die Strahldichten des Bodens spektral integriert werden (die kleine Abweichung vom L-f-L berechneten Wert für F^\uparrow am Boden ist durch eine unterschiedliche Auflösung bei der Integration verursacht worden). Die Anwendung von $B_r(T)$ liefert für F^\uparrow am Boden nicht den exakten Wert, da die Werte von $B_r(T^*)$ der einzelnen Klassen die Planckfunktion bei der Temperatur T^* repräsentieren. Die Anwendung von Gl. 61 auf die Bodentemperatur ergibt für diese dann im allgemeinen nicht die mit der Bodentemperatur berechenbare repräsentative Planckfunktion.

Für F^\downarrow findet man ebenfalls geringere Abweichungen bei der Anwendung von $B_r(T)$. Am Boden beträgt der Unterschied zwischen beiden Verfahren ca. 2 W/m^2 .

Die Genauigkeit, mit der die Planckfunktion bei Anwendung von $B_r(T)$ in k-Verteilungsmodellen berücksichtigt wird, hängt von der Anzahl der k-Verteilungsterme ab. Werden k-Verteilungen mit einer deutlich geringeren Anzahl von Termen als die hier betrachteten verwendet, wird die Planckfunktion zwangsläufig schlechter approximiert. Für k-Verteilungen mit wenig Termen muß dann geprüft werden, ob die Anwendung von $B_r(T)$ oder von $\overline{B}_{\Delta\nu}(T)$ besser ist. Zumal vorab nicht gesagt werden kann, bei welchem Verfahren sich die Fehler aller Näherungen günstiger kompensieren.

7.4

Kontinuumabsorption in k-Verteilungsmodellen

Die Berücksichtigung der Kontinuumabsorption des Wasserdampfs in k-Verteilungsmodellen ist denkbar einfach. Mit der repräsentativen Wellenzahl ν_r (Gl. 60) kann entsprechend den L-f-L Rechnungen nach den Gleichungen 28 bis 31 die optische Dicke $\Delta\tau$ der einzelnen Schichten für die Kontinuumabsorption bestimmt werden.

8

Berücksichtigung der Linienzentren in k-Verteilungsmodellen

In den vorangegangenen Abschnitten ist deutlich geworden, daß mit der FWS Approximation eine genaue und gleichzeitige Bestimmung der Strahlungsflüsse und Abkühlungsraten in der Stratosphäre nur unzureichend zu verwirklichen ist. Dies ist auch nicht weiter überraschend, da die spektralen Absorptionskoeffizienten der Linienzentren lediglich für den Zustand (p_0, T_0) korrekt wiedergegeben werden. Im folgenden wird ein Verfahren angegeben, das die Linienzentren näherungsweise berücksichtigt. Es ist aus zwei methodisch unterschiedlichen Teilschritten zusammengesetzt: Erstens wird der spektrale Absorptionskoeffizient aufgeteilt in den Beitrag, der aus dem Zentralbereich der Linien stammt, und in den Beitrag von Flügeln entfernt liegender Linien. Die Flügel- und Zentralbereiche sind in der multivariaten k-Verteilung durch eigene Dimensionen vertreten. Zweitens wird ein Korrekturfaktor eingeführt, der es ermöglichen soll, einen Wechsel der Druckabhängigkeit der spektralen Absorptionskoeffizienten von Zentrums- zu Flügelcharakter zu berücksichtigen, sofern ein Wechsel vorhanden ist.

8.1

Betrachtungen über den Wechsel der Druckabhängigkeit der Absorptionskoeffizienten

In Abschnitt 7.1 ist bereits erwähnt worden, daß es spektrale Absorptionskoeffizienten gibt, die bei geringem Druck durch das Zentrum einer Linie bestimmt sind, aber bei hohem Druck von den dann größeren Werten der Flügel anderer Linien dominiert werden. Beispielsweise gilt dies für die Spektralbereiche nahe den Zentren einiger der in Abb. 14 auf Seite 51 dargestellten Wasserdampflinien. Der in der Abbildung gestrichelt eingezeichnete, spektrale Absorptionskoeffizient wird bei hohem Druck (rechte, obere Bild) durch den Flügel einer oder mehrerer starker Absorptionslinien dominiert, die außerhalb des im Bild dargestellten Spektralbereichs liegt bzw. liegen. Der Absorptionskoeffizient im Flügel einer Lorentzlinie ist proportional zu p (Die Temperaturabhängigkeit ist zweitrangig und wird im folgenden vernachlässigt); er nimmt mit abnehmendem Druck ab. Für das Zentrum ist jedoch die Proportionalität durch $1/p$ gegeben, d.h. der Absorptionskoeffizient nimmt mit abnehmendem Druck zu. Es kann daher zu

einem Wechsel der Druckabhängigkeit der spektralen Absorptionskoeffizienten in Abhängigkeit von der Höhe kommen. Bei der FWS Approximation werden jedoch alle repräsentativen Absorptionskoeffizienten entsprechend der Druck- und Temperaturabhängigkeit von Linienflügeln berücksichtigt, so daß dominierende Zentren falsch approximiert werden. Aber nicht nur das Zusammenwirken verschiedener Linien kann zu einem Wechsel der Druckabhängigkeit führen. Er ist auch bei starken Linien vorhanden. Die Verbreiterung der Linie mit zunehmendem Druck sorgt dafür, daß im Übergang vom Zentralbereich zum Flügel Absorptionskoeffizienten existieren, die bei hohem Druck einen zentralen und bei niedrigem Druck einen flügelartigen Charakter haben. Ziel der folgenden Betrachtungen ist die Entwicklung eines Näherungsverfahrens, mit dem ein Wechsel der Druckabhängigkeit der Absorptionskoeffizienten in der FWS Approximation berücksichtigt werden kann.

Ausgangspunkt ist der Quotient von zwei Absorptionskoeffizienten der i -ten Lorentzlinie zur selben Wellenzahl für die Zustände (p, T) und (p_0, T_0) .

$$\frac{k_{i\nu}(p, T)}{k_{i\nu}(p_0, T_0)} = \eta^{\vartheta_i} \frac{S_i(T_0) \frac{\alpha_i(p_0, T_0)}{\Delta\nu_i^2 + \eta^2 \alpha_i^2(p_0, T_0)}}{S_i(T_0) \frac{\alpha_i(p_0, T_0)}{\Delta\nu_i^2 + \alpha_i^2(p_0, T_0)}} = \eta^{\vartheta_i} \frac{1 + \psi_{i\nu}}{1 + \eta^2 \psi_{i\nu}} \quad (62)$$

Die Abhängigkeit der Lorentzhalbwidthsbreite von Druck und Temperatur ist wieder durch $\eta = (p/p_0)(T_0/T)^n$ gegeben. Die Temperaturabhängigkeit der Linienstärke ist mit ϑ bezeichnet und $\psi_{i\nu} = \frac{\alpha_i^2(p_0, T_0)}{\Delta\nu_i^2}$. Der Wertebereich für die Funktion $\psi_{i\nu}$ lautet $0 < \psi_{i\nu} < \infty$. $\psi_{i\nu}$ ist nur abhängig vom Abstand $\Delta\nu_i$ des betrachteten Linienzentrums von der betrachteten Wellenzahl.

Die Grenzwertübergänge

$$\lim_{\Delta\nu_i \rightarrow \infty} \frac{k_{i\nu}(p, T)}{k_{i\nu}(p_0, T_0)} = \eta^{\vartheta_i} \quad \text{und} \quad \lim_{\Delta\nu_i \rightarrow 0} \frac{k_{i\nu}(p, T)}{k_{i\nu}(p_0, T_0)} = \frac{\vartheta_i}{\eta}$$

ergeben die Druck- und Temperaturabhängigkeit der Lorentzlinienflügel bzw. des -zentrums.

Werden die Beiträge aller Lorentzlinien betrachtet, und ist γ der Quotient der beiden Absorptionskoeffizienten aller Lorentzlinien eines Absorbers an der Spektralstelle ν für die Zustände (p, T) und (p_0, T_0) , so ist:

$$\gamma_\nu \equiv \frac{k_\nu(p, T)}{k_\nu(p_0, T_0)} \approx \eta^{\vartheta_\nu} \frac{\sum_{i=1}^L S_i(T_0) \frac{\alpha_i(p_0, T_0)}{\Delta\nu_i^2 + \eta^2 \alpha_i^2(p_0, T_0)}}{\sum_{i=1}^L S_i(T_0) \frac{\alpha_i(p_0, T_0)}{\Delta\nu_i^2 + \alpha_i^2(p_0, T_0)}} \quad (63)$$

ϑ bezeichnet nun die Approximation der Temperaturabhängigkeit der Liniestärken durch die effektive LSE.

Man kann davon ausgehen, daß der Absorptionskoeffizient in den meisten Spektralbereichen von jeweils einer Linie oder von einer Gruppe von Linien (starke Linien mit großem Abstand von der betrachteten Wellenzahl) dominiert wird, wobei in unterschiedlichen Höhen ein Wechsel der dominierenden Linien vorkommen kann. Daher wird in Analogie zu Gl. 62 ein Korrekturfaktor mit einer Funktion ψ eingeführt, der hauptsächlich durch die dominierende Linie(n) bestimmt ist:

$$\gamma_\nu = \eta\vartheta_\nu \frac{1 + \psi_\nu}{1 + \eta^2\psi_\nu} \quad (64)$$

Die Funktionen ψ , γ und η sind abhängig vom aktuellen Druck p , dem Referenzdruck p_0 sowie von T und T_0 . Die modifizierte FWS Approximation $\gamma_\nu \approx \eta\vartheta_\nu$ ist also mit einem Faktor versehen, der als Dominanzfaktor bezeichnet wird. Der Dominanzfaktor beinhaltet dabei den möglichen Wechsel der Druck- und Temperaturabhängigkeit des Absorptionskoeffizienten vom Flügel- zum Zentrumscharakter. Eine elementare Umformung von Gl. 64 ergibt schließlich eine Gleichung für ψ .

$$\psi_\nu = \frac{\gamma_\nu - \vartheta_\nu\eta}{\vartheta_\nu\eta - \gamma_\nu\eta^2} \quad (65)$$

Eine Diskussion der Gl. 65 ist aufgrund der Vielfalt, die der Quotient der Absorptionskoeffizienten γ annehmen kann, nur in groben Zügen durchführbar, zumal in der Stratosphäre nicht das Lorentz- sondern das Voigtprofil anzuwenden ist. Es lassen sich jedoch einige allgemeinere Aussagen machen:

- Für $\eta = 1$, d.h. für den Referenzzustand, ist $\gamma = \vartheta = 1$ mit der Folge, daß die obige Gleichung unbestimmt ist. Der auftretende mathematische Pol läßt sich mit der Regel von de l'Hospital schließen. Die Kenntnis des genauen Wertes von ψ an der Stelle des Pols ist für die Anwendung von ψ in Gl. 64 jedoch nicht erforderlich, da jeder beliebige Wert von ψ den unveränderten Absorptionskoeffizienten zum Zustand p_0, T_0 liefert.
- Wird der Absorptionskoeffizient durch Flügel weit entfernter Linien dominiert, sind die Werte von ψ klein. Es gilt dabei die Proportionalität $\psi \sim 1/\Delta\nu'^2$, wobei $\Delta\nu'$ den Abstand der dominierenden Linie (oder bei einer Gruppe von Linien einen effektiven Abstand) von der betrachteten Wellenzahl bezeichnet. Für große Abstände geht Gl. 64 in die modifizierte FWS Approximation über.

- Die Druckabhängigkeit der Funktion ψ_ν im Zentrum einer starken Linie ist etwas schwieriger anzugeben. Würde man den Grenzwert für $\Delta\nu \rightarrow 0$ (Seite 68) einer isolierten Linie in Gl. 65 einsetzen, erhielte man im Nenner Null und ψ_ν wäre damit nicht definiert. Tatsächlich existieren aber isolierte Linien nicht, sondern der spektrale Absorptionskoeffizient an der Spektralstelle des Zentrums einer starken Linie ist gegeben durch den Beitrag der starken Linie selbst und den im allgemeinen kleinen Beitrag der übrigen Linien. Wird vereinfachend angenommen, daß dieser Beitrag durch den Absorptionskoeffizienten k_{ν_j} von den Flügeln entfernter Linien zustandekommt, ergibt sich für den Quotienten der Absorptionskoeffizienten im Zentrum der i -ten Lorentzlinie γ_z mit $\Delta\nu_i = 0$:

$$\gamma_{z_i} = \frac{\frac{S_i(T)}{\pi} \frac{1}{\eta\alpha_i(p_0, T_0)} + \eta k_{\nu_j}}{\frac{S_i(T_0)}{\pi} \frac{1}{\alpha_i(p_0, T_0)} + k_{\nu_j}} \quad (66)$$

Eine einfache Umformung und die Verwendung von

$$\vartheta_i = \frac{S_i(T)}{S_i(T_0)} \quad \epsilon = \frac{\pi k_{\nu_j}}{S_i(T)} = \frac{1}{\vartheta_i} \frac{\pi k_{\nu_j}}{S_i(T_0)}$$

führt zu

$$\gamma_{z_i} = \vartheta_i \frac{\frac{1}{\eta\alpha_i(p_0, T_0)} + \eta\epsilon}{\frac{1}{\alpha_i(p_0, T_0)} + \epsilon\vartheta_i} \quad (67)$$

Einsetzen in Gl. 65, wobei wegen der angenommenen Dominanz des Absorptionskoeffizienten der i -ten Linie $\vartheta \simeq \vartheta_i$ gesetzt werden kann, und anschließende Umformung ergibt

$$\psi_{z_i} = \frac{\frac{1}{\eta^2\alpha_i(p_0, T_0)} + \epsilon - \frac{1}{\alpha_i(p_0, T_0)} - \epsilon\vartheta_i}{\epsilon\vartheta_i - \eta^2\epsilon} \quad (68)$$

Sowohl für $\epsilon \ll 1$ und $\eta \ll 1$ als auch $\epsilon \ll 1$ und $\eta \gg 1$ erhält man durch Streichen der kleinen Terme

$$\psi_{z_i} \simeq \frac{a}{\eta^2} \quad ,$$

wobei a für $\eta \gg 1$ durch $1/\epsilon\alpha_i(p_0, T_0)$ und für $\eta \ll 1$ durch $1/\vartheta_i\epsilon\alpha_i(p_0, T_0)$ gegeben ist. Mit der Näherung $\eta \simeq p/p_0$ ergibt sich die Proportionalität $\psi_{z_i} \sim 1/p^2$.

- Für reine Flügelbereiche ist ψ abhängig von der Genauigkeit der Approximation der Temperaturabhängigkeit der Linienstärke, d.h. von ϑ . Bei der FWS Approximation ist für große Abstände der Linienzentren von der betrachteten Wellenzahl (entsprechend dem Grenzwert für $\Delta\nu \rightarrow \infty$ auf Seite 68)

$$\gamma \approx \eta(\vartheta + \vartheta') \quad ,$$

wobei ϑ' den Fehler der approximierten Temperaturabhängigkeit beschreibt. Nach Einsetzen in Gl. 65 ergibt sich mit Berücksichtigung von $|\vartheta'/\vartheta| \ll 1$

$$\psi \approx \frac{\vartheta'}{\vartheta} \frac{1}{1 - \eta^2} \quad .$$

Hier können negative Werte von ψ durch die Fehler bei der Approximation der Temperaturabhängigkeit der Linienstärken auftreten. Ist die Temperaturabhängigkeit der Linienstärken durch die Anwendung der effektiven LSE unterschätzt (d.h. $\vartheta' < 0$), liegen die negativen Werte in Höhen mit $\eta < 1$, ansonsten darunter.

Die Funktion ψ_ν (Gl. 65) ist nicht allgemeingültig graphisch darstellbar. Jedoch kann ψ_ν monochromatisch in Abhängigkeit von der Höhe in einer vorzugebenden Atmosphäre und bei Festlegung von p_0 und T_0 bestimmt werden. Der Quotient der Absorptionskoeffizienten γ_ν wird dabei für jede atmosphärische Schicht mit L-f-L Methoden mit dem Voigtprofil berechnet.

In Abb. 20 ist ψ_ν für $p_0 = 10$ hPa bei unterschiedlichen Wellenzahlen dargestellt, und zwar als Kurvenschar im linken und rechten Bild vom Zentrum einer Linie (durchgezogene Kurve) in Richtung größerer Wellenzahlen gehend. Der Abstand zwischen den Kurven beträgt $\alpha(p_0, T_0)/2$ der jeweiligen Linie. Das mittlere Bild gilt für eine Spektralstelle ohne Linienzentrum, wobei das Zentrum der nächsten Linie ca. $0,1 \text{ cm}^{-1}$ entfernt ist. Die Kreise kennzeichnen negative Werte von ψ . Die Linien, auf denen das rechte Bild beruht, sind in Abb. 14 (rechte Spalte) auf Seite 51 dargestellt.

