

Universität  
Rostock



Traditio et Innovatio



Masterarbeit zum Thema

# Modellierung von langwelligem Strahlungstransfer bei kleinen Graueitsparametern

erstellt im Sommersemester 2016 am  
Leibniz-Institut für Atmosphärenphysik  
an der

U n i v e r s i t ä t   R o s t o c k

von

Kai Budde  
(geboren am 27.01.1989 in Rostock)

unter der Betreuung von

Prof. Dr. Erich Becker

und

Dr. Urs Schaefer-Rolffs



## Zusammenfassung

Wegen des rasanten Anstiegs der  $\text{CO}_2$ -Konzentration in der Atmosphäre ist es wichtig, sich mit dem Einfluss dieses Treibhausgases auf das Klimasystem der Erde zu beschäftigen. Ein vereinfachtes Strahlungstransportschema, welches in das Klimamodell KMCM implementiert ist, wird vorgestellt. Dieses wird so modifiziert, dass die Wellenzahlabhängigkeit des Absorptionskoeffizienten und der daraus resultierende Graueitsparameter bei den Berechnungen berücksichtigt wird und der Strahlungstransport ohne ad-hoc-Annahmen auskommt. Das Strahlungstransportschema erfasst dabei alle physikalisch relevanten Prozesse von der Erdoberfläche bis zur Thermosphäre. Die Gültigkeit und Grenzen dieses Schemas werden auch im Hinblick auf eine weitere Konzentrationserhöhung untersucht.

## Abstract

Due to the increasing amount of  $\text{CO}_2$  in the atmosphere, it is important to study the influence of this greenhouse gas on the Earth's climate system. A simplified radiative transfer scheme, which has been included in the global climate model KMCM, is presented. The scheme will be modified in order to include the dependency of the absorption coefficient on the wave number which results in a greyness parameter. All parameters in use are chosen with physical justification. Furthermore the presented radiative transfer equations include all processes from the troposphere to thermosphere. At the end of this thesis the validity of the scheme is examined and the response to an increased  $\text{CO}_2$ -concentration shown.

## Danksagung

Zuallererst möchte ich mich bei meinen Eltern bedanken, die mich immer unterstützen und dabei meinen eigenen Willen akzeptieren. Ich kann mir keine schönere Kindheit und Jugend vorstellen als die, die ich mit meiner Familie verbracht habe. All die vergangenen Jahre, die den Weg zu dieser Arbeit bereitet haben, waren sehr lehr- und erlebnisreich. Ich habe Menschen auf der ganzen Welt kennengelernt. Ihnen und meinen Freunden danke ich dafür, dass ihr ein Teil von mir wart oder seid. Insbesondere Sophia hat einen erheblichen Beitrag zu dieser Arbeit geleistet.

Bezüglich dieser Masterarbeit möchte ich mich sehr herzlich bei Erich Becker, Rahel Knöpfel und Urs Schaefer-Rolffs bedanken. Sie haben den Grundstein gelegt, auf dem ich aufbauen konnte. Zudem haben sie mir viel Zeit gewährt, um mich intensiv in das Thema einzuarbeiten.

# Inhaltsverzeichnis

|          |   |           |
|----------|---|-----------|
| <b>1</b> | <b>Strahlung und Klima</b>  | <b>1</b>  |
| 1.1      | Energiebilanz der Erde . . . . .  | 1         |
| 1.2      | Charakteristische Strahlung . . . . .   | 3         |
| 1.3      | Rolle von CO <sub>2</sub> als Treibhausgas . . . . .                                  | 5         |
| 1.4      | Modellierung des Klimas mit dem KMCM . . . . .  | 7         |
| 1.5      | Ziel der Arbeit . . . . .   | 9         |
| <b>2</b> | <b>Solarer (kurzwelliger) Strahlungstransport</b>                                     | <b>10</b> |
| 2.1      | Unterteilung der Sonneneinstrahlung . . . . .   | 10        |
| 2.2      | Beer-Bouguer-Lambert-Gesetz . . . . .   | 10        |
| 2.3      | Heizrate . . . . .  | 12        |
| 2.4      | Beispielhafte solare Heizraten . . . . .  | 13        |
| <b>3</b> | <b>Terrestrischer (langwelliger) Strahlungstransport</b>                              | <b>14</b> |
| 3.1      | Allgemeine Strahlungstransportgleichung . . . . .                                     | 14        |
| 3.2      | Näherung einer planparallelen Atmosphäre . . . . .                                    | 15        |
| 3.3      | Eddingtonnäherung . . . . .   | 16        |
| 3.4      | Strahlungsabsorption in Wolken . . . . .  | 18        |
| 3.5      | Breitbandnäherung . . . . .   | 19        |
| 3.6      | Grauheitsgrenze . . . . .   | 20        |
| 3.7      | Elsasser-Bandmodell . . . . .   | 20        |
| 3.8      | Näherung der spektralen Bestrahlungsstärken . . . . .                                 | 21        |
| 3.9      | Nebenbedingungen für die Bestrahlungsstärken $D^k, U^k, d^k, u^k$ . . . . .           | 22        |
| <b>4</b> | <b>Parameterbestimmung</b>  | <b>25</b> |
| 4.1      | Berechnung des Massenmischungsverhältnisses $q$ . . . . .                             | 25        |
| 4.2      | HITRAN-Datenbank . . . . .  | 26        |
| 4.3      | Verbreiterungseffekte bei Spektrallinien . . . . .                                    | 28        |
| 4.3.1    | Natürliche Linienverbreiterung . . . . .  | 28        |
| 4.3.2    | Dopplerverbreiterung . . . . .  | 28        |
| 4.3.3    | Stoßverbreiterung . . . . .   | 29        |
| 4.4      | Berechnung des Massenabsorptionskoeffizienten $\kappa$ . . . . .                      | 29        |
| 4.5      | CO <sub>2</sub> -Spektrum von 620 cm <sup>-1</sup> bis 715 cm <sup>-1</sup> . . . . . | 31        |
| 4.6      | Arbeiten mit den HITRAN-Daten . . . . .   | 32        |
| 4.6.1    | Initialisieren der spektroskopischen Daten . . . . .                                  | 32        |
| 4.6.2    | Filterung der Spektrallinien . . . . .  | 32        |
| 4.6.3    | Massenabsorptionsspektrum und Bestimmung von $\bar{\kappa}^k$ . . . . .               | 34        |
| 4.7      | Bestimmung von $\omega$ , $q_c$ und $\kappa^c$ . . . . .                              | 39        |
| <b>5</b> | <b>Implementierung des Strahlungsschemas ins KMCM</b>                                 | <b>40</b> |
| 5.1      | Diskretisierung . . . . .   | 40        |
| 5.1.1    | Halbniveaus . . . . .   | 40        |
| 5.1.2    | Implizites Euler-Verfahren . . . . .  | 41        |
| 5.1.3    | Iterationsvorschrift . . . . .  | 43        |
| 5.2      | Ausschnitte aus dem KMCM Quelltext . . . . .  | 43        |

|          |   |            |
|----------|---|------------|
| <b>6</b> | <b>Ergebnisse des Strahlungsschemas</b>   | <b>44</b>  |
| 6.1      | Vergleich der CO <sub>2</sub> -Heizraten . . . . .  | 44         |
| 6.2      | Einfluss der Graueitsschranke auf CO <sub>2</sub> -Heizraten . . . . .                        | 45         |
| 6.3      | Abhängigkeit vom Graueitsparameter $y^k$ . . . . .  | 46         |
| 6.4      | Cooling-to-space-Näherung . . . . .   | 49         |
| 6.5      | Angepasster Massenabsorptionskoeffizient und Erhöhung des CO <sub>2</sub> -Gehaltes . . . . . | 51         |
| <b>7</b> | <b>Zusammenfassung und Ausblick</b>   | <b>53</b>  |
| <b>A</b> | <b>Anhang</b>   | <b>54</b>  |
| A.1      | Erdoberflächentemperatur ohne Atmosphäre . . . . .  | 54         |
| A.2      | Umrechnungstabelle Wellenzahl - Wellenlänge - Frequenz . . . . .                              | 54         |
| A.3      | Planckfunktion im Wellenlängen- und Wellenzahlraum . . . . .                                  | 55         |
| A.4      | Legendrepolynome . . . . .  | 55         |
| A.5      | Berechnung der nach "unten" verlaufenden spektralen Leistungsdichte . . . . .                 | 56         |
| A.6      | Integration über untere Hemisphäre . . . . .  | 56         |
| A.7      | Frequenzbandintegration . . . . .   | 58         |
| A.8      | Mathematische Untersuchungen der Elsasserfunktion . . . . .                                   | 59         |
| A.9      | Umformulierung des oszillierenden Anteils der Bestrahlungsstärken . . . . .                   | 59         |
| A.10     | Berechnung der Bestrahlungsstärken im Elsasserbandmodell . . . . .                            | 61         |
| A.11     | Berechnung der Abweichungsamplituden . . . . .  | 64         |
| A.12     | Berechnung der Iterationsvorschrift . . . . .   | 67         |
| A.13     | Strahlungsparameter im KMCM . . . . .   | 71         |
| A.14     | Strahlungstransportschema im KMCM . . . . .   | 73         |
| A.15     | Fortran-style Spezifikationssymbole . . . . .   | 81         |
| A.16     | R-Skripte (Quelltexte) . . . . .  | 81         |
|          | A.16.1 importHITRANdata.R . . . . .   | 81         |
|          | A.16.2 mainHITRAN.R . . . . .   | 82         |
|          | A.16.3 abscoeffHITRAN.R . . . . .   | 89         |
|          | A.16.4 ParameterCalc.R . . . . .  | 102        |
|          | A.16.5 HelpersFunction.R . . . . .  | 104        |
|          | A.16.6 PlanckAndAbsCoeff.R . . . . .  | 106        |
|          | A.16.7 planck.R . . . . .   | 108        |
|          | A.16.8 LineByLineCoolingToSpace.R . . . . .   | 109        |
|          | <b>Literaturnachweis und Quellenverzeichnis</b>   | <b>111</b> |

# 1 Strahlung und Klima

Ohne die Sonne wäre Leben, wie wir es kennen, auf der Erde unmöglich<sup>1</sup>. Zudem käme die Dynamik der Atmosphäre, zum Beispiel alle Winde, zum Erliegen. Durch Kernfusion wird im Inneren der Sonne Energie freigesetzt, welche die Sonnenoberfläche zum Teil in Form elektromagnetischer Wellen verlässt. Die gerichteten elektromagnetischen Wellen bezeichnen wir als Strahlen bzw. Strahlung. Einzelne, also quantisierte, Wellenpakete werden Photonen genannt.

Bevor wir uns anschauen, wie die Oberflächentemperatur der Erde durch die Sonne beeinflusst wird, stellen wir das Konzept des thermodynamischen Gleichgewichtes vor. Ein thermodynamisches Gleichgewicht von zwei Systemen wird genau dann erreicht, wenn Energieaustausch zwischen beiden Systemen stattfindet, so dass die Gesamtentropie<sup>2</sup> maximiert wird. Dies hat unter anderem zur Folge, dass sich die Temperaturen der beiden Systeme angleichen.

Entfernt man in Gedanken die Sonne aus unserem Sonnensystem, so würde die Erde ihre Umlaufbahn verlassen, da die Gravitationskraft der Sonne wegfiel, und nach einer gewissen Zeit die Umgebungstemperatur annehmen. Die Oberflächentemperatur würde auf ca. 2,75 K (−270,4 °C) absinken. Dies entspricht der gemittelten Temperatur der kosmischen (Mikrowellen-)Hintergrundstrahlung [2].

Doch auf der Erde herrscht ein lebensfreundliches Klima. Die im Mittel vorherrschenden Temperaturen oder auch der Kohlenstoffdioxid-, Sauerstoff- und Wassergehalt ermöglichen Leben. Wie kommt es nun dazu, dass die gemittelte globale Erdoberflächentemperatur ca. 14 °C [3] beträgt? Verantwortlich dafür ist der natürliche Treibhauseffekt.

## 1.1 Energiebilanz der Erde

Im thermodynamischen Gleichgewicht emittiert und absorbiert ein System wie ein schwarzer Körper. Nach dem STEFAN-BOLTZMANN-Gesetz berechnet sich die Strahlungsleistung  $P$  eines Körpers der Fläche  $A$  bei der absoluten Temperatur  $T$  nach

$$P = \sigma \cdot A \cdot T^4 \quad , \quad (1.1)$$

mit der STEFAN-BOLTZMANN-Konstante

$$\sigma = \frac{2\pi^5 k_B^4}{15h^3 c^2} \approx 5,67 \cdot 10^{-8} \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \text{K}^4} \quad . \quad (1.2)$$

In dieser ist  $k_B$  die BOLTZMANN-Konstante,  $h$  die PLANCK-Konstante und  $c$  die Vakuumlichtgeschwindigkeit. Die Leistung der Sonnenstrahlen, die senkrecht auf einem Quadratmeter Fläche auf die Erde treffen, beträgt im Jahresmittel [4]

$$S_0 = 1360,8 \pm 0,5 \frac{\text{W}}{\text{m}^2} \quad (1.3)$$

und wird als Solarkonstante bezeichnet. Wie wir später sehen werden, handelt es sich dabei um eine Bestrahlungsstärke<sup>3</sup>. Hätte die Erde keine Atmosphäre und würde die gesamte Strahlung absorbiert werden<sup>4</sup>, so betrüge die durchschnittliche Oberflächentemperatur

---

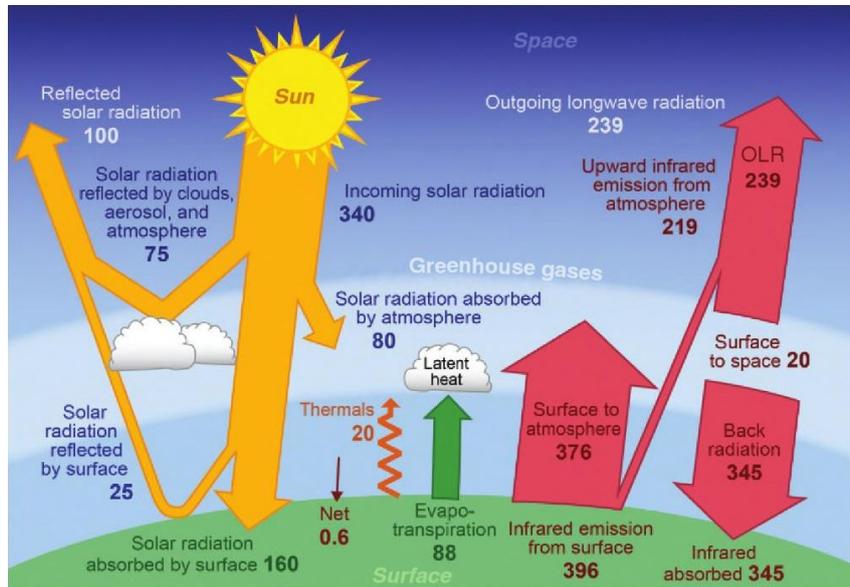
<sup>1</sup>”Life needs a constant energy flux from the sun to sustain it.” [1]

<sup>2</sup>Wird bildlich und vereinfacht als Maß der Unordnung bezeichnet.

<sup>3</sup>Die Bestrahlungsstärke wird auch als Strahlungsstromdichte bezeichnet.

<sup>4</sup>Aus unserer Erfahrung wissen wir, dass ein Teil der Sonnenstrahlung reflektiert wird. Sonst könnte man die Tagseite der Erde aus dem Weltall nicht sehen. Dementsprechend absorbiert die Erde nicht wie ein schwarzer Körper.

278,3 K bzw. 5,15 °C<sup>1</sup>. Für die Differenz zur tatsächlichen, durchschnittlichen Erdoberflächentemperatur von 14 °C muss demnach die Atmosphäre verantwortlich sein. Genauer gesagt führen die sogenannten Treibhausgase wie z.B. Kohlenstoffdioxid (CO<sub>2</sub>), Ozon (O<sub>3</sub>) und Wasserdampf (H<sub>2</sub>O) sowie Aerosole zu einer veränderten Energiebilanz.



**Abbildung 1:** Durchschnittliche globale Bestrahlungsstärken und Energieflussdichten (in  $\frac{W}{m^2}$ ) im System Erde-Atmosphäre (entnommen aus [5])

In Abbildung 1 sind neben Energieflussdichten aus dynamischen Prozessen die durchschnittlichen globalen Bestrahlungsstärken abgebildet. Die im Anhang A.1 berechnete und auf die Gesamtoberfläche der Erde bezogene Strahlungsstromdichte der Sonne  $S_{\text{Erde}} = 340,2 \frac{W}{m^2}$  (incoming solar radiation) ist dabei die einzige bedeutende Energiequelle. Etwa 30% der solaren Bestrahlungsstärke ( $100 \frac{W}{m^2}$ ) wird von der Erdoberfläche und den Wolken reflektiert (reflected solar radiation). Dies entspricht dem Albedo oder auch Rückstrahlvermögen der Erde. Etwa 23% der ankommenden Strahlung ( $80 \frac{W}{m^2}$ ) wird von Treibhausgasen, insbesondere von Ozon in der Stratosphäre absorbiert. Warum dies so ist, wird in Abschnitt 1.2 erklärt. 47% der ankommenden Strahlung ( $160 \frac{W}{m^2}$ ) wird von der Erdoberfläche aufgenommen.

Zu den in Richtung Weltall gerichteten Energieflussdichten gehören die Konvektion (Thermals) mit  $20 \frac{W}{m^2}$  und die Verdunstung (Evaporation) mit  $88 \frac{W}{m^2}$ . Die Energie dieser Prozesse wird in der Atmosphäre deponiert.  $396 \frac{W}{m^2}$  werden als Infrarotstrahlen von der Erdoberfläche emittiert, wovon lediglich  $20 \frac{W}{m^2}$  direkt in den Weltraum gelangen. Die übrig gebliebenen  $376 \frac{W}{m^2}$  werden in der Atmosphäre von den Treibhausgasen absorbiert. Insgesamt gelangen  $(80 + 20 + 88 + 376) \frac{W}{m^2} = 564 \frac{W}{m^2}$  in die Atmosphäre.

Diese emittiert wieder, wobei  $345 \frac{W}{m^2}$  in Richtung Erdoberfläche abgestrahlt werden.  $219 \frac{W}{m^2}$  (mit den  $20 \frac{W}{m^2}$  der direkt in den Weltraum gelangten Strahlung  $239 \frac{W}{m^2}$ ) verlassen die Atmosphäre (OLR = outgoing longwave radiation). Die Summe beträgt  $564 \frac{W}{m^2}$ , was der in die Atmosphäre gelangenden Bestrahlungsstärke entspricht.

Netto<sup>2</sup> bleibt dennoch eine Bestrahlungsstärke von aktuell  $0,6 \frac{W}{m^2}$  übrig. Diese Energie wird momentan von den Ozeanen gespeichert. Im klimatologischen Mittel sind Energie-

<sup>1</sup>Die Herleitung dieses Wertes befindet sich im Anhang A.1.

<sup>2</sup>In Abbildung 1 sind nur gerundete Werte angegeben. Das am Ende  $0,6 \frac{W}{m^2}$  übrig bleiben, muss man dem Autor glauben.

aufnahme und -abgabe gleich groß. Das bedeutet, dass in Zukunft die Weltmeere die überschüssige Energie wieder in die Atmosphäre freigeben werden.

Die in Abbildung 1 dargestellte Rückstrahlung von der Atmosphäre zur Erdoberfläche (back radiation) beschreibt den Treibhauseffekt und führt dazu, dass die Erdoberfläche diese absorbierte Strahlung wieder verlieren muss, was zu einer Erhöhung der Oberflächentemperatur führt. Dieser Zusammenhang wird durch das eingangs beschriebene STEFAN-BOLTZMANN-Gesetz (Gleichung 1.1) dargelegt. Im nun folgenden Unterkapitel 1.2 wird beschrieben, wie genau die spektrale Strahldichte eines schwarzen Körpers und die der Sonne bzw. Erde aussieht.

## 1.2 Charakteristische Strahlung

Aus Gleichung 1.1 wissen wir, dass die Strahlungsleistung nur von der Temperatur des emittierenden Objektes abhängt. (Dies gilt nur, sofern sich dessen Oberfläche nicht verändert.) Nun wollen wir uns anschauen, wie viel Energie ein schwarzer Körper pro Wellenzahlintervall  $[\tilde{\nu}, \tilde{\nu} + d\tilde{\nu}]$  abstrahlt (Emissionsspektrum). Die Wellenzahl  $\tilde{\nu}$  wird als Inverse der Wellenlänge  $\lambda$

$$\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} \quad (1.4)$$

definiert<sup>1</sup>. Für einen schwarzen Strahler gilt für die abgestrahlte Gesamtleistung pro Einheitsfläche  $A$

$$\frac{P}{A} = \int_0^{\infty} d\tilde{\nu} \int_{\text{Halbraum}} d\Omega B_{\tilde{\nu}} \cos(\vartheta) \quad (1.5)$$

mit dem Raumwinkelement<sup>2</sup>  $d\Omega = d\varphi \sin(\vartheta) d\vartheta$  und der PLANCKfunktion<sup>3</sup> (spektrale Strahldichte) (in  $\frac{\text{W}}{\text{m}^2 \cdot \text{sr} \cdot \text{cm}^{-1}}$ )

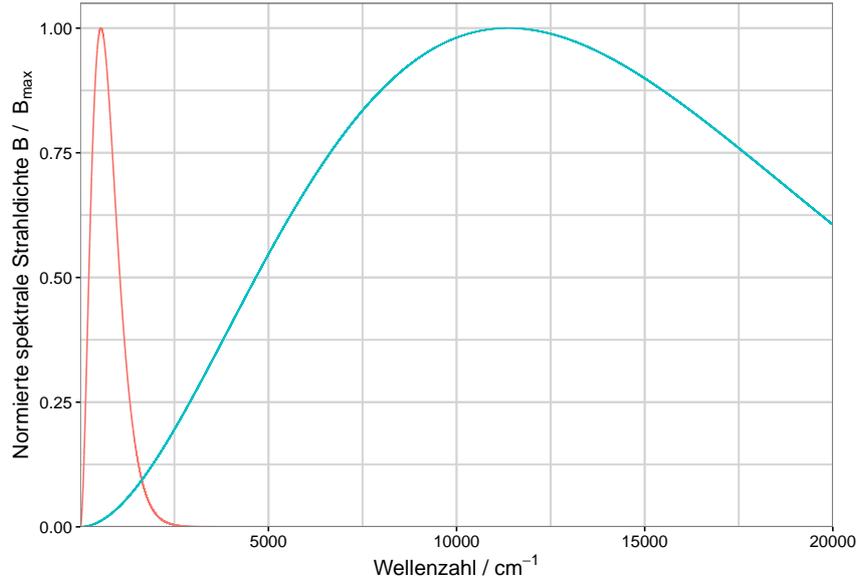
$$B_{\tilde{\nu}} = 2hc^2 \tilde{\nu}^3 \frac{1}{\exp\left(\frac{hc\tilde{\nu}}{k_B T}\right) - 1} \quad (1.6)$$

In Abbildung 2 sind die PLANCKfunktionen für  $T = 280 \text{ K}$  und  $T = 5800 \text{ K}$  dargestellt, wobei zur besseren Anschaulichkeit jeder Funktionswert durch das Maximum der jeweiligen Funktion dividiert wurde. Es lässt sich schnell erkennen, dass die spektrale Strahldichte stark von der Wellenzahl abhängt. Dabei verschiebt sich bei höheren Temperaturen das Maximum zu größeren Wellenzahlen und steigt an, was aufgrund der Normierung in dieser Abbildung nicht zu erkennen ist. Menschen können Licht einer Wellenlänge von etwa  $380 \text{ nm}$  bis  $750 \text{ nm}$  wahrnehmen [6]. Dies entspricht einem Wellenzahlintervall von  $13333,3 \text{ cm}^{-1}$  bis  $26315,8 \text{ cm}^{-1}$ . Der erste Wert könnte als Grenze zwischen langwelliger (kleine Wellenzahl) und kurzwelliger Strahlung (hohe Wellenzahl) festgelegt werden. Stattdessen unterscheiden wir analog zu Abbildung 1 zwischen solarer (=kurzwelliger) und terrestrischer (=langwelliger) Strahlung. Als Grenze soll, wie man aus Abbildung 2 ablesen kann, ein Wert von  $2000 \text{ cm}^{-1}$  ( $\hat{=} 5 \mu\text{m}$ ) dienen.

<sup>1</sup>Ein Umrechnungstabelle von in dieser Arbeit typischerweise auftretenden Wellenzahlen in Wellenlängen und Frequenzen befindet sich im Anhang A.2.

<sup>2</sup>Für den Raumwinkel  $\Omega$  gilt  $d\Omega = \frac{dA}{r^2}$  mit der infinitesimalen Fläche  $dA$  und dem Abstand  $r$ . Die Einheit des Raumwinkels ist sr (steradian).

<sup>3</sup>Für die Darstellung der PLANCKfunktion im Frequenz- oder Wellenlängenraum siehe Anhang A.3.



**Abbildung 2:** Normierte PLANCKfunktionen für  $T_E = 280 \text{ K}$  (rot) und  $T_S = 5800 \text{ K}$  (türkis). Für die tatsächlichen PLANCKkurven müssten diese mit den jeweiligen Maxima von  $B_{\max,E} \approx 1,25 \cdot 10^{-3} \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \cdot \text{sr} \cdot \text{cm}^{-1}}$  und  $B_{\max,S} \approx 1,11 \cdot 10^3 \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \cdot \text{sr} \cdot \text{cm}^{-1}}$  multipliziert werden.

In Abschnitt 1.3 werden wir sehen, warum bei  $\text{CO}_2$  nur die thermische Emission der Erde bei einer Wellenlänge von  $15 \mu\text{m}$  bzw. einer Wellenzahl von  $667 \text{ cm}^{-1}$  wichtig ist. Dass bei dieser Wellenzahl die solare Einstrahlung tatsächlich zu vernachlässigen ist, zeigt die folgende Rechnung. Der von der Sonne bestrahlte Raumwinkel, indem sich die Erde befindet beträgt

$$\begin{aligned}
 \Omega_S &\approx \frac{A_{\text{Erdscheibe}}}{r_{\text{SE}}^2} \\
 &= \frac{2\pi r_E^2}{r_{\text{SE}}^2} \\
 &= \frac{2\pi(6371 \cdot 10^3 \text{ m})^2}{(149597870700 \text{ m})^2} \\
 &\approx 1,14 \cdot 10^{-8} \text{ sr} \quad .
 \end{aligned} \tag{1.7}$$

Für den Vergleich berechnen wir die spektralen Bestrahlungsstärken der Sonne  $F_{\tilde{\nu},S}$  und Erde  $F_{\tilde{\nu},E}$  bei  $\tilde{\nu} = 667 \text{ cm}^{-1}$ . Aus Gleichung 1.5 erhalten wir für die Sonne bei einer Strahlungstemperatur von  $T = 5800 \text{ K}$  aufgrund der großen Entfernung näherungsweise

$$\begin{aligned}
 F_{\tilde{\nu},S} &= B_{\tilde{\nu}} \int_{\text{bestr. Raumwinkel}} d\Omega \underbrace{\cos(\vartheta)}_{\approx 1} \\
 &\approx B_{\tilde{\nu}} \cdot \Omega_S \\
 &= 1,96 \cdot 10^1 \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \cdot \text{sr} \cdot \text{cm}^{-1}} \cdot 1,14 \cdot 10^{-8} \text{ sr} \\
 &= 2,23 \cdot 10^{-7} \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \cdot \text{cm}^{-1}} \quad .
 \end{aligned} \tag{1.8}$$

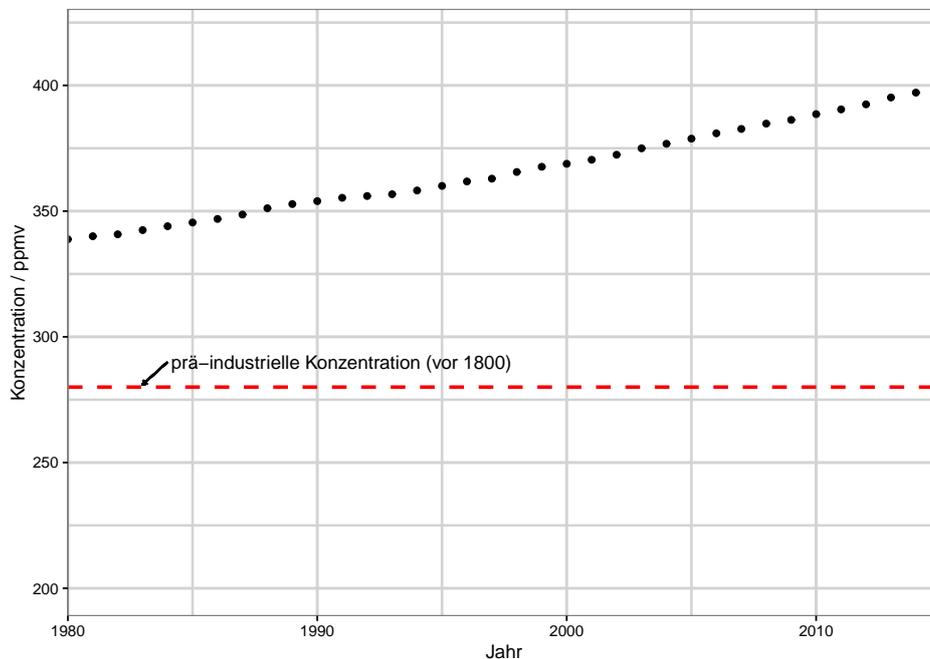
Die thermische Strahlung, die von der Erdoberfläche emittiert wird, durchstrahlt den gesamten oberen Halbraum. Daher erhalten wir im Falle der Erde für  $T = 280 \text{ K}$

$$\begin{aligned}
 F_{\nu,E} &= B_{\nu} \underbrace{\int_{\text{Halbraum}} d\Omega \cos(\vartheta)}_{=\pi} \\
 &= 1,19 \cdot 10^{-1} \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \cdot \text{sr} \cdot \text{cm}^{-1}} \cdot \pi \\
 &= 3,73 \cdot 10^{-1} \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \cdot \text{cm}^{-1}} .
 \end{aligned}
 \tag{1.9}$$

Die Ergebnisse der Gleichungen 1.8 und 1.9 zeigen, dass die von der Erde kommende spektrale Bestrahlungsstärke um einen Faktor  $10^6$  größer ist als die von der Sonne auftreffende.

### 1.3 Rolle von $\text{CO}_2$ als Treibhausgas

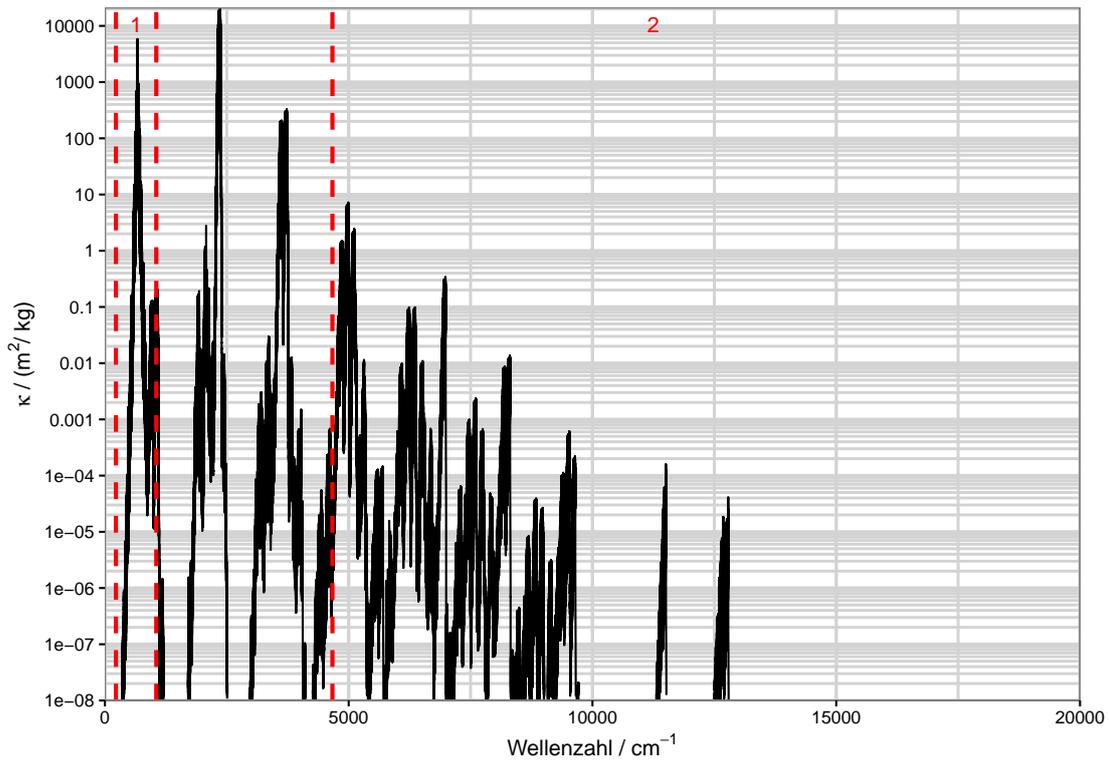
Wie wir bereits in Kapitel 1.1 angedeutet haben, führen die sogenannten Treibhausgase zu einer Erhöhung der mittleren Erdoberflächentemperatur. Kohlenstoffdioxid ist je nach Bewölkung für bis zu 26% des natürlichen Treibhauseffektes verantwortlich [7]. Vor allem durch anthropogene Einflüsse ist die  $\text{CO}_2$ -Konzentration in den letzten 200 Jahren um mehr als 40% gestiegen [8], [9]. Diese Zunahme wird in Abbildung 3 verdeutlicht. Aus Bohrkernproben in der Antarktis weiß man, dass auch in den 800.000 Jahren vor der industriellen Revolution der  $\text{CO}_2$ -Gehalt nie größer als  $300 \text{ ppmv}^1$  war [10]. Der beständige Konzentrationsanstieg sowie die hohe Verweildauer von mehreren hundert Jahren [11] in der Atmosphäre verdeutlichen die besondere Rolle des Moleküls bei der klimatischen Entwicklung der Erde. Aus diesem Grund testen wir das Modell des Strahlungstransportes sowie die damit einhergehenden Erwärmungs- und Abkühlungsraten mit  $\text{CO}_2$ .



**Abbildung 3:** Global gemittelte  $\text{CO}_2$ -Konzentrationen von 1980 bis 2015 (aus [8]). Zum Vergleich ist die mittlere  $\text{CO}_2$ -Konzentration von  $280 \text{ ppmv}$  vor 1800 [9] angegeben.

<sup>1</sup>Das Volumenmischungsverhältnis ppmv steht für "parts per million by volume" und bezeichnet das Verhältnis einer Teilchensorte  $\cdot 10^{-6}$  an der Gesamtteilchenzahl in einem festen Volumen.

Aus dem vorherigen Abschnitt 1.2 wissen wir, dass die solare Einstrahlung bei einer Wellenzahl von  $667\text{ cm}^{-1}$  vernachlässigbar ist. Nun wollen wir begründen, warum nur der Bereich um  $667\text{ cm}^{-1}$  für den Strahlungstransport im mittleren Infrarotbereich ( $\tilde{\nu} \in [200\text{ cm}^{-1}, 2000\text{ cm}^{-1}]$ ) relevant ist. Als Ergebnis aus nachfolgenden Kapiteln ist in Abbildung 4 der Massenabsorptionskoeffizient  $\kappa$  von  $\text{CO}_2$  im Bereich von  $0\text{ cm}^{-1}$  bis  $20000\text{ cm}^{-1}$  angegeben. Der Massenabsorptionskoeffizient ist ein Maß für die Fähigkeit, Strahlung einer bestimmten Wellenzahl zu absorbieren bzw. diese auch wieder zu emittieren. Es ist zu erkennen, dass  $\kappa$  sehr stark von der Wellenzahl abhängt. Zudem schwankt der Massenabsorptionskoeffizient um mehrere Größenordnungen ( $10^4$  bis  $0$ ). In derselben Abbildung 4 sind mit 1 bzw. 2 die Bereiche angegeben, in denen die Funktionswerte der PLANCKfunktionen aus Abbildung 2 die Hälfte des Maximalwerte überschritten haben.

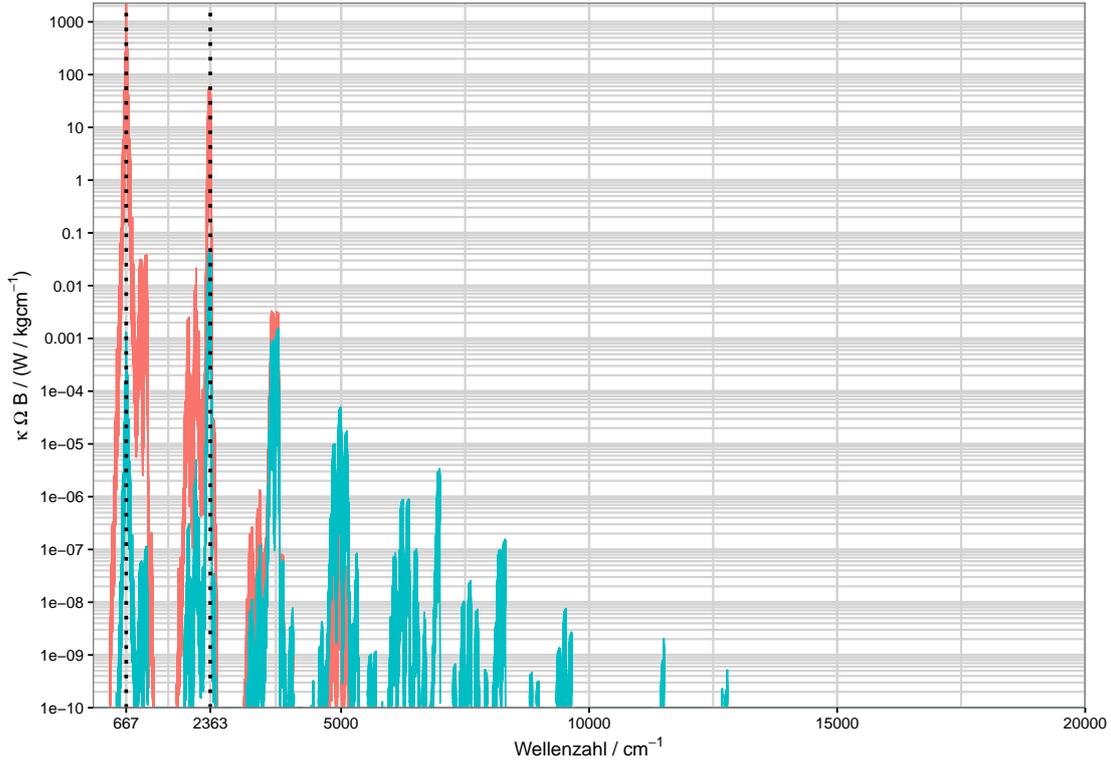


**Abbildung 4:** Massenabsorptionskoeffizient  $\kappa$  für  $\text{CO}_2$ -Linien (bestehend aus  $^{12}\text{C}$ - und  $^{16}\text{O}$ -Atomen) im Intervall von  $0\text{ cm}^{-1}$  bis  $20000\text{ cm}^{-1}$ .

Da die PLANCKfunktion  $B_{\tilde{\nu}}$  die von einem schwarzen Körper emittierte Strahlung angibt, können wir aus dem Produkt des Massenabsorptionskoeffizienten  $\kappa$  mit der von der Erde ausgehenden bzw. von der Sonne ankommenden spektralen Bestrahlungsstärke  $F_{\tilde{\nu}} = \Omega \cdot B_{\tilde{\nu}}$  abschätzen, wie viel Strahlung von  $\text{CO}_2$  absorbiert werden kann. In Abbildung 5 ist dieser Zusammenhang dargestellt. Es lässt sich erkennen, dass die Absorption von solarer Strahlung durch  $\text{CO}_2$  über den gesamten Wellenzahlbereich von  $0\text{ cm}^{-1}$  bis  $20000\text{ cm}^{-1}$  vernachlässigbar ist. Im Gegensatz dazu absorbiert  $\text{CO}_2$  die von der Erde emittierte Strahlung im Bereich um  $667\text{ cm}^{-1}$  bzw.  $2363\text{ cm}^{-1}$  besonders stark. Die Maxima liegen bei  $\tilde{\nu}_1 = 667,55\text{ cm}^{-1}$  mit  $\kappa \cdot F_{\tilde{\nu}_1,E} \approx 2169,3 \frac{\text{W}}{\text{kg}\cdot\text{cm}^{-1}}$  und bei  $\tilde{\nu}_2 = 2334,15\text{ cm}^{-1}$  mit  $\kappa \cdot F_{\tilde{\nu}_2,E} \approx 54,98 \frac{\text{W}}{\text{kg}\cdot\text{cm}^{-1}}$ . Dieser Unterschied bleibt auch bei kleineren Temperaturen in der oberen Atmosphäre bestehen, denn die PLANCKfunktionen betragen bei  $T_1 = 280\text{ K}$ ,  $T_2 = 250\text{ K}$  und  $T_3 = 220\text{ K}$ :

| $\tilde{\nu} / \text{cm}^{-1}$ | $B_{\tilde{\nu}}(T_1) / \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \cdot \text{sr} \cdot \text{cm}^{-1}}$ | $B_{\tilde{\nu}}(T_1) / \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \cdot \text{sr} \cdot \text{cm}^{-1}}$ | $B_{\tilde{\nu}}(T_1) / \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \cdot \text{sr} \cdot \text{cm}^{-1}}$ |
|--------------------------------|---|---|---|
| 667                            | $1,19 \cdot 10^{-1}$  | $7,77 \cdot 10^{-2}$  | $4,57 \cdot 10^{-2}$  |
| 2363                           | $8,34 \cdot 10^{-4}$  | $1,95 \cdot 10^{-4}$  | $3,05 \cdot 10^{-5}$  |

Diese Arbeit konzentriert sich lediglich auf den  $15 \mu\text{m}$  ( $\hat{=}$   $667 \text{ cm}^{-1}$ )-Bereich, denn der größte Teil der Strahlung wird in diesem Bereich von  $\text{CO}_2$  absorbiert und emittiert. Der Transport von solarer und terrestrischer Strahlung ist Bestandteil des *Kühlungsborn Mechanistic general Circulation Model* (KMCM). Eine kurze Darstellung des Modells beinhaltet der nachfolgende Abschnitt 1.4.



**Abbildung 5:** Produkt des Massenabsorptionskoeffizienten  $\kappa$  mit der spektralen Bestrahlungsstärke  $F_{\tilde{\nu}}$  in der Atmosphäre durch Abstrahlung von der Erde bei  $T_E = 280 \text{ K}$  (rot) und von der Sonne bei  $T_S = 5800 \text{ K}$  (türkis) (Berechnung analog zu Gleichungen 1.8 und 1.9). Die gepunkteten Linien zeigen Maxima bei  $\tilde{\nu} = 667 \text{ cm}^{-1}$  und  $\tilde{\nu} = 2363 \text{ cm}^{-1}$ .

## 1.4 Modellierung des Klimas mit dem KMCM

Das *Kühlungsborn Mechanistic general Circulation Model* (KMCM) ist ein am IAP<sup>1</sup> entwickeltes Klimamodell. Es enthält neben dem dynamischen Kern mit den entsprechenden Bewegungsgleichungen unter anderem einen Feuchtezyklus mit Verdunstung, Kondensation und Konvektion sowie ein Strahlungstransportschema. Letzteres lässt sich sehr genau und je nach Geometrie exakt lösen, wenn man die Gleichungen auf sehr kleinen Wellenzahlintervallen ( $10^{-4} \text{ cm}^{-1}$  oder kleiner) berechnet. Dies müsste für jede mögliche Temperaturverteilung in der Atmosphäre und über alle Absorptionslinien der beteiligten Moleküle geschehen, jedoch ist der Rechenaufwand für Klimamodelle zu groß.

Genauso wie in anderen Klimamodellen werden im KMCM Näherungen eingesetzt. Damit die Vereinfachungen die Realität wiedergeben, müssen geeignete Parameter, sogenannten

<sup>1</sup>Leibniz-Institut für Atmosphärenphysik Kühlungsborn an der Universität Rostock

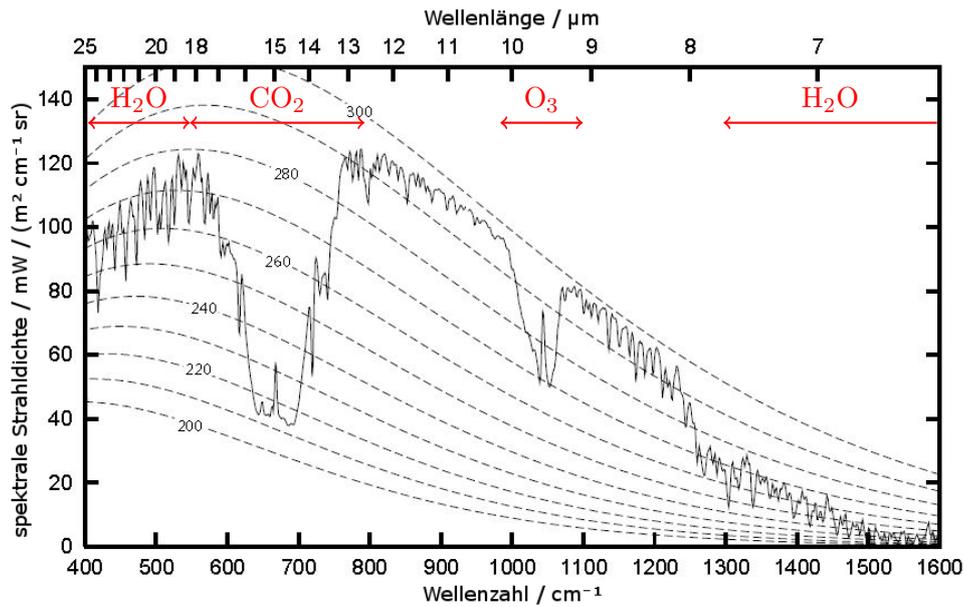
Parametrisierungen<sup>1</sup>, gefunden werden. Ein Parameter im KMCM ist bisher der Absorptionskoeffizient einer Bande gewesen. Dabei umfasst eine Absorptionsbande einen bestimmten Wellenzahlbereich, in dem ein Molekül besonders stark absorbiert und emittiert. Für jede dieser Banden werden im KMCM nach oben bzw. unten gerichtete Bestrahlungsstärken<sup>2</sup>  $F^k$  (in  $\frac{\text{W}}{\text{m}^2}$ ) ausgerechnet. Es gilt

$$F^k = \int_{\Omega} d\Omega \int_{\tilde{\nu}_{k1}}^{\tilde{\nu}_{k2}} d\tilde{\nu} L_{\tilde{\nu}}(\vec{r}, \vec{\Sigma}, t) \cos(\vartheta) \quad , \quad (1.10)$$

mit der spektralen Strahldichte  $L_{\tilde{\nu}}(\vec{r}, \vec{s}, t)$ <sup>3</sup>, dem Winkel  $\vartheta$  des Raumwinkelelementes zur Flächennormalen  $\vec{n}$  und dem Raumwinkelelement  $d\Omega$ . Daraus lässt sich in guter Näherung die Temperaturveränderung durch Strahlung nach

$$\frac{\partial T}{\partial t} = - \frac{g}{c_p} \frac{\partial F}{\partial p} \quad (1.11)$$

berechnen. Des Weiteren unterteilt man im KMCM vereinfachenderweise in kurzwellige (solare) Strahlung, die von Molekülen und Atomen in der Atmosphäre absorbiert bzw. gestreut/reflektiert wird und in langwellige (terrestrische) Strahlung, die von der Erde abgestrahlt wird.



**Abbildung 6:** Das infrarote Emissionsspektrum der Atmosphäre (TOA) wurde 1970 in einer Höhe von 1100 km vom Satelliten NIMBUS 4 mit IRIS-D in den Tropen über dem Pazifik aufgenommen. Das geglättete Spektrum besitzt eine Auflösung von  $2,8 \text{ cm}^{-1}$  bis  $3,0 \text{ cm}^{-1}$ . Zusätzlich sind gestrichelt die Schwarzkörperemissionslinien bei verschiedenen Temperaturen (entnommen aus [13]) sowie in Rot die im KMCM berücksichtigten Absorptionsbanden aufgetragen.

<sup>1</sup>“Because of the intrinsic complexity of the numerous processes included in these models and the computational demands of climate change simulation, it is frequently necessary to approximate the various processes using simplified representations called parameterizations.” [12]

<sup>2</sup>Oft wird die Bestrahlungsstärke mit  $E_e$  bezeichnet. Um zu zeigen, dass es sich um eine Strahlungsstromdichte (Dichte des Strahlungsflusses) handelt, wählen wir  $F$ .

<sup>3</sup>In dieser Arbeit wird für eine spektrale Strahldichte die Bezeichnung  $L_{\nu}$  statt der irreführenden spezifischen Intensität  $I_{\nu}$  verwendet.

Der solare Strahlungstransport wird in fünf Banden unterteilt. Dies wird in Kapitel 2 kurz umrissen. Bei dem terrestrischen Strahlungstransport wird die Absorption durch Ozon (zwischen  $980\text{ cm}^{-1}$  und  $1100\text{ cm}^{-1}$ ), Wasser (zwischen  $1\text{ cm}^{-1}$  und  $540\text{ cm}^{-1}$  sowie zwischen  $1300\text{ cm}^{-1}$  und  $2100\text{ cm}^{-1}$ ) und Kohlenstoffdioxid (zwischen  $540\text{ cm}^{-1}$  und  $800\text{ cm}^{-1}$ )<sup>1</sup> berücksichtigt. Dabei wird die  $\text{H}_2\text{O}$ -Bande in zwei Unterbanden unterteilt. In Abbildung 6 sind zum einen die Bereiche der vier bisher implementierten Banden dargestellt. Zum anderen ist die von der Erdatmosphäre über dem tropischen Pazifik emittierte bzw. durchgelassene spektrale Strahldichte im Intervall von  $400\text{ cm}^{-1}$  bis  $1600\text{ cm}^{-1}$  aufgetragen. Zusätzlich deuten gestrichelte Linien theoretische PLANCKkurven bei den entsprechenden Temperaturen an. Aus dieser Abbildung lässt sich unter anderem entnehmen, dass  $\text{CO}_2$  ab einer Atmosphärenschicht mit einer Temperatur von  $210 - 230\text{ K}$  quasi ungehindert in die darüberliegenden Schichten Strahlung emittiert. Die Implementierung des langwelligen Strahlungstransportes wird in Kapitel 3 beschrieben.

## 1.5 Ziel der Arbeit

In dieser Arbeit werden wir das von Rahel Knöpfel und Erich Becker entwickelte idealisierte Strahlungsschema [14] am Beispiel von  $\text{CO}_2$  überprüfen und anpassen. Dabei soll untersucht werden, inwieweit man mit Hilfe eines Grauheitsparameters Sättigungseffekte bei Konzentrationserhöhung erkennen kann. Zudem sollen alle Strahlungsparameter physikalisch begründet und die Erwärmungs- sowie Abkühlungsraten korrekt reproduziert werden.

---

<sup>1</sup>Das untersuchte Intervall für die Absorption durch  $\text{CO}_2$  ist in dieser Arbeit kleiner.

## 2 Solarer (kurzwelliger) Strahlungstransport

Wie wir in Abschnitt 1.1 gesehen haben, wird ca. 23% der kurzwelligen Sonneneinstrahlung von der Atmosphäre absorbiert. Als Hauptabsorber dienen Wolken, Wasserdampf, Aerosole und Ozon.

### 2.1 Unterteilung der Sonneneinstrahlung

Für die Modellierung wird die Bestrahlungsstärke der Sonne  $S_0$  (in  $\frac{\text{W}}{\text{m}^2}$ ) (Solarkonstante) in fünf Banden

$$S_0 = \sum_{k=1}^5 S_{0k} \quad \text{mit} \quad S_{0k} = a_k S_0 \quad (2.1)$$

unterteilt. Dabei stehen die Faktoren  $a_k$  für die jeweiligen Strahlungsanteile der Banden. Genauer entspricht  $a_1 = 0,0095$  der Ozon (UV)-<sup>1</sup>,  $a_2 = 0,21$  der Wasserdampf-,  $a_3 = 0,165$  der Sauerstoff-,  $a_4 = 3,5 \cdot 10^{-6}$  der UV (VIS<sup>2</sup>)- und  $a_5 = 1 - \sum_{k=1}^4 a_k \approx 0,6155$  der troposphärischen Wolkenbande. Bei den Berechnungen wird als Solarkonstante unter Berücksichtigung der Exzentrizität<sup>3</sup> der Erdumlaufbahn

$$S_0 = 1362 \frac{\text{W}}{\text{m}^2} + \cos(2\pi\tau) \cdot 55 \frac{\text{W}}{\text{m}^2} \quad (2.2)$$

mit der Zeit  $\tau$  (in Jahre) verwendet.

### 2.2 Beer-Bouguer-Lambert-Gesetz

Durchläuft Strahlung mit der spektralen Strahldichte  $L_{\bar{\nu}}$  ein transparentes Medium mit dem Massenextinktionskoeffizienten  $\kappa$  (in  $\frac{\text{m}^2}{\text{kg}}$ ), so nimmt die Strahldichte um

$$dL_{\bar{\nu}} = -L_{\bar{\nu}} \cdot d\tau \quad (2.3)$$

mit dem optischen Weg (dimensionslos<sup>4</sup>)

$$d\tau = \kappa \rho ds \quad , \quad (2.4)$$

der Massendichte  $\rho$  (in  $\frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$ ) und dem zurückgelegten geometrischen Weg  $s$  (in m) ab.

Wenn wir Gleichung 2.3 analog zu Gleichung 1.10 über eine Hemisphäre und über eine entsprechende Bande  $k$  integrieren, erhalten wir im Falle isotroper Strahlung unter Einfluss der Wolken die folgende Differentialgleichung für die Änderung der Bestrahlungsstärke  $S_{0k}$  entlang einer Wegstrecke  $ds$

$$\begin{aligned} dS_{0k} &= -\bar{\kappa}^k \rho_k S_{0k} ds - \kappa^c \rho_c S_{0k} ds \\ &= -(\bar{\kappa}^k \rho_k + r \rho_c) S_{0k} ds \quad . \end{aligned} \quad (2.5)$$

Diese Gleichung gilt für alle Banden ( $k = 1, 2, 3, 4, 5$ ) und enthält den bandgemittelten Massenabsorptionskoeffizienten  $\bar{\kappa}^k$  sowie die Wolken- und absorptionswirksame Massendichte  $\rho_c$  bzw.  $\rho_k$ . Zudem wird berücksichtigt, dass für jede Bande zum einen Strahlung

<sup>1</sup>Den ultravioletten Spektralbereich unterteilt man in UV-A: 380–315nm, UV-B: 315–280nm, UV-C: 280–100nm.

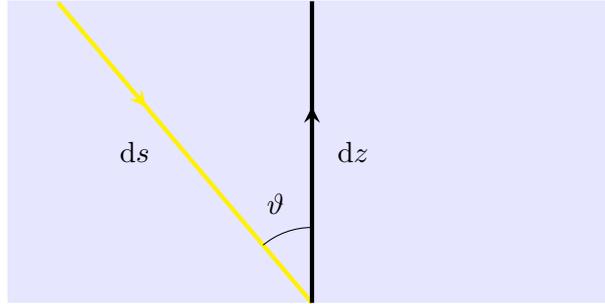
<sup>2</sup>VIS steht für sichtbares Licht.

<sup>3</sup>Die Exzentrizität beschreibt die Abweichung einer Umlaufbahn von einem Kreis.

<sup>4</sup>Eine physikalische Größe heißt dimensionslos, wenn sie durch einen Zahlenwert ohne Maßeinheit angegeben wird.

durch Absorption ( $\bar{\kappa}^k$ ) vermindert, zum anderen auch von den Wolken reflektiert wird ( $\kappa^c = r$ )<sup>1</sup> und damit nicht mehr entlang der ursprünglichen Richtung  $ds$  von der Quelle (Sonne) zum Aufpunkt propagiert. Im KMCM sind die bandgemittelten Massenabsorptionskoeffizienten  $\bar{\kappa}^k$  freie Parameter, die so gewählt werden, dass die Erwärmungsraten in der Strato- und Mesosphäre den Werten aus [15] und die von der Atmosphäre absorbierten sowie reflektierten Bestrahlungsstärken den Werten aus [16] entsprechen. Es sei  $\vartheta$  der spitze Winkel zwischen  $ds$  und der  $z$ -Achse (siehe Abbildung 7). Daraus folgt

$$dz = -\cos(\vartheta) ds \quad . \quad (2.6)$$



**Abbildung 7:** Zusammenhang zwischen geometrischem Weg und  $z$ -Achse.

Damit wird Gleichung 2.5 zu

$$dS_{0k} = (\bar{\kappa}^k \rho_k + r \rho_c) S_{0k} \frac{1}{\cos(\vartheta)} dz \quad . \quad (2.7)$$

Gleichung 2.7 zeigt, dass mit zunehmender Höhe ( $dz > 0$ ) auch die Bestrahlungsstärke wächst. (Dies passt zu der Tatsache, dass die Sonneneinstrahlung am oberen Ende der Atmosphäre am stärksten ist.) Mit Hilfe des hydrostatischen Gleichgewichtes

$$dp = -\rho_L g dz \quad (2.8)$$

mit dem Druck  $p$  (in Pa), der Erdbeschleunigung  $g$  (in  $\frac{m}{s^2}$ ) und der Massendichte der Luft  $\rho_L(z)$  lässt sich Gleichung 2.7 in Druckkoordinaten schreiben als

$$\begin{aligned} dS_{0k} &= -\frac{(\bar{\kappa}^k \rho_k + r \rho_c)}{\rho_L g \cos(\vartheta)} S_{0k} dp \\ &\text{bzw.} \\ \cos(\vartheta) dS_{0k} &= -\left(\bar{\kappa}^k \frac{\rho_k}{\rho_L} + r \frac{\rho_c}{\rho_L}\right) \frac{S_{0k}}{g} dp \\ \cos(\vartheta) \frac{dS_{0k}}{dp} &= -g^{-1} (\bar{\kappa}^k q_k + r q_c) S_{0k} \quad , \end{aligned} \quad (2.9)$$

wobei  $q_1 = q_2$  das Massenmischungsverhältnis von Ozon,  $q_3$  von Wasserdampf,  $q_4 = 0,2$  von Sauerstoff und  $q_5 = q_c$  das Massenmischungsverhältnis der Wolken ist.

<sup>1</sup> $r$  stellt die Reflektivität der Wolken dar.

### 2.3 Heizrate

Die diabatische Wärmeveränderung durch Strahlung

$$Q_k = c_p \frac{\partial T}{\partial t} = -g \frac{\partial S_{0k}}{\partial p} \quad (2.10)$$

mit der Heizrate  $Q_k$  (in  $\frac{\text{W}}{\text{kg}}$ ) in der Bande  $k$  und der spezifischen Wärmekapazität bei konstantem Druck  $c_p$  (in  $\frac{\text{J}}{\text{kg}\cdot\text{K}}$ ) wird wie in Gleichung 1.11 definiert. Zur Erwärmung trägt hier lediglich der absorbierte Strahlungsanteil, also

$$\tilde{S}_{0k} = \frac{q_k \bar{\kappa}^k}{q_k \bar{\kappa}^k + q_5 r} S_{0k} \quad (2.11)$$

bei. Daraus folgt für die Heizrate in der  $k$ -ten Bande

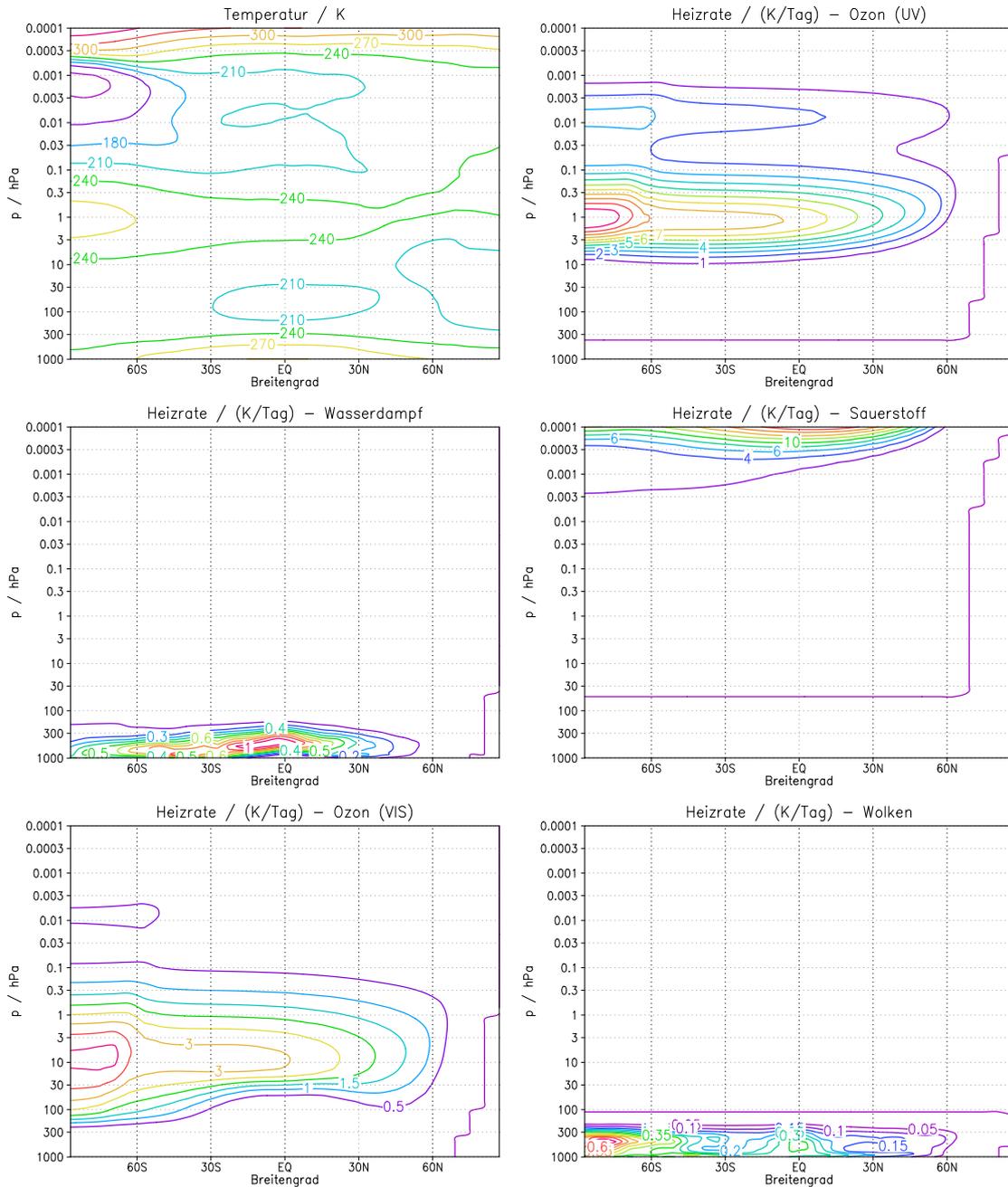
$$\begin{aligned} Q_{SW,k} &= -g \frac{\partial \tilde{S}_{0k}}{\partial p} \\ &= -g \frac{q_k \bar{\kappa}^k}{q_k \bar{\kappa}^k + q_5 r} \frac{\partial S_{0k}}{\partial p} \quad . \end{aligned} \quad (2.12)$$

Summiert über alle Banden lautet die Heizrate

$$Q_{SW} = -g \sum_{k=1}^5 \frac{q_k \bar{\kappa}^k}{q_k \bar{\kappa}^k + q_5 r} \frac{\partial S_{0k}}{\partial p} \quad . \quad (2.13)$$

## 2.4 Beispielhafte solare Heizraten

Die Erwärmungsraten durch solare Einstrahlung werden ohne Änderungen im KMCM implementiert zu haben ausgerechnet. In Abbildung sind die globalen, zonal gemittelten<sup>1</sup> Erwärmungsraten der fünf Banden für Januarbedingungen dargestellt.



**Abbildung 8:** Links oben: zonal gemittelte Temperatur. Andere Abbildungen: Erwärmungsraten durch solare Einstrahlung für Ozon (UV), Wasserdampf, Sauerstoff, Ozon (sichtbares Spektrum) und Wolken. Jeweils Januarbedingungen.

<sup>1</sup>Zonale Mittelung bedeutet Mittelung über alle Längengrade.

### 3 Terrestrischer (langwelliger) Strahlungstransport

In diesem Kapitel leiten wir Gleichungen her, mit denen der langwellige Strahlungstransport in der Atmosphäre berechnet werden kann. Das Resultat besteht aus vier gekoppelten Differentialgleichungen für die nach oben und unten gerichteten Bestrahlungsstärken  $U^k$  bzw.  $D^k$  sowie für die Abweichungsamplituden derselben  $u^k$  bzw.  $d^k$ . Diese Gleichungen stellen das theoretische Fundament der vorliegenden Arbeit dar.