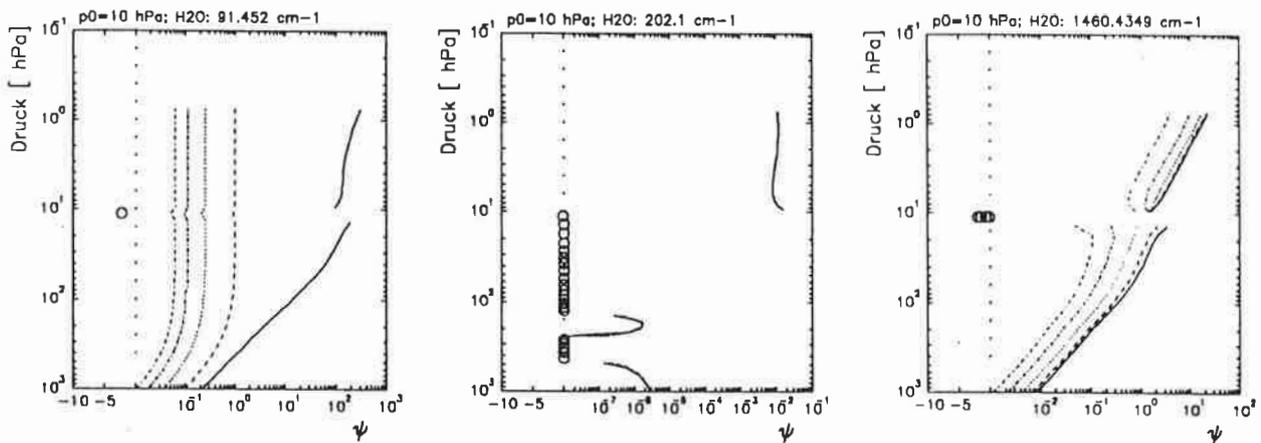


Abb. 20: ψ als Funktion vom Druck für Wasserdampfabsorption bei unterschiedlichen Wellenzahlen für $p_0 = 10$ hPa für den Sommer in mittleren Breiten. Die durchgezogenen Kurven gelten für die angegebenen Wellenzahlen, was im linken und rechten Bild gleichbedeutend mit dem Zentrum einer Linie ist. Die unterbrochenen Kurven folgen im Abstand von $\alpha(p_0, T_0)/2$ der "zentralen" Linie voneinander. Kreise kennzeichnen negative Werte von ψ . Die Rechnungen erfolgten nach Gl. 65, wobei γ_ν mit dem Voigtprofil bestimmt wurde.

In Abb. 21 ist ψ in Abhängigkeit von drei Referenzdrücken bei $\nu = 401.3789$ cm⁻¹ dargestellt: im linken Bild für $p_0 = 500$ hPa, im mittleren für 100 hPa und im rechten für 10 hPa.

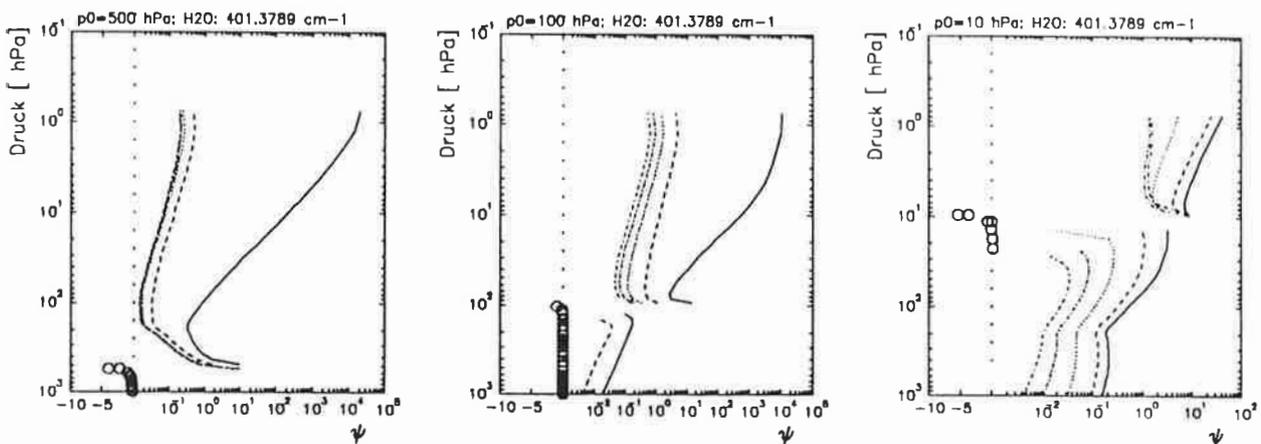


Abb. 21: Wie oben, jedoch für unterschiedliche Referenzdrücke bei der selben Wellenzahl.

Die Ergebnisse der oben durchgeführten Diskussion sind in den Kurven z. T. wiederzufinden:

- a) Für dominierende Linienzentren gilt näherungsweise die Proportionalität $\psi_\nu \sim 1/p^2$ (durchgezogene Kurven).
- b) Für dominierende Linienflügel ist ψ klein und unabhängig vom Druck (z.B. gestrichelte Kurven in Abb. 20 (links) in der Stratosphäre).
- c) Es kommt im Übergang vom Zentrum zum Flügel zu einem Wechsel der Druckabhängigkeit von ψ vom zentralen Charakter bei hohem Druck zum flügelartigen Charakter bei niedrigem Druck aufgrund der Abnahme der Linienbreite. So ist ψ für alle Kurven in Abb. 20 (links) bei hohem Druck proportional zu $1/p^2$ und bei niedrigem Druck unabhängig vom Druck (mit Ausnahme der "zentralen", durchgezogenen Kurve).
- d) Fehler bei der Approximation der Linienstärke können negative Werte von ψ zur Folge haben.

8.1.1

Anwendung des Dominanzfaktors

Wie läßt sich die im vorangegangenen eingeführte Funktion ψ für approximative Zwecke nutzen? In der bisher geschilderten Form sind immer noch L-f-L Rechnungen zur Bestimmung von ψ erforderlich. Für eine sinnvolle Anwendung ist daher eine einfache Rechenvorschrift nötig, mit der ψ ohne langwierige Berechnungen zumindest näherungsweise bestimmt werden kann.

Die Kurvenverläufe von ψ_ν lassen sich in grob zwei Gruppen einteilen: Zum einen ist ψ_ν in den Zentralbereichen von dominierenden Linien ungefähr proportional $1/p^2$, so daß ψ_ν bei einer doppeltlogarithmischen Darstellung vereinfacht als geradlinig angenommen werden kann. Zum anderen sind dominierende Flügelbereiche durch kleine Werte von ψ gekennzeichnet, die bei Anwendung von Gl. 65 den approximierten Absorptionskoeffizienten nur geringfügig beeinflussen.

Dieser Sachverhalt ließe sich z.B. nutzen, um L-f-L Rechnungen zu approximieren. Dabei sind zwar wie bisher zu jeder spektralen Stützstelle die Strahlungsflüsse und Abkühlungsraten zu berechnen. Die Absorptionskoeffizienten werden aber

nicht mehr zu jeder Schicht, sondern lediglich am Unter- und Oberrand der Atmosphäre sowie wie bei einem Referenzzustand in der Mitte bestimmt. Aus diesen werden dann die Quotienten der Absorptionskoeffizienten (γ_{unten} und γ_{oben}) berechnet. Nachdem die entsprechenden Werte von ψ_{unten} und ψ_{oben} logarithmiert worden sind, kann $\lg \psi(p)$ durch Interpolation genähert werden. Die Absorptionskoeffizienten werden dann mit Gl. 64 bestimmt. Zu den Werten am Oberrand der Atmosphäre muß noch angemerkt werden, daß diese aufgrund der Verwendung des Voigtprofils zwar von der dort vorauszusetzenden Temperatur abhängen, daß aber die Abhängigkeit der Absorptionskoeffizienten von der Wellenzahl vorherrscht. Als T_{oben} kann daher für alle Rechnungen der Wert 275 K angewendet werden, ohne zu große Fehler zu begehen.

Solche approximativen Modelle sind zwar im Rahmen dieser Arbeit nicht entwickelt worden, jedoch geschieht die Anwendung des Dominanzfaktors in den k-Verteilungsmodellen in ähnlicher Weise. Für jede Klasse werden in Analogie zur repräsentativen LSE von Seite 59 repräsentative Funktionswerte ψ_r^{unten} und ψ_r^{oben} gebildet:

$$\psi_r^{unten} = \frac{\sum_{j=1}^M \psi_j^{unten} k_{\nu_j} \delta \nu_j}{\sum_{j=1}^M k_{\nu_j} \delta \nu_j} \quad \text{und} \quad \psi_r^{oben} = \frac{\sum_{j=1}^M \psi_j^{oben} k_{\nu_j} \delta \nu_j}{\sum_{j=1}^M k_{\nu_j} \delta \nu_j} \quad (69)$$

Eventuelle negative Werte von ψ_r^{unten} bzw. ψ_r^{oben} werden dabei durch sehr kleine positive (10^{-10}) ersetzt. Eine weitere Ungenauigkeit entsteht dadurch, daß bei der Bestimmung einer k-Verteilung ϑ_ν nicht bestimmt werden kann, weil die atmosphärischen Temperaturprofile erst bei der Anwendung der k-Verteilung zur Verfügung stehen. Bei der Bestimmung von ψ wird daher vereinfachend $\vartheta = 1$ vorausgesetzt, d.h. es wird angenommen, daß die Temperaturabhängigkeit der Linienstärke auf ψ keinen Einfluß hat.

Bei der Anwendung der k-Verteilung wird $\lg \psi_r(p)$ aus den Werten von $\lg \psi_r^{unten}$ und $\lg \psi_r^{oben}$ zwischen $\lg p^{unten}$ und $\lg p^{oben}$ linear interpoliert. $\psi_r(p)$ wird in Gl. 64 eingesetzt.

Die Methode, mit Hilfe des Dominanzfaktors die Linienzentren zu berücksichtigen, ist in dem k-Verteilungsmodell mit modifizierter FWS Approximation angewandt worden. Die Abweichung der Strahlungsflußdichten von L-f-L berechneten ist in Abb. 22 durchgezogen dargestellt. Die Anwendung des Modells ohne Dominanzfaktor führt auf die gestrichelten Kurven. Der Referenzzustand ist

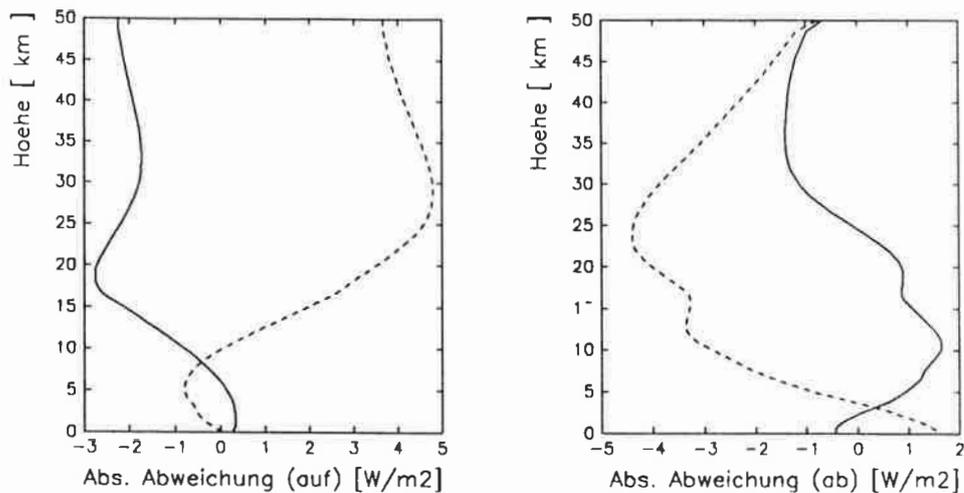


Abb. 22: Abweichung der mit k -Verteilungsmodellen approximierten von L-f-L berechneten Strahlungsflußdichten (links: F^\uparrow und rechts: F^\downarrow) für die Tropen. Gestrichelte Kurven mit der modifizierten FWS Approximation für $p_0 = 500$ hPa und $T_0 = 250$ K und durchgezogene mit der zusätzlichen Anwendung des Dominanzfaktors.

in beiden Fällen $p_0 = 500$ hPa und $T_0 = 250$ K. ψ_r^{oben} ist bei $p = 2$ hPa und ψ_r^{unten} bei $p = 1000$ hPa bestimmt worden.

Aus Abb. 22 wird deutlich, daß die Anwendung des Dominanzfaktors oberhalb von p_0 (bei ca. 5,5 km) zu kleine und unterhalb davon zu große aufwärtsgerichtete Strahlungsflußdichten ergibt. Bei der modifizierten FWA ohne Dominanzfaktor ist es umgekehrt. Jedoch ist der Absolutbetrag der Abweichung bei Anwendung des Dominanzfaktors in der Stratosphäre nur etwa halb so groß. Ähnliches gilt für F^\downarrow . Der Absolutbetrag der Abweichung ist mit dem Dominanzfaktor in 25 km Höhe um ca. 3 W/m^2 kleiner als ohne. Am Boden ergibt sich mit dem Dominanzfaktor $F^\downarrow \simeq -0,5 \text{ W/m}^2$ und ohne diesen ca. $1,5 \text{ W/m}^2$.

Rechnungen haben jedoch gezeigt, daß mit der hier vorgestellten Methode, die Linienzentren mit Hilfe des Dominanzfaktors im k -Verteilungsmodell zu berücksichtigen, es nicht möglich ist, die Abkühlungsraten in allen Bereichen der Atmosphäre ausreichend genau zu bestimmen. Daher ist eine zusätzliche Erweiterung der bisher betrachteten k -Verteilungsmodelle nötig.

8.2

Spaltung der repräsentativen Absorptionskoeffizienten in Zentralbereichs- und Flügelanteil

Sind bisher beim Erstellen der k -Verteilungen die spektralen Absorptionskoeffizienten verwendet worden, die sich aus den Beiträgen aller Linien ergeben, so wird im folgenden unterschieden zwischen den Beiträgen aus den Linienflügeln und aus den zentralen Bereichen. Die Breite der Linienzentren muß hierbei vorher festgelegt werden. Die beiden Koeffizienten $k_{\nu,z}$ und $k_{\nu,f}$ werden für jeden Absorber und jede Stützstelle in multivariate Absorptionsklassen einsortiert. Die Indizes z und f bezeichnen hierbei die Beiträge aus Linienflügeln bzw. Zentralbereichen. Die unter Anwendung einer multivariaten k -Verteilung bestimmte mittlere Transmission aus Gl. 43 wird somit zu

$$\bar{T}(u) \approx \sum_{l=1}^O a_l \exp\left\{-\sum_{m=1}^P (k_{zlm} + k_{flm})u_m\right\} \quad , \quad (70)$$

wobei k_{zlm} bzw. k_{flm} angibt, ob es sich um einen repräsentativen Absorptionskoeffizienten handelt, der aus Flügel- oder Zentralbereichen der Absorptionslinien gebildet worden ist.

Eine wesentliche Frage lautet nun: Wo ist die Grenze zwischen Zentral- und Flügelbereich einer Absorptionslinie zu ziehen? Um die Verhältnisse nahe der Linienzentren anschaulich zu machen, sind in Abb. 23 die Absorptionskoeffizienten künstlicher Spektrallinien zu unterschiedlichen Wellenzahlen in Abhängigkeit vom Abstand vom Zentrum dargestellt, wobei die Koeffizienten mit Hilfe des Voigtprofils bei gleicher Temperatur (250 K) für die Drücke $p = 1000$ hPa (durchgezogene Kurven), 100 hPa (gestrichelt), 10 hPa (gepunktet) und 1 hPa (punktgestrichelt) berechnet worden sind.

Für hohe Drücke erfolgt die Absorption nach dem Lorentzprofil, wobei der Absorptionskoeffizient in den Flügeln proportional zu η und im zentralen Bereich proportional zu $1/\eta$ ist, wobei die Breite des zentralen Bereichs vom Druck abhängig ist. Die Grenze zwischen dem Zentralbereich und dem Flügel kann daher nicht exakt gezogen werden, sondern es ist ein Übergangsbereich vorhanden, in dem die Druckabhängigkeit des Absorptionskoeffizienten bei hohem Druck durch zentralen und bei niedrigem Druck durch flügelartigen Charakter gegeben ist.

Für geringe Drücke ist der Unterschied zwischen dem Voigt- und dem Lorentzprofil erkennbar. Beim Voigtprofil wird bei geringem Druck die Halbwertsbreite

mit abnehmendem Druck nur noch geringfügig kleiner und die Absorptionskoeffizienten nehmen wesentlich weniger zu als beim Lorentzprofil.

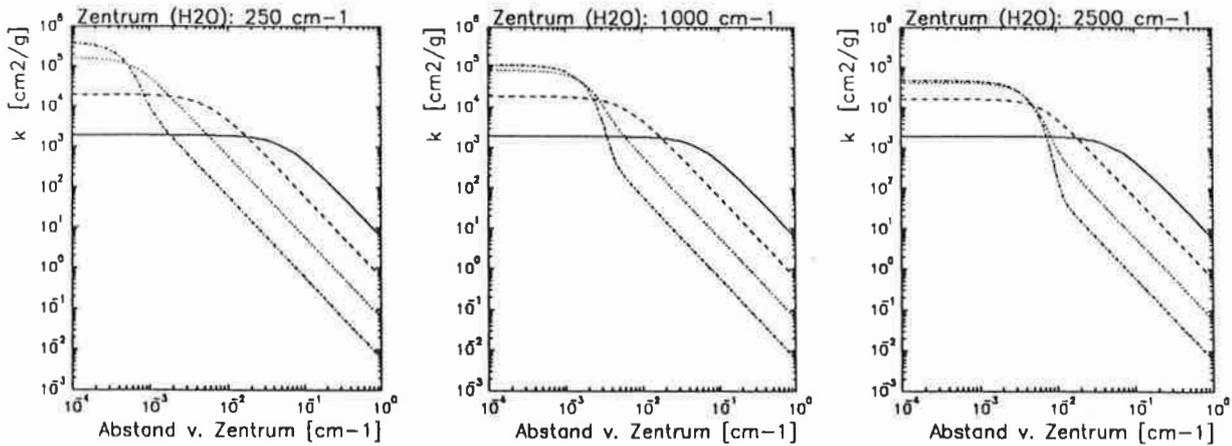


Abb. 23: Absorptionskoeffizient in Abhängigkeit vom Abstand vom Linienzentrum künstlicher Wasserdampfabsorptionslinien. Bei konstanter Temperatur (250 K) zeigen die durchgezogenen Kurven den Koeffizienten des Voigtprofils für $p = 1000$ hPa, gestrichelt für 100 hPa, gepunktet für 10 hPa und punktgestrichelt für 1 hPa an drei verschiedenen Spektralstellen im IR.

Ein interessanter Weg, die Höhenabhängigkeit der zentralen Linienbreite zu berücksichtigen, besteht darin, eine Druckabhängigkeit der Gewichte der k -Verteilungen für die zentralen repräsentativen Absorptionskoeffizienten einzuführen. Hiermit kann die Abhängigkeit der Halbwertsbreiten von η simuliert werden. Die Abhängigkeit der repräsentativen Absorptionskoeffizienten vom Druck wird entsprechend der Proportionalität für Flügel- bzw. Zentralbereiche berücksichtigt. Um dem Voigtprofil besser gerecht zu werden, kann dabei für die Zentralbereiche für die obere Stratosphäre zunächst vereinfachend angenommen werden, daß der Absorptionskoeffizient konstant ist. Erste Versuche zeigten, daß dieses Verfahren qualitativ die Strahlungsflüsse und Abkühlungsraten in der gesamten Atmosphäre wiedergibt. Jedoch wurde das Verfahren aus Termingründen nicht weiter entwickelt.

Vielmehr ist in dieser Arbeit die Anwendung des Dominanzfaktors mit der Zweiteilung des Absorptionskoeffizienten in die Beiträge aus den Linienflügeln und den Zentralbereichen kombiniert worden. Für jede Absorptionsklasse der k -Verteilung wird entsprechend der Vorgehensweise von Abschnitt 8.1.1 $\psi_{z,unten}^r$ und $\psi_{f,unten}^r$ sowie $\psi_{z,oben}^r$ und $\psi_{f,oben}^r$ berechnet.

Es hat sich gezeigt, daß die erzielten Ergebnisse ebenfalls, wie bei der modifizierten FWS Approximation selbst, empfindlich auf die benutzten Parameterwerte reagieren, so daß eine "Feineinstellung" der Parameter nötig ist. Auch erweist es sich in der oberen Stratosphäre für die Bestimmung der Absorptionskoeffizienten aus den Flügelbeiträgen als günstig, daß die Wirkung des Dominanzfaktor dort vermindert wird, indem $\log \psi_f^r(p)$ nur bis $p = 100$ hPa berechnet wird. Der Wert von $\log \psi_f^r(p)$ wird bei $p = 0,01$ hPa gleich Null gesetzt und dazwischen wird interpoliert. Hiermit wird verhindert, daß in der oberen Stratosphäre die Absorptionskoeffizienten aus Flügelbereichen (mit kleinen ψ -Werten) durch wenige Absorptionskoeffizienten mit zentralem Charakter (mit großen ψ -Werten) verfälscht werden.

Im folgenden sind die Parameter aufgeführt, mit denen das k-Verteilungsmodell, das als k-V-II Modell bezeichnet wird, die bisher am besten approximierten Strahlungsflüsse und Abkühlungsraten liefert:

Tabelle 6

Parameter im k-V-II Modell

p_{0z}	=	50 hPa	Referenzdruck für die Absorptionskoeffizienten der Zentralbereiche der Linien
p_{0f}	=	500 hPa	Referenzdruck für die Absorptionskoeffizienten der Linienflügel
T_{0z}	=	250 K	Referenztemperatur für Zentralbereiche
T_{0f}	=	250 K	Referenztemperatur für Flügel
$\alpha_L(p_{0z}, T_{0z})$			Abstand der Grenze zwischen Zentral- und Flügelbereich vom Linienzentrum
$p_{z,unten}$	=	1000 hPa	Druck für die Berechnung von $\psi_{z,unten}^r$
$p_{z,oben}$	=	2 hPa	Druck für die Berechnung von $\psi_{z,oben}^r$
$p_{f,unten}$	=	1000 hPa	Druck für die Berechnung von $\psi_{f,unten}^r$
$p_{f,oben}$	=	2 hPa	Druck für die Berechnung von $\psi_{f,oben}^r$
$\Delta \lg k_z$	=	0,5	Breite der Absorptionsklassen für Zentralbereiche
$\Delta \lg k_f$	=	0,5	Breite der Absorptionsklassen für Flügel

Mit dem k-V-II Modell sind Strahlungsübertragungsrechnungen für drei Modellatmosphären durchgeführt worden. Die Abweichungen der Ergebnisse von entsprechenden L-f-L Rechnungen sind in Abb. 24 dargestellt: durchgezogen für die Tropen, gestrichelt für den Sommer in mittleren Breiten und gepunktet für den subarktischen Winter, wobei die oberen Bilder absolute und die unteren prozentuale Abweichungen zeigen.

Die absoluten Abweichungen für F^{\uparrow} liegen im Bereich von $-0,6$ bis $+0,3 \text{ W/m}^2$. Die maximalen absoluten Abweichungen für F^{\downarrow} befinden sich in 5 km Höhe mit ca. 1 W/m^2 . Am Boden sind die absoluten Abweichungen für F^{\downarrow} kleiner als $0,3 \text{ W/m}^2$. Die Abkühlungsraten in der Troposphäre sind besser als $\pm 0,03 \text{ K/d}$ approximiert und in der Stratosphäre bis 45 km Höhe besser als $\pm 1 \text{ K/d}$. Die prozentualen Abweichungen für die Abkühlungsraten variieren um $\pm 10 \%$, mit Ausnahme im Bereich der Tropopause. Dort sind aber die Absolutwerte der Abkühlungsraten klein und z.T. wechselt das Vorzeichen.

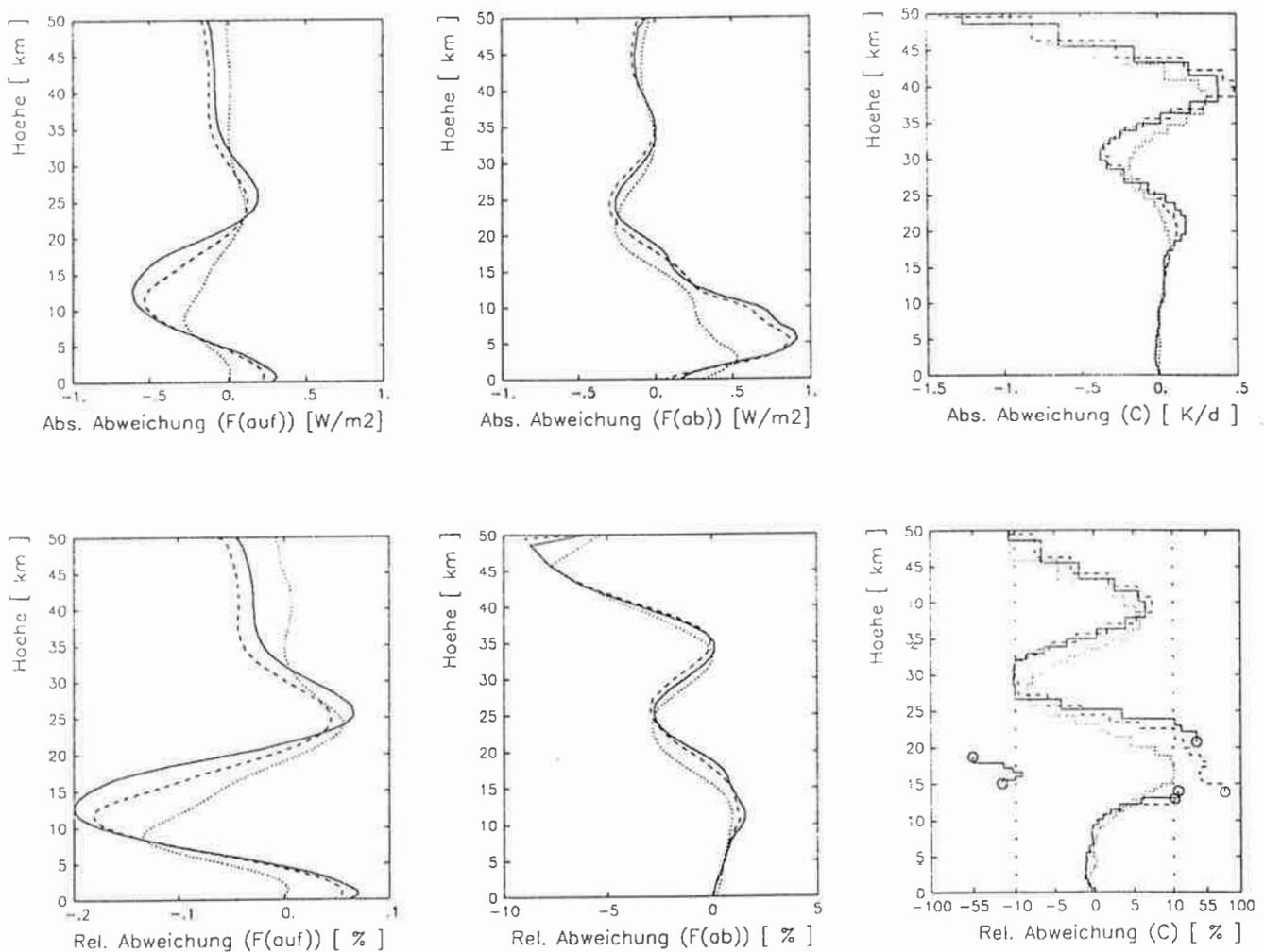


Abb. 24: Abweichungen der Strahlungsflußdichten (F) und Abkühlungsraten (C) nach dem k-V-II Modell von L-f-L Ergebnissen. Durchgezogene Kurven für die tropische Modellatmosphäre, gestrichelte für den Sommer in mittleren Breiten und gepunktete für den subarktischen Winter. Kreise kennzeichnen Werte, die außerhalb des Bildrahmens liegen.

Teil 4: Ergebnisse der Strahlungsübertragungsmodelle

9

Fehlerabschätzung

Bei der bisherigen Entwicklung der Modelle ist hauptsächlich angestrebt worden, die numerischen Fehler bei den L-f-L Modellen zu minimieren, bzw. die Genauigkeit der L-f-L Ergebnisse mit den k-Verteilungsmodellen zu erreichen. In diesem Kapitel wird abgeschätzt, welche Genauigkeit aufgrund physikalischer Unsicherheiten überhaupt erzielt werden kann. Die beiden größten Fehlerquellen sind hierbei fehlerbehaftete Linienparameter und die bereits in Abschnitt 3.2.2 erörterten, unzureichenden Kenntnisse über die extremen Absorptionslinienflügel.

9.1

Einfluß fehlerbehafteter Linienparameter

Bei allen bisherigen Betrachtungen ist bei der Anwendung der Linienparameter aus dem HITRAN Atlas davon ausgegangen worden, daß diese korrekt sind. Die Parameter sind jedoch nicht exakt bekannt, da sie mittels Messungen und Näherungen quantenmechanischer Gesetzmäßigkeiten bestimmt werden und somit fehlerbehaftet sein können. Rothman et al. (1986) diskutieren detailliert die Fehler der Linienstärken und Halbwertsbreiten. Im folgenden werden Sensitivitätsbetrachtungen für L-f-L Rechnungen bezüglich möglicher, systematischer Fehler durchgeführt. Jedoch können nicht die Unsicherheiten der Parameter einzelner Linien verwendet werden, denn diese sind in dem HITRAN Atlas nicht aufgeführt. Vielmehr wird aufgrund der Angaben von Rothman et al. (1986) ein "mittlerer" Fehler von 10 % für die Linienstärken und die Halbwertsbreiten als grober Schätzwert verwendet.

Um die maximalen Fehler für die Flüsse und Abkühlungsraten zu finden, werden die Fehlerschranken für die Halbwertsbreite und Linienstärke in einer Weise kombiniert, daß ihre Gesamtwirkung maximal ist. Aus dem Lorentz- (Gl. 13) und dem Voigtprofil (Gl. 14) folgt, daß eine vergrößerte Linienstärke den Absorptionskoeffizienten in allen Abständen vom Linienzentrum vergrößert.

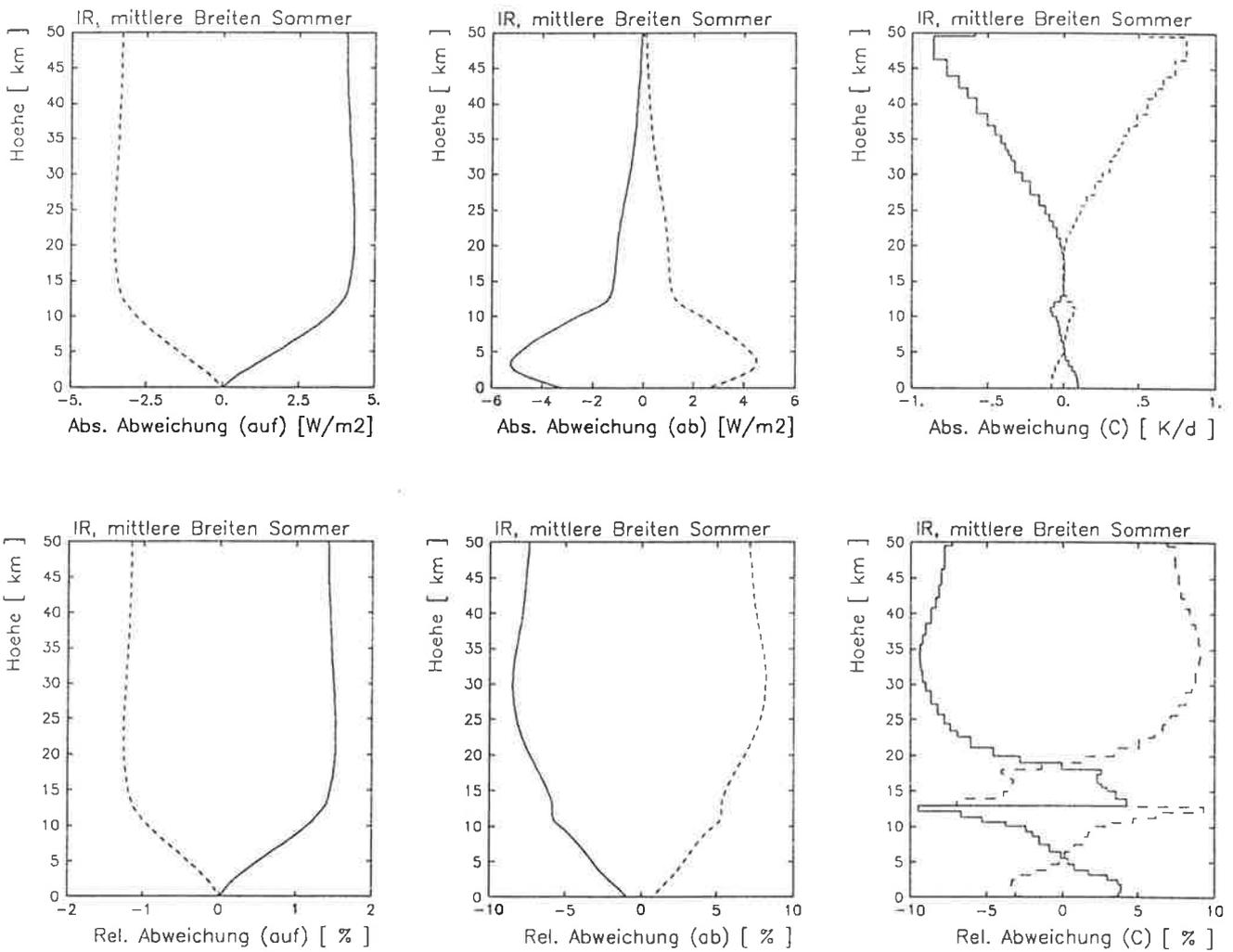


Abb. 25: Abweichungen von F^\uparrow (links), F^\downarrow (mitte) und den Abkühlungsraten C (rechts) für den Sommer in mittleren Breiten von solchen, bei denen die Linienparameter als exakt vorausgesetzt sind. Die Annahme verminderter Linienstärken und Lorentzhalbwidths um -10 % führt auf die durchgezogene Kurve, die Erhöhung um 10 % auf die gestrichelte.