#### 3.1 Allgemeine Strahlungstransportgleichung

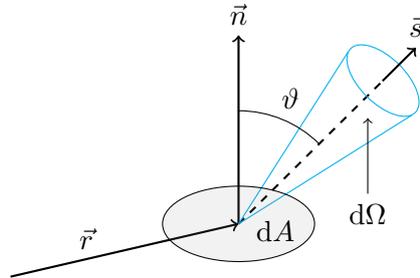
Die Strahlungstransportgleichung erfasst Absorption, wie wir sie aus dem BEER-BOUGER-LAMBERT-Gesetz 2.3 kennen, sowie Emission, welche die Strahlung verstärkt. Die Transportgleichung kann geschrieben werden als

$$dL_{\tilde{\nu}} = (-L_{\tilde{\nu}} + S_{\tilde{\nu}})d\tau \quad (3.1)$$

mit der spektralen Strahldichte  $L_{\tilde{\nu}}$ , einer spektralen Quellfunktion  $S_{\tilde{\nu}}$  (beide in  $\frac{\text{W}}{\text{m}^2 \cdot \text{sr} \cdot \text{cm}^{-1}}$ ) und dem optischen Weg  $\tau$  [17]. Gleichung 3.1 besagt, dass die Abnahme der Strahldichte proportional zur Strahldichte selbst und die Zunahme proportional zu einer Quellfunktion ist. Letztere kann zum Beispiel die emittierte Strahlung eines schwarzen Körpers sein. Äquivalent zu Gleichung 3.1 lässt sich die Strahlungstransportgleichung unter Berücksichtigung von Gleichung 2.4 mit

$$\vec{s} \cdot \vec{\nabla} L_{\tilde{\nu}}(\vec{r}, \vec{s}, t) = \rho(\vec{r}, t) \kappa(\vec{r}, t, \tilde{\nu}) [-L_{\tilde{\nu}}(\vec{r}, \vec{s}, t) + S_{\tilde{\nu}}(\vec{r}, \vec{s}, t)] \quad (3.2)$$

ausdrücken [18]. Dabei ist  $\rho(\vec{r}, t)$  (in  $\frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$ ) die Massendichte des absorbierenden Mediums und  $\kappa(\vec{r}, t, \tilde{\nu})$  (in  $\frac{\text{m}^2}{\text{kg}}$ ) dessen Massenabsorptionskoeffizient<sup>1</sup>. Der Einheitsrichtungsvektor eines Strahlenbündels  $\vec{s} = \vec{s}(\varphi, \vartheta)$  hängt vom Azimut- ( $\varphi$ ) und Zenitwinkel ( $\vartheta$ ) ab. Dieser Zusammenhang wird in Abbildung 9 dargestellt.



**Abbildung 9:** Von einem Oberflächenelement  $dA$  mit dem Normalenvektor  $\vec{n}$  am Ort  $\vec{r}$  in Richtung des Einheitsvektors  $\vec{s}$  abgehende Strahlung. Diese nimmt den infinitesimalen Raumwinkel  $d\Omega$  ein. (Der Azimutwinkel ist nicht gekennzeichnet. In dieser Zeichnung fallen die  $z$ -Achse und  $\vec{n}$  zusammen. Der Zenitwinkel  $\vartheta$  wird zwischen  $z$ -Achse und  $\vec{s}$  gemessen.) Die dabei im Wellenzahlintervall  $[\tilde{\nu}, \tilde{\nu} + d\tilde{\nu}]$  transportierte Energie beträgt  $dE_{\tilde{\nu}} = L_{\tilde{\nu}} \cos(\vartheta) d\tilde{\nu} dA d\Omega dt$ .

Als Quellfunktion kann nach [19]

$$S_{\tilde{\nu}}(\vec{r}, \vec{s}, t) = (1 - \omega(\vec{r}, t, \tilde{\nu})) B_{\tilde{\nu}}(T) + \omega(\vec{r}, t, \tilde{\nu}) \frac{1}{4\pi} \int L_{\tilde{\nu}}(\vec{r}, \vec{s}, t) d\Omega \quad (3.3)$$

angegeben werden, wobei  $\omega(\vec{r}, t, \tilde{\nu})$  das Einfachrückstreuungsvermögen<sup>2</sup> darstellt und den Beitrag zur Emission durch Streuung angibt. Dieses gilt als Maß für die Abweichung vom

<sup>1</sup>Wie SCHWARZSCHILD und andere Autoren gehen wir davon aus, dass beim terrestrischen Strahlungstransport in der unteren Atmosphäre keine Streuung stattfindet.

<sup>2</sup>Auf Englisch als single scattering albedo (SSA) bezeichnet.

lokalen thermischen Gleichgewicht<sup>1</sup> (ltGG). Im thermischen Gleichgewicht gilt  $\omega(\vec{r}, t, \tilde{\nu}) = 0$ . Die hohe Stoßrate der Moleküle führt dazu, dass sich trotz Absorption und Emission eine BOLTZMANNVerteilung der Energieniveaus einstellt und ein Volumenelement als PLANCKScher Strahler angesehen werden kann. Ab einer Höhe von ca. 65 km [20] verringern sich die Kollisionsraten der Moleküle so stark, dass mit einem nicht-thermischen Gleichgewicht<sup>2</sup> (ntGG) gerechnet werden muss. Dort gilt  $\omega(\vec{r}, t, \tilde{\nu}) \in (0, 1)$ .

In Gleichung 3.3 ist mit  $B_{\tilde{\nu}}(T)$  wie gewohnt die PLANCKfunktion gemeint. Die Integration auf der rechten Seite der Gleichung verläuft über alle Raumwinkel

$$d\Omega = \sin(\vartheta) d\vartheta d\varphi \quad . \quad (3.4)$$

Wir möchten nun Gleichung 3.2 umschreiben, um die in Abschnitt 3.3 gemachten Annahmen leichter implementieren zu können. Dafür sei  $ds$  die Dicke einer Schicht, die von einem Strahl durchleuchtet wird. Der Vektor  $\vec{s}$  zeige in die Richtung des Strahls. Für die Ableitung lässt sich

$$\frac{d}{ds} = \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} + \vec{s} \cdot \vec{\nabla} \quad (3.5)$$

mit der Lichtgeschwindigkeit  $c$  schreiben. Für einen stationären Strahlungszustand, bei dem die partielle Ableitung nach der Zeit verschwindet, kann mit dem Differentialoperator aus Gleichung 3.5 die Strahlungstransportgleichung geschrieben werden als

$$\frac{dL_{\tilde{\nu}}(\vec{r}, \vec{s})}{ds} = \rho(\vec{r})\kappa(\vec{r}, \tilde{\nu}) [-L_{\tilde{\nu}}(\vec{r}, \vec{s}) + S_{\tilde{\nu}}(\vec{r}, \vec{s})] \quad . \quad (3.6)$$

### 3.2 Näherung einer planparallelen Atmosphäre

Wir gehen davon aus, dass die Atmosphäre aus planparallelen Schichten besteht. Diese seien auf den horizontalen Skalen<sup>3</sup>, mit denen wir arbeiten, sehr homogen. Das heißt, das sowohl die spektralen Strahldichten als auch die Dichte und der Massenabsorptionskoeffizient nur von der Höhe  $z$  abhängen. Damit ist  $\vec{r} = z\vec{e}_z$ . Aus diesem Grund besitzen die Strahlungsprozesse keine Azimutwinkelabhängigkeit mehr und es gilt  $\vec{s} = \vartheta\vec{e}_\vartheta$ . Außerdem leiten wir statt nach  $s$  nach  $z$  unter Zuhilfenahme der Gleichung 2.6 ab<sup>4</sup>. Damit wird Gleichung 3.6 zu

$$\cos(\vartheta) \frac{dL_{\tilde{\nu}}(z, \vartheta)}{dz} = \rho(z)\kappa(z, \tilde{\nu}) [-L_{\tilde{\nu}}(z, \vartheta) + S_{\tilde{\nu}}(z, \vartheta)] \quad . \quad (3.7)$$

Im KMCM wird der Druck als vertikale Koordinate verwendet. Wir wollen also mit Hilfe des hydrostatischen Gleichgewichtes

$$dp(z) = -\rho_L(z)gdz \quad (3.8)$$

die Strahlungstransportgleichung 3.7 in Druckkoordinaten umschreiben. Dabei ist  $p$  der Luftdruck in Pa<sup>5</sup>,  $\rho_L$  die Massendichte der Luft und  $g$  die als konstant angenommene Erdbeschleunigung. Wir erhalten

<sup>1</sup>Auf Englisch als local thermal equilibrium (LTE) bezeichnet.

<sup>2</sup>Auf Englisch als non-local thermal equilibrium (non-LTE) bezeichnet.

<sup>3</sup>Die horizontale Auflösung der benutzten KMCM Version beträgt 450 km.

<sup>4</sup>Anders als in Abbildung 7 gezeigt weisen sowohl  $ds$  als auch  $dz$  "nach oben", weshalb  $dz/ds = \cos(\vartheta)$ .

<sup>5</sup>Für gewöhnlich wird der Luftdruck in 1 hPa = 1 mBar = 10<sup>2</sup> Pa angegeben.

$$\begin{aligned}
\cos(\vartheta) \frac{dL_{\tilde{\nu}}(z, \vartheta)}{dz} &= \rho(z) \kappa(z, \tilde{\nu}) [-L_{\tilde{\nu}}(z, \vartheta) + S_{\tilde{\nu}}(z, \vartheta)] \\
-\cos(\vartheta) \frac{dL_{\tilde{\nu}}(p, \vartheta)}{dp} \rho_L(p) g &= \rho(p) \kappa(p, \tilde{\nu}) [-L_{\tilde{\nu}}(p, \vartheta) + S_{\tilde{\nu}}(p, \vartheta)] \\
-\cos(\vartheta) \frac{dL_{\tilde{\nu}}(p, \vartheta)}{dp} &= \frac{1}{g} \frac{\rho(p)}{\rho_L(p)} \kappa(p, \tilde{\nu}) [-L_{\tilde{\nu}}(p, \vartheta) + S_{\tilde{\nu}}(p, \vartheta)] \\
-\cos(\vartheta) \frac{dL_{\tilde{\nu}}(p, \vartheta)}{dp} &= \frac{1}{g} q(p) \kappa(p, \tilde{\nu}) [-L_{\tilde{\nu}}(p, \vartheta) + S_{\tilde{\nu}}(p, \vartheta)]
\end{aligned} \tag{3.9}$$

mit dem Massenmischungsverhältnis des absorbierenden Mediums  $q(p)$  (in ppm bzw. ppmw<sup>1</sup>).

### 3.3 Eddingtonnäherung

Die spektrale Strahldichte  $L_{\tilde{\nu}}(p, \vartheta)$  hängt trotz Näherung einer planparallelen Atmosphäre vom Winkel  $\vartheta$  ab. Diese Anisotropie wird mit Hilfe einer Entwicklung nach der Winkelabhängigkeit  $\vartheta$  der Strahldichte in LEGENDREpolynome [20] berücksichtigt<sup>2</sup>. Die sogenannte EDDINGTONNäherung führt bei einem Abbruch nach dem ersten anisotropen Term zu

$$L_{\tilde{\nu}}(p, \vartheta) \approx L_{\tilde{\nu}0}(p) + L_{\tilde{\nu}1}(p) \cos(\vartheta) \quad . \tag{3.10}$$

Daraus kann die nach "oben" bzw. "unten" verlaufende spektrale Bestrahlungsstärke  $U_{\tilde{\nu}}$  ( $0 \leq \vartheta \leq \pi/2$ ) bzw.  $D_{\tilde{\nu}}$  ( $\pi/2 \leq \vartheta \leq \pi$ ) (in  $\frac{\text{W}}{\text{m}^2 \cdot \text{cm}^{-1}}$ ) berechnet werden. Die spektrale Netto-Bestrahlungsstärke ist nach [19] definiert als

$$F_{\tilde{\nu}} = U_{\tilde{\nu}} - D_{\tilde{\nu}} \quad , \tag{3.11}$$

mit

$$U_{\tilde{\nu}} = \int_{\text{obere Hemisphäre}} L_{\tilde{\nu}}(p, \vartheta) \cos(\vartheta) \, d\Omega \tag{3.12}$$

und

$$D_{\tilde{\nu}} = - \int_{\text{untere Hemisphäre}} L_{\tilde{\nu}}(p, \vartheta) \cos(\vartheta) \, d\Omega \quad , \tag{3.13}$$

wobei  $U_{\tilde{\nu}}$  und  $D_{\tilde{\nu}}$  als spektrale Bestrahlungsstärke in Richtung  $\vec{n}$  ("nach oben") bzw. in Richtung  $-\vec{n}$  ("nach unten") definiert sind. Beide Größen sind positiv, das heißt  $U_{\tilde{\nu}} \geq 0$  und  $D_{\tilde{\nu}} \geq 0$ . Zur Berechnung der spektralen Bestrahlungsstärken setzen wir die EDDINGTONNäherung aus Gleichung 3.10 ein. Unter Berücksichtigung von

$$\begin{aligned}
\int_{\text{obere Hemisphäre}} f(z, \cos(\vartheta)) \, d\Omega &= 2\pi \int_0^{\pi/2} f(z, \cos(\vartheta)) \sin(\vartheta) \, d\vartheta \\
&= -2\pi \int_0^{\pi/2} f(z, \cos(\vartheta)) \, d(\cos(\vartheta)) \\
&= 2\pi \int_0^1 f(z, y) \, dy \quad .
\end{aligned} \tag{3.14}$$

<sup>1</sup>ppmw steht für "part per million by weight" und gibt an, wie viele Teilchen eines Stoffes pro einer Million Teilchen bei vorgegebener Masse vorhanden sind.

<sup>2</sup>Eine kurze mathematische Abhandlung über LEGENDREpolynome befindet sich im Anhang A.4

mit  $\cos(\vartheta) =: y$  erhalten wir die folgende nach oben gerichtete spektrale Bestrahlungsstärke

$$\begin{aligned}
U_{\bar{\nu}} &= \int_{\text{obere Hemisphäre}} L_{\bar{\nu}}(p, \vartheta) \cos(\vartheta) \, d\Omega \\
&= \int_{\pi/2}^0 \int_0^{2\pi} L_{\bar{\nu}}(p, \vartheta) \cos(\vartheta) \, d\varphi \, d(\cos(\vartheta)) \\
&= 2\pi \int_{\pi/2}^0 L_{\bar{\nu}}(p, \vartheta) \cos(\vartheta) \, d(\cos(\vartheta)) \\
&= 2\pi \int_{\pi/2}^0 (L_{\bar{\nu}0}(p) + L_{\bar{\nu}1}(p) \cos(\vartheta)) \cos(\vartheta) \, d(\cos(\vartheta)) \\
&= 2\pi \int_0^1 L_{\bar{\nu}0}(p) y \, dy \\
&\quad + 2\pi \int_0^1 L_{\bar{\nu}1}(p) y^2 \, dy \\
&= 2\pi L_{\bar{\nu}0}(p) \cdot \frac{1}{2} + 2\pi L_{\bar{\nu}1}(p) \cdot \frac{1}{3} \\
U_{\bar{\nu}} &= \pi L_{\bar{\nu}0}(p) + \frac{2}{3} \pi L_{\bar{\nu}1}(p) \quad .
\end{aligned} \tag{3.15}$$

Analog gilt (Rechnung siehe Anhang A.5)

$$D_{\bar{\nu}} = \pi L_{\bar{\nu}0}(p) - \frac{2}{3} \pi L_{\bar{\nu}1}(p) \quad . \tag{3.16}$$

An dieser Stelle soll für eine spätere Rechnung auch  $L_{\bar{\nu}0}$  sowie  $L_{\bar{\nu}1}$  in Abhängigkeit von  $U_{\bar{\nu}}$  und  $D_{\bar{\nu}}$  berechnet werden. Es gilt

$$U_{\bar{\nu}} + D_{\bar{\nu}} = 2\pi L_{\bar{\nu}0} \implies L_{\bar{\nu}0} = \frac{1}{2\pi} (U_{\bar{\nu}} + D_{\bar{\nu}}) \tag{3.17}$$

und

$$U_{\bar{\nu}} - D_{\bar{\nu}} = \frac{4}{3} \pi L_{\bar{\nu}1} \implies L_{\bar{\nu}1} = \frac{3}{4\pi} (U_{\bar{\nu}} - D_{\bar{\nu}}) \quad . \tag{3.18}$$

Nun kommen wir zurück zu der Strahlungstransportgleichung aus Gleichung 3.9 und versuchen diese mithilfe der nach oben bzw. unten gerichteten spektralen Bestrahlungsstärken auszudrücken. Dazu setzen wir die Quellfunktion  $S_{\bar{\nu}}(p, \vartheta)$  aus Gleichung 3.3 zusammen mit der EDDINGTONnäherung ein und berechnen das auftretende Integral. Der Übersichtlichkeit halber werden vorerst alle Indizes und Argumente unterdrückt.

$$\begin{aligned}
-\cos(\vartheta) \frac{dL}{dp} &= \frac{q}{g} \kappa [-L + S] \\
-\cos(\vartheta) \frac{dL}{dp} &= \frac{q}{g} \kappa \left[ -L + (1 - \omega)B + \omega \frac{1}{4\pi} \int L \, d\Omega \right] \\
&\quad \text{mit } L = (L_0 + L_1 \cos(\vartheta)) \\
-\cos(\vartheta) \frac{dL}{dp} &= \frac{q}{g} \kappa \left[ -L + (1 - \omega)B + \omega \frac{1}{4\pi} \int (L_0 + L_1 \cos(\vartheta)) \, d\Omega \right] \\
&\quad \text{mit } \int (L_0 + L_1 \cos(\vartheta)) \, d\Omega = 4\pi L_0 + 2\pi L_1 \underbrace{\int_{-1}^1 y \, dy}_{=0} \\
-\cos(\vartheta) \frac{dL}{dp} &= \frac{q}{g} \kappa [-L + (1 - \omega)B + \omega L_0] \quad .
\end{aligned} \tag{3.19}$$

Anschließend integrieren wir über die obere und danach untere Hemisphäre. Dabei kann die Ableitung nach dem Druck  $p$  aus dem Integranden herausgezogen werden. Zudem ist die PLANCKfunktion  $B(T)$  unabhängig vom Raumwinkel (Annahme der Isotropie). Des Weiteren werden zur Vereinfachung die Gleichungen 3.15 und 3.16 genutzt. Aus

$$-\frac{d}{dp}2\pi \int_0^1 Ly \, dy = \frac{q\kappa}{g} \left[ -2\pi \int_0^1 dy (L + (1 - \omega)B + \omega L_0) \right] \quad (3.20)$$

mit

$$\begin{aligned} -\int_0^1 Ly \, dy &= -\int_0^1 (L_0 + L_1 y)y \, dy \\ &= -L_0 \frac{1}{2} - L_1 \frac{1}{3} = -\frac{U}{2\pi} \end{aligned} \quad (3.21)$$

und mit

$$\begin{aligned} -\int_0^1 L \, dy &= \int_0^1 (L_0 + L_1 y) \, dy \\ &= -L_0 - L_1 \frac{1}{2} = -\frac{1}{8\pi}(7U + D) \end{aligned} \quad (3.22)$$

erhalten wir

$$\begin{aligned} -\frac{d}{dp} \frac{U}{2\pi} &= \frac{q\kappa}{g} \left[ -\frac{1}{8\pi}(7U + D) + (1 - \omega)B + \omega \frac{1}{2\pi}(U + D) \right] \\ -\frac{d}{dp} U &= \frac{q\kappa}{g} \left[ -\frac{1}{4}(7U + D) + (1 - \omega)B \cdot 2\pi + \omega(U + D) \right] \\ -\frac{d}{dp} U &= \frac{q\kappa}{g} \left[ \left( -\frac{7}{4} + \omega \right) U - \left( \frac{1}{4} - \omega \right) D + 2\pi(1 - \omega)B \right] \\ \frac{d}{dp} U &= \frac{q\kappa}{g} \left[ \left( \frac{7}{4} - \omega \right) U + \left( \frac{1}{4} - \omega \right) D - 2\pi(1 - \omega)B \right] . \end{aligned} \quad (3.23)$$

Ab diesem Punkt werden wir wieder Indizes geschrieben, sofern es sich um spektrale Größen handelt. Auf die Argumente wird weiterhin verzichtet. Mit einer analogen Rechnung für die Integration über die untere Hemisphäre (siehe Anhang A.6) erhalten wir zusammengefasst

$$\frac{d}{dp} U_{\tilde{\nu}} = \frac{q\kappa}{g} \left[ \left( \frac{7}{4} - \omega \right) U_{\tilde{\nu}} + \left( \frac{1}{4} - \omega \right) D_{\tilde{\nu}} - 2\pi(1 - \omega)B_{\tilde{\nu}} \right] , \quad (3.24a)$$

$$\frac{d}{dp} D_{\tilde{\nu}} = \frac{q\kappa}{g} \left[ -\left( \frac{7}{4} - \omega \right) D_{\tilde{\nu}} - \left( \frac{1}{4} - \omega \right) U_{\tilde{\nu}} + 2\pi(1 - \omega)B_{\tilde{\nu}} \right] . \quad (3.24b)$$

### 3.4 Strahlungsabsorption in Wolken

Bisher sind wir davon ausgegangen, dass die Atmosphäre wolkenlos ist. Die Parametrisierung des Strahlungstransportes innerhalb einer Wolke erfordert wegen der relativ geringen räumlichen Ausdehnung, der hohen Lichtundurchlässigkeit und Inhomogenität eine gesonderte Betrachtung [21]. Im KMCM wird die Absorption langwelliger Strahlung in Wolken mit einem frequenzunabhängigen Massenabsorptionskoeffizienten  $\kappa^c$  implementiert. Als Abkürzung führen wir einen erweiterten spektralen Massenabsorptionskoeffizienten<sup>1</sup>

$$\kappa_+ = \kappa + \frac{q_c}{q} \kappa^c \quad (3.25)$$

<sup>1</sup> $\kappa$  ist weiterhin von der Wellenzahl  $\tilde{\nu}$  abhängig.

mit dem Massenmischungsverhältnis der Wolkenteilchen  $q_c$  ein. Damit werden die Strahlungstransportgleichungen 3.24a und 3.24b zu

$$\frac{d}{dp} U_{\tilde{\nu}} = \frac{q\kappa_+}{g} \left[ \left( \frac{7}{4} - \omega \right) U_{\tilde{\nu}} + \left( \frac{1}{4} - \omega \right) D_{\tilde{\nu}} - 2\pi(1 - \omega)B_{\tilde{\nu}} \right] , \quad (3.26a)$$

$$\frac{d}{dp} D_{\tilde{\nu}} = \frac{q\kappa_+}{g} \left[ - \left( \frac{7}{4} - \omega \right) D_{\tilde{\nu}} - \left( \frac{1}{4} - \omega \right) U_{\tilde{\nu}} + 2\pi(1 - \omega)B_{\tilde{\nu}} \right] . \quad (3.26b)$$

### 3.5 Breitbandnäherung

Die Bestrahlungsstärken sollen für einzelne Wellenzahlbanden  $\Delta\tilde{\nu}_k = \tilde{\nu}_{k2} - \tilde{\nu}_{k1}$  berechnet werden. In diesen Frequenzbanden gilt die Näherung

$$(\tilde{\nu}_{k2} - \tilde{\nu}_{k1}) X_{\tilde{\nu}} = X^k + X' \quad \left( \text{in } \frac{\text{W}}{\text{m}^2} \right) \quad (3.27)$$

mit

$$X^k = \int_{\tilde{\nu}_{k1}}^{\tilde{\nu}_{k2}} X_{\tilde{\nu}} d\tilde{\nu} \quad (3.28)$$

und

$$\overline{X'}^k := \frac{1}{\tilde{\nu}_{k2} - \tilde{\nu}_{k1}} \int_{\tilde{\nu}_{k1}}^{\tilde{\nu}_{k2}} X' d\tilde{\nu} \stackrel{!}{=} 0 , \quad (3.29)$$

wobei  $X$  für  $U$  oder  $D$  stehen kann. Demnach handelt es sich bei  $(\tilde{\nu}_{k2} - \tilde{\nu}_{k1}) X_{\tilde{\nu}}$  um eine in der entsprechenden Wellenzahlbande konstante Funktion  $X^k$ , zu der eine oszillierende Funktion  $X'$  mit einem Mittelwert von Null addiert wird.  $X'$  enthält dabei die schnellen Oszillationen, die mit individuellen Absorptionslinien identifiziert werden. Des Weiteren soll für den Massenabsorptionskoeffizienten

$$\kappa = \overline{\kappa}^k + \kappa' \quad (3.30)$$

mit

$$\overline{\kappa}^k = \frac{1}{\tilde{\nu}_{k2} - \tilde{\nu}_{k1}} \int_{\tilde{\nu}_{k1}}^{\tilde{\nu}_{k2}} \kappa d\tilde{\nu} \quad \text{und} \quad \overline{\kappa'}^k = \frac{1}{\tilde{\nu}_{k2} - \tilde{\nu}_{k1}} \int_{\tilde{\nu}_{k1}}^{\tilde{\nu}_{k2}} \kappa' d\tilde{\nu} = 0 \quad (3.31)$$

gelten. Da  $\kappa^c$  nicht von der Frequenz abhängt, kann der Koeffizient auf  $\kappa$  addiert werden. Damit erhalten wir

$$\kappa_+ = \left( \overline{\kappa}^k + \frac{q_c}{q} \kappa^c \right) + \kappa' . \quad (3.32)$$

Für die PLANCKfunktion und das Einfachrückstreuungsvermögen (ERSV) gilt näherungsweise im Intervall  $\tilde{\nu}_{k1} \leq \tilde{\nu} \leq \tilde{\nu}_{k2}$

$$B_{\tilde{\nu}} \approx \overline{B}^k \quad \text{und} \quad \omega_{\tilde{\nu}} \approx \overline{\omega}^k . \quad (3.33)$$

Das heißt, dass sowohl das ERSV als auch die PLANCKfunktion in der betrachteten Frequenzbande als konstant angenommen werden.

Nun werden die spektralen EDDINGTON-artigen und planparallel genäherten Strahlungstransportgleichungen 3.26 über eine Wellenzahlbande integriert. Die Rechnung befindet sich im Anhang A.7.

Die Ergebnisse lauten

$$\frac{d}{dp}U^k = \frac{q}{g} \left[ \left( \frac{7}{4} - \bar{\omega}^k \right) \left( \bar{\kappa}_+^k U^k + \overline{\kappa' U'^k} \right) + \left( \frac{1}{4} - \bar{\omega}^k \right) \left( \bar{\kappa}_+^k D^k + \overline{\kappa' D'^k} \right) - 2\pi(1 - \bar{\omega}^k) \bar{\kappa}_+^k B^k \right] \quad (3.34)$$

sowie

$$\frac{d}{dp}D^k = \frac{q}{g} \left[ - \left( \frac{7}{4} - \bar{\omega}^k \right) \left( \bar{\kappa}_+^k D^k + \overline{\kappa' D'^k} \right) - \left( \frac{1}{4} - \bar{\omega}^k \right) \left( \bar{\kappa}_+^k U^k + \overline{\kappa' U'^k} \right) + 2\pi(1 - \bar{\omega}^k) \bar{\kappa}_+^k B^k \right] \quad (3.35)$$

und beschreiben die gemittelten Strahlungstransportgleichungen. Die Kovarianzterme<sup>1</sup> ( $\overline{\kappa' D'^k}$  bzw.  $\overline{\kappa' U'^k}$ ) hängen mit der Abweichung von der Graueitsgrenze<sup>2</sup> zusammen. Was Graueit bedeutet, wird im folgenden Abschnitt beschrieben.

### 3.6 Graueitsgrenze

Eine Absorptionsbande wird als grau bezeichnet, sofern der Massenabsorptionskoeffizient  $\kappa = \bar{\kappa}^k$  unabhängig von der Frequenz in der Bande ist [14]. Damit wäre  $\overline{\kappa' X'^k} = 0$ . Dies kann wegen der starken Druckverbreiterung für einige Banden in der unteren Troposphäre der Fall sein.

### 3.7 Elsasser-Bandmodell

Die Abweichung von der Graueitsgrenze muss parametrisiert werden. Eine einfache Parametrisierung stellt das ELSASSER-Bandmodell [22] dar. Es beschreibt die Wellenzahlabhängigkeit des Massenabsorptionskoeffizienten  $\kappa$  in Form einer Formfunktion<sup>3</sup>  $f(\tilde{\nu}, \delta^k, \gamma^k)$ . Für diese werden unendlich viele LORENTZkurven als Absorptionslinien angenommen, die einen festen Abstand  $\delta^k > 0$  und eine feste Linienbreite  $\gamma^k > 0$  besitzen. Daraus erhält man

$$\begin{aligned} \kappa &= \bar{\kappa}^k + \kappa' = \bar{\kappa}^k + \bar{\kappa}^k \cdot \left( f(\tilde{\nu}, \delta^k, \gamma^k) - 1 \right) \\ &= \bar{\kappa}^k \cdot f(\tilde{\nu}, \delta^k, \gamma^k) \quad , \quad \text{für } \tilde{\nu}_{k1} \leq \tilde{\nu} \leq \tilde{\nu}_{k2} \end{aligned} \quad (3.36)$$

mit der ELSASSERformfunktion

$$f(\tilde{\nu}, \delta^k, \gamma^k) = \frac{\sinh(2\pi y^k)}{\cosh(2\pi y^k) - \cos(2\pi \tilde{\nu} / \delta^k)} \quad (3.37)$$

und dem Graueitsparameter<sup>4</sup>  $y^k = \gamma^k / \delta^k$ . Der wellenzahlabhängige Massenabsorptionskoeffizient ist demnach das Produkt aus der ELSASSERformfunktion und dem Mittelwert des Koeffizienten. In Abbildung 10 ist eine vereinfachte ELSASSERformfunktion

$$f(x; l) = \frac{\sinh(l)}{\cosh(l) - \cos(x)} \quad (3.38)$$

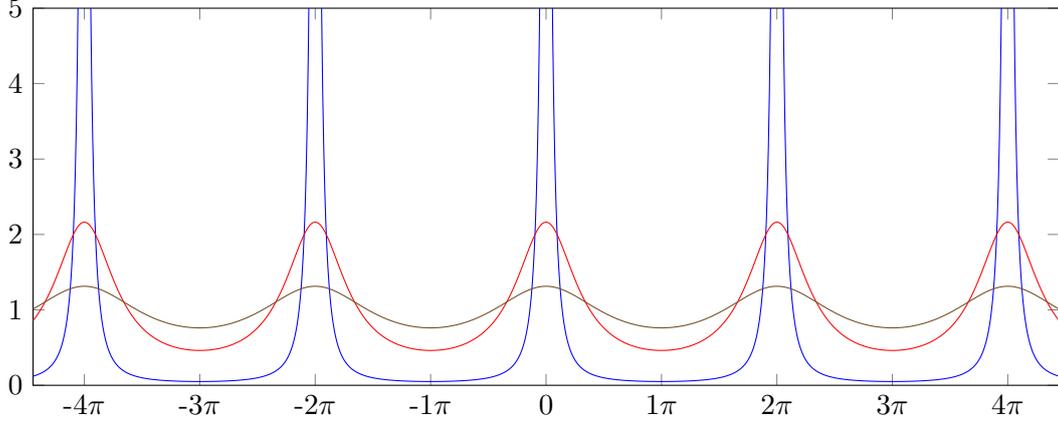
<sup>1</sup>Hierbei handelt es sich um die mathematische Kovarianz aus der Stochastik:  $\text{Cov}(X, Y) := E[(X - E(X)) \cdot (Y - E(Y))]$  mit dem Erwartungswert  $E(X)$ .

<sup>2</sup>Auf Englisch wird Graueitsgrenze als gray limit bezeichnet.

<sup>3</sup>Auf Englisch als shape function bezeichnet.

<sup>4</sup>Wenn die  $k$ te-Bande sehr grau ist, gilt  $y^k \gg 1$ . Bei  $y^k \ll 1$  sind die Absorptionslinien weit voneinander getrennt und überlappen wenig bis gar nicht.

zu sehen. Dort sind der Linienabstand  $\delta^k = 2\pi$  und die Linienbreite  $\gamma^k = l$ . Gleichung 3.38 ist nur für  $\cosh(l) - \cos(x) > 0$  ( $\forall x \in \mathbb{R}$ ) definiert.



**Abbildung 10:** Vereinfachte ELSASSERformfunktion  $f(x; l)$  nach Gleichung 3.38 mit  $l = 0, 1$  (blau); 1 (rot); 2 (braun).

Die ELSASSERformfunktion  $f(\tilde{\nu}, \delta^k, \gamma^k)$ , die im Intervall  $\tilde{\nu}_{k2} - \tilde{\nu}_{k1}$  aus  $N$  Linien mit einer Periode von  $\delta^k$  ( $\frac{2\pi\tilde{\nu}}{\delta^k} = 2\pi n \Rightarrow \tilde{\nu}_n = \delta^k n$ ) zusammengesetzt ist, ist normiert. Gezeigt wird dies anhand der vereinfachten ELSASSERformfunktion. Für diese gilt

$$\begin{aligned}
 \bar{f}^k &= N \frac{1}{N \cdot 2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\sinh(l)}{\cosh(l) - \cos(x)} dx \\
 &= \frac{1}{2\pi} \left( 2 \arctan(\coth(l/2) \tan(x/2)) \right) \Big|_{-\pi}^{\pi} \\
 &= \frac{1}{2\pi} \left( 2 \lim_{x \rightarrow \infty} \arctan(x) - 2 \lim_{x \rightarrow -\infty} \arctan(x) \right) \\
 &= \frac{1}{2\pi} \left( 2 \frac{\pi}{2} + 2 \frac{\pi}{2} \right) \\
 &= 1 \quad .
 \end{aligned} \tag{3.39}$$

### 3.8 Näherung der spektralen Bestrahlungsstärken

Eine weitere Näherung betrifft die Bestrahlungsstärken in der untersuchten Wellenzahlbande  $\tilde{\nu}_{k2} - \tilde{\nu}_{k1}$ . Dort soll ähnlich zum Massenabsorptionskoeffizienten

$$\begin{aligned}
 (\tilde{\nu}_{k2} - \tilde{\nu}_{k1}) U_{\tilde{\nu}} &= U^k + \underbrace{u^k \cdot \pi y^k}_{=U'} \left( f(\tilde{\nu}, \delta^k, \gamma^k) - 1 \right) \\
 (\tilde{\nu}_{k2} - \tilde{\nu}_{k1}) D_{\tilde{\nu}} &= D^k + \underbrace{d^k \cdot \pi y^k}_{=D'} \left( f(\tilde{\nu}, \delta^k, \gamma^k) - 1 \right)
 \end{aligned} \tag{3.40}$$

gelten. Der farblich hervorgehobene Faktor  $\pi y^k$  zeigt eine Neuerung<sup>1</sup> im Vergleich zum bisher implementierten Strahlungstransport, die wir Graueitsschranke nennen und deren Einfluss auf die Strahlungstransportgleichungen wir nachvollziehen wollen. Im Anhang A.10 wird vorgeführt, wie man nach Einsetzen der Näherungen aus Gleichungen 3.36 und 3.40 in die bandintegrierten EDDINGTON-artigen Strahlungstransportgleichungen 3.34 und 3.35 zu folgenden gekoppelten Differentialgleichungen kommt.