Die Vergrößerung der Halbwertsbreite hat in den Flügeln eine Vergrößerung des Absorptionskoeffizienten zur Folge. Für die Linienzentren zeigen Rechnungen mit dem Voigtprofil, daß der Absorptionskoeffizient bei großen Wellenzahlen und kleinem Druck nur gering von der Lorentzhalbhwertsbreite abhängt, so daß in der Stratosphäre im wesentlichen die Fehler der Linienstärken zum Tragen kommen. Bei hohem Druck ist die Linienform überwiegend durch die Stoßdämpfung bestimmt, so daß eine Vergrößerung der Halbwertsbreite den Absorptionskoeffizienten nach dem Lorentzprofil in den Zentralbereichen vermindert und in den Flügeln vergrößert. Da aber Änderungen des Strahlungstransports bei hohem Druck hauptsächlich durch die Linienflügel verursacht werden, ist der Gesamtfehler dann maximal, wenn das Vorzeichen der Fehlerschranken sowohl bei den Linienstärken als auch bei den Halbwertsbreiten übereinstimmt, d.h. beide gleichzeitig vermindert bzw. erhöht werden.

Um die Sensitivität der Strahlungsflüsse und der Abkühlungsraten bezüglich der Variationen der Linienparameter zu untersuchen, sind Rechnungen für den Sommer in mittleren Breiten durchgeführt worden für: a) Die Linienstärken und Lorentzhalbhwertsbreiten aus dem HITRAN Parameteratlas sind um 10 % vermindert. b) Sie sind unverändert angewandt. c) Sie sind um 10 % vergrößert. Die Abweichungen der Fälle a) und c) von b) sind in Abb. 25 für die Strahlungsflußdichten und Abkühlungsraten dargestellt, wobei die durchgezogenen Kuven für die Verminderung der Parameter und die gestrichelten für die Vergrößerung gelten.

F^{\uparrow} ist bei vorausgesetzter Kenntnis der Linienparameter auf $\pm 10\%$ Genauigkeit am Oberrand der Atmosphäre auf etwa -3 W/m^2 bis 4 W/m^2 bestimmbar. Die größten Unsicherheiten bei F^{\uparrow} sind sogar größer, sie treten mit ca. $\pm 5 \text{ W/m}^2$ in 3 km Höhe auf. Die Abkühlungsraten sind auf etwa $\pm 0,8 \text{ K/d}$ in der oberen Stratosphäre bestimmt. In der Troposphäre ergeben sich Ungenauigkeiten von ca. $0,1 \text{ K/d}$.

Diese Abweichungen geben eine Vorstellung über mögliche Unsicherheiten in L-f-L Strahlungstransportrechnungen aufgrund der gegenwärtigen Kenntnis der Linienparameter.

9.2

Auswirkung abgeschnittener Linien

Im folgenden wird untersucht, inwieweit das Abschneiden der Absorptionslinien bei einem willkürlich festgelegten Abstand vom Linienzentrum die Ergebnisse beeinflusst. In den Abschnitten über L-f-L Modelle war ja die Linienreichweite auf 10 cm^{-1} begrenzt worden, um u.a. die Vergleichbarkeit mit der ICRCCM Studie (WMO, 1984) zu gewährleisten.

Im Zusammenhang mit der Kontinuumsabsorption ist auf Seite 14 bereits erläutert worden, daß in den extremen Flügeln die wahre Linienform vom Lorentzprofil abweicht. In L-f-L Rechnungen können empirisch bestimmte Profilmomente angewandt werden (Menoux et al., 1987), die u.a. asymmetrische Abweichungen vom Lorentzprofil erfassen, oder auch sogenannte "line coupling" Effekte, die Interferenzen zwischen Rotationsübergängen während der Absorption berücksichtigen (Strow und Reuter, 1988). Ihre Berücksichtigung in k-Verteilungsmodellen ist möglich, falls die entsprechenden Absorptionskoeffizienten die gleiche Druck- und Temperaturabhängigkeit haben wie die Flügel des Lorentzprofils.

Im folgenden wird jedoch nur abgeschätzt, inwieweit der Strahlungstransport durch die Reichweite des Lorentzprofils beeinflusst wird. Mit dem k-V-II Modell sind Rechnungen mit unterschiedlichen Abschneideentfernungen durchgeführt worden. Die Abweichungen der Resultate von denen mit der Reichweite 10 cm^{-1} sind in Abb. 26 dargestellt, wobei die Reichweite 5 cm^{-1} auf die durchgezogene Kurve, 20 cm^{-1} auf die gestrichelte und 50 cm^{-1} auf die gepunktete führt.

Die ausschließliche Verwendung von Ergebnissen des k-V-II Modells bei der Bestimmung der Abweichungen hat zur Folge, daß Fehler, deren Ursache in der Methodik der k-Verteilungsmodelle liegen, sich nahezu eliminieren, wie an den Abweichungen für die Abkühlungsraten in der oberen Stratosphäre zu sehen ist.

Menoux et al. (1987) haben für einige CO_2 Linien gefunden, daß bereits bei kleinen Abständen vom Zentrum (Größenordnung $0,5$ bis 3 cm^{-1}) die von ihnen gemessenen Absorptionskoeffizienten kleiner sind als diejenigen nach dem Lorentzprofil. Vorausgesetzt eine Verallgemeinerung ihrer Befunde auf alle Linien wäre zulässig, würde der Strahlungstransport bei Voigtlinien mit Reichweiten größer als 10 cm^{-1} bereits durch zu große Absorptionskoeffizienten in den Flügeln geprägt sein. Da die Unterschiede der in Abb. 16 gezeigten Kurven für die Reichweiten 20 cm^{-1} und 50 cm^{-1} nicht mehr groß sind, kann man dann davon ausgehen, daß der Einfluß extremer Linienflügel in den Absorptionsbanden

vernachlässigt werden kann.

Die Unterschiede zwischen den F^{\uparrow} Werten, die sich aus dem Abschneiden bei 5 und 10 cm^{-1} ergeben, (durchgezogene Kurve) belaufen sich auf ca. 1 % am Oberrand der Atmosphäre. Die größten Abweichungen für F^{\uparrow} gibt es in der mittleren Troposphäre mit ca. -3 %. Für die Abkühlungsraten ergeben sich am Boden Abweichungen von ca. 4 % und als maximale Abweichungen von ca. -7 % zwischen 5 und 10 km Höhe. Die Abweichungen der Abkühlungsraten, die über den Bildrahmen hinausgehen und durch Kreise gekennzeichnet sind, fallen mit kleinen Absolutwerten der Abkühlungsraten zusammen.

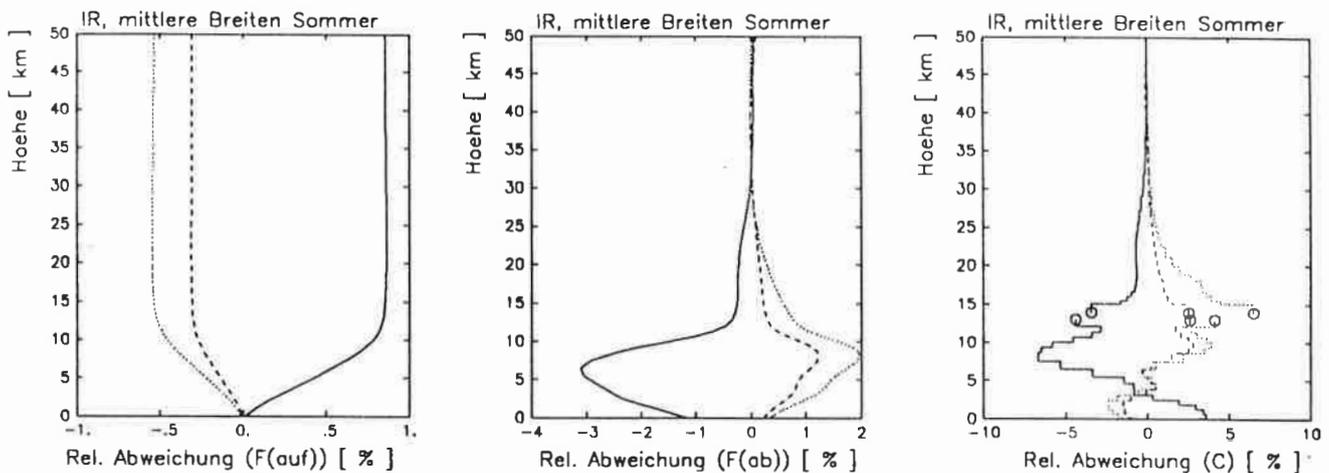


Abb. 26: Abweichung von Strahlungsflußdichten und Abkühlungsraten mit dem k-V-II Modell bei variierten Reichweiten der Absorptionslinien bezogen auf die Reichweite von 10 cm^{-1} . Die durchgezogenen Kurven beruhen auf dem Abschneiden der Linien bei 5 cm^{-1} , die gestrichelten bei 20 cm^{-1} und die gepunkteten bei 50 cm^{-1} . Kreise kennzeichnen Bereiche, in denen der Bildrahmen überschritten wird.

Die durchgeführten Betrachtungen zeigen, daß auf Grund der Unsicherheit über die wahre Linienform in den Flügeln Fehler in der Größenordnung von 5 bis 10 % für die Abkühlungsraten auftreten können. Eine genauere Kenntnis des Verlaufs der Linienprofile, insbesondere in Abständen bis zu 10 cm^{-1} von den Linienzentren, ist also durchaus von Bedeutung für die Berechnung von Strahlungsübertragungen.

10

Betrachtungen über den Rechenaufwand

Bisher sind in dieser Arbeit lediglich die Ergebnisse von Strahlungsübertragungsrechnungen erörtert worden. Die verwendete Rechenzeit und der benötigte Speicherplatz im Computer sind dagegen nur beiläufig erwähnt worden. Die Rechnungen wurden auf dem Computer CRAY-2S am Deutschen Klimarechenzentrum in Hamburg durchgeführt. Bei den Rechenläufen gab es keine Speicherplatzprobleme, mit einer Ausnahme: Das Einsortieren der spektralen Absorptionskoeffizienten in eine Häufigkeitsverteilung, deren Klassen durch die Elemente einer mehrdimensionalen Matrix gegeben sind, übersteigt bei Berücksichtigung aller Absorber einen vertretbaren Speicherplatzbedarf. Die meisten Elemente der mehrdimensionalen Matrix bestehen jedoch aus nichtbelegten Klassen. Wenn die Nullelemente eliminiert werden, können daher die mehrdimensionalen Matrizen mit geringem, numerischen Aufwand auf eindimensionale Felder komprimiert werden. Dabei dienen die Elemente eines zusätzlichen Feldes zur Identifizierung der Klassen im Matrizenraum.

Werden die benötigten Rechenzeiten betrachtet, muß bei den k -Verteilungsmodellen unterschieden werden zwischen dem Erstellen der k -Verteilung und ihrer Anwendung. In Tabelle 7 sind die Laufzeiten der einzelnen Modelle aufgeführt. Die benötigte Zeit für das L-f-L Modell mit ASLV-Auflösung ist dabei ein grober Schätzwert, da Läufe nur über Teilbereiche des IR durchgeführt worden sind. Die in Tabelle 7 angegebenen Zeiten für die Anwendung der k -Verteilungen beziehen sich auf die Berechnung des Strahlungstransports. Nicht berücksichtigt ist dabei die benötigte Zeit für das Einlesen der k -Verteilung und für die Berechnung der Modellatmosphäre.

Der Vergleich der aufgeführten Rechenzeiten verdeutlicht, daß die Anwendung von k -Verteilungen angebracht ist, wenn die erforderliche Rechengenauigkeit dies zuläßt. Die in dieser Arbeit vorgestellten k -Verteilungen benötigen jedoch zu viel Rechenzeit, als daß sie in globalen Modellen verwendet werden können. Für solch einen Einsatz muß die Rechenzeit reduziert werden, indem die Anzahl der k -Verteilungsterme verringert wird. Die k -Verteilung der modifizierten FWS Approximation (k -V-I Modell) besteht aus ca. 10.000 Termen und die mit Auftrennung in Flügel- und Zentralbereiche der Spektrallinien (k -V-II Modell) aus ca. 23.000 Termen. Die überwiegende Anzahl von Termen entsteht in Spektralbereichen mit mehrfacher Überlappung der Absorber, wobei jedoch viele der kleinen

repräsentativen Absorptionskoeffizienten keinen nennenswerten Beitrag zur optischen Dicke liefern, so daß sie vernachlässigt werden können. Des weiteren gibt es benachbarte Absorptionsklassen mit repräsentativen Absorptionskoeffizienten, die so groß sind, daß für beide die Transmission in allen atmosphärischen Schichten nahezu verschwindet. Die Koeffizienten dieser Klassen können daher zusammengefaßt werden. Eine Komprimierung von repräsentativen Absorptionskoeffizienten mit ähnlicher Wirkung aus verschiedenen Klassen bzw. die Eliminierung von wirkungslosen könnte z.B. mit der Methode der kleinsten Quadrate erreicht werden. Dies ist jedoch in dieser Arbeit nicht durchgeführt worden.

Tabelle 7

Rechenzeitbedarf der Strahlungsübertragungsmodelle im Intervall $10 - 2500 \text{ cm}^{-1}$ bei Integration über den Zenitwinkel mit der Gauß Quadratur vierter Ordnung. Recheneinheiten in CPU-Sekunden.

L-f-L:		
ASLV-Auflösung	>	50.000
konstanter Stützstellenabstand von $0,01 \text{ cm}^{-1}$ und Gauß Quadratur achter Ordnung	~	25.000
Erstellen der k-Verteilungen:		
k-V-I Modell	~	1.500
k-V-II Modell	~	3.500
Anwendung der k-Verteilungen:		
k-V-I Modell	~	4
k-V-II Modell	~	18

Eine weitere Möglichkeit, die Anzahl der Terme zu reduzieren, besteht in der Vernachlässigung von Absorptionslinien bzw. -banden. Untersuchungen hierüber sind auch in Hinblick auf Bandenmodelle sinnvoll, da bei ihnen die Berücksichtigung der Überlappung der Absorptionsbanden ein Problem darstellt. Die Rechenzeit ist ebenfalls von der Anzahl der Stützstellen bei der Integration über den Zenitwinkel abhängig. Die beiden zuletzt genannten Punkte werden im folgenden näher untersucht.

Schließlich ist die Rechenzeit davon abhängig, wie mathematische Ausdrücke numerisch umgesetzt werden. Insbesondere erfordert die Berechnung von Exponentialfunktionen (Bestimmung der Transmission und der Temperaturabhängigkeit der Linienstärken) viel Rechenzeit. Die Rechenprogramme sind jedoch nicht

hinsichtlich der Rechenzeit optimiert worden, da ja das Hauptinteresse der Genauigkeit der Ergebnisse galt.

10.1

Einfluß der numerischen Integration über den Zenitwinkel

Der Rechenzeitbedarf für Strahlungsübertragungsrechnungen ist proportional der Anzahl der Stützstellen bei der Integration über den Zenitwinkel. Wie auf Seite 7 erläutert ist, wird diese Integration in den vorgestellten L-f-L und k-Verteilungsmodellen numerisch mit der Gauß Quadratur vorgenommen, wobei in den bisherigen Rechnungen vier Stützstellen verwendet worden sind. Im folgenden werden Ergebnisse von Rechnungen mit dem k-V-II Modell vorgestellt, bei deren Durchführung die Anzahl der Stützstellen über den Zenitwinkel variiert worden ist. Die Verwendung von nur einer Stützstelle ist selbstverständlich aus Gründen der Rechenzeit optimal. Dies entspricht bei der Gauß Quadratur der Näherung des (integrierten) Strahlungsflusses durch den entsprechend gewichteten Strahlungsfluß in Richtung des Zenitwinkels von 60° .