<sup>1</sup>Der Grund dafür befindet sich im Anhang A.9.

$$\begin{aligned} \frac{dU^k}{dp} = \frac{q}{g} \left\{ \left[ \frac{7}{4} - \bar{\omega}^k \right] \left( \bar{\kappa}_+^k U^k + \bar{\kappa}^k u^k \pi y^k \left( \coth(2\pi y^k) - 1 \right) \right) \right. \\ \left. + \left[ \frac{1}{4} - \bar{\omega}^k \right] \left( \bar{\kappa}_+^k D^k + \bar{\kappa}^k d^k \pi y^k \left( \coth(2\pi y^k) - 1 \right) \right) \right. \\ \left. - 2\pi [1 - \bar{\omega}^k] \bar{\kappa}_+^k B^k \right\} \quad , \end{aligned} \quad (3.41a)$$

$$\begin{aligned} \frac{dD^k}{dp} = \frac{q}{g} \left\{ - \left[ \frac{7}{4} - \bar{\omega}^k \right] \left( \bar{\kappa}_+^k D^k + \bar{\kappa}^k d^k \pi y^k \left( \coth(2\pi y^k) - 1 \right) \right) \right. \\ \left. - \left[ \frac{1}{4} - \bar{\omega}^k \right] \left( \bar{\kappa}_+^k U^k + \bar{\kappa}^k u^k \pi y^k \left( \coth(2\pi y^k) - 1 \right) \right) \right. \\ \left. + 2\pi [1 - \bar{\omega}^k] \bar{\kappa}_+^k B^k \right\} \end{aligned} \quad (3.41b)$$

Die entsprechenden Differentialgleichungen für die Abweichungsamplituden<sup>1</sup>  $u^k$  und  $d^k$  erhält man, indem die Gleichungen 3.40 in die nach oben bzw. unten gerichtete Strahlungstransportgleichungen 3.26 eingesetzt werden. Nichtlineare Terme (in Gleichung A.31) werden vernachlässigt. Die Rechnung befindet sich im Anhang A.11. Die Ergebnisse lauten

$$\begin{aligned} \frac{du^k}{dp} = \frac{q}{g} \left\{ \left[ \frac{7}{4} - \bar{\omega}^k \right] \left( \bar{\kappa}^k \frac{U^k}{\pi y^k} + \bar{\kappa}_+^k u^k \right) \right. \\ \left. + \left[ \frac{1}{4} - \bar{\omega}^k \right] \left( \bar{\kappa}^k \frac{D^k}{\pi y^k} + \bar{\kappa}_+^k d^k \right) - 2\pi [1 - \bar{\omega}^k] \bar{\kappa}^k \frac{B^k}{\pi y^k} \right\} \quad , \end{aligned} \quad (3.42a)$$

$$\begin{aligned} \frac{dd^k}{dp} = \frac{q}{g} \left\{ - \left[ \frac{7}{4} - \bar{\omega}^k \right] \left( \bar{\kappa}^k \frac{D^k}{\pi y^k} + \bar{\kappa}_+^k d^k \right) \right. \\ \left. - \left[ \frac{1}{4} - \bar{\omega}^k \right] \left( \bar{\kappa}^k \frac{U^k}{\pi y^k} + \bar{\kappa}_+^k u^k \right) + 2\pi [1 - \bar{\omega}^k] \bar{\kappa}^k \frac{B^k}{\pi y^k} \right\} \quad . \end{aligned} \quad (3.42b)$$

### 3.9 Nebenbedingungen für die Bestrahlungsstärken $D^k, U^k, d^k, u^k$

In Abschnitt 3.3 wurden die spektralen Bestrahlungsstärken  $U_{\tilde{\nu}}$  und  $D_{\tilde{\nu}}$  so definiert, dass sie stets positiv sind. Da das Wellenzahlintervall immer größer Null sein soll, folgt daraus, dass auch Gleichungen 3.40 positiv sind. Somit gilt

$$(\tilde{\nu}_{k2} - \tilde{\nu}_{k1}) U_{\tilde{\nu}} = U^k + u^k \pi y^k (f - 1) \stackrel{!}{\geq} 0 \quad (3.43)$$

Dies hat zur Folge, dass auch das Bandmittel  $U^k > 0$  (und analog  $D^k > 0$ ) sein muss, denn über die Wellenzahl integriert lautet Gleichung 3.43

$$\begin{aligned} (\tilde{\nu}_{k2} - \tilde{\nu}_{k1}) \int_{\tilde{\nu}_{k1}}^{\tilde{\nu}_{k2}} U_{\tilde{\nu}} d\tilde{\nu} = \int_{\tilde{\nu}_{k1}}^{\tilde{\nu}_{k2}} \left( U^k + u^k \pi y^k (f - 1) \right) d\tilde{\nu} \stackrel{!}{\geq} 0 \\ (\tilde{\nu}_{k2} - \tilde{\nu}_{k1}) U^k = (\tilde{\nu}_{k2} - \tilde{\nu}_{k1}) \left( U^k + 0 \right) \stackrel{!}{\geq} 0 \quad . \end{aligned} \quad (3.44)$$

<sup>1</sup>Auf Englisch perturbation amplitudes genannt.

Daher können wir schlussfolgern, dass

$$\begin{aligned} u^k \pi y^k (f - 1) &\stackrel{!}{\geq} -U^k \\ \Rightarrow -\frac{U^k}{\pi y^k |f - 1|} &\stackrel{!}{\leq} u^k \stackrel{!}{\leq} \frac{U^k}{\pi y^k |f - 1|} \end{aligned} \quad (3.45)$$

sein muss. Wegen der Wellenzahlabhängigkeit von  $(f - 1)$  müssen wir das Minimum und Maximum davon betrachten. Maxima werden bei jeder Übergangslinie  $\tilde{\nu} = z \cdot \delta^k$  mit  $z \in \mathbb{Z}$  erreicht. Dort gilt

$$\begin{aligned} f_{\max} = f(\tilde{\nu} = 0, \delta^k, \gamma^k) &= \frac{\sinh(2\pi y^k)}{\cosh(2\pi y^k) - \cos(0)} \\ &= \frac{\sinh(2\pi y^k)}{\cosh(2\pi y^k) - 1} \\ &= \frac{\exp(2\pi y^k) - \exp(-2\pi y^k)}{\exp(2\pi y^k) + \exp(-2\pi y^k) - 2} \\ &= \frac{(\exp(\pi y^k) + \exp(-\pi y^k)) (\exp(\pi y^k) - \exp(-\pi y^k))}{(\exp(\pi y^k) - \exp(-\pi y^k)) (\exp(\pi y^k) + \exp(-\pi y^k))} \\ &= \coth(\pi y^k) > 0 \quad , \text{ da } y^k > 0 \quad . \end{aligned} \quad (3.46)$$

Die ELSASSERformfunktion besitzt Minima bei  $\tilde{\nu} = (z + 1/2) \cdot \delta^k$  mit  $z \in \mathbb{Z}$ . Dort beträgt der Funktionswert

$$\begin{aligned} f_{\min} = f(\tilde{\nu} = 0, \delta^k, \gamma^k) &= \frac{\sinh(2\pi y^k)}{\cosh(2\pi y^k) - \cos(\pi)} \\ &= \frac{\sinh(2\pi y^k)}{\cosh(2\pi y^k) + 1} \\ &= \frac{\exp(2\pi y^k) - \exp(-2\pi y^k)}{\exp(2\pi y^k) + \exp(-2\pi y^k) + 2} \\ &= \frac{(\exp(\pi y^k) + \exp(-\pi y^k)) (\exp(\pi y^k) - \exp(-\pi y^k))}{(\exp(\pi y^k) + \exp(-\pi y^k)) (\exp(\pi y^k) + \exp(-\pi y^k))} \\ &= \tanh(\pi y^k) > 0 \quad , \text{ da } y^k > 0 \quad . \end{aligned} \quad (3.47)$$

Bei der Ungleichung 3.45 werden die Fälle  $f - 1 < 0$  und  $f - 1 > 0$  unterschieden.  $f - 1 < 0$  kann nur nahe dem Minimum auftreten, denn  $\tanh(\pi y^k) < 1$  für  $y^k > 0$ , wohingegen  $\coth(\pi y^k) > 1$  für  $y^k > 0$ . Die zwei Fälle lauten

$$\begin{aligned} \text{Fall 1:} \quad f - 1 &\geq 0 \\ \Rightarrow u^k &\geq -\frac{U^k}{\pi y^k (\coth(\pi y^k) - 1)} \quad , \\ \text{Fall 2:} \quad f - 1 &< 0 \\ \Rightarrow u^k &\leq -\frac{U^k}{\pi y^k (\tanh(\pi y^k) - 1)} \quad . \end{aligned} \quad (3.48)$$

Mit

$$-\left( \frac{1}{\coth(\pi y^k) - 1} + \frac{1}{\tanh(\pi y^k) - 1} \right) = 1 \quad (3.49)$$

und der Abkürzung

$$-\frac{1}{\tanh(\pi y^k) - 1} =: t_y \quad (3.50)$$

gilt zusammengefasst als Nebenbedingung<sup>1</sup>

$$\underbrace{(1 - t_y)}_{<0} \cdot \frac{U^k}{\pi y^k} \leq u^k \leq \underbrace{t_y}_{>0} \cdot \frac{U^k}{\pi y^k} \quad (3.51)$$

und analog

$$(1 - t_y) \cdot \frac{D^k}{\pi y^k} \leq d^k \leq t_y \cdot \frac{D^k}{\pi y^k} \quad (3.52)$$

Für die Lösung des gekoppelten Differentialgleichungssystems bestehend aus Gleichungen 3.41a, 3.41b, 3.42a und 3.42b fehlen neben den Nebenbedingungen noch Randbedingungen. Wir gehen davon aus, dass unmittelbar an der Erdoberfläche, also beim Bodendruck  $p_S$ , die nach oben gerichtete spektrale Strahldichte einer PLANCKfunktion mit der Oberflächentemperatur der Erde entspricht. Am oberen Rand der Atmosphäre ( $p = 0$  hPa) soll die nach unten gerichtete spektrale Bestrahlungsstärke Null sein, da wir keine langwellige Strahlung aus dem Weltall berücksichtigen. Über die aus der Erdatmosphäre austretende langwellige Strahlung, die relevant für den Energiehaushalt der Erde ist, können wir keine Aussage machen ( $U^k(p = 0 \text{ hPa}) = \text{unbekannt}$ ). Die Randbedingungen lauten also

$$U^k(p = p_S) = \int_{\tilde{\nu}_{k1}}^{\tilde{\nu}_{k2}} d\tilde{\nu} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi/2} d\vartheta B_{\tilde{\nu}} \cos(\vartheta) \sin(\vartheta) = \pi B^k$$

$$\approx \pi(\tilde{\nu}_{k2} - \tilde{\nu}_{k1}) B_{\tilde{\nu}} \left( \tilde{\nu} = \frac{\tilde{\nu}_{k1} + \tilde{\nu}_{k2}}{2}, T = T_S \right) \quad , \quad (3.53a)$$

$$D^k(p = 0 \text{ hPa}) = 0 \frac{\text{W}}{\text{m}^2} \quad . \quad (3.53b)$$

Bevor wir uns in Kapitel 5 um die Implementierung der Strahlungstransportgleichungen ins KMCM kümmern, bestimmen wir im folgenden Kapitel 4 alle vorkommenden Größen und Parameter.

<sup>1</sup>Als Rechenbeispiel für die **neue** und alte Methode nehmen wir ohne Berücksichtigung der Einheiten  $U^k = 20$  und  $y^k = 0.001$  an. Das ergibt die Ungleichung  $(-0.063) -20,06 < u^k < 6386,3 (20.06)$ . Ein zweites Beispiel wäre  $D^k = 10$  und  $y^k = 0.1$ , welches auf die Ungleichung  $(-4.37) -13,91 < u^k < 45,75 (14.37)$  führt.

## 4 Parameterbestimmung

Das zu lösende Differentialgleichungssystem, welches aus den Gleichungen 3.41 und 3.42 besteht, beinhaltet folgende physikalischen Größen, die es zu bestimmen gilt:

1. bezüglich CO<sub>2</sub>:
  - (a) Massenmischungsverhältnis  $q$ ,
  - (b) bandgemittelter Massenabsorptionskoeffizient  $\bar{\kappa}^k$ ,
  - (c) mittlerer Linienabstand  $\delta^k$  und mittlere Linienbreite  $\gamma^k$  für die Berechnung Graueitsparameter  $y^k$ ,
  - (d) Einfachrückstreuungsvermögen  $\bar{\omega}^k$ ,
2. bezüglich der Wolken:
  - (a) Massenmischungsverhältnis  $q_c$ ,
  - (b) Massenabsorptionskoeffizient  $\kappa^c$ .

Wir beginnen mit der Berechnung des Massenmischungsverhältnisses von CO<sub>2</sub>. Anschließend werden die spektroskopischen Größen  $\bar{\kappa}^k$ ,  $\delta^k$  und  $\gamma^k$  ermittelt. Dazu verwenden wir die frei zugängliche HITRAN-Datenbank<sup>1</sup>. Am Ende dieses Kapitels werden kurz die Eigenschaften des Einfachrückstreuungsvermögens  $\bar{\omega}^k$  sowie der Wolkenparameter  $q_c$  und  $\kappa^c$  beschrieben.

### 4.1 Berechnung des Massenmischungsverhältnisses $q$

Wie allgemein üblich wird für die Konzentration von Spurengasen in der Atmosphäre das Volumenmischungsverhältnis in ppmv angegeben. Im August 2016 betrug das über einen Monat gemittelte CO<sub>2</sub>-Volumenmischungsverhältnis auf dem Berg Mauna Loa auf Hawaii 402,25 ppmv. Zur Umrechnung in ein Massenmischungsverhältnis gehen wir vom idealen Gasgesetz

$$pV = nRT = \frac{m}{M}RT \quad (4.1)$$

mit dem Druck  $p$  (in Pa), dem Volumen  $V$  (in m<sup>3</sup>), der Stoffmenge  $n$  (in mol), der universellen Gaskonstanten ( $R = 8,3145 \frac{\text{J}}{\text{mol}\cdot\text{K}}$ ), der Temperatur  $T$  (in K), der Masse  $m$  (in kg) und der molaren Masse ( $M_{\text{CO}_2} = 44,0 \cdot 10^{-3} \frac{\text{kg}}{\text{mol}}$ ) aus. Für die Massendichte folgt

$$\rho = \frac{m}{V} = \frac{pM}{RT} \quad (4.2)$$

Außerdem erhalten wir, dass das Volumenmischungsverhältnis  $x$  (gegeben in ppmv oder ppm) dem Partialdruck  $\frac{p_{\text{CO}_2}}{p_{\text{Luft}}}$  entspricht, denn

$$\begin{aligned} x &= \frac{N_{\text{CO}_2}/V}{N_{\text{Luft}}/V} \\ &= \frac{n_{\text{CO}_2} \cdot N_A/V}{n_{\text{Luft}} \cdot N_A/V} \\ &= \frac{p_{\text{CO}_2}}{p_{\text{Luft}}} \end{aligned} \quad (4.3)$$

---

<sup>1</sup>Zu finden unter <http://www.hitran.org>.

In Gleichung 4.3 steht  $N_{\text{CO}_2}$  für die Teilchenzahl der  $\text{CO}_2$ -Moleküle und  $N_{\text{Luft}}$  für die Gesamtteilchenzahl der Luftmoleküle in einem Testvolumen.  $N_A = 6,022 \cdot 10^{23} \frac{1}{\text{mol}}$  ist die AVOGADROkonstante und gibt an, wie viele Teilchen pro mol vorhanden sind. Aus den Gleichungen 4.2 und 4.3 lässt sich nun das Massenmischungsverhältnis berechnen. Es gilt

$$\begin{aligned} q &= \frac{\rho_{\text{CO}_2}}{\rho_{\text{Luft}}} \\ &= \frac{p_{\text{CO}_2} M_{\text{CO}_2}}{p_{\text{Luft}} M_{\text{Luft}}} \\ &= x \frac{M_{\text{CO}_2}}{M_{\text{Luft}}} \quad . \end{aligned} \quad (4.4)$$

Für ein  $\text{CO}_2$ -Volumenmischungsverhältnis von 400 ppm ergäbe dies zum Beispiel

$$q = 400 \cdot 10^{-6} \frac{44,0 \text{ g/mol}}{29,0 \text{ g/mol}} \approx 606,9 \cdot 10^{-6} \quad , \quad (4.5)$$

wobei mit  $M_{\text{Luft}} = 28,96546 \cdot 10^{-3} \frac{\text{kg}}{\text{mol}}$  die molare Masse von trockener Luft [23] angenommen wurde. Die Formel für die Umrechnung (in ppmw) lautet demnach

$$q \approx x \cdot 1,52 \quad , \quad (4.6)$$

wobei  $x$  das Volumenmischungsverhältnis in ppm ist.

## 4.2 HITRAN-Datenbank

HITRAN steht für "high-resolution transmission molecular absorption database". Die Datenbank wird unter anderem in den Abhandlungen [24], [25], [26] und [27] beschrieben. Einen Datenausschnitt liefert die Tabelle 1. Für 47 Moleküle sind unter anderem die folgenden, für uns wichtigen Größen enthalten:

- Resonanzwellenzahl<sup>1</sup>  $\tilde{\nu}_c$  (in  $\text{cm}^{-1}$ )
- Linienintensität<sup>2</sup> (Linienstärke)  $S$  (in  $\frac{\text{cm}^{-1}}{\text{molec} \cdot \text{cm}^{-2}}$ )
- Linienverbreiterung<sup>3</sup> durch Luft  $\gamma$  (halbe Halbwertsbreite<sup>4</sup>) (in  $\text{cm}^{-1}$ )
- Linienverbreiterung (HWHM) durch eigene Teilchensorte<sup>5</sup>  $\gamma_s$  (in  $\text{cm}^{-1}$ ) .

Alle Angaben beziehen sich auf eine Referenztemperatur  $T_0$  von 296 K und einen Referenzdruck von  $p_0 = 101325 \text{ Pa}$ . Wie genau die Temperatur- und Druckabhängigkeit der Größen aussieht und wie wir daraus den bandgemittelten Massenabsorptionskoeffizienten  $\kappa^k$  bestimmen können, ist in Abschnitt 4.4 und 4.6.3 zu finden. Zunächst folgt eine kurze Übersicht physikalischer Effekte, die zu einer Linienverbreiterung führen.

---

<sup>1</sup>Auf Englisch als transition wave number bezeichnet.

<sup>2</sup>Auf Englisch als line strength bezeichnet.

<sup>3</sup>Auf Englisch als air-broadened halfwidth bezeichnet.

<sup>4</sup>Auf Englisch als halfwidth at half max (HWHM) bezeichnet.

<sup>5</sup>Auf Englisch als self-broadened halfwidth bezeichnet.

| #1 | #2 | $\tilde{\nu}$ | $S_w$     | $A_{21}$  | $\gamma$ | $\gamma_S$ | $E''$     | $n$  | ... |
|----|----|---------------|-----------|-----------|----------|------------|-----------|------|-----|
| 2  | 1  | 667.387310    | 1.160E-29 | 1.619E+00 | .0672    | 0.075      | 5265.1187 | 0.74 |     |
| 2  | 5  | 667.389650    | 6.280E-29 | 2.195E+00 | .0647    | 0.068      | 2824.4829 | 0.68 |     |
| 2  | 3  | 667.390833    | 9.163E-29 | 2.132E+00 | .0610    | 0.065      | 3714.7644 | 0.64 |     |

| ... | $\delta$ | $v'$     | $v''$    | $Q'$ | $Q''$ | IER    | IRef         | line mixing flag (lmf) | $g'$  | $g''$ |
|-----|----------|----------|----------|------|-------|--------|--------------|------------------------|-------|-------|
|     | -.000735 | 3 2 2 04 | 3 1 1 04 |      | R 46f | 337764 | 1927 5 4 5 7 |                        | 95.0  | 93.0  |
|     | -.000809 | 1 1 1 01 | 1 0 0 01 |      | Q 63e | 437774 | 1221 5 4 5 7 |                        | 254.0 | 254.0 |
|     | -.000943 | 0 3 3 01 | 0 2 2 01 |      | Q 80f | 337764 | 1927 5 4 5 7 |                        | 161.0 | 161.0 |

Erklärung der Spaltennamen:

| Bezeichnung   | FSS    | Einheit  | Beschreibung  |
|---------------|--------|--|---|
| #1: molec id  | I2     |  | Identifikationsnummer des Moleküls (unabhängig von dessen atomarer Zusammensetzung)   |
| #2: iso id    | I1     |  | Lokale Identifikationsnummer des Isotopologs (von Massenzahl abhängig und nach Häufigkeit sortiert)                                 |
| $\tilde{\nu}$ | F12.6  | $\text{cm}^{-1}$   | Resonanzwellenzahl  |
| $S_w$         | E10.3  | $\frac{\text{cm}^{-1}}{\text{molec} \cdot \text{cm}^{-2}}$ | Linienintensität multipliziert mit der Häufigkeit des Isotopologs bei $T = 296\text{K}$   |
| $A_{21}$      | E10.3  | $\text{s}^{-1}$  | EINSTEIN-A-Koeffizient  |
| $\gamma$      | F5.4   | $\text{cm}^{-1} \cdot \text{atm}^{-1}$                     | Luft-verbreiterte LORENTZ- halbe Halbwertsbreite (HWHM) bei $p = 1 \text{ atm}$ und $T = 296 \text{ K}$                             |
| $\gamma_S$    | F5.3   | $\text{cm}^{-1} \cdot \text{atm}^{-1}$                     | Selbst-verbreitertes HWHM bei $1 \text{ atm}$ und $296 \text{ K}$   |
| $E''$         | F10.4  | $\text{cm}^{-1}$   | Energie des unteren Zustandes   |
| $n$           | F4.2   |  | Temperaturexponent des Luft-verbreiterten HWHM  |
| $\delta$      | F8.6   | $\text{cm}^{-1} \cdot \text{atm}^{-1}$                     | Druck-induzierte Linienverschiebung durch Luft bei $p = 1 \text{ atm}$  |
| $v'$          | A15    |  | Globale Quantenzahlen und Label des oberen Zustandes: Elektronische u. Vibrations-Quantenzahlen                                     |
| $v''$         | A15    |  | Globale Quantenzahlen und Label des unteren Zustandes: Elektronische u. Vibrations-Quantenzahlen                                    |
| $Q'$          | A15    |  | Lokale Quantenzahlen u. Label des oberen Zustandes: Rotations-, Hyperfein- u. weitere Quantenzahlen                                 |
| $Q''$         | A15    |  | Lokale Quantenzahlen u. Label des unteren Zustandes: Rotations-, Hyperfein- u. weitere Quantenz.                                    |
| IER           | I1 · 6 |  | Liste mit sechs Indizes (je einstellig) als Fehlerangabe für die Übergangsparameter $\tilde{\nu}, S_w, \gamma, \gamma_S, n, \delta$ |
| IRef          | I2 · 6 |  | Liste mit sechs Quellenreferenzen (je zweistellig) für die Übergangsparameter $\tilde{\nu}, S_w, \gamma, \gamma_S, n, \delta$ .     |
| lmf           | A1     |  | Kennzeichnung, falls zusätzliche Info zu Linienvermischung vorliegt   |
| $g'/g''$      | F7.1   |  | Entartung des oberen/unteren Zustandes  |

**Tabelle 1:** Ausschnitt aus der HITRAN Datenbank mit FSS = Fortran-style Spezifikationssymbol (für Erläuterungen siehe A.15)

### 4.3 Verbreiterungseffekte bei Spektrallinien

Bei Emission oder Absorption von Photonen ändert sich der Zustand eines Moleküls. Dabei ist jedem Übergang eine Energie zugeordnet, welche sich über die Beziehung

$$E = h\nu = hc\tilde{\nu} \quad (4.7)$$

mit dem PLANCKSchen Wirkungsquantum  $h = 6,626 \cdot 10^{-34}$  Js, der Frequenz  $\nu$  (in  $\text{s}^{-1}$ ) sowie der Vakuumlichtgeschwindigkeit  $c = 2,998 \cdot 10^8 \frac{\text{m}}{\text{s}}$  auch mit einer Wellenzahl angegeben lässt. Die tatsächliche Energie einer Zustandsänderung kann jedoch aufgrund von drei physikalischen Effekten, die zur Verbreiterung von Emissions- und Absorptionslinien beitragen, abweichen. Die genaue Form der Linien wird in Abschnitt 4.4 beschrieben. Zu den Effekten gehören die

- natürliche Linienverbreiterung,
- thermische DOPPLERlinienverbreiterung,
- Druck- bzw. Stoßverbreiterung.

Um den Einfluss abschätzen zu können, berechnen wir die halbe Halbwertsbreite (HWHM) für alle drei Effekte für  $\text{CO}_2$  bei den Referenzwerten ( $T_0 = 296$  K,  $p_0 = 101325$  Pa) sowie bei  $T_M = 200$  K und  $p_M = 0,1$  Pa. Letztere sind Beispielwerte für die Mesopausenregion in etwa 70 km Höhe.

#### 4.3.1 Natürliche Linienverbreiterung

Ein angeregtes Teilchen kann spontan in einen Zustand geringerer Energie übergehen. Die inverse Zerfallsdauer (Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit)  $1/\tau_{\text{sp}} = A_{21}$  (in  $1/\text{s}$ ) heißt EINSTEINKoeffizient [28]. Aus dieser kann mit Hilfe der HEISENBERGSchen Unschärferelation

$$\Gamma\tau_{\text{sp}} = \hbar \quad (4.8)$$

mit der Energieunschärfe  $\Gamma$  (in J) und dem reduzierten PLANCKSchen Wirkungsquantum  $\hbar = h/(2\pi)$  die natürliche Linienverbreiterung abgeschätzt werden. Es gilt

$$\begin{aligned} \Gamma &= \Delta E = h\Delta\nu = \frac{hc}{\Delta\lambda} = hc\Delta\tilde{\nu} \\ \Rightarrow \Delta\tilde{\nu} &= \frac{A_{21}}{2\pi c} \end{aligned} \quad (4.9)$$

Für den später betrachteten (infraroten) Spektralbereich von  $620 - 715 \text{ cm}^{-1}$  liegen die EINSTEINKoeffizienten, welche der HITRAN-Datenbank entnommen wurden, im Intervall von  $0,1 \text{ s}^{-1}$  bis  $9,4 \text{ s}^{-1}$ . Dies entspricht einer halben Halbwertsbreite ( $\Delta\tilde{\nu}/2$ ) von  $2,7 \cdot 10^{-13} \text{ cm}^{-1}$  bis  $2,5 \cdot 10^{-11} \text{ cm}^{-1}$ . Wie die Beispiele der DOPPLER- und Stoßverbreiterung zeigen werden, kann die natürliche Linienverbreiterung aufgrund der Größenordnungsunterschiede vernachlässigt werden.

#### 4.3.2 Dopplerverbreiterung

Für die halbe Halbwertsbreite (HWHM) der DOPPLERverbreiterung gilt

$$\Delta\tilde{\nu} = \frac{\tilde{\nu}_c}{c} \sqrt{\frac{2k_B T \ln(2)}{m}} \quad (4.10)$$

mit der Übergangswellenzahl  $\tilde{\nu}_c$  (in  $\text{cm}^{-1}$ ), der Vakuumlichtgeschwindigkeit  $c$ , der BOLTZMANNkonstante  $k_B \approx 1,38065 \cdot 10^{-23} \frac{\text{J}}{\text{K}}$  und der Masse von  $\text{CO}_2$  ( $m_{\text{CO}_2} = 44 \frac{\text{g}}{\text{mol}} / N_A \approx 7,306 \cdot 10^{-26} \text{ kg}$ ). Für die Beispielübergangswellenzahl von  $\tilde{\nu}_c = 667,4233 \text{ cm}^{-1}$  (siehe Tabelle 1) gilt für die betrachteten Temperaturen

$$\begin{aligned}\Delta\tilde{\nu}(T = 296 \text{ K}) &\approx 6,2 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^{-1} \\ \Delta\tilde{\nu}(T = 200 \text{ K}) &\approx 5,1 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^{-1} \quad .\end{aligned}\tag{4.11}$$

### 4.3.3 Stoßverbreiterung

Für die Druck- bzw. Stoßverbreiterung sind in Tabelle 1 die halben Halbwertsbreiten angegeben. Dazu zählen die Verbreiterung durch Kollisionen mit Luftmolekülen ( $\gamma$ ) und durch Stöße mit Teilchen der selben Art ( $\gamma_S$ ). Welcher Wert davon einen größeren Einfluss besitzt, hängt von der Zusammensetzung des Gemisches ab. Die Halbwertsbreiten sind am Referenzpunkt um zwei Größenordnungen größer als die der Dopplerverbreiterung. In der unteren Atmosphäre findet deswegen vor allem eine Linienverbreiterung durch Stöße statt. In der oberen Atmosphäre wird die DOPPLERverbreiterung immer wichtiger.

## 4.4 Berechnung des Massenabsorptionskoeffizienten $\kappa$

In Kapitel 1.3 hatten wir uns bereits ohne Herleitung das Massenabsorptionsspektrum von  $\text{CO}_2$  im Intervall von  $0 \text{ cm}^{-1}$  bis  $20000 \text{ cm}^{-1}$  angeschaut. Nun wird hergeleitet, wie aus den HITRAN-Daten der Massenabsorptionskoeffizient berechnet werden kann. Des Weiteren werden wir das Intervall festlegen, mit dem der Strahlungstransport untersucht werden soll.

Es existieren drei Größen, die als Absorptionskoeffizienten gelten: der Absorptionskoeffizient  $\kappa^*$ , der Massenabsorptionskoeffizient  $\kappa_m$  sowie der Absorptionsquerschnitt  $\sigma$ . Nach [19] gelten die Zusammenhänge

$$\begin{aligned}\kappa^* &= -\frac{1}{L_{\tilde{\nu}}} \frac{\partial L_{\tilde{\nu}}}{\partial s} \quad (\text{in } \text{m}^{-1}) \quad , \\ \kappa &= \frac{1}{\rho} \kappa^* \quad (\text{in } \frac{\text{m}^2}{\text{kg}}) \quad , \\ \sigma &= \frac{1}{\tilde{n}} \kappa^* \quad (\text{in } \text{m}^2) \quad ,\end{aligned}\tag{4.12}$$

mit sowohl der Massendichte  $\rho$  als auch der Teilchenzahldichte  $\tilde{n} = \frac{N}{V}$  des absorbierenden Stoffes.

Der Massenabsorptionskoeffizient  $\kappa(\tilde{\nu}, p, T)$  einer einzelnen Spektrallinie kann nach [19], [29] und [30] aus dem Absorptionsquerschnitt  $\sigma$  (in  $\frac{\text{m}^2}{\text{molec}}$ )<sup>1</sup>

$$\sigma(\tilde{\nu}, p, T) = S \cdot \underbrace{\frac{1}{\gamma} f\left(\frac{\tilde{\nu} - \tilde{\nu}_c}{\gamma}\right)}_{\text{normierte Linie}} \cdot 10^{-4} \frac{\text{m}^2}{\text{cm}^2}\tag{4.13}$$

mit der Linienstärke  $S$  (in  $\frac{\text{cm}^{-1}}{\text{molec}\cdot\text{cm}^{-2}}$ ), der Linienbreite  $\gamma$  (in  $\text{cm}^{-1}$ ) und der Übergangswellenzahl  $\tilde{\nu}_c$  (in  $\text{cm}^{-1}$ ) bestimmt werden.  $f$  beschreibt die Linienform<sup>2</sup> und ist normiert, so dass

$$\int \sigma \, d\tilde{\nu} = S\tag{4.14}$$

<sup>1</sup>'molec' ist keine Einheit im physikalischen Sinne, sondern steht für Anzahl der Moleküle.

<sup>2</sup>Auf Englisch mit line shape bezeichnet.

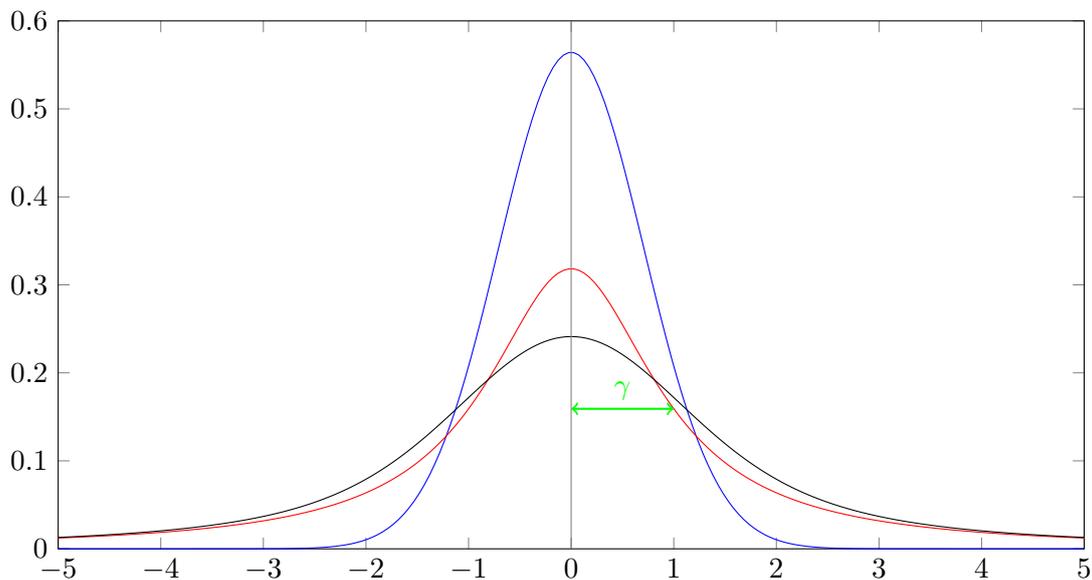
gilt. Als mögliche Linienformen kommen GAUSSfunktionen

$$f(x) = \frac{\exp(-x^2)}{\sqrt{\pi}} \quad , \quad (4.15)$$

LORENTZfunktionen

$$f(x) = \frac{1}{\pi} \frac{1}{(1+x^2)} \quad (4.16)$$

oder die Faltung dieser Verteilungsfunktionen, das sogenannte VOIGTprofil, in Frage. Die Linienformen, wie sie in Abbildung 11 zu sehen sind, hängen von der Art der Linienverbreiterung ab. Für den hier betrachteten Fall der unteren Atmosphäre am Referenzpunkt verwenden wir das LORENTZprofil um die Druckverbreiterung annähernd richtig<sup>1</sup> darzustellen.



**Abbildung 11:** GAUSS-Kurve (blau) nach Gleichung 4.15, LORENTZ-Kurve (rot) nach Gleichung 4.16 und VOIGT-kurve (schwarz) nach Gleichung 4.17 (entstanden aus gezeigten Profilen). Zudem ist die halbe Halbwertsbreite  $\gamma$  der LORENTZkurve eingetragen.

Ab einer Höhe von ca. 50 km verringert sich die Druckverbreiterung, die zu einer LORENTZkurve führt. Die DOPPLERverbreiterung, die eine GAUSS-förmige Kurve erzeugt, übt in der oberen Atmosphäre den stärkeren Einfluss auf die Linienverbreiterung aus. Die Kombination aus LORENTZ-  $L(x)$  und GAUSSkurve  $G(x)$  führt zum bereits erwähnten VOIGTprofil  $V(x)$ , welches in Abbildung 11 zu sehen ist. Mathematisch gesehen entsteht  $V(x)$  aus einer Faltung von  $G(x)$  und  $L(x)$

$$V(x) = (G * L)(x) = \int_{-\infty}^{\infty} G(y)L(x-y) dy \quad . \quad (4.17)$$

Für die halbe Halbwertsbreite des VOIGTprofils  $\gamma_V$  gilt in guter Näherung [32]

$$\gamma_V = 0,5346 \cdot \gamma_L + \sqrt{0,2166 \cdot \gamma_L^2 + \gamma_G^2} \quad . \quad (4.18)$$

<sup>1</sup>Tatsächlich zeigen Experimente Abweichungen von dem Profil. Die Linienflügel müssten in einiger Entfernung vom Zentrum stärker als bei der LORENTZkurve abfallen (siehe z.B. [31]).

Die halbe Halbwertsbreite der GAUSSkurve  $\gamma_G$  entspricht  $\Delta\tilde{\nu}$  aus Gleichung 4.10 und die halbe Halbwertsbreite der LORENTZkurve  $\gamma_L$  berechnet sich nach Gleichung 4.19. Die Temperatur- und Druckabhängigkeit von  $\gamma_L$  und  $S$  lässt sich nach [29] durch

$$\gamma_L(p, T) = \left(\frac{T_0}{T}\right)^n [\gamma(p_0, T_0)(p - p_{\text{part}}) + \gamma_S(p_0, T_0)p_{\text{part}}] \quad (4.19)$$

und

$$S(T) = S(T_0) \left(\frac{T}{T_0}\right)^n \exp\left(-\frac{h\nu_l}{k_B} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0}\right)\right) \quad (4.20)$$

berücksichtigen, wobei  $p_{\text{part}}$  der Partialdruck (in atm),  $k_B$  die BOLTZMANNkonstante und  $\nu_l$  die untere Frequenz des betrachteten Überganges ist.  $n$  ist ein experimentell ermittelter Exponent der Temperaturabhängigkeit von  $S$  und  $\gamma$ .

Aus diesen Größen kann nun der wellenzahl-, druck- und temperaturabhängige Massenabsorptionskoeffizient

$$\begin{aligned} \kappa(\tilde{\nu}, p, T) &= \frac{\tilde{n}}{\rho} \sigma = \frac{N/V}{m/V} \sigma = \frac{N}{n \cdot M} \sigma = \frac{N}{(N/N_A)M} \sigma = \frac{N_A}{M} \sigma \\ &= \frac{N_A}{M} \frac{S}{\gamma_V} \frac{1}{\pi \cdot \left(1 + \left(\frac{\tilde{\nu} - \tilde{\nu}_c}{\gamma_V}\right)^2\right)} \cdot 10^{-4} \frac{\text{m}^2}{\text{cm}^2} \\ &= \frac{N_A}{M} \frac{S}{\pi} \frac{\gamma_V}{\gamma_V^2 + (\tilde{\nu} - \tilde{\nu}_c)^2} \cdot 10^{-4} \frac{\text{m}^2}{\text{cm}^2} \end{aligned} \quad (4.21)$$

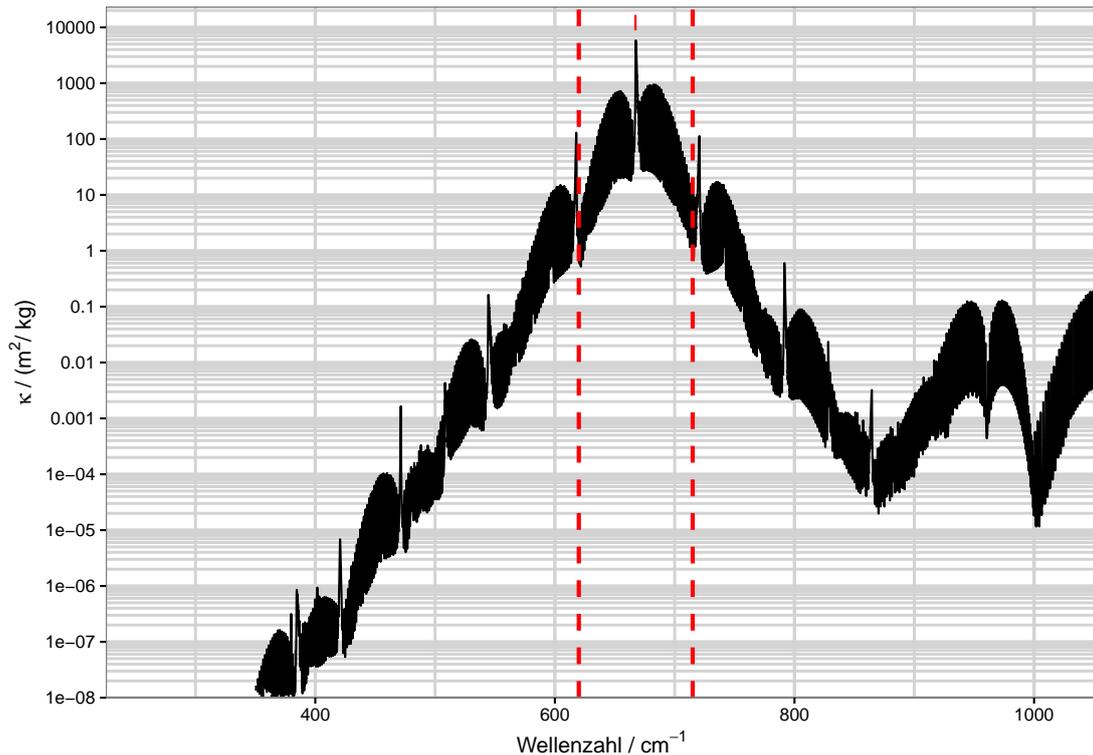
berechnet werden, wobei  $\tilde{n}$  die Teilchendichte (in  $\text{m}^{-3}$ ),  $\rho$  die Massendichte (in  $\frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$ ),  $N$  die Teilchenanzahl,  $m$  die Masse (in kg),  $M$  die molare Masse (in  $\frac{\text{kg}}{\text{mol}}$ ) und  $n$  die Stoffmenge (in mol) des zu betrachtenden Absorbers ist.  $N_A$  stellt die AVOGADROkonstante (in  $\text{mol}^{-1}$ ) dar.

#### 4.5 CO<sub>2</sub>-Spektrum von 620 cm<sup>-1</sup> bis 715 cm<sup>-1</sup>

In Abbildung 4 des Abschnittes 1.3 haben wir bereits den Massenabsorptionskoeffizienten von CO<sub>2</sub> im gesamten auf HITRAN zur Verfügung stehenden Wellenzahlbereich gesehen. Die Abbildung 12 zeigt einen Ausschnitt daraus. Beide Bilder wurden mit Hilfe von R-Skripten erzeugt, welche in Abschnitt 4.6 beschrieben und im Anhang A.16 aufgelistet werden.

Wie bereits in Abschnitt 1.3 konstatiert wurde, betrachten wir wegen der sehr hohen Absorptionskoeffizienten für unsere Berechnungen nur Wellenzahlen im Bereich von 620 cm<sup>-1</sup> bis 715 cm<sup>-1</sup>. Dieses Intervall entspricht einer Wellenlänge von 13,99  $\mu\text{m}$  bis 16,13  $\mu\text{m}$ . Für alle Isotopologe<sup>1</sup> in diesem Intervall existieren 43.462 Übergänge. Die Daten für die Spektrallinien stammen ursprünglich aus [33], [34], [35] und [36], wurden jedoch in der HITRAN-Datenbank zusammengetragen.

<sup>1</sup>Isotopologe sind chemische Verbindungen, die sich in ihrer Zusammensetzung durch verschiedene Isotope unterscheiden. Isotopolog 1 bei CO<sub>2</sub> entspricht einer Zusammensetzung aus <sup>12</sup>C- und <sup>16</sup>O-Atomen.



**Abbildung 12:** Massenabsorptionskoeffizient  $\kappa$  für  $\text{CO}_2$ -Linien mit der Isotopologenzahl 1 im Intervall  $I = [225 \text{ cm}^{-1}, 1053 \text{ cm}^{-1}]$ . Das Intervall  $I$  befindet sich zwischen den rot gestrichelten Linien.

## 4.6 Arbeiten mit den HITRAN-Daten

Die spektroskopischen Daten für den gesamten verfügbaren Wellenzahlbereich (169.292 Absorptionslinien) werden für das Isotopolog  $^{12}\text{C}^{16}\text{O}_2$  von der HITRAN-Datenbank heruntergeladen. Diese Zusammensetzung des Kohlenstoffdioxidmoleküls ist mit einer mittleren Häufigkeit von 98,4204% [37] in der Atmosphäre vorhanden, weswegen wir uns nur auf diese Molekülsorte konzentrieren. Die Berechnungen werden mit Daten vom 29.07.2016 durchgeführt. Alle Manipulationen erfolgen mit Hilfe von kurzen R-Skripten<sup>1</sup>.

### 4.6.1 Initialisieren der spektroskopischen Daten

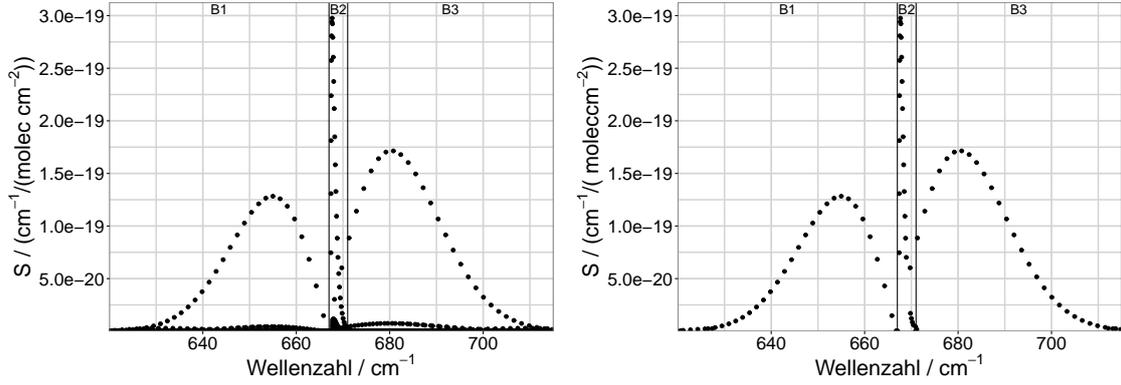
Das Skript `importHITRANdata.R` importiert aus einem vorgegebenen Pfad HITRAN-Daten. Dabei sind die Längen der Felder vorgegeben und entsprechen der neuesten Version der Datenbank [27]. Als Ergebnis erhalten wir zwei `data.frames`: `df.HITRAN.data` enthält alle importierten spektroskopischen Daten im richtigen Format und `df.HITRAN.DB.format` enthält die Informationen zu der Länge der einzelnen Spalten der Datenbank. Dieses Skript muss nicht aufgerufen werden, da es, sofern es nicht bereits das entsprechende `data.frame` gibt, automatisch von `mainHITRAN.R` ausgeführt wird.

### 4.6.2 Filterung der Spektrallinien

Für die Berechnung des mittleren Linienabstandes  $\delta^k$  müssen die Daten bereinigt werden. Im betrachteten Intervall befinden sich sehr viele eng beieinander liegende und schwache Linien sowie Linien mit einer verhältnismäßig großen Linienstärke  $S$  (siehe Abbildung 13

<sup>1</sup>„R ist eine freie Programmiersprache für statistische Berechnungen und Grafiken.“ [38]

links). Schwache Linien tragen quasi nicht zum Massenabsorptionskoeffizienten bei und müssen daher bei der Berechnung des mittleren Linienabstandes vernachlässigt werden.<sup>1</sup> Die Filterung findet im Skript `mainHITRAN.R` statt. Dieses Skript verkleinert das Spektrum auf einen gewählten Wellenzahlbereich  $[\tilde{\nu}_{k1}, \tilde{\nu}_{k2}]$  und die gewählte Isotopologenzahl. Als Ergebnis erhalten wir `df.HITRAN.data.reduced` und einige Kennzahlen. Dazu gehören der mittlere Linienabstand  $\delta^k$ , die mittlere Linienbreite  $\gamma^k$ , der Graueitsparameter  $y^k = \frac{\gamma^k}{\delta^k}$  und die mittlere Linienstärke  $S^k$ . Außerdem kann man `cuts` angeben, welche das Intervall  $[\tilde{\nu}_{k1}, \tilde{\nu}_{k2}]$  in Blöcke unterteilen, die jeweils ein Maximum enthalten. In jedem Block werden so viele Daten entfernt, dass zum lokalen Maximum eine monoton steigende Folge hin- und von dort eine monoton fallende Folge wegführt. Als Ergebnis erhält man das `data.frame df.HITRAN.data.reduced` sowie die Kennzahlen dazu. Zusätzlich werden auch grafische Abbildungen erzeugt.



**Abbildung 13:** 10667 ungefilterte (links) und 106 gefilterte (rechts) Linienstärken  $S$  im Intervall  $[620 \text{ cm}^{-1}, 715 \text{ cm}^{-1}]$ . Die senkrechten Linien geben die Begrenzung der Blöcke an, die für die Filterung angegeben worden sind.

In Abbildung 13 sind links alle Linienstärken im gewählten Intervall  $[620 \text{ cm}^{-1}, 715 \text{ cm}^{-1}]$  aufgetragen. Rechts sind lediglich die gefilterten Linien dargestellt. Das Intervall  $I$  wurde in die Blöcke 1:  $[620 \text{ cm}^{-1}, 667 \text{ cm}^{-1}]$ , 2:  $[667 \text{ cm}^{-1}, 671 \text{ cm}^{-1}]$  und 3:  $[671 \text{ cm}^{-1}, 715 \text{ cm}^{-1}]$  unterteilt. Die spektroskopischen Kennzahlen der ungefilterten und gefilterten Daten im gesamte Intervall sowie für die einzelnen Blöcke befinden sich in Tabelle 2.

| Intervall       | Linienabstand<br>$\delta^k / \text{cm}^{-1}$ | Linienbreite<br>$\gamma^k / \text{cm}^{-1}$ | Graueitsparameter<br>$y^k = \frac{\gamma^k}{\delta^k}$ | Linienstärke<br>$S / \frac{\text{cm}^{-1}}{\text{molec} \cdot \text{cm}^{-2}}$ |
|-----------------|--|---|--|--|
| $I$ : ungef.    | 0,008903                                     | 0,07057                                     | 7,926  | $8,218 \cdot 10^{-22}$   |
| $I$ : gefiltert | 0,9044                                       | 0,07289                                     | 0,08059  | $7,383 \cdot 10^{-20}$   |
| B1: ungef.      | 0,009279                                     | 0,07092                                     | 7,643  | $3,614 \cdot 10^{-22}$   |
| B1: gefiltert   | 1,236  | 0,07376                                     | 0,05969  | $4,257 \cdot 10^{-20}$   |
| B2: ungef.      | 0,004329                                     | 0,07203                                     | 16,64  | $4,764 \cdot 10^{-21}$   |
| B2: gefiltert   | 0,1318                                       | 0,07393                                     | 0,5608   | $1,250 \cdot 10^{-19}$   |
| B3: ungef.      | 0,009392                                     | 0,06990                                     | 7,442  | $5,439 \cdot 10^{-22}$   |
| B3: gefiltert   | 1,257  | 0,07104                                     | 0,05653  | $6,367 \cdot 10^{-20}$   |

**Tabelle 2:** Gemittelte spektroskopische Kennzahlen der gefilterten und Daten von  $\text{CO}_2$  aus HITRAN im Intervall  $I=[620 \text{ cm}^{-1}, 715 \text{ cm}^{-1}]$  sowie in den Blöcken B1= $[620 \text{ cm}^{-1}, 667 \text{ cm}^{-1}]$ , B2= $[667 \text{ cm}^{-1}, 671 \text{ cm}^{-1}]$  und B3= $[671 \text{ cm}^{-1}, 715 \text{ cm}^{-1}]$  beim Referenzpunkt ( $T_0 = 296 \text{ K}$  und  $p_0 = 1013,25 \text{ hPa}$ ).

<sup>1</sup>Ein Nachweis befindet sich in Abschnitt 4.6.3.

### 4.6.3 Massenabsorptionsspektrum und Bestimmung von $\bar{\kappa}^k$

Der Massenabsorptionskoeffizient in Abhängigkeit der Wellenzahl, des Druckes und der Temperatur  $\kappa(\tilde{\nu}, p, T)$  für eine einzelne Linie lässt sich nach Gleichung 4.21 in Zusammenhang mit Gleichungen 4.19, 4.20 und 4.18 berechnen. Zu beachten ist, dass in der HITRAN-Datenbank die Energie der unteren Zustände  $E''$  in  $\text{cm}^{-1}$  angegeben wird (siehe Tabelle 1) und  $\gamma$  bereits auf 1 atm normiert wurde. Daher müssen die Gleichungen 4.19 und 4.20 angepasst werden

$$\begin{aligned}\gamma(p, T) &= \left(\frac{T_0}{T}\right)^n \left[ \gamma(p_0, T_0) \left( \frac{p - p_{\text{part}}}{101325 \frac{\text{Pa}}{\text{atm}}} \right) + \gamma_S(p_0, T_0) \left( \frac{p_{\text{part}}}{101325 \frac{\text{Pa}}{\text{atm}}} \right) \right] \\ S(T) &= S(T_0) \left(\frac{T}{T_0}\right)^n \exp\left(-\frac{E'' \cdot 100 \frac{\text{m}^{-1}}{\text{cm}^{-1}} \cdot hc}{k_B} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0}\right)\right) \\ &= S(T_0) \left(\frac{T}{T_0}\right)^n \exp\left(-E'' \cdot 100 \frac{\text{m}^{-1}}{\text{cm}^{-1}} \cdot a \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0}\right)\right) \quad ,\end{aligned}\tag{4.22}$$

mit  $a = \frac{hc}{k_B} \approx 0,0143878 \text{ m K}$ . Die Temperatur  $T$ , der atmosphärische Druck  $p$  und der Partialdruck des Absorbers  $p_{\text{part}}$  werden in SI-Einheiten und  $S$  und  $\gamma$  wie in Tabelle 1 angegeben verwendet. Der Partialdruck kann nach Gleichung 4.3 aus dem Luftdruck und dem Volumenmischungsverhältnis berechnet werden. In der Abbildung 14 sind alle 106 einzelne LORENTZkurven der gefilterten Daten zu sehen, die, wie wir gleich sehen werden, summiert den wellenzahlabhängigen Massenabsorptionskoeffizienten ergeben würden.

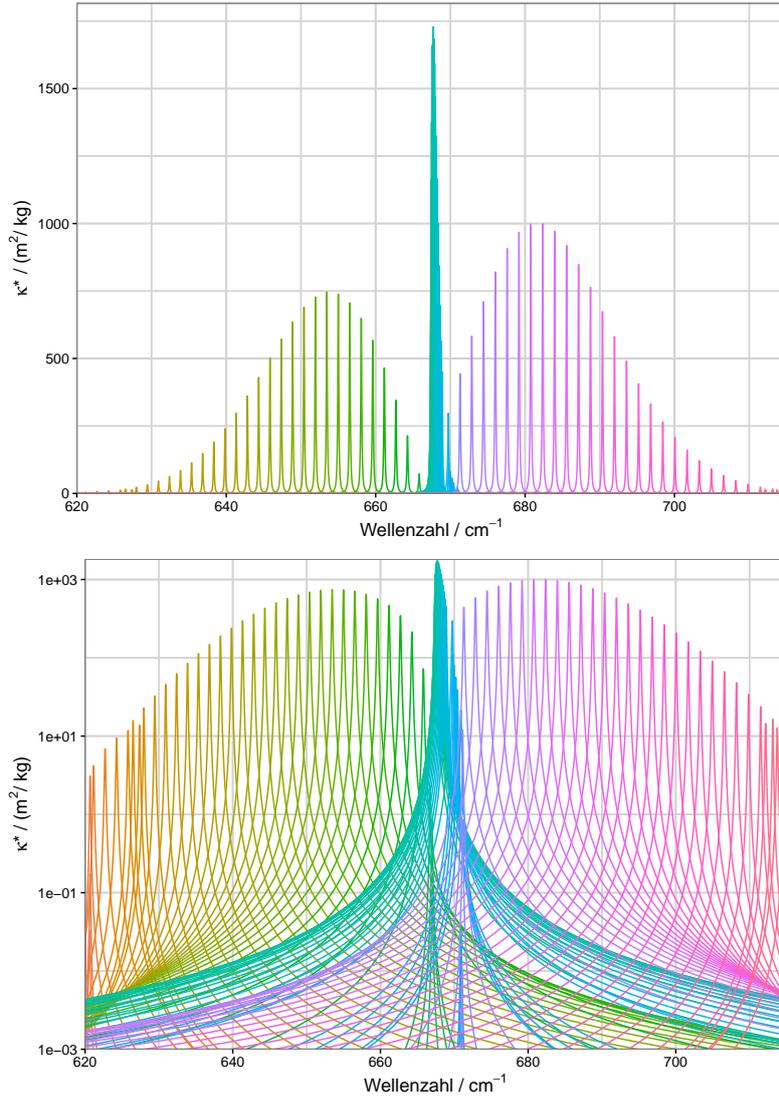
Möchte man den Massenabsorptionskoeffizienten  $\kappa$  für einen kleinen Wellenzahlbereich berechnen, der zahlreiche Spektrallinien enthält, so muss man Linien in diesem und benachbarten Bereichen mit einbeziehen (aufsummieren), da sich die Absorptionskurven einzelner Linien überlagern. Sei  $\Delta I$  ein betrachtetes Intervall, dessen zentrale Absorptionswellenzahl  $\tilde{\nu}_i$  ist, dann gilt nach Gleichung 4.13 für den Absorptionsquerschnitt  $\sigma$  in diesem Intervall

$$\sigma(\tilde{\nu}_i, p, T) = \left( \sum_j \frac{S_j}{\gamma_j} \frac{1}{\Delta I} \int_{\tilde{\nu}_i - \Delta I/2}^{\tilde{\nu}_i + \Delta I/2} f\left(\frac{\tilde{\nu} - \tilde{\nu}_{c,j}}{\gamma_j}\right) d\tilde{\nu} \right) \cdot 10^{-4} \frac{\text{m}^2}{\text{cm}^2} \quad ,\tag{4.23}$$

wobei  $j$  mindestens über alle Linien im Intervall  $\Delta I$  läuft<sup>1</sup>. Die Linienform entspricht in der Erdatmosphäre für Drücke ab etwa 10 hPa [29] der LORENTZkurve aus Gleichung 4.16. Für diese gilt im unbestimmten Integral

$$\int f(x) dx = \int \frac{1}{\pi} \frac{1}{1+x^2} dx = \frac{1}{\pi} \arctan(x) + C \quad .\tag{4.24}$$

<sup>1</sup>Da die LORENTZfunktion relativ schnell abfällt, besitzen nur Linien in unmittelbarer Nähe von  $\tilde{\nu}_i$  einen Einfluss auf  $\sigma(\tilde{\nu}_i)$ . Es bietet sich an, alle  $j$  Linien zu berücksichtigen, die sich innerhalb von drei Linienbreiten von  $\tilde{\nu}_i$  entfernt befinden.



**Abbildung 14:** Individuelle Massenabsorptionskoeffizienten  $\kappa^*$  aller 106 gefilterten Linien im Intervall  $[620 \text{ cm}^{-1}, 715 \text{ cm}^{-1}]$ . Unten ist die y-Achse logarithmisch dargestellt.

Damit lässt sich das Integral in Gleichung 4.23 berechnen.

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{\gamma_j} \int_{\tilde{\nu}_i - \Delta I/2}^{\tilde{\nu}_i + \Delta I/2} f\left(\frac{\tilde{\nu} - \tilde{\nu}_{c,j}}{\gamma_j}\right) d\tilde{\nu} &= \frac{1}{\gamma_j} \int_{\tilde{\nu}_i - \Delta I/2}^{\tilde{\nu}_i + \Delta I/2} \frac{1}{\pi} \frac{1}{1 + \left(\frac{\tilde{\nu} - \tilde{\nu}_{c,j}}{\gamma_j}\right)^2} d\tilde{\nu} \\
 &= \int_{\frac{\tilde{\nu}_i - \Delta I/2 - \tilde{\nu}_{c,j}}{\gamma_j}}^{\frac{\tilde{\nu}_i + \Delta I/2 - \tilde{\nu}_{c,j}}{\gamma_j}} \frac{1}{\pi} \frac{1}{1 + x^2} dx \\
 &= \frac{1}{\pi} \arctan(x) \Big|_{\frac{\tilde{\nu}_i - \Delta I/2 - \tilde{\nu}_{c,j}}{\gamma_j}}^{\frac{\tilde{\nu}_i + \Delta I/2 - \tilde{\nu}_{c,j}}{\gamma_j}} \\
 &= \frac{1}{\pi} \left[ \arctan\left(\frac{\tilde{\nu}_i + \Delta I/2 - \tilde{\nu}_{c,j}}{\gamma_j}\right) - \arctan\left(\frac{\tilde{\nu}_i - \Delta I/2 - \tilde{\nu}_{c,j}}{\gamma_j}\right) \right].
 \end{aligned} \tag{4.25}$$

Als Resultat erhalten wir zur numerischen Berechnung des Absorptionsquerschnittes im Intervall  $\left[\tilde{\nu}_i - \frac{\Delta I}{2}, \tilde{\nu}_i + \frac{\Delta I}{2}\right]$

$$\sigma(\tilde{\nu}_i, p, T) = \left( \sum_j \frac{S_j}{\Delta I} \frac{1}{\pi} \left[ \arctan \left( \frac{\tilde{\nu}_i - \Delta I/2 - \tilde{\nu}_{c,j}}{\gamma_j} \right) - \arctan \left( \frac{\tilde{\nu}_i + \Delta I/2 - \tilde{\nu}_{c,j}}{\gamma_j} \right) \right] \right) \cdot 10^{-4} \frac{\text{m}^2}{\text{cm}^2} . \quad (4.26)$$

Der Massenabsorptionskoeffizient im Intervall  $\left[\tilde{\nu}_i - \frac{\Delta I}{2}, \tilde{\nu}_i + \frac{\Delta I}{2}\right]$  berechnet sich anschließend aus Gleichung 4.21 zu

$$\kappa(\tilde{\nu}_i, p, T) = \frac{N_A}{M_{\text{CO}_2}} \sigma(\tilde{\nu}_i, p, T) . \quad (4.27)$$

Für den bandgemittelten Massenabsorptionskoeffizienten folgt damit

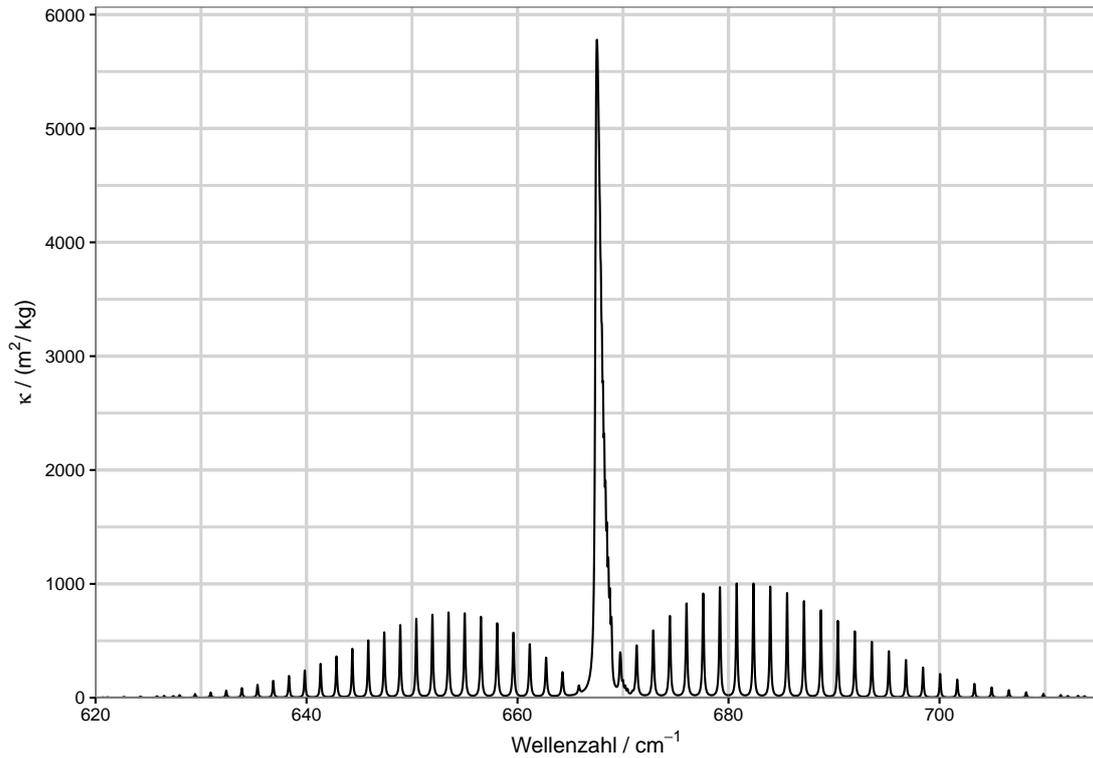
$$\bar{\kappa}^k = \frac{N_A}{M_{\text{CO}_2}} \frac{1}{Z} \sum_{i=1}^Z \sigma(\tilde{\nu}_i, p, T) . \quad (4.28)$$

In Tabelle 3 sind die Massenabsorptionskoeffizienten von den drei Banden (Block 1-3) zusammengefasst. Die Filterung der Daten minimiert den Mittelwert um ca. 10%.

|               | Mittlerer Massenabsorptionskoeffizient<br>$\bar{\kappa}^k / \frac{\text{m}^2}{\text{kg}}$ |
|---------------|---|
| B1: ungef.    | 56,902  |
| B1: gefiltert | 52,141  |
| B2: ungef.    | 1440,4  |
| B2: gefiltert | 1270,2  |
| B3: ungef.    | 79,358  |
| B3: gefiltert | 71,748  |

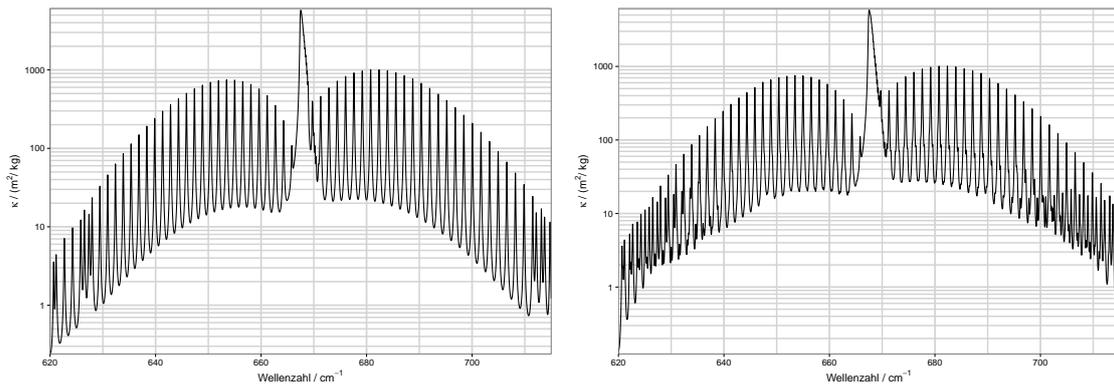
**Tabelle 3:** Gemittelte Massenabsorptionskoeffizienten der gefilterten und ungefilterten Spektroskopischen Daten von  $\text{CO}_2$  im Intervall  $I=[620 \text{ cm}^{-1}, 715 \text{ cm}^{-1}]$  sowie in den Blöcken  $B1=[620 \text{ cm}^{-1}, 667 \text{ cm}^{-1}]$ ,  $B2=[667 \text{ cm}^{-1}, 671 \text{ cm}^{-1}]$  und  $B3=[671 \text{ cm}^{-1}, 715 \text{ cm}^{-1}]$ .