Zumeist wird jedoch nicht dieser Wert des Winkels verwendet, sondern aus Betrachtungen über die sogenannte "diffuse Transmissionsfunktion für Flußdichten"

$$T_f = 2 \int_0^1 \mu e^{-\Delta\tau/\mu} d\mu \approx e^{-\beta\Delta\tau}$$

für isotrope Strahldichten und deren Ersetzung durch die Transmission in eine Richtung θ mit $\beta = 1/\cos\theta$ (siehe z.B. Kondratyev [1969]) ist nach Elsasser (1960) der Winkel von ca. 53° entsprechend $\beta = 1,66$ günstiger. Laut Goody und Yung (1989) sollten aufgrund zahlreicher Untersuchungen auch bei nicht-isotropen Verhältnissen die auftretenden Fehler bei der Berechnung von Abkühlungsraten 2 % nicht überschreiten.

Um die Auswirkung unabhängig von den Fehlern der k-Verteilungsmodellrechnung abschätzen zu können, wenn nur eine Stützstelle verwendet wird, ist $\beta = 1,66$ auch in einer L-f-L Rechnung angewandt worden. Die Abweichung dieser Ergebnisse von entsprechenden L-f-L Resultaten mit vier Stützstellen bei der Gauß Quadratur ist in Abb. 27 als durchgezogene Kurve dargestellt. Die Abweichungen für F^1 liegen im Bereich von $\pm 0,15 W/m^2$. Die maximale, absolute Abweichung für

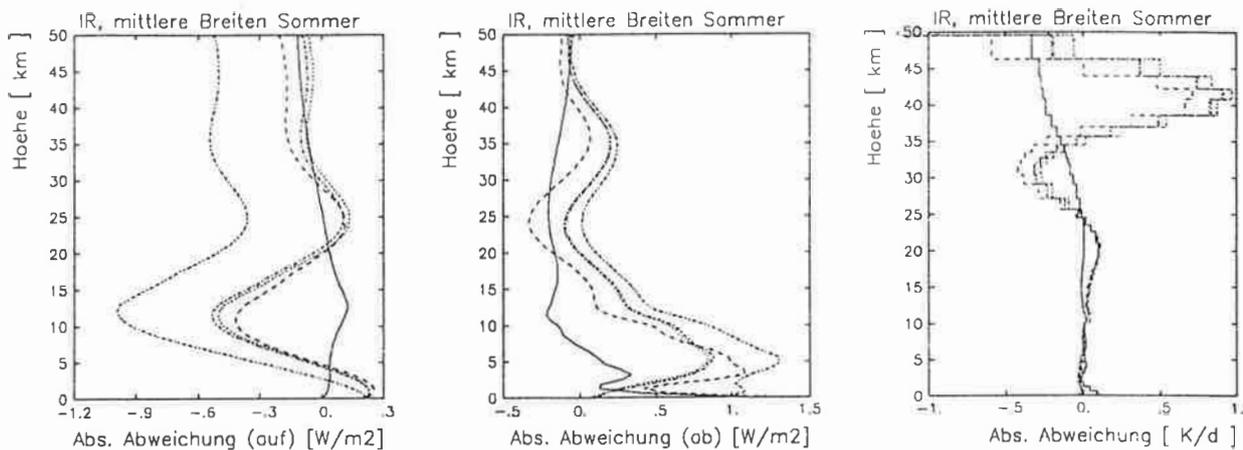


Abb. 27: Abweichung der Strahlungsflußdichten und Abkühlungsraten von L-f-L berechneten Ergebnissen unter Verwendung der Gauß Quadratur mit vier Stützstellen bei der Integration über den Zenitwinkel.

- L-f-L Rechnung mit einer Stützstelle ($\beta=1,66$)
- - - - Anwendung von k-Verteilungen mit einer Stützstelle ($\beta=1,66$)
- k-Verteilungen mit 8 Stützstellen bei der Gauß Quadratur
- · - · - · k-Verteilungen mit 4 Stützstellen
- - - - - k-Verteilung mit 2 Stützstellen

F^\uparrow ist am Boden mit etwa 1 W/m^2 zu finden. Der von Goody und Yung (1989) angegebene, maximale Fehler der Abkühlungsraten ist jedoch teilweise überschritten worden. Die gefundenen Abweichungen von ca. $0,1 \text{ K/d}$ in Bodennähe entsprechen etwa 3 bis 4 %. Für die Stratosphäre oberhalb von 30 km ergeben sich negative Abweichungen in der Größenordnung von -2 bis -4 %.

Ebenfalls in Abb. 27 sind die Abweichungen der Ergebnisse des k-Verteilungsmodells von denen des L-f-L Modells mit vier Stützstellen bei der Gauß Quadratur über den Zenitwinkel dargestellt. Dabei führt die Anwendung einer Stützstelle mit $\beta = 1,66$ auf die gestrichelte Kurve, die Gauß Quadratur mit 8 Stützstellen auf die gepunktete, mit 4 Stützstellen auf die punktgestrichelte und mit 2 Stützstellen auf die Strich-Strich-Punkt-Punkt Kurve. Letztere liefert für F^\uparrow die schlechtesten Ergebnisse. Die Fehler aufgrund der Anwendung von $\beta = 1,66$ sind aber kleiner, als die durch die Methode der k-Verteilung verur-

sachten Fehler. Allerdings gilt dies für F^1 in der Stratosphäre nur eingeschränkt, da dort die Anwendung von $\beta = 1,66$ im k-V-II Modell im Vergleich zu den Gauß Quadraturen höherer Ordnung etwas schlechter ist. Die Integration über den Zenitwinkel mit nur einer Stützstelle mit $\beta = 1,66$ ist daher gut geeignet, in approximativen Strahlungstransportmodellen angewandt zu werden.

10.2

Auswirkung vernachlässigter Absorption

Die Vernachlässigung von nahezu wirkungslosen Absorbern, Absorptionbanden oder auch nur -linien reduziert die Anzahl der k-Verteilungsterme und spart damit Rechenzeit. Aus diesem Grund sind die Absorber CO und O₂ in den Rechnungen mit den k-Verteilungsmodellen nicht verwendet worden, da L-f-L Rechnungen gezeigt haben, daß sie keinen relevanten Beitrag zu den Flüssen und Abkühlungsraten im IR liefern. Die Absorber H₂O (mit Kontinuumabsorption), CO₂, O₃, CH₄ und N₂O sind dagegen in den bisherigen Rechnungen mit allen Absorptionslinien berücksichtigt worden. Die Lage der Banden ist in Abb. 28 skizziert, wobei der gestrichelte Teil der Linie für H₂O den Spektralbereich mit der Kontinuumabsorption kennzeichnet. Die senkrecht gepunkteten Linien geben die Intervalle wieder, in die das IR für die L-f-L Rechnungen in Anlehnung an den Überlappungsgrad der Absorptionbanden unterteilt worden ist. Die folgenden Ergebnisse über die Wirkung vernachlässigter Absorption sind mit dem L-f-L Modell ermittelt worden.

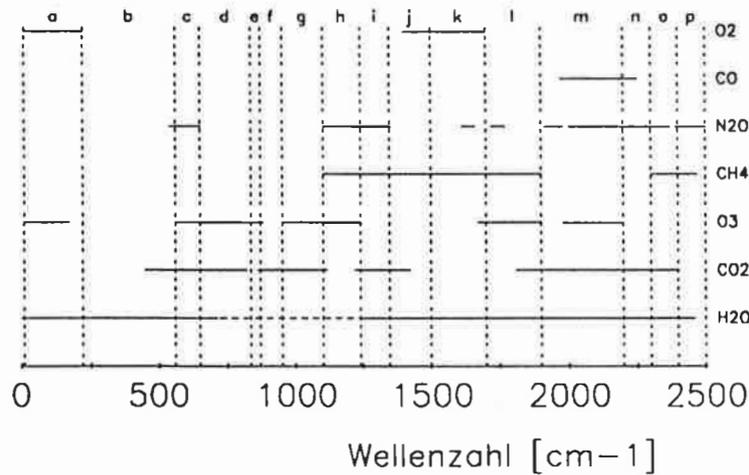


Abb. 28: Verteilung der Absorptionsbanden. Die gestrichelte Linie für H₂O kennzeichnet den Bereich mit Kontinuumsabsorption.

10.2.1 Einfluß der Wasserdampflinien im atmosphärischen Fenster

Wie in Abschnitt 3.2.2 erläutert ist, wird die Kontinuumsabsorption des Wasserdampfs nach der von Roberts et al. (1976) hergeleiteten, empirischen Formel berücksichtigt. Es wird nun untersucht, ob die H₂O Linien im atmosphärischen Fenster mit einbezogen werden müssen. Hierzu ist eine Rechnung durchgeführt worden, bei der die im Spektralbereich von 8 bis 14 μm liegenden Wasserdampfabsorptionslinien vernachlässigt worden sind. Die Linien der anderen Absorber sind vollständig berücksichtigt worden. Die Rechnung ist für die Tropen durchgeführt worden, da dort der Wasserdampfgehalt der Troposphäre am größten ist.

Die Abweichungen der hiermit erzielten Strahlungsflußdichten bzw. Abkühlungsraten von den Ergebnissen unter Berücksichtigung aller Linien sind als absolute (untere Abszisse) und relative (obere Abszisse) Werte in Abb. 29 dargestellt. Die maximalen Abweichungen von ca. $3,5 W/m^2$ (1,2 %) für F^\uparrow in der linken Abbildung bzw. $7,7 W/m^2$ (-2,5 %) für F^\downarrow (mitte) sowie im Bereich von ca. $\pm 0,2 K/d$ ($\pm 7,5$ %) für die Abkühlungsraten (rechts) zeigen, daß zusätzlich zu der Conti-

numabsorption des Wasserdampfs auch dessen Linien im Fenster berücksichtigt werden müssen. (Die Kreise im Bild für die Abkühlungsraten zeigen den Bereich, in dem große relative Abweichungen mit kleinen absoluten zusammenfallen.)

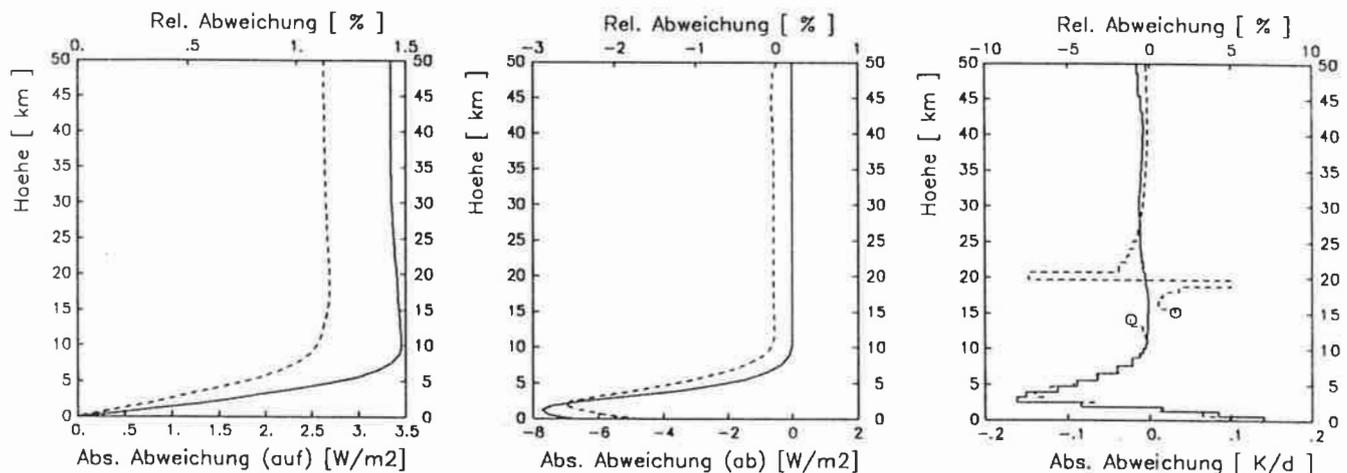


Abb. 29: Auswirkung der Vernachlässigung der H_2O Linien im atmosphärischen Fenster ($8 - 14 \mu m$) für die Tropen. Abweichungen von F^{\uparrow} (links), F^{\downarrow} (mitte) und den Abkühlungsraten (rechts) im IR. Für die durchgezogenen Kurven gilt die untere Abszisse, für die gestrichelten die obere. Kreise kennzeichnen Werte, die den Bildrahmen überschreiten.

10.2.2 Vernachlässigung von Absorbern

Um den Einfluß einzelner Absorber im IR abzuschätzen, sind Rechnungen mit unterschiedlichen Kombinationen von Absorbern in der tropischen Atmosphäre durchgeführt worden. Die Abweichungen von den exakten Ergebnissen, die aus der Verwendung aller Linien resultieren, sind in Abb. 30 dargestellt.

Die oberen Bilder in Abb. 30 geben die absoluten Abweichungen und die unteren die relativen Abweichungen von F^{\uparrow} (links), F^{\downarrow} (mitte) und der Abkühlungsraten (rechts) wieder. Die durchgezogenen Kurven stellen die Abweichungen aufgrund der Kombination von H_2O und CO_2 dar, die gestrichelten resultieren aus der Kombination von H_2O , CO_2 und O_3 und die gepunkteten aus der Kombination

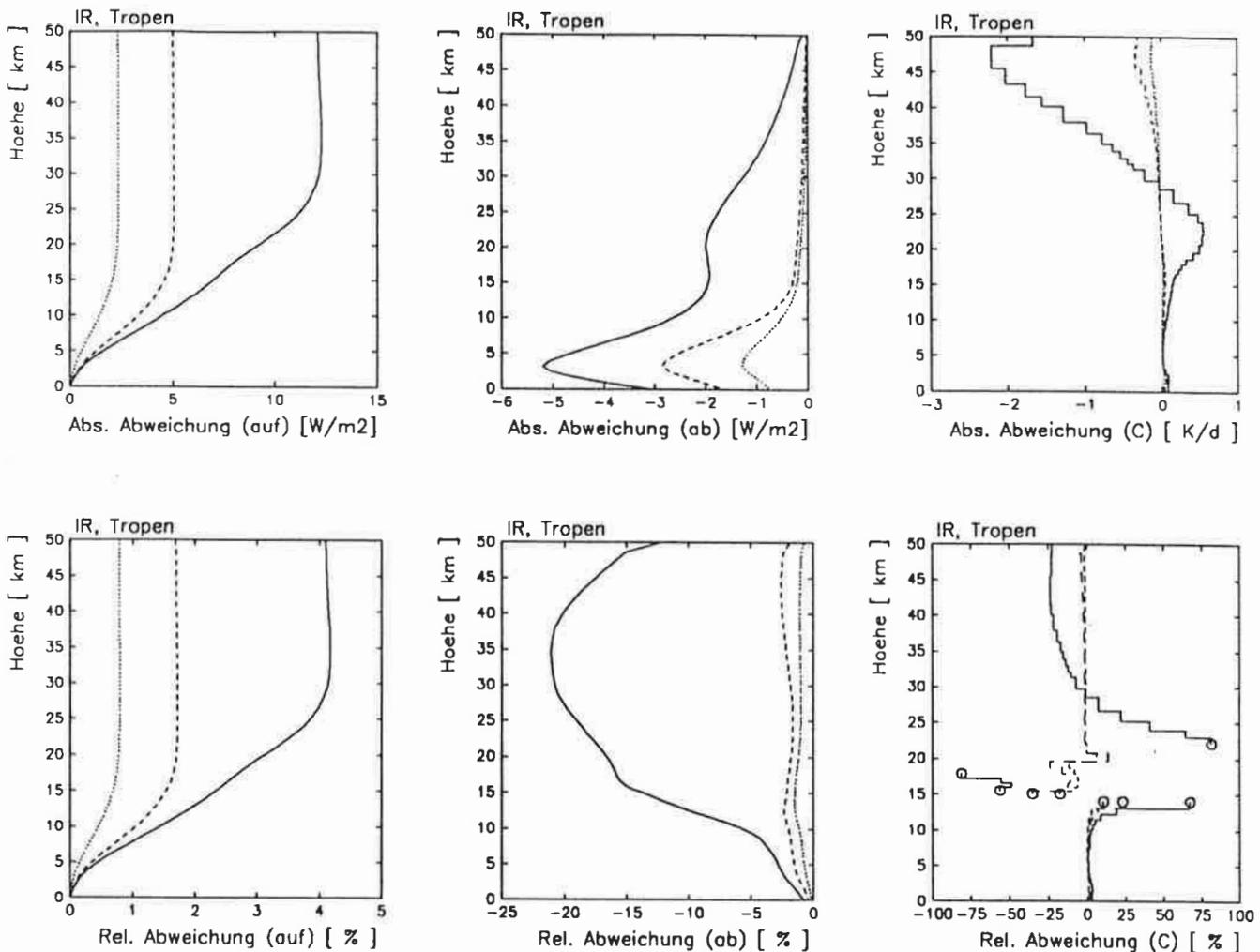


Abb. 30: Abweichungen von Ergebnissen unter Berücksichtigung der Absorber H_2O , CO_2 , O_3 , CH_4 und N_2O . Die Kombination der Absorber H_2O & CO_2 führt auf die durchgezogenen Kurven, H_2O & CO_2 & O_3 auf die gestrichelten und H_2O & CO_2 & O_3 & CH_4 auf die gepunkteten. Absolute Abweichungen in den oberen Bildern und relative in den unteren für F^{\uparrow} (links), F^{\downarrow} (mitte) und den Abkühlungsraten (rechts).

von H_2O , CO_2 , O_3 und CH_4 . Letztere zeigen also im wesentlichen den Einfluß von N_2O . (Die Beiträge von O_2 und CO in den exakten L-f-L Rechnungen können vernachlässigt werden. Die abwärtsgerichtete Strahlungsflußdichte von O_2 alleine beträgt am Boden ca. $0,3 \text{ W/m}^2$. Der Einfluß wird aber bei Berücksichtigung aller Absorber überlagert.)

Die Unterschiede zwischen den durchgezogenen und den gestrichelten Kurven zeigen den Einfluß des Ozons. Die Vernachlässigung von O_3 führt bei F^{\uparrow} zu einer Überschätzung von ca. 7 W/m^2 am Oberrand der Atmosphäre, bei F^{\downarrow} zu einer Unterschätzung von ca. -2 W/m^2 in der unteren Troposphäre.

Der Einfluß von CH_4 und N_2O auf den Strahlungstransport ist in etwa gleich

groß: Für F^{\uparrow} ergeben sich bei Vernachlässigung jeweils eines der beiden Absorber Abweichungen von 2 bis 3 W/m^2 am Oberrand der Atmosphäre und für F^{\downarrow} von ca. 1 W/m^2 am Boden.

Für den Einfluß der einzelnen Absorber auf die Abkühlungsraten gilt: Die Vernachlässigung von Ozon hat bei 25 km Höhe Abweichungen von ca. 0,5 K/d und in der oberen Stratosphäre von ca. -2 K/d zur Folge. Wird die Absorption von Methan bzw. N_2O nicht berücksichtigt, betragen die Abweichungen ca. 1 bis 2 % in der unteren Troposphäre, d.h. sie sind kleiner als 0,1 K/d.

10.2.3

Einfluß von Absorptionsbanden

Abschließend wird untersucht, wie sich eine Vernachlässigung von Absorptionsbanden im IR auswirkt. Hierzu sind zwei Rechnungen für den Sommer in mittleren Breiten durchgeführt worden: A) Es sind die wichtigen Banden aller Gase berücksichtigt worden, wobei nur die Überlappung von Banden zweier verschiedener Absorber zugelassen worden ist. Diese Banden sind in Abb. 31 durchgezogen skizziert. Die im Spektralbereich der Wasserdampfkontinuumabsorption liegenden Wasserdampflinien (gestrichelt für H_2O in Abb. 31) sind dabei wie eine Bande betrachtet worden. B) In der zweiten Rechnung ist zu den Banden aus Rechnung A die 14 μm Ozonbande einbezogen worden.

In den Rechnungen A und B ist die Absorption durch N_2O völlig vernachlässigt worden und der Beitrag der Spektralbereiche $\nu > 2400 \text{ cm}^{-1}$ ist unberücksichtigt geblieben.

Die absoluten Abweichungen der Ergebnisse aus Rechnung A und B von denen mit Berücksichtigung aller Linien sind in Abb. 32 für F^{\uparrow} (links), F^{\downarrow} (mitte) und für die Abkühlungsraten (rechts) dargestellt. Die stärkste, absolute Abweichung aus Rechnung A für F^{\uparrow} beläuft sich auf ca. 3,5 W/m^2 und für F^{\downarrow} auf ca. -2,4 W/m^2 . Die stärkste absolute Abweichung der Abkühlungsraten liegt in der oberen Stratosphäre mit ca. -0,5 K/d.

Der Verlauf der gestrichelten Kurven zeigt, daß die Hinzunahme der 14 μm Ozonbande in allen Fällen eine Verbesserung der Ergebnisse liefert.

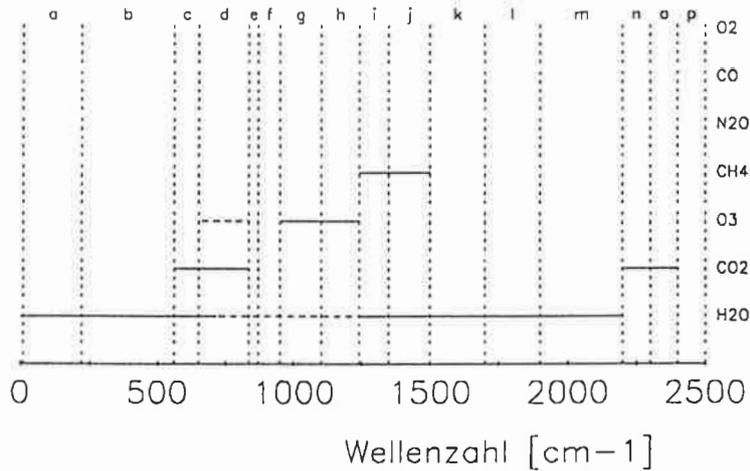


Abb. 31: Verteilung der Absorptionsbanden im IR, wobei schwache Banden vernachlässigt sind. In Rechnung A sind die durchgezogen skizzierten Banden und der gestrichelt gezeichnete Bereich mit Wasserdampfkontinuumabsorption verwendet worden. In Rechnung B ist die gestrichelt gezeichnete $14 \mu m$ Ozonbande mit berücksichtigt worden.

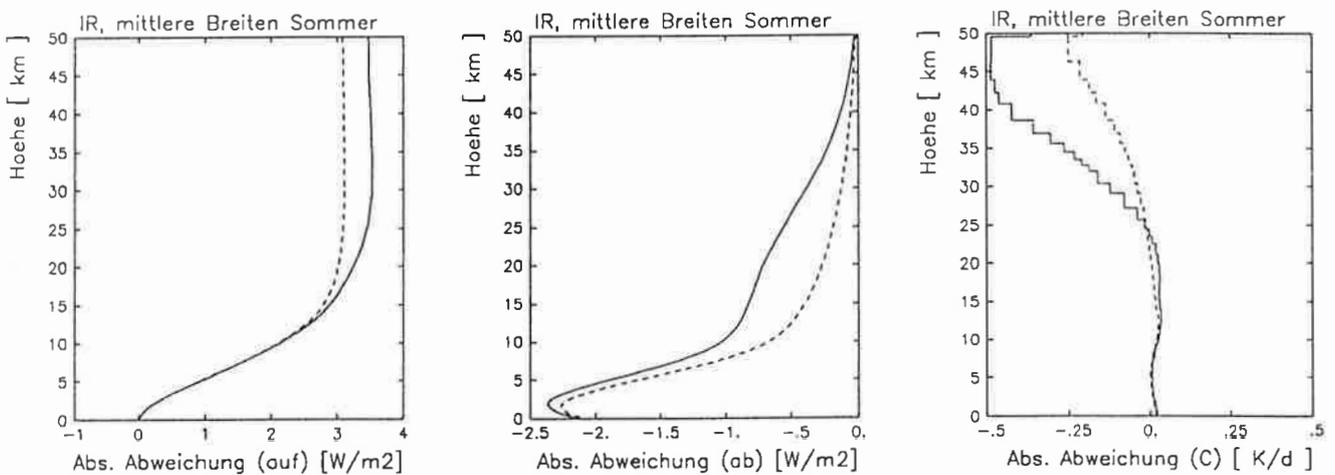


Abb. 32: Absolute Abweichungen von F^\uparrow (links), F^\downarrow (mitte) und der Abkühlungsraten (rechts). Bandenverteilung für Rechnung A führt auf die durchgezogenen und die Hinzunahme der $14 \mu m$ Ozonbande auf die gestrichelten Kurven.

Der Vollständigkeit halber sind die Strahlungsflußdichten mit und ohne N₂O Spektrallinien in den Wellenzahlbereichen um 600 cm⁻¹ sowie um 1250 cm⁻¹ in tabellarischer Form angegeben.

Tabelle 8:
Strahlungsflußdichten (W/m^2) in zwei Spektralintervallen (Sommer in mittleren Breiten)

560–650 cm ⁻¹	F_{oben}^{auf}	F_{Boden}^{ab}	$F_{Trop.p.}^{auf}{}^1)$	$F_{Trop.p.}^{ab}$
mit N ₂ O	23,98	39,15	24,28	4,32
ohne N ₂ O	24,39	39,09	24,57	4,11
1000–1350 cm ⁻¹				
mit N ₂ O	31,73	26,71	32,5	0,4
ohne N ₂ O	32,40	26,17	32,6	0,3

¹⁾Tropopause bei 13 Km

Die erzielten Resultate lassen die Möglichkeit unberücksichtigt, daß bei veränderten Konzentrationen der Spurenstoffe bestimmten Absorptionsbanden eine gewichtigere Rolle zukommen kann als in dem diskutierten Fall. So blieben bei den obigen Betrachtungen u.a. die schwachen CO₂ Linien im atmosphärischen Fenster zwischen 950 und 1100 cm⁻¹ unberücksichtigt, was einen Fehler für F^{\downarrow} von 0,7 W/m^2 am Boden mit sich bringt. Rechnungen in diesem Spektralbereich mit verdoppelter CO₂ Konzentration ergeben, daß die Vernachlässigung dieser Linien einen Fehler von ca. 2 W/m^2 zur Folge hat.

11

Einfluß der Absorbermengen

Im letzten Abschnitt ist bereits darauf hingewiesen worden, daß k-Verteilungsmodelle den Strahlungstransport nicht nur in der gegenwärtigen Atmosphäre genau genug wiedergeben müssen, sondern auch in Atmosphären mit geänderter Zusammensetzung. Weitere Spurenstoffe können mit den k-Verteilungsmodellen ohne Schwierigkeiten berücksichtigt werden, wenn die Parameter der Spektrallinien vorliegen. Dies ist in dieser Arbeit nicht geschehen. Im folgenden wird jedoch die Konzentration der Hauptabsorber geändert. Zunächst wird untersucht, welchen Einfluß eine Erhöhung der Wasserdampfdichte im Tropopausenniveau hat. Anschließend werden Auswirkungen auf den Strahlungstransport betrachtet, wenn die Konzentration von CO_2 , CH_4 und N_2O verdoppelt und die Ozondichte verringert wird.

11.1

Einfluß der Wasserdampfdichte im Bereich der Tropopause

Durch die prognostizierte Zunahme des Flugverkehrs oberhalb von 10 km Höhe stehen neben möglichen Einflüssen auf den Chemiehaushalt in dieser Region auch mögliche Änderungen der Strahlungsübertragung zur Diskussion. Die Vermehrung des Wasserdampfs ist ja durch das Auftreten von Kondensstreifen am Himmel für jedermann sichtbar.

Um überhaupt erst einmal eine Abschätzung über die Empfindlichkeit des Strahlungstransports durchzuführen, ist in den Modellatmosphären nach McClatchey et al. (1978) die Wasserdampfdichte im Bereich 10 bis 15 km um 10 % erhöht worden. Die Interpolation der Atmosphäre im Rechenmodell aus der Atmosphäre nach McClatchey und die Berechnung der optischen Dicke zwischen zwei Schichtgrenzen (Abschnitt 3.3) bewirken jedoch, daß der Bereich mit veränderter Dichte geringfügig nach oben und unten aufgeweitet ist. Die Rechnungen sind mit dem k-V-II Modell durchgeführt worden. Die Abweichungen der auf- und abwärtsgerichteten Strahlungsflußdichten sowie der Abkühlungsraten von den Ergebnissen mit den ursprünglichen Modellatmosphären zeigt Abb. 33: durchgezogen für die Tropen, gestrichelt für den Sommer in mittleren Breiten und gepunktet für den subarktischen Winter.

Die Strahlungstransporte und Abkühlungsraten verhalten sich in beiden Modellatmosphären für die Tropen und den Sommer in mittleren Breiten nahezu gleich und reagieren auf die Änderung der Dampfdichte stärker als die des subarktischen Winters. Die physikalischen Unsicherheiten (siehe Kapitel 9) und der durch die Anwendung von k -Verteilungen verursachte Fehler stellen die Aussagekraft der Resultate zunächst in Frage. In einem der folgenden Abschnitte wird jedoch gezeigt: Die durch die Anwendung des k -V-II Modells erzeugten Fehler sind nahezu unempfindlich gegenüber Änderungen der atmosphärischen Zusammensetzung. Dies hat zur Folge, daß bei der Bildung von Differenzen zwischen zwei mit dem k -Verteilungsmodell berechneten Ergebnissen die Fehler der k -Methode sich nahezu kompensieren.

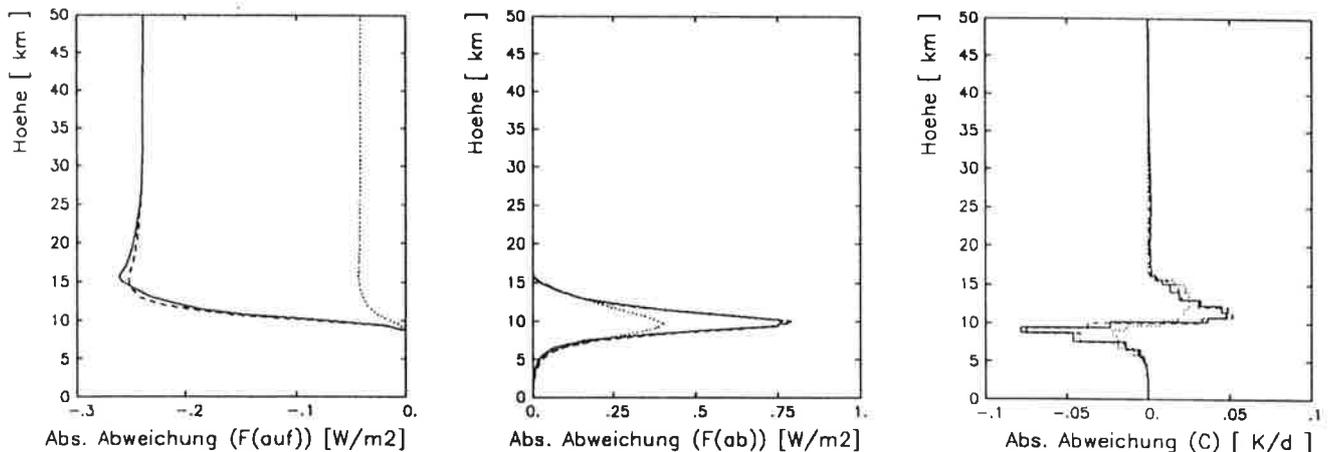


Abb. 33: Abweichung des mit dem k -Verteilungsmodell berechneten F^{\uparrow} (links), F^{\downarrow} (mitte) und der Abkühlungsraten (rechts) aufgrund einer Vergrößerung der Dampfdichte um 10% zwischen 10 und 15 km in den verwendeten Modellatmosphären nach McClatchey et al. (1978). Die durchgezogenen Kurven gelten für die Tropen, die gestrichelten für den Sommer in mittleren Breiten und die gepunkteten für den subarktischen Winter.

Der erhöhte Wasserdampfgehalt vermindert F^{\uparrow} oberhalb des gestörten Atmosphärenbereichs bis zu $-0,25 \text{ W/m}^2$. F^{\uparrow} wird vergrößert, wobei die maximale Abweichung mit ca. $0,75 \text{ W/m}^2$ bei 10 km liegt. In den tieferen Schichten klingt die Störung aufgrund der Absorption der einfallenden Strahlung und Emission entsprechend der Schichttemperatur wieder ab. Im oberen Teil des gestörten Bereichs werden die Abkühlungsraten vergrößert (maximal um ca. $0,05 \text{ K/d}$) und im unteren Teil werden sie verringert (maximal um ca. $0,075 \text{ K/d}$). Die Grenze zwischen beiden Teilen liegt bei etwa 11 km.

Der Einfluß des Flugverkehrs auf den Strahlungshaushalt kann hiermit jedoch nicht explizit angegeben werden, da neben dem Wasserdampfeintrag auch Effekte wie die Eiskristallbildung und die Ausbreitung der Kondensstreifen berücksichtigt werden müssen.