In Abbildung 15 ist der Massenabsorptionskoeffizient aus den gefilterten Daten über der Wellenzahl aufgetragen. Es lässt sich erkennen, dass in der linken und rechten Bande (Block 1 und 2) die Linien sehr gleichmäßig verteilt sind. In der mittleren Bande (Block 2) überlagern sich die einzelnen Linien zu einem großen Peak.



**Abbildung 15:** Massenabsorptionskoeffizient  $\kappa$  am Referenzpunkt  $(T_0, p_0)$  für die gefilterten Linien im Intervall  $[620 \text{ cm}^{-1}, 715 \text{ cm}^{-1}]$ .

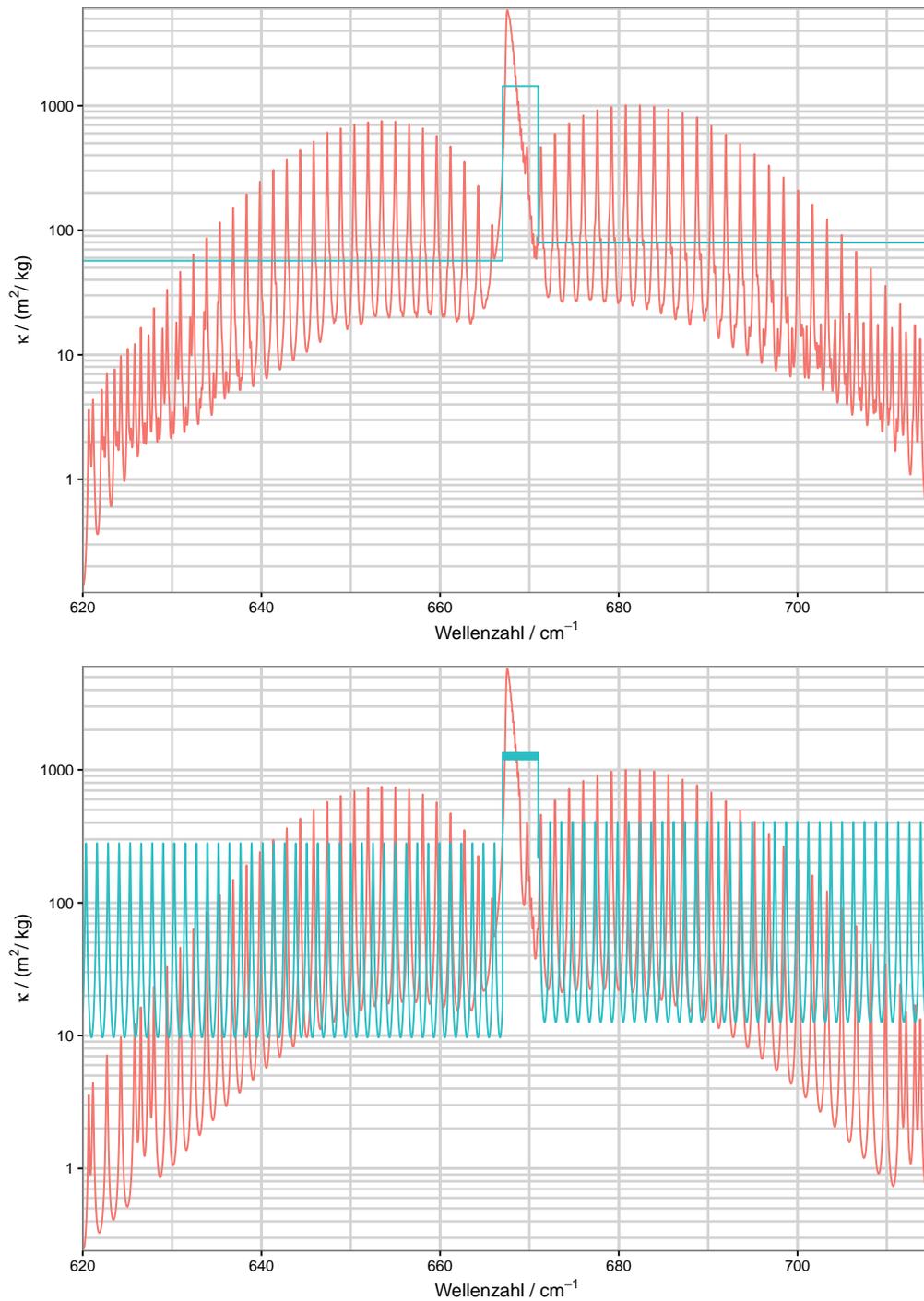
Die allgemeine Form der regelmäßigen Linien sowie das hohe Maximum in der Mitte ändern sich nicht, wenn die ungefilterten Daten verwendet werden. Der Vergleich wird in Abbildung 16 ersichtlich. Damit begründen wir, dass für die Parametrisierung mittels einer ELSASSERformfunktion der bandgemittelte Massenabsorptionskoeffizient aus den ungefilterten, der mittlere Linienabstand  $\delta^k$  jedoch aus den gefilterten Daten stammt.



**Abbildung 16:** Massenabsorptionskoeffizient  $\kappa$  am Referenzpunkt  $(T_0, p_0)$  für die gefilterten (links) und ungefilterten Linien (rechts) im Intervall  $[620 \text{ cm}^{-1}, 715 \text{ cm}^{-1}]$ .

Ein wichtiges Ziel dieser Arbeit ist es, die Wellenzahlabhängigkeit des Massenabsorptionskoeffizienten mit Hilfe der ELSASSERformfunktion, wie sie in Gleichung 3.37 erscheint, darzustellen. Abbildung 17 zeigt den tatsächlichen Massenabsorptionskoeffizienten  $\kappa$ . Im oberen Bild ist zusätzlich für jede Bande der bandgemittelte Massenabsorptionskoeffizient  $\bar{\kappa}^k$  eingezeichnet. Im unteren Bild befindet sich die ELSASSERformfunktion  $f$ , welche mit

dem bandgemittelten Massenabsorptionskoeffizienten multipliziert worden ist. Die Form der Linien wird durch unseren Ansatz gut wiedergegeben. Allerdings zeigt sich bei dem ELSASSERfunktion nicht der exponentielle Abfall in den Flanken. Dies führt zu Problemen, auf die wir in Kapitel 6 eingehen werden.



**Abbildung 17:** Massenabsorptionskoeffizient  $\kappa$  am Referenzpunkt  $(T_0, p_0)$  für die gefilterten Linien im Intervall  $[620 \text{ cm}^{-1}, 715 \text{ cm}^{-1}]$  zusammen mit der Elsasseransatzfunktion.

Bevor wir uns um die Bestimmung der drei letzten Parameter kümmern, soll eine alternative Berechnung des bandgemittelten Massenabsorptionskoeffizienten angegeben werden. Wir wissen aus Gleichung 4.14, dass das Integral des Absorptionsquerschnittes  $\sigma$  über alle Wellenzahlen die Linienstärke  $S$  ergibt. Wenn wir davon ausgehen, dass sich die einzelnen Linien nicht überschneiden<sup>1</sup>, so erhalten wir

$$\begin{aligned}
\bar{\kappa}^k &= \frac{1}{\Delta\tilde{\nu}_k} \int_{\tilde{\nu}_{k1}}^{\tilde{\nu}_{k2}} \frac{N_A}{M_{\text{CO}_2}} \sigma \, d\tilde{\nu} \\
&= \frac{1}{\Delta\tilde{\nu}_k} \frac{N_A}{M_{\text{CO}_2}} \sum_{i=1}^Z \int_{\tilde{\nu}_i - \varepsilon}^{\tilde{\nu}_i + \varepsilon} \sigma \, d\tilde{\nu} \\
&\approx \frac{1}{\Delta\tilde{\nu}_k} \frac{N_A}{M_{\text{CO}_2}} \sum_{i=1}^Z S_i \cdot 10^{-4} \frac{\text{m}^2}{\text{cm}^2} \quad .
\end{aligned} \tag{4.29}$$

Da hier keine numerische Integration stattfindet, ist diese Berechnung sehr schnell. Zum Vergleich mit Tabelle 3 berechnen wir aus den Daten auf diese Weise die bandgemittelten Massenabsorptionskoeffizienten. Die Ergebnisse befinden sich in Tabelle 4.

|               | Mittlerer Massenabsorptionskoeffizient<br>$\bar{\kappa}^k / \frac{\text{m}^2}{\text{kg}}$ |
|---------------|---|
| B1: ungef.    | 53,29   |
| B1: gefiltert | 48,34   |
| B2: ungef.    | 1501,4  |
| B2: gefiltert | 1325,4  |
| B3: ungef.    | 79,25   |
| B3: gefiltert | 71,308  |

**Tabelle 4:** Gemittelte Massenabsorptionskoeffizienten der gefilterten und ungefilterten Spektroskopischen Daten von  $\text{CO}_2$  im Intervall  $I=[620 \text{ cm}^{-1}, 715 \text{ cm}^{-1}]$  sowie in den Blöcken  $B1=[620 \text{ cm}^{-1}, 667 \text{ cm}^{-1}]$ ,  $B2=[667 \text{ cm}^{-1}, 671 \text{ cm}^{-1}]$  und  $B3=[671 \text{ cm}^{-1}, 715 \text{ cm}^{-1}]$ .

#### 4.7 Bestimmung von $\omega$ , $q_c$ und $\kappa^c$

Die hier gesuchten Parameter sind nicht Bestandteil dieser Arbeit. Deswegen wird für das Einfachrückstreuungsvermögen  $\omega$  lediglich das Ergebnis der Rechnung eines Zwei-Zustand-Atoms aus [19] angegeben. Es gilt

$$\omega = 1 - \frac{C_{21}}{C_{21} + A_{21} \left(1 - \exp\left(-\frac{h\nu_0}{k_B T}\right)\right)} \tag{4.30}$$

mit der Anregungsrate durch Kollisionen  $C_{21}$ , dem EINSTEINKoeffizienten  $A_{21}$  und der BOLTZMANNkonstante  $k_B$ , der Temperatur  $T$  und der Energie des Grundzustandes  $h\nu_0$ . Für die Wolkenparameter wird angenommen, dass in der Troposphäre

$$q_c \kappa^c = 1 + 0,01 \frac{\text{m}^2}{\text{kg}} \cdot c_{\text{Wolke}} \tag{4.31}$$

gilt, wobei  $c_{\text{Wolke}}$  die Wolkenkonzentration und die angegebenen  $0,01 \frac{\text{m}^2}{\text{kg}}$  einen einstellbaren Parameter darstellen.

<sup>1</sup>Die weggeschnittenen Linienanteile vernachlässigen wir.

## 5 Implementierung des Strahlungsschemas ins KMCM

Das *Kühlungsborn Mechanistic general Circulation Model* wurde in der Programmiersprache FORTRAN77 und FORTRAN90 geschrieben. Der Strahlungstransport, wie er in den Kapiteln 2 und 3 beschrieben wird, ist größtenteils durch Dr. Rahel Knöpfel und Prof. Dr. Erich Becker implementiert worden. Allerdings konnten durch die Wahl der Parameter keine Sättigungseffekte bei Erhöhung des CO<sub>2</sub>-Gehaltes festgestellt werden. Aus diesem Grund haben wir sowohl den Strahlungsansatz als auch die Strahlungsparameter modifiziert und Nebenbedingungen konkretisiert. Im Folgenden wird beschrieben, wie sowohl der langwellige Strahlungstransport als auch die einzelnen Parameter ins KMCM implementiert werden.

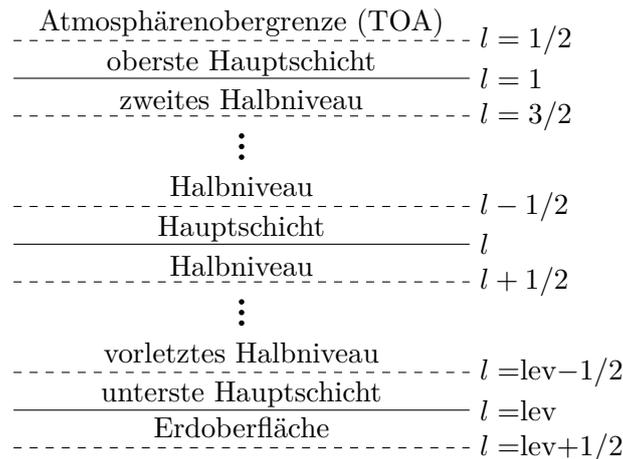
Die Parameter, die wir im vorherigen Kapitel 4 gefunden haben, werden in die Datei `radpar.f` eingetragen. Des Weiteren müssen die Dateien `radiation.f` und `zobukb.f` ergänzt werden, da wir nun mit sechs statt mit vier langwelligen Absorptionsbanden rechnen.

### 5.1 Diskretisierung

Der Strahlungstransport wird im KMCM mit Hilfe der Gleichungen 3.41a, 3.41b, 3.42a und 3.42b berechnet. Das gekoppelte Differentialgleichungssystem muss zur numerischen Berechnung diskretisiert werden. Dazu unterteilen wir die Atmosphäre in 70 Druckniveauschichten auf. Zur Lösung benutzen wir das implizite EULER-Verfahren und berechnen nacheinander die Lösungen der einzelnen Differentialgleichungen. Das Verfahren wird wiederholt, so dass die Lösungen konvergieren. Die konkrete Implementierung wird im Folgenden beschrieben.

#### 5.1.1 Halbniveaus

Die Atmosphäre wird in isobare Niveauschichten unterteilt. Prognostische Variablen wie die horizontalen Windgeschwindigkeiten  $u, v$  oder die Temperatur  $T$  werden auf den ganzzahligen Niveaustufen  $l$  berechnet [39]. Diagnostische Variablen wie zum Beispiel  $U^k$  und  $D^k$  werden auf Halbniveaus  $l \pm 1/2$  bestimmt.



**Abbildung 18:** Aufbau der diskretisierten Atmosphäre in Haupt- und Halbniveaus.

Für jedes Niveau  $l$  müssen die Ableitungen  $\left. \frac{dX^k}{dp} \right|_l$  bzw.  $\left. \frac{dx^k}{dp} \right|_l$  mit  $X = U, D$  und  $x = u, d$  berechnet werden. Die Niveaus werden von der höchsten betrachteten Atmosphärenschicht (Thermosphäre) ( $l = 1 - 1/2 = 1/2 \equiv p_{\text{TOA}}$ ) bis zum Boden ( $l = \text{lev} + 1/2 \equiv p_s$ ) durchnummeriert.

### 5.1.2 Implizites Euler-Verfahren

Zur Lösung der Strahlungstransportgleichungen muss das gekoppelte Differentialgleichungssystem mit den Gleichungen 3.41 und 3.42 gelöst werden. Dieses hat die Form

$$\begin{aligned} \frac{dU^k}{dp} &= f_1(U^k, D^k, u^k, d^k; \bar{\omega}^k, \bar{\kappa}^k, B^k, y^k) \quad , \\ \frac{dD^k}{dp} &= f_2(U^k, D^k, u^k, d^k; \bar{\omega}^k, \bar{\kappa}^k, B^k, y^k) \quad , \\ \frac{du^k}{dp} &= f_3(U^k, D^k, u^k, d^k; \bar{\omega}^k, \bar{\kappa}^k, B^k, y^k) \quad , \\ \frac{dd^k}{dp} &= f_4(U^k, D^k, u^k, d^k; \bar{\omega}^k, \bar{\kappa}^k, B^k, y^k) \quad . \end{aligned} \tag{5.1}$$

Zu Beginn der numerischen Berechnung besitzt nur die nach oben gerichtete Bestrahlungsstärke  $U^k$  einen von Null verschiedenen Wert. Wir gehen davon aus, dass die Erde wie ein schwarzer Körper bei der Temperatur  $T_s$  emittiert. Die Anfangswerte des Differentialgleichungssystems 5.1 lauten demnach

$$U^k(p_s) = (U^k)_{\text{lev}+1/2} = \pi B^k(T_s) \tag{5.2a}$$

$$D^k(p_{\text{TOA}}) = (D^k)_{1/2} = 0 \frac{\text{W}}{\text{m}^2} \tag{5.2b}$$

$$U^k(p < p_s) = (U^k)_{l+1/2} = 0 \frac{\text{W}}{\text{m}^2} \quad , \text{ für } l = 0, 1, \dots, \text{lev} - 1 \tag{5.2c}$$

$$D^k(p > p_{\text{TOA}}) = (D^k)_{l+1/2} = 0 \frac{\text{W}}{\text{m}^2} \quad , \text{ für } l = 1, 2, \dots, \text{lev} \tag{5.2d}$$

$$u^k(p) = (u^k)_{l+1/2} = 0 \frac{\text{W}}{\text{m}^2} \quad , \text{ für } l = 0, 1, \dots, \text{lev} \tag{5.2e}$$

$$d^k(p) = (d^k)_{l+1/2} = 0 \frac{\text{W}}{\text{m}^2} \quad , \text{ für } l = 0, 1, \dots, \text{lev} \quad . \tag{5.2f}$$

Wie in den Gleichungen 3.53 angegeben, bilden die Gleichungen 5.2a und 5.2b Randbedingungen des Differentialgleichungssystems, die bei jeder Iteration bestehen bleiben.

$U^k$  und  $u^k$  werden von der Erdoberfläche zum oberen Ende der Atmosphäre<sup>1</sup> iterativ gefunden. Umgekehrt integrieren wir  $D^k$  bzw.  $d^k$  von oben nach unten. Die nicht-äquidistanten Stützstellen für die Lösung des Differentialgleichungssystems sind  $p_l$  mit  $l = 1, 2, \dots, \text{lev}$ . Mit Hilfe eines expliziten EULER-Verfahrens<sup>2</sup> ließe sich das Differentialgleichungssystem 5.1 iterativ nach

<sup>1</sup>Wird auf Englisch mit top of the atmosphere (TOA) bezeichnet.

<sup>2</sup>Dieses kann aus der Näherung der Ableitung  $f'(x)$  einer Funktion  $f(x)$  entwickelt werden. Es gilt  $f'(x_k) \approx \frac{f(x_{k+1}) - f(x_k)}{x_{k+1} - x_k} = \frac{f(x_{k+1}) - f(x_k)}{\Delta x_k} \Rightarrow f(x_{k+1}) \approx f(x_k) + f'(x_k) \cdot \Delta x_k$ .

$$\begin{aligned}
(U^k)_{l-\frac{1}{2}} &= (U^k)_{l+\frac{1}{2}} - \Delta p_l \cdot f_{1,l+\frac{1}{2}} \quad , \\
&\quad \text{mit } l = \text{lev}, \text{lev} - 1, \dots, 1 \\
(u^k)_{l-\frac{1}{2}} &= (u^k)_{l+\frac{1}{2}} - \Delta p_l \cdot f_{2,l+\frac{1}{2}} \quad , \\
&\quad \text{mit } l = \text{lev}, \text{lev} - 1, \dots, 1 \\
(D^k)_{l+\frac{1}{2}} &= (D^k)_{l-\frac{1}{2}} + \Delta p_l \cdot f_{3,l-\frac{1}{2}} \quad , \\
&\quad \text{mit } l = 1, 2, \dots, \text{lev} \\
(d^k)_{l+\frac{1}{2}} &= (d^k)_{l-\frac{1}{2}} + \Delta p_l \cdot f_{4,l-\frac{1}{2}} \quad , \\
&\quad \text{mit } l = 1, 2, \dots, \text{lev}
\end{aligned} \tag{5.3}$$

mit  $f_{i,l+\frac{1}{2}} = f_i((U^k)_{l+\frac{1}{2}}, (D^k)_{l+\frac{1}{2}}, (u^k)_{l+\frac{1}{2}}, (d^k)_{l+\frac{1}{2}}; (\bar{\omega}^k)_l, (\bar{\kappa}^k)_l, B_l^k, y_l^k)$ ,  $i = 1, 2, 3, 4$  und  $\Delta p_l = (p_{l+\frac{1}{2}} - p_{l-\frac{1}{2}})$  lösen. Wir entscheiden uns jedoch für das numerisch stabilere [40] implizite EULER-Verfahren. Dieses lautet

$$\begin{aligned}
(U^k)_{l-\frac{1}{2}} &= (U^k)_{l+\frac{1}{2}} - \Delta p_l \cdot f_{1,l-\frac{1}{2}} \quad , \\
&\quad \text{mit } l = \text{lev}, \text{lev} - 1, \dots, 1 \\
(u^k)_{l-\frac{1}{2}} &= (u^k)_{l+\frac{1}{2}} - \Delta p_l \cdot f_{2,l-\frac{1}{2}} \quad , \\
&\quad \text{mit } l = \text{lev}, \text{lev} - 1, \dots, 1 \\
(D^k)_{l+\frac{1}{2}} &= (D^k)_{l-\frac{1}{2}} + \Delta p_l \cdot f_{3,l+\frac{1}{2}} \quad , \\
&\quad \text{mit } l = 1, 2, \dots, \text{lev} \\
(d^k)_{l+\frac{1}{2}} &= (d^k)_{l-\frac{1}{2}} + \Delta p_l \cdot f_{4,l+\frac{1}{2}} \quad , \\
&\quad \text{mit } l = 1, 2, \dots, \text{lev} \quad .
\end{aligned} \tag{5.4}$$

Da die Funktionen  $f_{\{1,2,3,4\}}$  linear in den gesuchten Größen  $((U^k)_{l-\frac{1}{2}}, (u^k)_{l-\frac{1}{2}}, (D^k)_{l+\frac{1}{2}}, (d^k)_{l+\frac{1}{2}})$  sind, muss trotz des impliziten EULER-Verfahrens nach jeder Iteration kein Gleichungssystem gelöst werden. Wir erhalten also<sup>1</sup>

$$\begin{aligned}
(U^k)_{l-\frac{1}{2}} &= (U^k)_{l+\frac{1}{2}} - \Delta p_l \cdot f_1 \left( (U^k)_{l-\frac{1}{2}}, (D^k)_{l-\frac{1}{2}}, (u^k)_{l-\frac{1}{2}}, (d^k)_{l-\frac{1}{2}} \right) \quad , \\
&\quad \text{mit } l = \text{lev}, \text{lev} - 1, \dots, 1 \\
(u^k)_{l-\frac{1}{2}} &= (u^k)_{l+\frac{1}{2}} - \Delta p_l \cdot f_2 \left( (U^k)_{l-\frac{1}{2}}, (D^k)_{l-\frac{1}{2}}, (u^k)_{l-\frac{1}{2}}, (d^k)_{l-\frac{1}{2}} \right) \quad , \\
&\quad \text{mit } l = \text{lev}, \text{lev} - 1, \dots, 1 \\
(D^k)_{l+\frac{1}{2}} &= (D^k)_{l-\frac{1}{2}} + \Delta p_l \cdot f_3 \left( (U^k)_{l+\frac{1}{2}}, (D^k)_{l+\frac{1}{2}}, (u^k)_{l+\frac{1}{2}}, (d^k)_{l+\frac{1}{2}} \right) \quad , \\
&\quad \text{mit } l = 1, 2, \dots, \text{lev} \\
(d^k)_{l+\frac{1}{2}} &= (d^k)_{l-\frac{1}{2}} + \Delta p_l \cdot f_4 \left( (U^k)_{l+\frac{1}{2}}, (D^k)_{l+\frac{1}{2}}, (u^k)_{l+\frac{1}{2}}, (d^k)_{l+\frac{1}{2}} \right) \quad , \\
&\quad \text{mit } l = 1, 2, \dots, \text{lev} \quad .
\end{aligned} \tag{5.5}$$

<sup>1</sup>Wir verzichten auf die explizite Angabe von  $(\bar{\omega}^k)_l, (\bar{\kappa}^k)_l, B_l^k$  und  $y_l^k$  in  $f(\dots)$ .

### 5.1.3 Iterationsvorschrift

Beim entwickelten Strahlungstransportschema handelt es sich um ein lineares Differentialgleichungssystem 1. Ordnung, weshalb wir in die Gleichungen 5.5 die entsprechenden Terme einsetzen ( $f_i(\dots)$  ersetzen) und nach  $(U^k)_{l-\frac{1}{2}}$ ,  $(u^k)_{l-\frac{1}{2}}$ ,  $(D^k)_{l+\frac{1}{2}}$  sowie  $(d^k)_{l+\frac{1}{2}}$  umstellen können. Die Rechnung befindet sich im Anhang A.12. Das Ergebnis lautet

$$\begin{aligned}
(U^k)_{l-\frac{1}{2}} &= \text{facA}_l (U^k)_{l+\frac{1}{2}} - \text{facC}_l c_l (D^k)_{l-\frac{1}{2}} \\
&\quad - \text{facE}_l \mathcal{D}_l \pi y_l^k (u^k)_{l-\frac{1}{2}} - \text{facC}_l \mathcal{D}_l \pi y_l^k (d^k)_{l-\frac{1}{2}} + c_l \text{UKT}_l \\
(u^k)_{l-\frac{1}{2}} &= \text{facA}_l (u^k)_{l+\frac{1}{2}} - \text{facC}_l c_l (d^k)_{l-\frac{1}{2}} \\
&\quad - \text{facE}_l \frac{(U^k)_{l-\frac{1}{2}}}{\pi y_l^k} - \text{facC}_l \frac{(D^k)_{l-\frac{1}{2}}}{\pi y_l^k} + \frac{\text{UKT}_l}{\pi y^k} \\
(D^k)_{l+\frac{1}{2}} &= \text{facA}_l (D^k)_{l-\frac{1}{2}} - \text{facC}_l c_l (U^k)_{l+\frac{1}{2}} \\
&\quad - \text{facE}_l \mathcal{D}_l \pi y_l^k (d^k)_{l+\frac{1}{2}} - \text{facC}_l \mathcal{D}_l \pi y_l^k (u^k)_{l+\frac{1}{2}} + c_l \text{UKT}_l \\
(d^k)_{l+\frac{1}{2}} &= \text{facA}_l (d^k)_{l-\frac{1}{2}} - \text{facC}_l c_l (u^k)_{l+\frac{1}{2}} \\
&\quad - \text{facE}_l \frac{(D^k)_{l+\frac{1}{2}}}{\pi y_l^k} - \text{facC}_l \frac{(U^k)_{l+\frac{1}{2}}}{\pi y_l^k} + \frac{\text{UKT}_l}{\pi y^k}
\end{aligned} \tag{5.6}$$

mit

$$\begin{aligned}
\mathcal{A}_l &= \frac{7}{4} - (\bar{\omega}^k)_l \\
\mathcal{B}_l &= \frac{1}{4} - (\bar{\omega}^k)_l \\
\mathcal{C}_l &= 2\pi[1 - (\bar{\omega}^k)_l] \\
\mathcal{D}_l &= \coth(2\pi y_l^k) - 1 \\
\text{facA}_l &= \left[ 1 + \frac{q\Delta p_l}{g} \cdot \mathcal{A}_l (\bar{\kappa}_+^k)_l \right]^{-1} \\
\text{facC}_l &= \text{facA}_l \frac{q\Delta p_l}{g} \mathcal{B}_l (\bar{\kappa}^k)_l \\
\text{facE}_l &= \text{facA}_l \frac{q\Delta p_l}{g} \mathcal{A}_l (\bar{\kappa}^k)_l \\
c_l &= \left( 1 + \frac{\kappa^c}{(\bar{\kappa}^k)_l} \right) \\
\text{UKT}_l &= \text{facA}_l \frac{\Delta p_l}{g} \mathcal{C}_l (\bar{\kappa}^k)_l B_l^k \quad .
\end{aligned} \tag{5.7}$$

## 5.2 Ausschnitte aus dem KMCM Quelltext

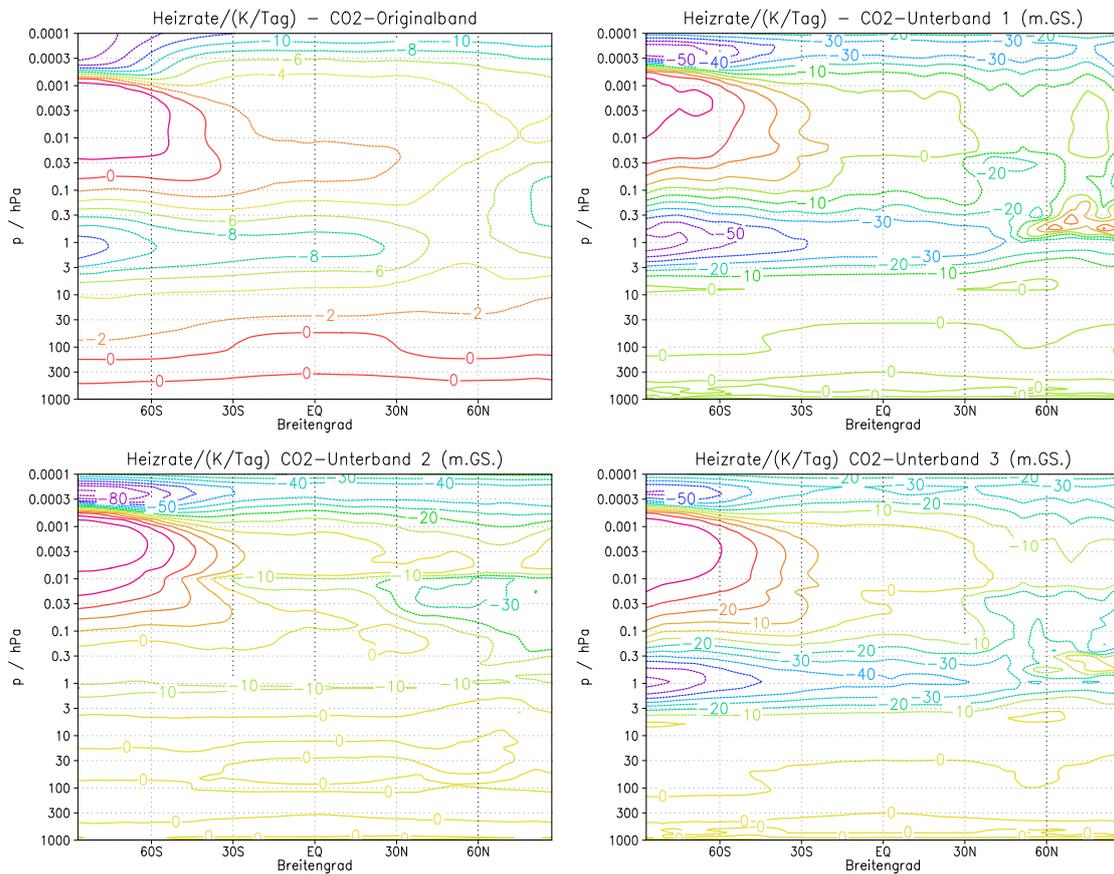
Ausschnitte aus den Quelltexten für die Parameterangabe und den Strahlungstransport befinden sich im Anhang A.13 und A.14.

## 6 Ergebnisse des Strahlungsschemas

In diesem Kapitel präsentieren wir die Ergebnisse, die man nach einer Modifizierung des KMCM und nach der Parametereingabe erhält. Die Modellberechnungen finden ohne Rückkopplung ins dynamische System für einen Modelltag mit Januarbedingungen statt.