11.2

Einfluß der Konzentration von Spurengasen

Relativ genau approximierete Strahlungstransporte sind nötig, wenn der Einfluß geänderter Spurengaskonzentrationen in der Atmosphäre mit Klimamodellen untersucht werden soll. Auf Seite 79 sind die Fehler abgeschätzt worden, mit denen man bei der Anwendung des k-V-II Modells für gegenwärtige Atmosphären zu rechnen hat. Im Hinblick auf den Einsatz in Klimamodellen muß auch sichergestellt werden, daß die Näherungen für Atmosphären mit veränderlichen Zusammensetzungen brauchbar sind. Zunächst wird mittels L-f-L Rechnungen die Auswirkung auf den Strahlungstransport betrachtet, wenn folgende Änderungen der Konzentrationen vorgenommen werden:

- a) Verdopplung der CO_2 -Konzentration auf 600 ppmv.
- b) Verdopplung der CH_4 -Konzentration auf 3,5 ppmv.
- c) Verdopplung der N_2O -Konzentration auf 0,56 ppmv.
- d) Verminderung der O_3 -Dichte auf 10 %.

Anschließend wird untersucht, wie gut das k-V-II Modell diese Ergebnisse wiedergeben kann.

11.2.1

a) Rechnungen mit dem L-f-L Modell

In Abb. 34 sind die Abweichungen von F^\uparrow (links), F^\downarrow (mitte) und den Abkühlungsraten (rechts) dargestellt, die sich aus den Ergebnissen von L-f-L Rechnungen mit veränderter und gegenwärtiger Konzentration ergeben. Die oberen Bilder zeigen die absoluten und die unteren die relativen Abweichungen. Die Abweichungen für die Änderung der CO_2 -Konzentration sind durchgezogen, für Methan gestrichelt, für N_2O gepunktet und für Ozon punktgestrichelt eingezeichnet (bei unverändert gelassener Konzentration der übrigen Absorber). Senkrechte, gepunktete Linien in den einzelnen Bildern markieren den Skalenwechsel der Abszisse. Kreise kennzeichnen Bereiche, in denen die prozentualen Abweichungen der Abkühlungsraten den Bildrahmen überschreiten.

Der Einfluß der Konzentrationsverdopplung von CH_4 bzw. N_2O ergibt für F^\uparrow Änderungen in der Größenordnung von $-0,5$ bis -1 W/m^2 am Oberrand der Atmosphäre und für F^\downarrow von $0,5$ bis $0,75 \text{ W/m}^2$ im Bereich der unteren Troposphäre. Die Abweichung der Abkühlungsraten beträgt maximal $0,1 \text{ K/d}$.

Ein größerer Einfluß ergibt sich bei der Verdopplung der CO_2 -Konzentration. F^\uparrow erfährt eine starke Abnahme bis zu -4 W/m^2 in 15 km Höhe, F^\downarrow wird bis zu $4,5 \text{ W/m}^2$ in der unteren Troposphäre erhöht und die Abkühlungsraten erfahren eine stetige Zunahme in der Stratosphäre mit zunehmender Höhe. Die Abweichungen erreichen das Maximum mit ca. $2,5 \text{ K/d}$ zwischen 45 und 50 km Höhe. Die Abkühlungsraten in Bodennähe sind um ca. 4% vermindert.

Die Reduzierung der Ozondichte in der gesamten Modellatmosphäre auf ein Zehntel hat umgekehrte Vorzeichen bei den Abweichungen zur Folge. F^\uparrow vergrößert sich um maximal 6 W/m^2 in der Stratosphäre, F^\downarrow wird um ca. $-2,5 \text{ W/m}^2$ in der unteren Troposphäre verringert und die Abweichungen der Abkühlungsraten sind in der oberen Stratosphäre am ausgeprägtesten mit -1 bis -2 K/d . Im Gegensatz zum Kohlendioxid hat eine Variation der Ozondichte auch im Bereich der Tropopause eine Änderung der Abkühlungsraten von etwa $0,2 \text{ K/d}$ zur Folge. Die hier vorgenommene Reduzierung der Ozondichte in der ganzen Atmosphäre ist jedoch unrealistisch. Für die bodennahen Schichten ist im Gegenteil eine anthropogene Erhöhung zu berücksichtigen, die dort dann ebenfalls zu einer Erwärmung führt.

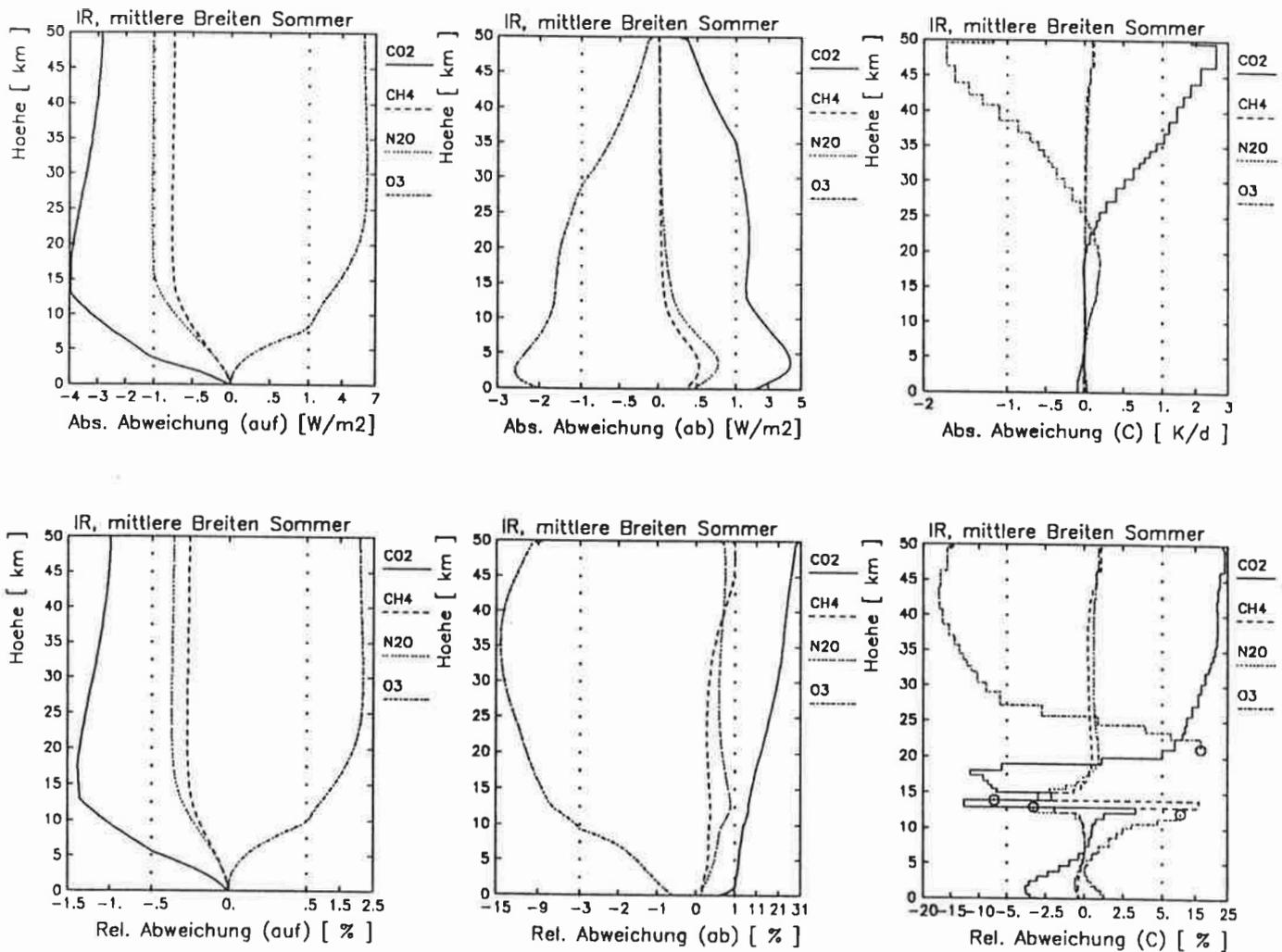


Abb. 34: Einfluß einer verdoppelten Konzentration von CO_2 , CH_4 und N_2O sowie die auf 10 % reduzierte Ozondichte der Modellatmosphäre nach McClatchey (1978) in L-f-L Rechnungen, wobei die jeweils anderen Absorber unverändert geblieben sind. Absolute Abweichungen für F^\uparrow (links), F^\downarrow (mitte) und für die Abkühlungsraten (rechts) in den oberen Bildern und relative Abweichungen in den unteren Bildern. Senkrechte, gepunktete Linien markieren einen Skalenwechsel der Abszisse. Kreise kennzeichnen Bereiche, in denen die relativen Abweichungen der Abkühlungsraten den Bildrahmen überschreiten.

11.2.2

b) Rechnungen mit dem k-V-II Modell

Die im vorherigen Abschnitt erläuterten Änderungen der Spurengaskonzentrationen sind ebenfalls in Rechnungen mit dem k-V-II Modell, das in Abschnitt 8.2 beschrieben ist, angewandt worden. Die Abweichungen zwischen den hiermit erzielten und den L-f-L berechneten Ergebnissen aus dem vorangegangenen Abschnitt sind in Abb. 35 in den unteren Bildern dargestellt. Des vollständigen Überblicks wegen sind in den oberen Bildern noch einmal die Abweichungen aus Abschnitt 8.2 zwischen den Ergebnissen des k-V-II und des L-f-L Modells für die gegenwärtige Atmosphäre des Sommers in mittleren Breiten dargestellt.

Der Vergleich der Abweichungen zwischen den Bildern für F^1 , F^1 und den Abkühlungsraten zeigt, daß die Güte der Approximation kaum von der Zusammensetzung der Atmosphäre abhängt. Wenn die Differenz von approximierten Ergebnissen, die sich aus unterschiedlichen Zusammensetzungen der Atmosphäre ergeben, gebildet wird, eliminieren sich die systematischen Fehler des k-V-II Modells nahezu vollständig. Lediglich Änderungen der Ozondichte verändern gleichzeitig die Abweichungen zwischen den exakten L-f-L Ergebnissen und den mit dem k-V-II Modell genäherten. Es fällt aber auf, daß im Fall der Ozonverminderung eine deutliche Verbesserung der Approximation der Abkühlungsraten in der Stratosphäre eintritt. Hier stellt sich daher die Frage, ob nicht der größte Teil der Abweichungen der Abkühlungsraten bei Anwendung des k-V-II Modells durch die Approximation der Ozonabsorption verursacht wird. Und wenn ja, wie dem abzuhelfen ist.

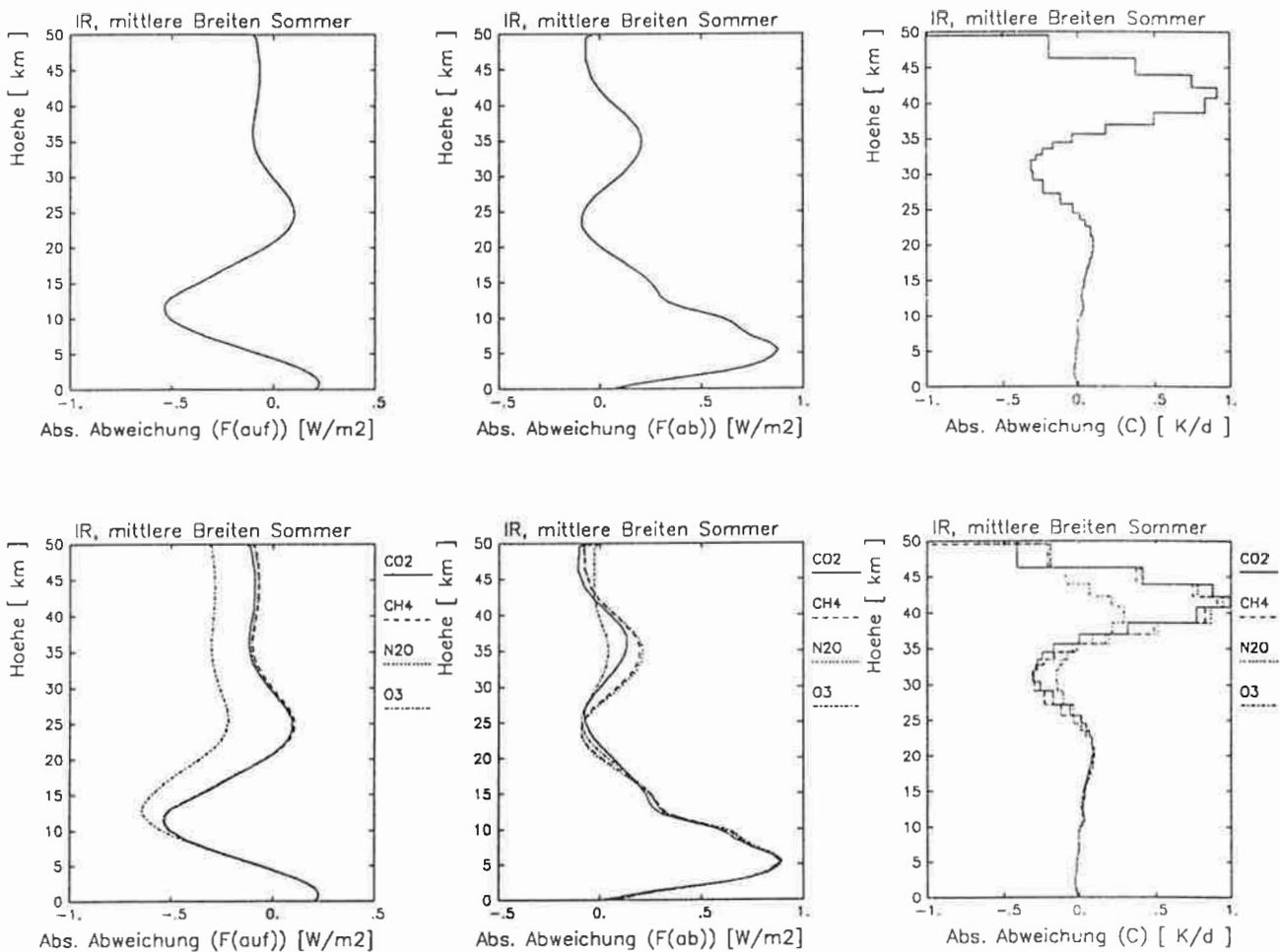


Abb. 35: Absolute Abweichungen von F^{\uparrow} (links), F^{\downarrow} (mitte) und den Abkühlungsraten (rechts) zwischen der Anwendung des k-V-II und des L-f-L Modells bei unterschiedlicher Zusammensetzung der Atmosphäre. Die oberen Bilder beruhen auf der Modellatmosphäre nach McClatchey et al. (1978) und die unteren auf der Verdopplung der Konzentration für CO_2 , CH_4 und N_2O sowie einer auf 10 % reduzierten Ozondichte in dieser Modellatmosphäre, wobei jeweils die Konzentration der übrigen Absorber unverändert blieb.

12

Schlußbetrachtungen

In dieser Arbeit sind drei Modelle zur Bestimmung der Strahlungsübertragung im IR in klaren Atmosphären vorgestellt worden: Ein Linie-für-Linie Modell, ein einfaches k-Verteilungsmodell mit modifizierter FWS Approximation (k-V-I Modell) und ein aufwendigeres k-Verteilungsmodell (k-V-II), bei dem die Zentral- und Flügelbereiche der Linienzentren in der multivariaten k-Verteilung separat berücksichtigt sind und die Druckabhängigkeit der Zentren durch Anwendung des Dominanzfaktors grob genähert ist.

Für die folgenden Bemerkungen sind in Abb. 36 F^{\uparrow} , F^{\downarrow} und die Abkühlungsraten für die tropische Modellatmosphäre dargestellt. Die in Abschnitt 5.2 erläuterten L-f-L Rechnungen führen auf die durchgezogenen Kurven, den gestrichelten liegt das k-V-II Modell aus Abschnitt 8.2 und den gepunkteten das k-V-I Modell mit dem Referenzdruck $p_0 = 500$ hPa aus Abschnitt 7.2.2 zugrunde.

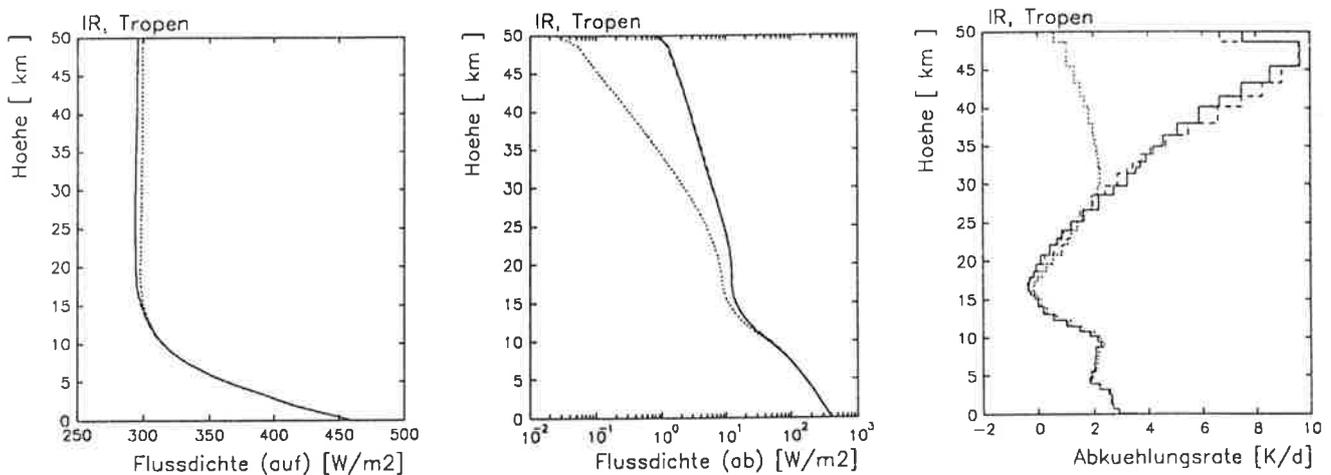


Abb. 36: Strahlungsflußdichten und Abkühlungsraten aus Rechnungen mit dem L-f-L Modell (durchgezogene Kurve), dem k-V-II Modell (gestrichelt) und dem k-V-I Modell (gepunktet) für die tropische Modellatmosphäre nach McClatchey et al. (1978) im IR.

Da die Darstellung der Absolutwerte Unterschiede zwischen den Kurven z.T. schwierig erkennen läßt, sind hier die maximalen Abweichungen als Zahlenwerte noch einmal aufgeführt:

Tabelle 9:

Abweichungen zwischen L-f-L Rechnungen und den k-Verteilungsmodellen für die Tropen im IR

	F^{\uparrow}		F^{\downarrow}		Abkühlungsrate	
	[W/m ²]	[%]	[W/m ²]	[%]	[K/d]	[%]
Boden:						
k-V-I	0,04	0,008	1,6	0,4	-0,02	-0,5
k-V-II	0,3	0,06	0,17	0,04	-0,004	-0,11
Troposphäre:						
k-V-I	-0,8 ; +2	-0,3 ; +0,5	-3,4 ; +1,6	-20 ; +0,5	-0,02 ; +0,15	-0,5 ; +10
k-V-II	-0,6 ; +0,3	-0,2 ; +0,07	+0,1 ; +1	0 ; +1,7	-0,03 ; +0,03	-1 ; + 5
Stratosphäre: ¹⁾						
k-V-I	+2 ; +4,8	+0,5 ; +1,7	-4,5 ; -1	-100 ; -20	-9 ; +0,5	-90 ; +40
k-V-II	-0,6 ; +0,2	-0,2 ; +0,06	-0,07 ; +0,2	-6 ; +6	-0,9 ; +0,9	-10 ; +15

Durch ein Semikolon getrenntes Zahlenpaar bezeichnet den auftretenden Wertebereich.

Absolut- und Prozentwerte können aus unterschiedlichen Höhen stammen.

¹⁾ Prozentwerte der Abkühlungsraten nur oberhalb von 20 km

Die entwickelten Modelle sind aufgrund der jeweils notwendigen Rechenzeit und der erzielten Genauigkeit für unterschiedliche Anwendungen geeignet. L-f-L Modelle sind für Rechnungen in großen Spektralbereichen nur als Eichmaß für approximierende Modelle einsetzbar. Jedoch kann auch für kleine Spektralbereiche, wie z.B. in der lasergestützten Fernerkundung mit notwendiger, hoher Auflösung, ein L-f-L Modell von Nutzen sein. Insbesondere kann mit der vorgestellten ASLV-Auflösung, bei der die Verteilung der Spektrallinien zur Bestimmung der Stützstellen herangezogen wird, mit relativ wenig Stützstellen eine hohe Genauigkeit erzielt werden. Das k-V-II Modell, das in der Genauigkeit nahe an L-f-L Rechnungen heranreicht, ist für das ganze IR mit einer großen Anzahl von Termen verbunden. Daher ist seine Anwendung in Klimamodellen in der hier vorgestellten Form nicht möglich. In der Satellitenfernerkundung mit den relativ schmalbandigen Kanälen erscheint eine Anwendung des k-V-II Modells jedoch denkbar. Das k-V-I Modell ist wegen der großen Fehler in der Stratosphäre nur

für die Troposphäre geeignet. Weitere Optimierungen hinsichtlich der Rechengeschwindigkeit lassen einen Einsatz in Klimamodellen möglich erscheinen.

Im folgenden sind einige Merkmale der einzelnen Modelle aufgeführt:

- **L-f-L Modelle:** Sie werden als Mittel zur unmittelbaren Anwendung der physikalischen Grundgleichungen angesehen. Die Fehler bei der numerischen Umsetzungen der Gleichungen müssen so klein wie möglich gehalten werden. Näherungen sind aber für rechenzeitintensive Teilbereiche unerlässlich. Unter diesem Gesichtspunkt sind die durchgeführten Approximationen der spektralen Absorptionskoeffizienten aus Abschnitt 3.3.1 zu sehen, die im Abstand einiger Halbwertsbreiten vom Zentrum starker Linien Ungenauigkeiten der Koeffizienten bis zu 1 % zulassen.

Weitere Fehler aufgrund der spektralen Auflösung können in der Stratosphäre für sehr kleine Spektralintervalle bis zu einigen Prozent betragen, wenn als Auflösung $0,01 \text{ cm}^{-1}$ breite Teilintervalle und die Gauß Quadratur achter Ordnung angewandt wird. Ein Vergleich zwischen dieser Auflösung und dem Modell mit der ASLV-Auflösung zeigt für den breiten Spektralbereich $1100 \text{ bis } 1500 \text{ cm}^{-1}$ keine nennenswerten Unterschiede.

Der Vergleich mit den L-f-L Ergebnissen der ICRCCM Studie erbrachte als größte Abweichung von einem der in der Studie angegebenen Modelle für die aufwärtsgerichtete Strahlungsflußdichte am Oberrand der Atmosphäre ca. $1,9 \text{ W/m}^2$ und für die abwärtsgerichtete am Boden ca. $1,1 \text{ W/m}^2$.

- **k-V-I Modell:** Es konnte gezeigt werden, daß die Approximation der Temperaturabhängigkeit der Linienstärken durch die Anwendung der effektiven LSE und die Einführung multivariater Häufigkeitsverteilungen für die angenäherte Berechnung von Strahlungstransporten geeignet ist.

Die Annahme, daß die zentralen Bereiche der Absorptionslinien vollständig schwarz absorbieren, hat in der oberen Stratosphäre große Fehler zur Folge. Daher sind durch das k-Verteilungsmodell mit modifizierter FWS Approximation atmosphärische Abkühlungsraten nur innerhalb der Troposphäre und mit Einschränkungen in der unteren Stratosphäre bis ca. 30 km Höhe approximierbar.

- **k-V-II Modell:** Die spektralen Absorptionskoeffizienten sind in den Beitrag aus dem Flügel- bzw. dem Zentralbereich der Linien aufgeteilt und werden als eigenständige repräsentative Absorptionskoeffizienten in den k-Verteilungen verwendet. Mit der Anwendung des höhenabhängigen Domi-

nanzfaktors $(1 + \psi)/(1 + \eta^2\psi)$ wird der Wechsel der Druckabhängigkeit des Absorptionskoeffizienten vom Flügel- zum Zentrumscharakter, falls vorhanden, bei unterschiedlichen Höhen grob berücksichtigt. Hierdurch wird die Berechnung des Strahlungstransports in der gesamten Atmosphäre verbessert. Insbesondere gilt dies für die Abkühlungsraten in der oberen Stratosphäre, wo die Fehler bis auf ± 1 K/d verringert werden.

Unumgängliche Fehler sind bei Rechnungen mit L-f-L und k-Verteilungsmodellen durch die ungenaue Kenntnis der Linienparameter gegeben. Eine grobe Abschätzung, bei der die Linienstärke und Lorentzhalbwidthsbreite um ± 10 % variiert worden sind, ergab deutliche Unterschiede. Die aufwärtsgerichteten Strahlungsflüsse variieren dabei in der Stratosphäre bis zu $\pm 1,5$ %, F^{\downarrow} bis zu $\pm 8,5$ % und bei 10 km Höhe um ca. ± 5 %. Für die Abkühlungsraten ergeben sich oberhalb der Tropopause Abweichungen von ± 10 % und in Bodennähe von ± 4 %. Die Abschätzungen mit Hilfe des k-V-II Modells über den Einfluß der Linienreichweite lassen auch für L-f-L Rechnungen Fehler in der Größordnung von ± 3 % für F^{\downarrow} und ± 5 % für die Abkühlungsraten in der Troposphäre erwarten. Ursache sind dabei die mangelnde Kenntnis über den wahren Verlauf der Absorptionslinienflügel.

Mit den in dieser Arbeit vorgestellten k-Verteilungsmodellen kann der Strahlungstransport in klaren Atmosphären im IR mit hoher Genauigkeit berechnet werden. Für die Berücksichtigung der Absorption von Teilchen bzw. Tröpfchen und der Streuprozesse können die k-Verteilungen in entsprechende Strahlungsübertragungsmodelle, z.B. Zweistrommodelle, eingesetzt werden.

13

Danksagung

Die vorliegende Arbeit entstand im Rahmen der Promotionsförderung des Max-Planck-Instituts für Meteorologie.

Mein Dank gilt Herrn Prof. Dr. H. Hinzpeter und Herrn Dr. S. Bakan, die die Arbeit angeregt und durch Diskussionen gefördert haben. Ebenfalls sei an dieser Stelle vielen Mitarbeitern des Hamburger Meteorologischen Instituts und des Deutschen Klimarechenzentrums gedankt.

14

Symbol- und Abkürzungsverzeichnis

(Lokal begrenzte Größen sind nicht aufgeführt)

a_{index}	Gewicht eines Terms einer k-Verteilung
ASLV	Auflösung des Spektrums gemäß der spektralen Linienverteilung
B	Planckfunktion
B_r	repräsentativer Planckfunktionsterm
$\bar{B}_{\Delta\nu}$	mittlere Planckfunktion im Intervall $\Delta\nu$
C	Abkühlungsrate
c	Lichtgeschwindigkeit
c_p	spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck
E	Energieterm des unteren Übergangsniveaus beim Quantensprung; lower state energy
E_r	repräsentativer Term der lower state energy
f	Formfaktor der Absorptionslinien
F^\uparrow	aufwärtsgerichtete Strahlungsflußdichte
F^\downarrow	abwärtsgerichtete Strahlungsflußdichte
FWS	Far-Wing-Scaling
g	Schwerebeschleunigung in Meereshöhe am Äquator
g_{index}	Gewicht der Gauß Quadratur
HITRAN	Bezeichnung des Linienparameterkatalogs (Rothman et al., 1986)
h	Plancksche Konstante
ICRCCM	InterComparison of Radiation Codes in Climate Models, WMO (1984)
IR	Infrarot
J_ν	monochromatische Quellfunktion
k	Boltzmannsche Konstante
k_f	Beitrag aus Linienflügeln zum spektralen Absorptionskoeffizienten
k_{kont}	Kontinuumabsorption des Wasserdampfs
k_r	repräsentativer Absorptionskoeffizient
k_z	Beitrag aus den Zentralbereichen von Linien zum Absorptionskoeffizienten
k_ν	spektraler Absorptionskoeffizient
k-V-I	k-Verteilungsmodell mit modifizierter FWS Approximation
k-V-II	k-Verteilungsmodell mit Berücksichtigung der Linienzentren durch die Aufteilung des Absorptionskoeffizienten in die Beiträge aus den Flügel- - und Zentralbereichen sowie der Anwendung des Dominanzfaktors

L_ν	spektrale Strahldichte
L-f-L	Linie-für-Linie
n	Potenz bei der Temperaturabhängigkeit der Lorentzhalbwidthen
OGQ	Ordnung der Gauß Quadratur
p	Luftdruck
p_f	Druck für die Bestimmung von ψ_f^r
p_z	Druck für die Bestimmung von ψ_z^r
p_0	L-f-L: Druck, zu dem die Linienparameter bestimmt sind k-Verteilung: Referenzdruck, zu dem eine k-Verteilung erstellt ist
q	Gaskonzentration
Q_r	Rotationszustandssumme
Q_v	Vibrationszustandssumme
S	Linienstärke
T	Temperatur
T_0	L-f-L: Temperatur, zu der die Linienparameter bestimmt sind k-Verteilung: Referenztemperatur, zu der eine k-Verteilung erstellt ist
\bar{T}	mittlere Transmission
u	Absorbermenge
z	Höhe
α_D	Dopplerhalbwidthbreite
α_L	Lorentzhalbwidthbreite
α_v	Voigthalfwidthbreite
β	Diffusivitätsfaktor = 1,66
γ_ν	Quotient zweier spektraler Absorptionskoeffizienten
$\Delta \lg k$	Absorptionsklassenbreite
$\Delta \nu$	Wellenzahlintervall
$\Delta \nu_i$	Abstand vom Zentrum der i-ten Linie
$\Delta \tau$	Differenz der optischen Dicken zwischen Schichtgrenzen
$\delta \nu$	L-f-L: Teilintervall, in dem die Gauß Quadratur angewandt wird k-Verteilung: Intervalle, deren Absorptionskoeffizienten zur gleichen Klasse gehören
η	$\frac{p}{p_0} \left(\frac{T_0}{T} \right)^n$: Druck-Temperaturabhängigkeit der Lorentzhalbwidthbreite
θ	Zenitwinkel
ϑ	approximierte Temperaturabhängigkeit der Linienstärken
μ	Kosinus des Zenitwinkels

ν	Wellenzahl
ρ	Dichte
τ	optische Dicke
ϕ	Azimutwinkel
χ	Abweichungsfaktor vom Lorentzabsorptionskoeffizienten
ψ	Teil des Dominanzfaktors $(1 + \psi)/(1 + \eta^2\psi)$
ψ_τ	repräsentativer Wert von ψ

- EXAMENSARBEIT Nr. 1
Juli 1990
Modellierung des gekoppelten Systems
Ozean-Atmosphäre in den Tropen
Mojib Latif
- EXAMENSARBEIT Nr. 2
Juli 1990
Zur Dynamik des antarktischen Zirkumpolar-
stromes
Jörg-Olaf Wolff
- EXAMENSARBEIT Nr. 3
Juli 1990
Zur Erniedrigung des atmosphärischen
Kohlendioxidgehalts durch den Weltozean
während der letzten Eiszeit
Christoph Heinze
- EXAMENSARBEIT Nr. 4
August 1990
Analysis and Prediction of the El Niño
Southern Oscillation Phenomenon using
Principal Oscillation Pattern Analysis
Jin-Song Xu
- EXAMENSARBEIT Nr. 5
Dezember 1990
Untersuchung zur niederfrequenten
Variabilität der Meeresoberflächen-
temperatur im Nordpazifik
Ute Luksch
- EXAMENSARBEIT Nr. 6
Dezember 1990
Meereismodellierung im Südlichen Ozean
Achim Stössel
- EXAMENSARBEIT Nr. 7
Dezember 1990
Principal Interaction/Oscillation Patterns
Theorie und Analysen
zum El Niño/Southern Oscillation-Phänomen
Udo Weese
- EXAMENSARBEIT Nr. 8
Dezember 1990
Bestimmung des Temperaturprofils der
Troposphäre mit einem Zwei-Frequenz-LIDAR
Felix A. Theopold
- EXAMENSARBEIT Nr. 9
Januar 1991
Modellierung des gekoppelten Systems:
Inlandeis, Übergangszone und Schelfeis
der Antarktis
Wolfgang Böhmer
- EXAMENSARBEIT Nr. 10
Januar 1991
Interne Variabilität in einem stochastisch
angetriebenen ozeanischen Zirkulations-
modell
Uwe Mikolajewicz
- EXAMENSARBEIT Nr. 11
Februar 1991
Bildung und Transport von Aerosolteilchen
und ihre Bedeutung für den Strahlungs-
haushalt
Ingrid Schult
- EXAMENSARBEIT Nr. 12
März 1991
Strahlungsübertragung in klaren Atmosphären
im IR mit k-Verteilungs- und Linie-für-
Linie Modellen
Heinz-Dieter Hollweg

ISSN 0938-5177