### 6.1 Vergleich der CO<sub>2</sub>-Heizraten

Wir beginnen die Validierung des modifizierten Strahlungstransportschemas, indem die CO<sub>2</sub>-Heizraten aus der neuen Version mit den ursprünglichen Resultaten aus KMCM verglichen werden. In Abbildung 19 sind oben links die zonal gemittelten Heizraten nach der alten Methode abgebildet. Diese stimmen gut mit Ergebnissen aus zum Beispiel [41] überein. Die Atmosphäre kühlt sich in der Stratopausenregion ( $p \approx 1$  hPa) um bis zu 10 K/Tag ab und erwärmt sich leicht in der Sommermesosphäre ( $80^\circ\text{S}$ ,  $p \approx 10^{-2}$  hPa). Im Vergleich dazu erhalten wir mit dem angepassten Schema Abkühlungsraten, die um einen Faktor 10 größer sind. Noch größer wird der Unterschied, wenn man die Heizraten der drei Absorptionsbanden addiert. Die Heizraten in der Troposphäre sind in beiden Modellversionen ähnlich.



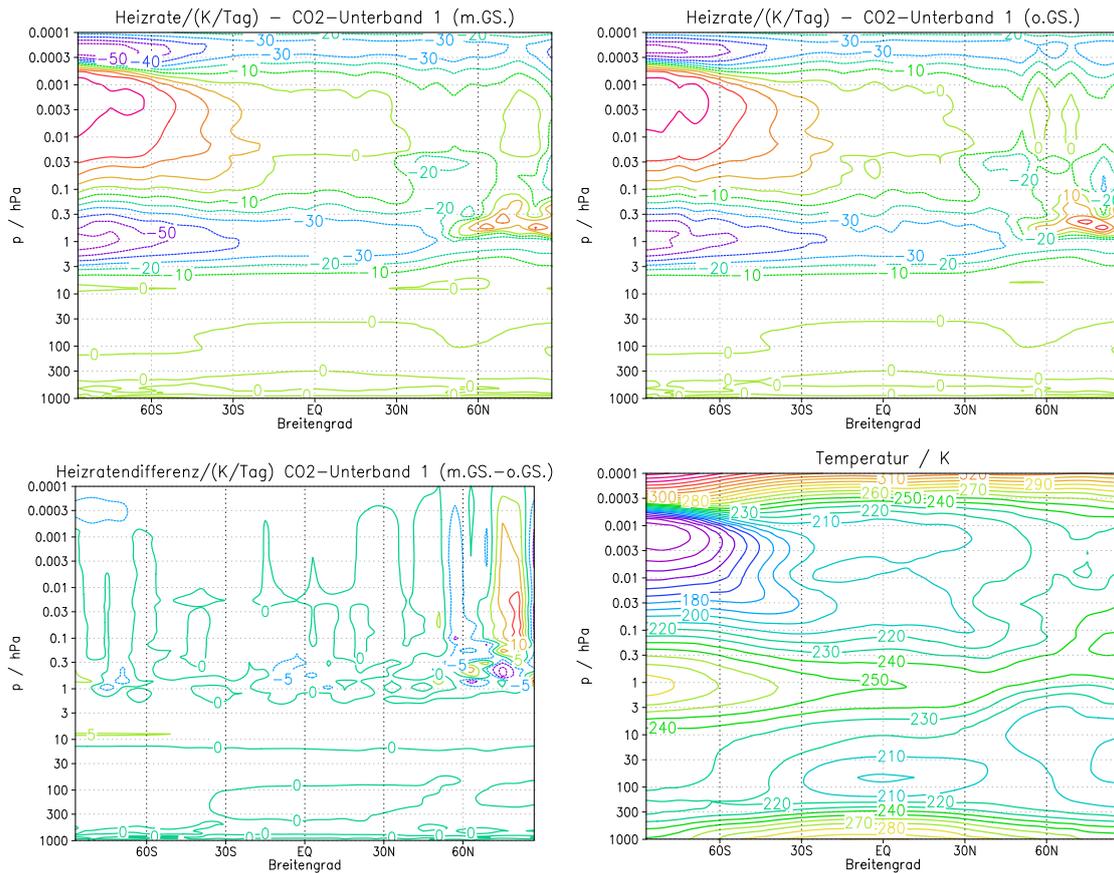
**Abbildung 19:** Vergleich der Heizraten für Januarbedingungen in der  $15\mu\text{m}$ -CO<sub>2</sub>-Bande. Oben links: ursprüngliches Ergebnis aus dem KMCM. Oben rechts, unten links und unten rechts: Heizraten in den drei CO<sub>2</sub>-Absorptionsbanden mit Parameterwerten aus HITRAN (siehe Tabellen 2 und 3).

Obwohl wir die Wahl aller Parameter physikalisch begründet haben, entspricht das Ergebnis nicht unserer Vorstellung. Aus diesem Grund untersuchen wir zunächst den Einfluss

des Graueitsparameters und der Graueitsschranke auf die Resultate und betrachten im Anschluss daran noch einmal den bandgemittelten Massenabsorptionskoeffizienten.

## 6.2 Einfluss der Graueitsschranke auf CO<sub>2</sub>-Heizraten

Wir haben in Gleichung 3.40 eine sogenannte Graueitsschranke eingeführt. Die Abbildungen 20 und 21 zeigen, welchen Einfluss diese im Strahlungstransportmodell auf die Heizraten und Bestrahlungsstärken besitzt. Für alle verbliebenen Untersuchungen konzentrieren wir uns auf die linke CO<sub>2</sub>-Unterbande (Unterbande 1).<sup>1</sup>



**Abbildung 20:** Vergleich der Heizraten für Januarbedingungen in der linken 15µm-CO<sub>2</sub>-Unterbande. Oben links: mit Graueitsschranke. Oben rechts: ohne Graueitsschranke. Unten links: Differenz der Heizraten  $Q_4(\text{mit GS.}) - Q_4(\text{ohne GS.})$ . Unten rechts: Temperaturverteilung.

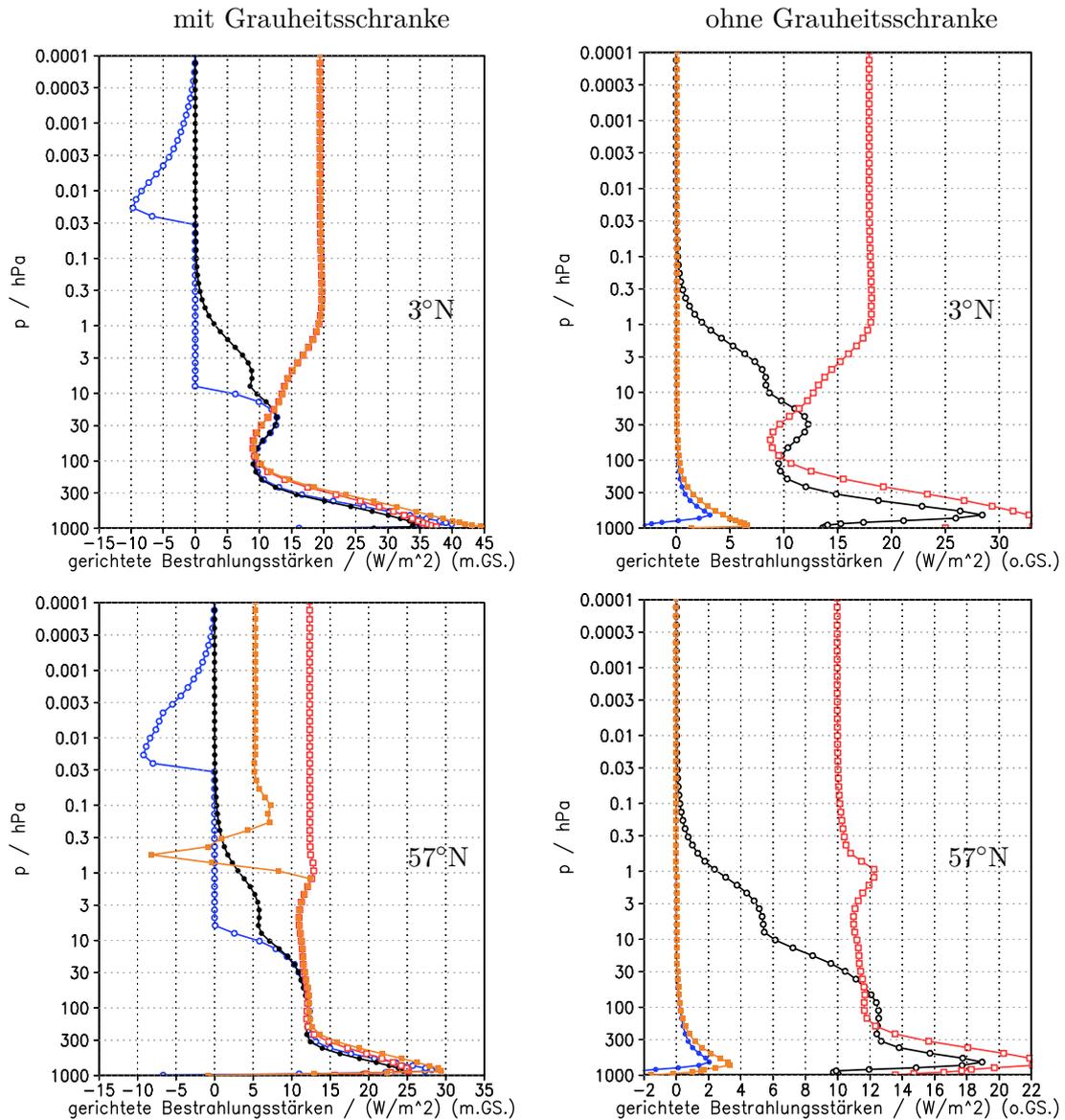
Nur in der Polarregion auf der Nordhalbkugel unterscheiden sich die Heizraten beider Varianten signifikant voneinander. Die Differenzen treten wahrscheinlich aufgrund numerischer Ungenauigkeiten auf. Aus der Betrachtung der Heizraten können wir nicht schlussfolgern, ob die Berechnung mit oder ohne Graueitsschranke zu bevorzugen ist.

Im nächsten Schritt untersuchen wir die Unterschiede bei den gerichteten Bestrahlungsstärken  $U^k$  und  $D^k$  sowie den Abweichungsamplituden  $u^k$  und  $d^k$ . In Abbildung 20 sieht man auf der linken Seite die Ergebnisse mit und auf der rechten Seite ohne Graueitsschranke jeweils bei 3°N und 57°N. Wie wir bereits in Abschnitt 3.9 am Rechenbeispiel gesehen haben, ist der größte Unterschied bei den Abweichungsamplituden zu sehen. Dies

<sup>1</sup>Dabei behalten wir die allgemeine Schreibweise der bandspezifischen physikalischen Größen mit einem hochgestellten  $k$  bei, auch wenn sich einige Werte auf eine bestimmte Bande beziehen. Welche Bande gemeint ist, wird im Text verdeutlicht.

hängt jedoch nur mit der unterschiedlichen Skalierung zusammen. Bei den Abbildungen, die mit der Graueitsschranke entstanden sind, lässt sich gut erkennen, wie sich mit wachsender Entfernung von der Erdoberfläche die negativen Abweichungsamplituden den Bestrahlungsstärken nähern ( $-u^k \rightarrow U^k$  und  $-d^k \rightarrow D^k$ ). Wenn die untere Schranke aus Gleichung 3.51 oder 3.52 erreicht wird, bedeutet dies, dass die gesamte Strahlung, die absorbiert werden kann, absorbiert wurde.

Auch aus dieser Abbildung lässt sich keine Präferenz entwickeln, weshalb wir letztendlich mit der Graueitsschranke weiterrechnen werden.

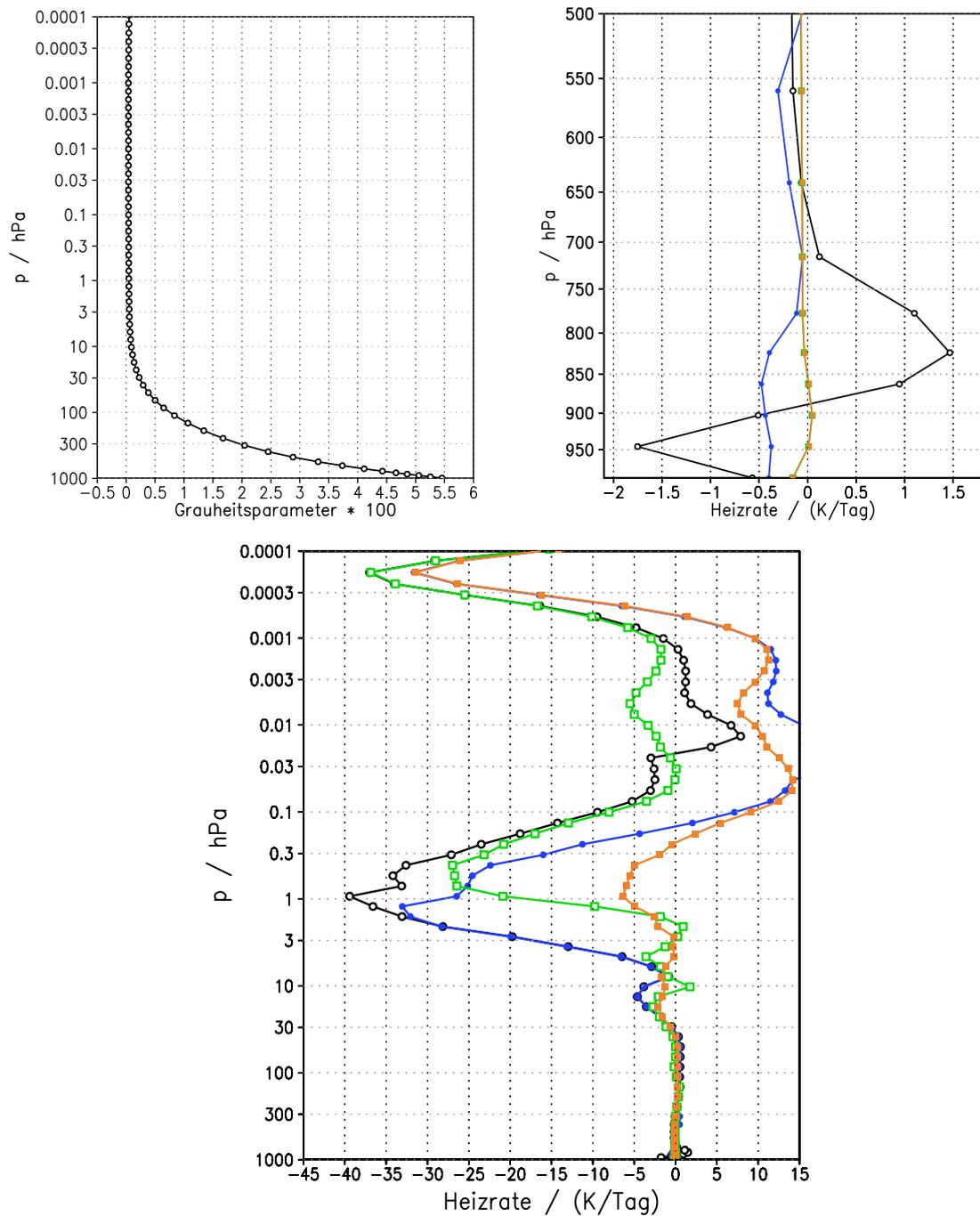


**Abbildung 21:** Vergleich der gerichteten Bestrahlungsstärken für Januarbedingungen in der linken  $15\mu\text{m}$ - $\text{CO}_2$ -Unterbande. Oben: zonale Mittelungen bei  $3^\circ\text{N}$ . Unten: zonale Mittelungen bei  $57^\circ\text{N}$ . Links: mit Graueitsschranke. Rechts: ohne Graueitsschranke. Zu sehen sind:  $D^k$  (schwarz),  $-d^k$  (blau),  $U^k$  (rot) und  $-u^k$  (orange).

### 6.3 Abhängigkeit vom Graueitsparameter $y^k$

Das Hauptanliegen dieser Arbeit ist es, langwelligen Strahlungstransport bei kleinen Graueitsparametern zu berechnen. Aus diesem Grund betrachten wir in Abbildung 22 den

Einfluss des Graueitsparameters  $y^k$  auf die Heizrate. Der Graueitsparameter der linken  $\text{CO}_2$ -Unterbande fällt bereits innerhalb von 20 km über der Erdoberfläche von ca.  $5,5 \cdot 10^{-2}$  bis auf  $5 \cdot 10^{-4}$ . Die Absorptionslinien von  $\text{CO}_2$  sind demnach ab der Stratosphäre sehr schmal und besitzen kaum Überlappung. Erhöht man künstlich den Graueitsparameter, so simuliert man damit eine Ausweitung und stärkere Überschneidung der einzelnen Linien. Der Einfluss auf die Heizrate wird im rechten und unteren Teil der Abbildung 22 verdeutlicht. Der Graueitsparameter wurde von  $y^k$  (schwarz) auf  $2y^k$  (blau),  $10y^k$  (grün) und  $100y^k$  (orange) erhöht.



**Abbildung 22:** Vergleich der Heizraten für Januarbedingungen in der linken  $15\mu\text{m}$ - $\text{CO}_2$ -Unterbande in Abhängigkeit vom Grauheitsparameter ( $y^k$  (schwarz),  $2y^k$  (blau),  $10y^k$  (grün),  $100y^k$  (orange)) bei  $3^\circ\text{N}$ . Oben links: aus HITRAN abgeleiteter Grauheitsparameter (siehe Tabelle 2) mit entsprechender Druckabhängigkeit. Oben rechts: Heizraten in der unteren Troposphäre in Abhängigkeit vom Grauheitsparameter. Unten: Heizraten bis in die Thermosphäre in Abhängigkeit vom Grauheitsparameter.

Mit steigendem Graueitsparameter sinkt die Abkühlungsrate (negative Heizrate) in der Stratopausenregion und erreicht zur ursprünglichen KMCM-Version vergleichbare Werte ( $\sim 10$  K/Tag). Allerdings steigt für größere Graueitsparameter die Heizrate in der Mesosphäre auf über 10 K/Tag. Ein zu kleiner Graueitsparameter kann also nicht alleiniger Verursacher der Abweichung sein, wie wir sie in Abschnitt 6.1 gesehen haben. Aus diesem Grund betrachten wir noch einmal den bandgemittelten Massenabsorptionskoeffizienten und die Näherung einer ELSASSERbande.

#### 6.4 Cooling-to-space-Näherung

Als Diagnosewerkzeug zur Untersuchung der Parameter benutzen wir die Abkühlungsrate in den Weltraum (cooling-to-space). Sie wird in der mittleren Atmosphäre nach [42] aus

$$\frac{\delta T}{\delta t}(z) = -\frac{\pi}{c_p \rho_L(z)} B_r(z) \frac{d\mathbb{T}_{\tilde{\nu}}(z, \infty)}{dz} \quad (6.1)$$

bzw.

$$\frac{\delta T}{\delta t}(p) = -\frac{\pi g}{c_p} B^k(p) \frac{d\mathbb{T}_{\tilde{\nu}}(p, 0)}{dp} \quad (6.2)$$

berechnet. Dabei ist  $c_p$  die spezifische Wärmekapazität von Luft,  $g$  die Gravitationskonstante,  $\rho_L(z)$  die Dichte von Luft in der Höhe  $z$  und  $B_r = B^k = \int_{\tilde{\nu}_1}^{\tilde{\nu}_2} B_{\tilde{\nu}} d\tilde{\nu}$  die im betrachteten Intervall  $\Delta\tilde{\nu}$  integrierte PLANCKfunktion. Für dieses Intervall muss auch die diffuse Transmission

$$\mathbb{T}_{\tilde{\nu}}(z, z', \mu) = \exp\left(-\frac{1}{\mu} \int_z^{z'} \kappa(\tilde{\nu}, p(\tilde{z}), T) \rho_a d\tilde{z}\right) \quad (6.3)$$

bestimmt werden. In Gleichung 6.3 steht  $\mu = \cos(\vartheta)$  für den Kosinus des Zenitwinkels  $\vartheta$ , welcher in unserem Fall im Mittel  $3/5$  betragen soll<sup>1</sup>.  $\kappa$  stellt den Massenabsorptionskoeffizienten und  $\rho_a = q \cdot \rho_L$  die Absorberdichte dar. Für die Ableitung der Transmission in Gleichung 6.1 gilt

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbb{T}_{\tilde{\nu}}(z, \infty)}{dz} &= \frac{d}{dz} \exp\left(-\frac{1}{\mu} \int_z^{\infty} \kappa(\tilde{\nu}, p, T) \rho_a d\tilde{z}\right) \\ &= \exp\left(-\frac{1}{\mu} \int_z^{\infty} \kappa(\tilde{\nu}, p, T) \rho_a d\tilde{z}\right) \frac{d}{dz} \left(-\frac{1}{\mu} \int_z^{\infty} \kappa(\tilde{\nu}, p, T) \rho_a d\tilde{z}\right) \\ &= \exp\left(-\frac{1}{\mu} \int_z^{\infty} \kappa(\tilde{\nu}, p, T) \rho_a d\tilde{z}\right) \left(\frac{1}{\mu} \kappa(\tilde{\nu}, p(z), T(z)) \rho_a\right) \\ &\approx \left(\frac{1}{\mu} \kappa(\tilde{\nu}, p(z), T(z)) q \cdot \rho_L\right) \exp\left(-\frac{1}{\mu} \kappa(\tilde{\nu}, p(z), T(z)) \int_z^{\infty} \rho_a d\tilde{z}\right) \\ &= \left(\frac{1}{\mu} \kappa(\tilde{\nu}, p(z), T(z)) q \cdot \rho_L\right) \exp\left(-\frac{1}{\mu} \kappa(\tilde{\nu}, p(z), T(z)) q \int_z^{\infty} \rho_L d\tilde{z}\right) \\ &= \left(\frac{1}{\mu} \kappa(\tilde{\nu}, p(z), T(z)) q \cdot \rho_L\right) \exp\left(-\frac{1}{\mu} \kappa(\tilde{\nu}, p(z), T(z)) q \int_p^0 \left[-\frac{1}{g}\right] d\tilde{p}\right) \\ &= \left(\frac{1}{\mu} \kappa(\tilde{\nu}, p(z), T(z)) q \cdot \rho_L\right) \exp\left(-\frac{1}{\mu} \kappa(\tilde{\nu}, p(z), T(z)) q \left[\frac{p}{g}\right]\right) . \end{aligned} \quad (6.4)$$

<sup>1</sup>Experimente zeigen, dass dieser Wert eine gute Näherung ist.

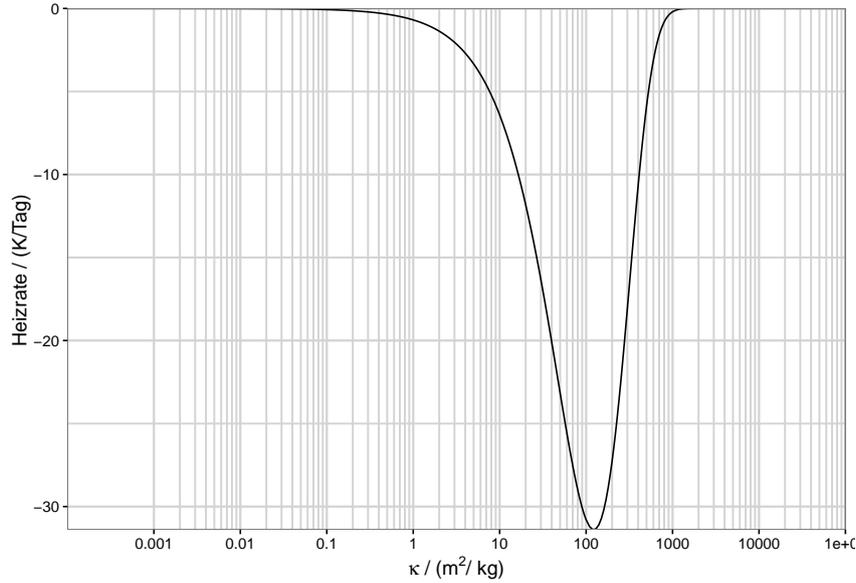
Damit erhalten wir als Abschätzung für Gleichung 6.1 in Abhängigkeit vom Massenabsorptionskoeffizienten  $\kappa$

$$\begin{aligned}\frac{\delta T}{\delta t}(\kappa) &= -\frac{\pi}{c_p \rho_L} B_r \left( \frac{1}{\mu} \kappa q \rho_L \right) \exp\left(-\frac{1}{\mu} \kappa q \frac{p}{g}\right) \\ &= -\frac{\pi}{c_p} \frac{B_r q}{\mu} \kappa \exp\left(-\frac{q p}{\mu g} \kappa\right) \\ &= -a \kappa e^{(-b \kappa)} \quad .\end{aligned}\tag{6.5}$$

Wir wollen die Heizrate  $\frac{\delta T}{\delta t}$  aus Gleichung 6.5 für die linke Unterbande im Wellenzahlbereich  $\tilde{\nu} \in [620 \text{ cm}^{-1}, 667 \text{ cm}^{-1}]$  bei  $p = 1 \text{ hPa}$  und  $T = 240 \text{ K}$  durchführen. Es gilt  $c_p = 1005 \frac{\text{J}}{\text{kg K}}$ ,  $B_r = 3,77 \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \text{sr}}$ ,  $q = 480 \cdot 10^{-6}$ ,  $\mu = \frac{3}{5}$ ,  $g = 9,81 \frac{\text{m}}{\text{s}^2}$ . Die Koeffizienten lauten

$$a = 9,43 \cdot 10^{-6} \quad \text{und} \quad b = 8,15 \cdot 10^{-3} \quad .\tag{6.6}$$

Die Abbildung 23 zeigt den Zusammenhang zwischen mittlerem Massenabsorptionskoeffizienten im betrachteten Intervall und Heizrate. Zwischen  $10 \frac{\text{m}^2}{\text{kg}}$  und  $130 \frac{\text{m}^2}{\text{kg}}$  steigt die Abkühlungsrate rapide an. In diesem Bereich reagiert die Cooling-to-space-Näherung sehr sensibel. Für den aus HITRAN ermittelten bandgemittelten Massenabsorptionskoeffizienten für die linke Unterbande von  $\bar{\kappa}^k = 56,9 \frac{\text{m}^2}{\text{kg}}$  ergibt dies eine Abkühlungsrate in der Stratosphärenregion von ca. 25 K/Tag. (In dieser Rechnung ist die Bande grau.) Dies stimmt gut mit dem Resultat aus Abbildung 20 überein.



**Abbildung 23:** Abkühlungsrate durch Cooling-to-space-Näherung bei  $p = 1 \text{ hPa}$  und  $T = 240 \text{ K}$ . Das Wellenzahlintervall lautet  $[620 \text{ cm}^{-1}, 667 \text{ cm}^{-1}]$ .

Zum Vergleich kann das Cooling-to-space mit den tatsächlichen Absorptionslinien berechnet werden. Die Abkühlungsrate wird in `LineByLineCoolingToSpace.R` mit einem Abtastintervall von  $0,005 \text{ cm}^{-1}$  für die linke Unterbande bei  $p = 1 \text{ hPa}$  und  $T = 240 \text{ K}$  berechnet. Als Resultat erhält man

$$\left. \frac{\delta T}{\delta t} \right|_1 = -4,84 \frac{\text{K}}{\text{Tag}} \quad .\tag{6.7}$$

Dieses Ergebnis weicht deutlich von dem einer grauen Bande ab (25 K/Tag). Berechnet man die Cooling-to-space-Näherung für alle drei Unterbanden ( $[620 \text{ cm}^{-1}, 715 \text{ cm}^{-1}]$ ), so erhält man eine Heizrate von

$$\left. \frac{\delta T}{\delta t} \right|_1 + \left. \frac{\delta T}{\delta t} \right|_2 + \left. \frac{\delta T}{\delta t} \right|_3 = -13,0 \frac{\text{K}}{\text{Tag}} \quad (6.8)$$

Die Berechnung bei sehr großer Auflösung führt zu einem akzeptablen Wert. Das bedeutet, dass die ELSASSERformfunktion nicht geeignet ist, um den realen Absorptionskoeffizienten in einem breiten Wellenzahlbereich darzustellen. Damit wir den Ansatz nicht aufgeben müssen, berechnen wir mit unterschiedlichen bandgemittelten Massenabsorptionskoeffizienten  $\bar{\kappa}^k$  die Cooling-to-space-Näherung und wählen aus diesen Ergebnissen ein  $\bar{\kappa}^k$  aus, das die gewünschten Ergebnisse liefert. Die Ergebnisse sind in Tabelle 5 aufgelistet. Daraus erhalten wir als angepassten, bandgemittelten Massenabsorptionskoeffizienten für die linke CO<sub>2</sub>-Unterbande

$$\bar{\kappa}^k = 8,2 \frac{\text{m}^2}{\text{kg}} \quad (6.9)$$

Im letzten Teil dieses Kapitels ersetzen wir in `radpar.f` die Angabe vom bandgemittelten Massenabsorptionskoeffizienten der linken CO<sub>2</sub>-Unterbande und berechnen globale Heizraten und Bestrahlungsstärken für die einfache, doppelte und viervache CO<sub>2</sub>-Konzentration.

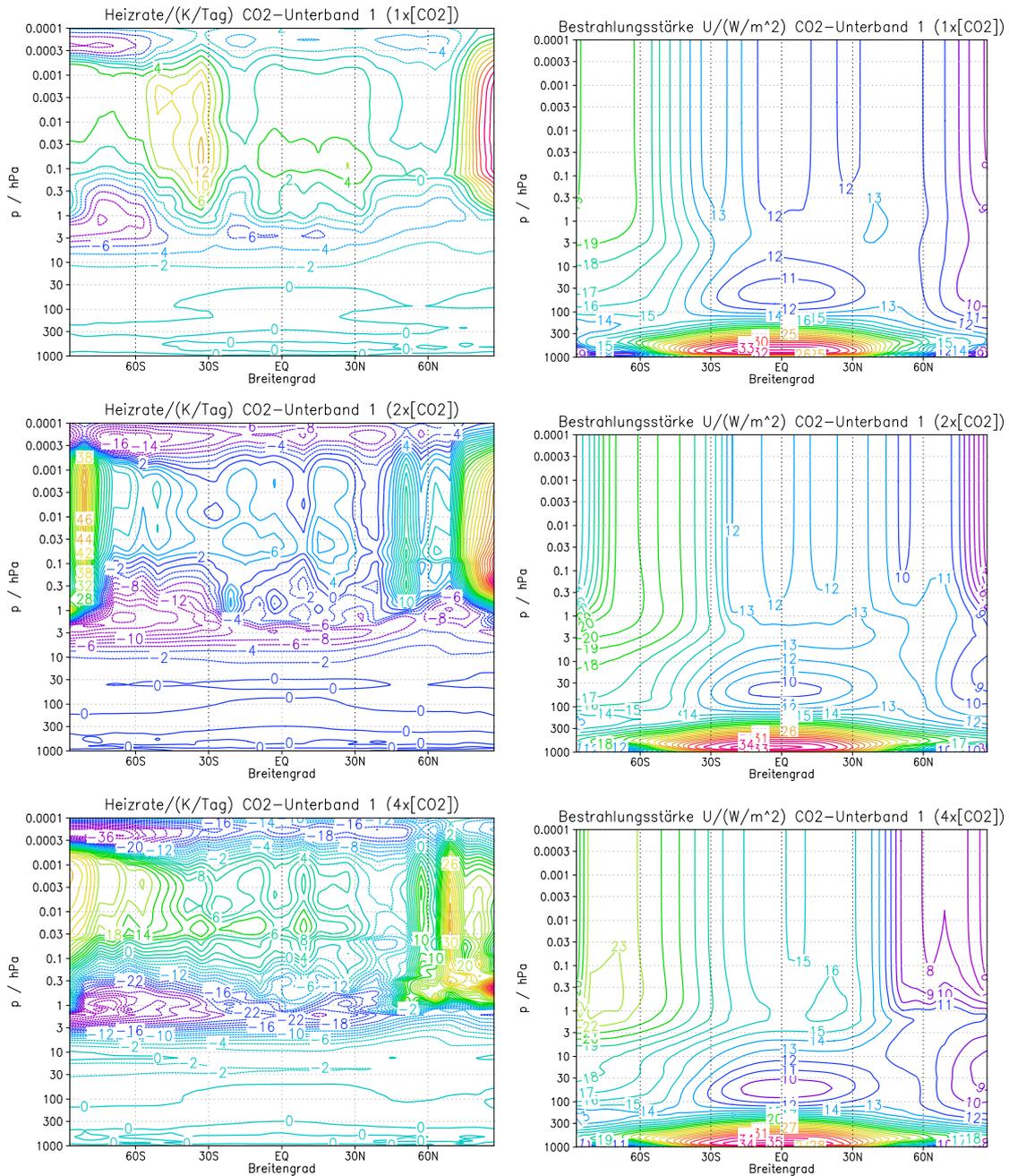
| $\bar{\kappa}^k / \frac{\text{m}^2}{\text{kg}}$ | CTS / (K/Tag) | $\bar{\kappa}^k / \frac{\text{m}^2}{\text{kg}}$ | CTS / (K/Tag) |
|---|---------------|---|---------------|
| 1   | -0,68         | 11  | -6,0          |
| 2   | -1,33         | 12  | -6,5          |
| 3   | -1,95         | 13  | -6,9          |
| 4   | -2,54         | 14  | -7,2          |
| 5   | -3,11         | 15  | -7,6          |
| 6   | -3,66         | 16  | -8,0          |
| 7   | -4,17         | 17  | -8,3          |
| 8   | -4,67         | 18  | -8,6          |
| 9   | -5,15         | 19  | -8,9          |
| 10  | -5,60         | 20  | -9,2          |
|   |               | 57  | -14,7         |

**Tabelle 5:** Heizrate aus Cooling-to-space-Näherung (CTS) in der linken Unterbande von CO<sub>2</sub> bei verschiedenen Massenabsorptionskoeffizienten und für eine ELSASSERformfunktion.

## 6.5 Angepasster Massenabsorptionskoeffizient und Erhöhung des CO<sub>2</sub>-Gehaltes

Der angepasste Massenabsorptionskoeffizient für die linke CO<sub>2</sub>-Unterbande von  $620 \text{ cm}^{-1}$  bis  $667 \text{ cm}^{-1}$  kann benutzt werden, um für die einfache, doppelte und vierfache CO<sub>2</sub>-Konzentration die Heizraten sowie die nach oben gerichteten Bestrahlungsstärken  $U^k$  auszurechnen. Als CO<sub>2</sub>-Konzentration ist im KMCM ein Wert von  $q = 480 \text{ ppmw}$  vorgegeben. Das entspricht einem Volumenmischungsverhältnis von  $x = 316 \text{ ppmv}$ . Das doppelte Volumenmischungsverhältnis läge bei  $x = 632 \text{ ppmv}$  und das vierfache bei  $x = 1264 \text{ ppmv}$ . Die Entwicklung der betrachteten Größen lassen sich in Abbildung 24 betrachten. In der Troposphäre finden wenige Veränderungen statt. Ab der Stratosphäre aufwärts gibt es große Unterschiede bei den Heizraten. Die nach oben gerichteten Bestrahlungsstärken  $U^k$  steigen am oberen Rand, wie zu erwarten war, mit höherer CO<sub>2</sub>-Konzentration an. Sättigungseffekte lassen sich aus diesen Grafiken nicht ablesen. Dies müsste gesondert und

intensiv für die Bestrahlungsstärken untersucht werden. Allerdings haben die vorangegangenen Experimente gezeigt, dass der in dieser Arbeit benutzte Strahlungstransport weiter zu verbessern bleibt.



**Abbildung 24:** Vergleich der bei Heizraten (links) und nach oben gerichteter Bestrahlungsstärke ( $U^k$ ) bei der ursprünglicher CO<sub>2</sub>-Konzentration von 480 ppmw sowie bei 960 ppmw und 1920 ppmw.

## 7 Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit befassten wir uns mit dem Strahlungstransport in der Atmosphäre, wobei die Strahlungswechselwirkung mit  $\text{CO}_2$  im Vordergrund stand. Für die solare Strahlung, die aus Richtung Sonne auf die Erdatmosphäre trifft, kann die Bestrahlungsstärke mit dem BEER-BOUGER-LAMBERTbeschrieben werden, da keine Quellen kurzwelliger Strahlung in der Atmosphäre existieren.

Bei der terrestrischen Strahlung liefert die SCHWARZSCHILDgleichung die Grundlage für die Berechnung der Bestrahlungsstärken. Aus der Divergenz der Bestrahlungsstärken kann anschließend die Heizrate berechnet werden. Mit Hilfe der Näherung einer planparallelen Atmosphäre und der EDDINGTONnäherung haben wir frequenzgemittelte Strahlungstransportgleichungen hergeleitet. Anschließend haben wir das System aus vier gekoppelten Gleichungen für  $U^k$ ,  $D^k$ ,  $u^k$  und  $d^k$  diskretisiert und durch das implizite EULERverfahren numerisch berechenbar gemacht.

Für die Implementierung ins Modell mussten Parameter bestimmt werden. Zu diesen gehörten sowohl der bandgemittelte Massenabsorptionskoeffizient  $\bar{\kappa}^k$  als auch der Graueitsparameter  $y^k$ . Aus der HITRAN-Datenbank haben wir alle notwendigen spektroskopischen Daten entnommen und entsprechend unserer Vorgaben angepasst. Die Daten wurden so gefiltert, dass der Graueitsparameter zusammen mit der ELSASSERformfunktion eine gute Näherung des tatsächlichen wellenzahlabhängigen Massenabsorptionsspektrum ergab.

Zusammen mit den Neuerungen wurden aus KMCM-Daten eines Tages unter Januarbedingungen unter anderem Heizraten und Bestrahlungsstärken ermittelt. Es stellte sich heraus, dass die Werte nicht mit vergleichbaren Modellrechnungen übereinstimmten. Aus diesem Grund haben wir uns mit der Validierung des Strahlungstransportschemas und der Parameter befasst. Wir haben herausgefunden, dass der aus HITRAN gewonnene bandgemittelte Massenabsorptionskoeffizient zusammen mit der ELSASSERformfunktion den tatsächlichen Linienverlauf zu ungenau wiedergibt, so dass die Abkühlungsraten um den Faktor 10 zu groß waren. Daraufhin wurde spektral sehr fein aufgelöst (line-by-line) die Cooling-to-space-Näherung berechnet. Aus dem Vergleich mit den Resultaten des ELSASSERansatzes konnte ein angepasster Massenabsorptionskoeffizient gefunden werden, der bessere Ergebnisse lieferte.

Während der Erstellung dieser Arbeit wurde festgestellt, dass das Differentialgleichungssystem bei kleinen Graueitsparametern und den ermittelten Massenabsorptionskoeffizienten sehr störanfällig ist und die Lösung schnell zu oszillieren beginnt. Deshalb war es wichtig, dass die Randbedingungen korrekt und strikt umgesetzt werden.

In naher Zukunft müssen wir den Effekt der endlichen Linienbreite durch einen effektiven frequenzgemittelten Massenabsorptionskoeffizienten als Funktion des Graueitsparameters parametrisieren. Dazu passen wir die Werte an die Cooling-to-space-Abkühlungsraten im Stratopausenbereich an.

Zusätzlich muss in naher Zukunft die Temperaturabhängigkeit des Absorptionskoeffizienten parametrisiert werden. Im Idealfall lässt sich das gekoppelte Differentialgleichungssystem in zwei gekoppelte Differentialgleichungen umschreiben, die dann noch von einer Funktion  $g(y^k)$  abhängen.

## A Anhang

### A.1 Erdoberflächentemperatur ohne Atmosphäre

Verteilt man die solare Einstrahlung, die senkrecht auf eine Hälfte der Erdkugel also auf eine Kreisscheibe mit dem Radius der Erde trifft, über die gesamte Erdoberfläche, erhält man

$$\begin{aligned} S_0 \cdot A_{\text{Kreisscheibe}} &= S_{\text{Erde}} \cdot A_{\text{Erdoberfläche}} \\ S_0 \cdot \pi r_E^2 &= S_{\text{Erde}} \cdot 4\pi r_E^2 \\ \Rightarrow S_{\text{Erde}} &= \frac{S_0}{4} \approx 340,2 \frac{\text{W}}{\text{m}^2} . \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

Nach dem STEFAN-BOLTZMANN-Gesetz 1.1 erhält man damit eine Temperatur von

$$\begin{aligned} P/A &= \sigma T^4 = S_{\text{Erde}} \\ \Rightarrow T &= \left( \frac{S_{\text{Erde}}}{\sigma} \right)^{\frac{1}{4}} \approx 278,3 \text{ K} \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

### A.2 Umrechnungstabelle Wellenzahl - Wellenlänge - Frequenz

Die folgende Tabelle 6 soll die Umwandlung gegebener spektroskopischer Größen in eine andere Domäne erleichtern. Im Allgemeinen wird sichtbares Licht zwischen  $0,38 \mu\text{m}$  und  $0,78 \mu\text{m}$  eingeordnet [6]. Im Spektrum folgt danach die Infrarotstrahlung bis  $10^2 \mu\text{m}$ .

| Wellenzahl / $\text{cm}^{-1}$ | Wellenlänge / $\mu\text{m}$ | Frequenz / THz |
|-------------------------------|-----------------------------|----------------|
| 200                           | 50,00                       | 6,00           |
| 400                           | 25,00                       | 11,99          |
| 600                           | 16,67                       | 17,99          |
| 610                           | 16,39                       | 18,29          |
| 620                           | 16,13                       | 18,59          |
| 630                           | 15,87                       | 18,89          |
| 640                           | 15,63                       | 19,19          |
| 650                           | 15,38                       | 19,49          |
| 660                           | 15,15                       | 19,79          |
| 670                           | 14,93                       | 20,09          |
| 680                           | 14,71                       | 20,39          |
| 690                           | 14,49                       | 20,69          |
| 700                           | 14,29                       | 20,99          |
| 710                           | 14,08                       | 21,29          |
| 720                           | 13,89                       | 21,59          |
| 800                           | 12,50                       | 23,98          |
| 1000                          | 10,00                       | 29,98          |
| 2000                          | 5,00                        | 59,96          |
| 4000                          | 2,50                        | 119,92         |
| 8000                          | 1,25                        | 239,83         |
| 16000                         | 0,63                        | 479,67         |

**Tabelle 6:** Tabelle mit häufig vorkommenden Wellenzahlen sowie deren Entsprechungen im Wellenlängen- und Frequenzraum. Die Abkürzung T steht für Tera =  $10^{12}$ .

### A.3 Planckfunktion im Wellenlängen- und Wellenzahlraum

Die PLANCKfunktion im Frequenzraum lautet

$$B_{\tilde{\nu}}(T) = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{\exp\left(\frac{h\nu}{k_B T}\right) - 1} \quad . \quad (\text{A.3})$$

Für die Umrechnung gilt

$$\begin{aligned} B_{\nu}(T) \, d\nu &= B_{\lambda}(T) \, d\lambda \\ \Rightarrow B_{\lambda}(T) &= \left| \frac{d\nu}{d\lambda} \right| B_{\nu}(T) \\ &= \frac{c}{\lambda^2} \frac{2h(c/\lambda)^3}{c^2} \frac{1}{\exp\left(\frac{h(c/\lambda)}{k_B T}\right) - 1} \\ &= \frac{2hc^2}{\lambda^5} \frac{1}{\exp\left(\frac{hc}{\lambda k_B T}\right) - 1} \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

und analog

$$\begin{aligned} B_{\nu}(T) \, d\nu &= B_{\tilde{\nu}}(T) \, d\tilde{\nu} \\ \Rightarrow B_{\tilde{\nu}}(T) &= \left| \frac{d\nu}{d\tilde{\nu}} \right| B_{\nu}(T) \\ &= c \frac{2h(c\tilde{\nu})^3}{c^2} \frac{1}{\exp\left(\frac{hc\tilde{\nu}}{k_B T}\right) - 1} \\ &= 2hc^2 \tilde{\nu}^3 \frac{1}{\exp\left(\frac{hc\tilde{\nu}}{k_B T}\right) - 1} \quad . \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

### A.4 Legendrepolynome

Polynome, die auf dem Intervall  $L = [-1, 1]$  die Relation

$$\int_{-1}^1 P_n(x) P_m(x) \, dx = 0 \quad (\text{A.6})$$

für  $m, n \in \mathbb{N}_0$ ,  $m \neq n$  sowie  $P_n(1) = 1$  erfüllen, werden (orthogonale) LEGENDREpolynome genannt, sofern sie die LEGENDREDifferentialgleichung

$$(1 - x^2)P''(x) - 2xP'(x) + n(n+1)P(x) = 0 \quad , \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad (\text{A.7})$$

lösen. Die ersten LEGENDREpolynome lauten

$$\begin{aligned} P_0(x) &= 1 \\ P_1(x) &= x \\ P_2(x) &= \frac{1}{2}(3x^2 - 1) \quad . \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Weiter existieren sogenannte zugeordnete LEGENDREpolynome  $P_l^{(m)}(x)$ , welche die folgende Differentialgleichung lösen

$$(1 - x^2) \frac{d^2 P_l^{(m)}(x)}{dx^2} - 2x \frac{d P_l^{(m)}(x)}{dx} + \left( l(l+1) - \frac{m^2}{1-x^2} \right) P_l^{(m)}(x) = 0 \quad . \quad (\text{A.9})$$

Als allgemeine Lösung ergibt sich

$$P_l^{(m)}(x) = \frac{(-1)^m}{2^l l!} (1-x^2)^{m/2} \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} (x^2-1)^l \quad . \quad (\text{A.10})$$

Die LEGENDRE Polynome werden auch zonale Kugelfunktionen genannt, da sie in den Eigenfunktionen

$$Y_{l,m}(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{2l+1}{2} \cdot \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_{lm}(\cos(\vartheta)) \exp(im\varphi) \quad (\text{A.11})$$

des Drehimpulsoperators  $\hat{L}^2$  stecken und im Produkt mit der radialen Wellenfunktion  $R(r)$  die zeitunabhängige SCHRÖDINGER Gleichung lösen.

### A.5 Berechnung der nach "unten" verlaufenden spektralen Leistungsdichte

$$\begin{aligned} D_\nu &= - \int_{\text{untere Hemisphäre}} L_{\bar{\nu}}(p, \vartheta) \cos(\vartheta) \, d\Omega \\ &= - \int_{-1}^0 \int_0^{2\pi} L_{\bar{\nu}}(p, \vartheta) \cos(\vartheta) \, d\varphi \, d(\cos(\vartheta)) \\ &= 2\pi \int_0^{-1} L_{\bar{\nu}}(p, \vartheta) \cos(\vartheta) \, d(\cos(\vartheta)) \\ &= 2\pi \int_0^{-1} (L_{\bar{\nu}0}(p) + L_{\bar{\nu}1}(p) \cos(\vartheta)) \cos(\vartheta) \, d(\cos(\vartheta)) \\ &= 2\pi \int_0^{-1} L_{\bar{\nu}0}(p) \cos(\vartheta) \, d(\cos(\vartheta)) + \\ &\quad 2\pi \int_0^{-1} L_{\bar{\nu}1}(p) \cos(\vartheta) \cos(\vartheta) \, d(\cos(\vartheta)) \\ &= 2\pi L_{\bar{\nu}0}(p) \cdot \frac{1}{2} - 2\pi L_{\bar{\nu}1}(p) \cdot \frac{1}{3} \\ &= \pi L_{\bar{\nu}0}(p) - \frac{2}{3} \pi L_{\bar{\nu}1}(p) \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

### A.6 Integration über untere Hemisphäre

$$\begin{aligned} -\frac{d}{dp} \int_{-1}^0 L \cos(\vartheta) \, d(\cos(\vartheta)) &= \frac{q\kappa}{g} \left[ - \int_{-1}^0 L \, d(\cos(\vartheta)) + (1-\omega)B + \omega L_0 \right] \\ \frac{d}{dp} \int_0^{-1} L \cos(\vartheta) \, d(\cos(\vartheta)) &= \frac{q\kappa}{g} \left[ \int_0^{-1} L \, d(\cos(\vartheta)) + (1-\omega)B + \omega L_0 \right] \\ \text{mit } \int_0^{-1} L \cos(\vartheta) \, d(\cos(\vartheta)) &= \int_0^{-1} (L_0 + L_1 \cos(\vartheta)) \cos(\vartheta) \, d(\cos(\vartheta)) \\ &= L_0 \frac{1}{2} - L_1 \frac{1}{3} = \frac{D}{2\pi} \\ \text{und mit } \int_0^{-1} L \, d(\cos(\vartheta)) &= \int_0^{-1} (L_0 + L_1 \cos(\vartheta)) \, d(\cos(\vartheta)) \\ &= -L_0 + L_1 \frac{1}{2} = -\frac{1}{8\pi} (7D + U) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow \frac{d}{dp} \frac{D}{2\pi} &= \frac{q\kappa}{g} \left[ -\frac{1}{8\pi}(7D + U) + (1 - \omega)B + \omega \frac{1}{2\pi}(U + D) \right] \\
\frac{d}{dp} D &= \frac{q\kappa}{g} \left[ -\frac{1}{4}(7D + U) + (1 - \omega)B \cdot 2\pi + \omega(U + D) \right] \\
\frac{d}{dp} D &= \frac{q\kappa}{g} \left[ -\left(\frac{7}{4} - \omega\right) D - \left(\frac{1}{4} - \omega\right) U + 2\pi(1 - \omega)B \right]
\end{aligned} \tag{A.13}$$

## A.7 Frequenzbandintegration

Für die nach oben gerichtete integrierte Leistungsdichte erhält man<sup>1</sup>

$$\frac{d}{dp} \int_{\tilde{\nu}_{k1}}^{\tilde{\nu}_{k1}} U_{\tilde{\nu}} d\tilde{\nu} = \int_{\tilde{\nu}_{k1}}^{\tilde{\nu}_{k1}} \left\{ \frac{q\kappa_+}{g} \left[ \left( \frac{7}{4} - \omega \right) U_{\tilde{\nu}} + \left( \frac{1}{4} - \omega \right) D_{\tilde{\nu}} - 2\pi(1 - \omega)B_{\tilde{\nu}} \right] \right\} d\tilde{\nu}$$

mit  $B_{\tilde{\nu}} \approx \bar{B}^k$ ,  $\omega \approx \bar{\omega}^k$  und  $\kappa_+ = \kappa + \frac{q_c}{q}\kappa^c = \bar{\kappa}^k + \kappa' + \frac{q_c}{q}\kappa^c = \left( \bar{\kappa}^k + \frac{q_c}{q}\kappa^c \right) + \kappa'$

$$\frac{d}{dp} \int_{\tilde{\nu}_{k1}}^{\tilde{\nu}_{k1}} \frac{1}{\tilde{\nu}_{k2} - \tilde{\nu}_{k1}} (U^k + U') d\tilde{\nu} = \int_{\tilde{\nu}_{k1}}^{\tilde{\nu}_{k1}} \left\{ \frac{q \left( \bar{\kappa}^k + \frac{q_c}{q}\kappa^c + \kappa' \right)}{g} \left[ \left( \frac{7}{4} - \bar{\omega}^k \right) \frac{1}{\tilde{\nu}_{k2} - \tilde{\nu}_{k1}} (U^k + U') + \left( \frac{1}{4} - \bar{\omega}^k \right) \frac{1}{\tilde{\nu}_{k2} - \tilde{\nu}_{k1}} (D^k + D') - 2\pi(1 - \bar{\omega}^k)\bar{B}^k \right] \right\} d\tilde{\nu}$$

$$\text{mit } \frac{1}{\tilde{\nu}_{k2} - \tilde{\nu}_{k1}} \int_{\tilde{\nu}_{k1}}^{\tilde{\nu}_{k2}} \kappa^* X^k d\tilde{\nu} = \kappa^* X^k \quad ,$$

$$\frac{1}{\tilde{\nu}_{k2} - \tilde{\nu}_{k1}} \int_{\tilde{\nu}_{k1}}^{\tilde{\nu}_{k2}} \kappa^* X' d\tilde{\nu} = 0 \quad ,$$

$$\frac{1}{\tilde{\nu}_{k2} - \tilde{\nu}_{k1}} \int_{\tilde{\nu}_{k1}}^{\tilde{\nu}_{k2}} \kappa' X^k d\tilde{\nu} = 0 \quad ,$$

$$\text{und } \frac{1}{\tilde{\nu}_{k2} - \tilde{\nu}_{k1}} \int_{\tilde{\nu}_{k1}}^{\tilde{\nu}_{k2}} \kappa' X' d\tilde{\nu} = \overline{\kappa' X'^k} \quad \text{mit}$$

$\kappa^* = \bar{\kappa}^k$  bzw.  $\kappa^* = \kappa^c$ ,  $X = U$  bzw.  $X = D$  und  $\bar{\kappa}_+^k = \bar{\kappa}^k + \frac{q_c}{q}\kappa^c$  gilt

$$\frac{d}{dp} U^k = \frac{q}{g} \left\{ \left[ \left( \frac{7}{4} - \bar{\omega}^k \right) \left( \bar{\kappa}_+^k U^k + \overline{\kappa' U'^k} \right) + \left( \frac{1}{4} - \bar{\omega}^k \right) \left( \bar{\kappa}_+^k D^k + \overline{\kappa' D'^k} \right) - 2\pi(1 - \bar{\omega}^k)\bar{\kappa}_+^k \bar{B}^k (\tilde{\nu}_{k2} - \tilde{\nu}_{k1}) \right] \right\}$$

bzw. mit  $B^k = (\tilde{\nu}_{k2} - \tilde{\nu}_{k1})\bar{B}^k$

$$\frac{d}{dp} U^k = \frac{q}{g} \left\{ \left[ \left( \frac{7}{4} - \bar{\omega}^k \right) \left( \bar{\kappa}_+^k U^k + \overline{\kappa' U'^k} \right) + \left( \frac{1}{4} - \bar{\omega}^k \right) \left( \bar{\kappa}_+^k D^k + \overline{\kappa' D'^k} \right) - 2\pi(1 - \bar{\omega}^k)\bar{\kappa}_+^k B^k \right] \right\}$$

(A.14)

<sup>1</sup>Beachte, dass die nicht-gestrichelten Variablen frequenzunabhängig sind:  $\int_{\tilde{\nu}_{k1}}^{\tilde{\nu}_{k2}} X' d\tilde{\nu} = 0$ .

und analog für die nach unten gerichtete integrierte Leistungsdichte

$$\begin{aligned} \frac{d}{dp} \int_{\tilde{\nu}_{k1}}^{\tilde{\nu}_{k1}} D_{\tilde{\nu}} d\tilde{\nu} &= \int_{\tilde{\nu}_{k1}}^{\tilde{\nu}_{k1}} \left\{ \frac{q\kappa_+}{g} \left[ -\left(\frac{7}{4} - \omega\right) D_{\tilde{\nu}} - \left(\frac{1}{4} - \omega\right) U_{\tilde{\nu}} + 2\pi(1 - \omega) B_{\tilde{\nu}} \right] \right\} d\tilde{\nu} \\ \frac{d}{dp} D^k &= \frac{q}{g} \left\{ \left[ -\left(\frac{7}{4} - \bar{\omega}^k\right) \left(\bar{\kappa}_+^k D^k + \bar{\kappa}'^k D'^k\right) - \left(\frac{1}{4} - \bar{\omega}^k\right) \left(\bar{\kappa}_+^k U^k + \bar{\kappa}'^k U'^k\right) + 2\pi(1 - \bar{\omega}^k) \bar{\kappa}_+^k B^k \right] \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

## A.8 Mathematische Untersuchungen der Elsasserfunktion

Die ELSASSERANSATZFUNKTION

$$f(\nu, \delta^k, \gamma^k) = \frac{\sinh(2\pi y^k)}{\cosh(2\pi y^k) - \cos(2\pi\nu/\delta^k)} \quad (\text{A.16})$$

wollen wir nach der Frequenz  $\nu$  ableiten und das Ergebnis Null setzen, um herauszufinden, wie weit benachbarte Maxima voneinander entfernt sind. Zur vereinfachten Darstellung setzen wir  $a := \sinh(2\pi y^k)$  und  $b = \cosh(2\pi y^k)$ .

$$\begin{aligned} f(\nu, \delta^k, \gamma^k) &= \frac{a}{b - \cos(2\pi\nu/\delta^k)} \\ \Rightarrow f'(\nu, \delta^k, \gamma^k) &= \frac{a \cdot \frac{2\pi}{\delta^k} \cdot \sin(2\pi\nu/\delta^k)}{(b - \cos(2\pi\nu/\delta^k))^2} \stackrel{!}{=} 0 \\ &\Leftrightarrow 0 = \sin(2\pi\nu/\delta^k) \\ &\Leftrightarrow \pi \cdot n = 2\pi\nu/\delta^k \quad , \quad n \in \mathbb{N} \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

Da wir sowohl ein Maximum als auch Minimum innerhalb einer Periode von  $f$  erwarten, sind zwei benachbarte Maxima um  $\delta^k$  voneinander entfernt.

## A.9 Umformulierung des oszillierenden Anteils der Bestrahlungsstärken

Ziel der Umformulierung ist es, dass trotz kleiner Graueitsparameter keine allzu starken wellenzahlabhängigen Oszillationen bei der spektralen Bestrahlungsstärke auftreten. Dies gelingt uns durch folgenden Ansatz, wie die Entwicklung für kleine Graueitsparameter  $y^k$  zeigen wird. Es

gilt im Maximum

$$\begin{aligned}
\pi y^k \left( f(\tilde{\nu}, \delta^k, \gamma^k) - 1 \right) &= \pi y^k \left( \frac{\sinh(2\pi y^k)}{\cosh(2\pi y^k) - 1} - 1 \right) \\
&= \pi y^k \left( \frac{\exp(2\pi y^k) - \exp(-2\pi y^k)}{\exp(2\pi y^k) + \exp(-2\pi y^k) - 2} - 1 \right) \\
&\approx \pi y^k \left( \frac{4\pi y^k}{2 + (2\pi y^k)^2 - 2} - 1 \right) \\
&= 1 - \pi y^k \approx 1
\end{aligned} \tag{A.18}$$

und im Minimum

$$\begin{aligned}
\pi y^k \left( f(\tilde{\nu}, \delta^k, \gamma^k) - 1 \right) &= \pi y^k \left( \frac{\sinh(2\pi y^k)}{\cosh(2\pi y^k) + 1} - 1 \right) \\
&= \pi y^k \left( \frac{\exp(2\pi y^k) - \exp(-2\pi y^k)}{\exp(2\pi y^k) + \exp(-2\pi y^k) + 2} - 1 \right) \\
&\approx \pi y^k \left( \frac{4\pi y^k}{2 + (2\pi y^k)^2 + 2} - 1 \right) \\
&\approx \left( \frac{4\pi y^k \pi y^k - 4 - (2\pi y^k)^2}{4 + (2\pi y^k)^2} \right) \\
&= -\frac{1}{1 + \underbrace{(\pi y^k)^2}_{\rightarrow 0}} = -1 \quad .
\end{aligned} \tag{A.19}$$

Das heißt, dass sowohl das Maximum als auch das Minimum von  $\pi y^k \left( f(\tilde{\nu}, \delta^k, \gamma^k) - 1 \right)$  für  $y^k \rightarrow 0$  beschränkt sind.

## A.10 Berechnung der Bestrahlungsstärken im Elsasserbandmodell

Wir versehen die nach oben gerichtete, über die  $k$ -te Frequenzbande integrierte Strahlungstransportgleichung (Gleichung 3.34) mit den entsprechenden Näherungen (ersetze die frequenzabhängigen Variablen) und verzichten dabei auf die Argumente der Funktionen:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dp} U^k &= \frac{q}{g} \left\{ \left[ \left( \frac{7}{4} - \bar{\omega}^k \right) \left( \bar{\kappa}_+^k U^k + \overline{\kappa' U'^k} \right) + \left( \frac{1}{4} - \bar{\omega}^k \right) \left( \bar{\kappa}_+^k D^k + \overline{\kappa' D'^k} \right) - 2\pi(1 - \bar{\omega}^k) \bar{\kappa}_+^k B^k \right] \right\} \\
&= \frac{q}{g} \left\{ \left( \frac{7}{4} - \bar{\omega}^k \right) \left( \bar{\kappa}_+^k U^k + \overline{\bar{\kappa}^k \cdot (f-1) \cdot u^k \pi y^k (f-1)^k} \right) + \left( \frac{1}{4} - \bar{\omega}^k \right) \left( \bar{\kappa}_+^k D^k + \overline{\bar{\kappa}^k \cdot (f-1) \cdot d^k \pi y^k (f-1)^k} \right) \right. \\
&\quad \left. - 2\pi(1 - \bar{\omega}^k) \bar{\kappa}_+^k B^k \right\} \\
&= \frac{q}{g} \left\{ \left( \frac{7}{4} - \bar{\omega}^k \right) \left( \bar{\kappa}_+^k U^k + \overline{\bar{\kappa}^k u^k \pi y^k (f-1)^{2k}} \right) + \left( \frac{1}{4} - \bar{\omega}^k \right) \left( \bar{\kappa}_+^k D^k + \overline{\bar{\kappa}^k d^k \pi y^k (f-1)^{2k}} \right) \right. \\
&\quad \left. - 2\pi(1 - \bar{\omega}^k) \bar{\kappa}_+^k B^k \right\}
\end{aligned} \tag{A.20}$$

Es gilt

$$\begin{aligned}
\overline{(f-1)^{2k}} &= \overline{f^2 - 2f + 1}^k = \overline{f^2}^k - \overline{2f}^k + \overline{1}^k = \overline{f^2}^k - 2\overline{f}^k + 1 = \overline{f^2}^k - 2 + 1 \\
&= \overline{f^2}^k - 1 \\
&= \frac{1}{\tilde{\nu}_{k2} - \tilde{\nu}_{k1}} \int_{\tilde{\nu}_{k1}}^{\tilde{\nu}_{k2}} \left( \frac{\sinh(2\pi y^k)}{\cosh(2\pi y^k) - \cos(2\pi \tilde{\nu} / \delta^k)} \right)^2 d\tilde{\nu} - 1 \\
&= \frac{(\sinh(2\pi y^k))^2}{\tilde{\nu}_{k2} - \tilde{\nu}_{k1}} \int_{\tilde{\nu}_{k1}}^{\tilde{\nu}_{k2}} \left( \frac{1}{\cosh(2\pi y^k) - \cos(2\pi \tilde{\nu} / \delta^k)} \right)^2 d\tilde{\nu} - 1 \\
&\approx N \cdot \frac{(\sinh(2\pi y^k))^2}{\tilde{\nu}_{k2} - \tilde{\nu}_{k1}} \int_{-\delta^k/2}^{\delta^k/2} \left( \frac{1}{\underbrace{\cosh(2\pi y^k)}_{:=a} - \cos(2\pi \tilde{\nu} / \delta^k)} \right)^2 d\tilde{\nu} - 1 \quad ,
\end{aligned} \tag{A.21}$$

wobei  $N$  die Anzahl der Linien in der Bande  $k$  ist. Wir integrieren nur über eine einzelnen Linie, also von einem zum darauf folgenden Minimum von  $\cos(x)$ . Die Funktion  $\cos(x)$  hat Minima bei  $(2n-1)\pi$  mit  $n \in \mathbb{N}$ . Dementsprechend integrieren wir von  $\frac{2\pi}{\delta^k} \tilde{\nu}_{\min} = -\pi \Rightarrow -\delta^k/2$  bis

$\frac{2\pi}{\delta^k} \tilde{\nu}_{\min} = \pi \Rightarrow \delta^k/2$ . Ansonsten könnten wir über Unstetigkeiten von  $\frac{1}{(1-\cos(x))^2}$  kommen. Diese Funktion ist unstetig in  $2\pi n$  mit  $n \in \mathbb{N}$ . Das bestehende Integral in Gleichung A.21 lautet analytisch<sup>1</sup> gelöst

$$\begin{aligned}
\int_{-\delta^k/2}^{\delta^k/2} \left( \frac{1}{\cosh(a) - \cos(2\pi\tilde{\nu}/\delta^k)} \right)^2 d\tilde{\nu} &:= \frac{\delta^k}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \left( \frac{1}{\cosh(a) - \cos(x)} \right)^2 dx \\
&= \frac{\delta^k}{2\pi} \left[ 2 \coth(a) \cdot \frac{1}{\sinh^2(a)} \cdot \arctan \left( \coth \left( \frac{a}{2} \right) \tan \left( \frac{x}{2} \right) \right) + \mathcal{O}(\sin(x/2)) \right] \Big|_{-\pi}^{\pi} \\
&= \frac{\delta^k}{2\pi} \left[ 2 \frac{\cosh(a)}{\sinh(a)} \cdot \frac{1}{\sinh^2(a)} \cdot \arctan \left( \coth \left( \frac{a}{2} \right) \tan \left( \frac{\pi}{2} \right) \right) \right. \\
&\quad \left. - 2 \frac{\cosh(a)}{\sinh(a)} \cdot \frac{1}{\sinh^2(a)} \cdot \arctan \left( \coth \left( \frac{a}{2} \right) \tan \left( \frac{-\pi}{2} \right) \right) \right]
\end{aligned} \tag{A.22}$$

In den Gleichungen A.22 haben wir berücksichtigt, dass  $\mathcal{O}(\sin(\pi/2)) - \mathcal{O}(\sin(-\pi/2)) = 0$ . Außerdem ist  $\coth(a/2) > 1$  für  $a > 0$  und damit gilt

$$\arctan \left( \coth \left( \frac{a}{2} \right) \tan \left( \frac{\pm\pi}{2} \right) \right) \approx \frac{\pm\pi}{2} \quad . \tag{A.23}$$

Somit wird aus Gleichung A.22

$$\begin{aligned}
\int_{-\delta^k/2}^{\delta^k/2} \left( \frac{1}{\cosh(a) - \cos(2\pi\tilde{\nu}/\delta^k)} \right)^2 d\tilde{\nu} &\approx \frac{\delta^k}{2\pi} \left[ 2 \frac{\cosh(a)}{\sinh^3(a)} \cdot \frac{\pi}{2} - 2 \frac{\cosh(a)}{\sinh^3(a)} \cdot \frac{(-\pi)}{2} \right] \\
&= \delta^k \frac{\cosh(a)}{\sinh^3(a)}
\end{aligned} \tag{A.24}$$

Berücksichtigen wir, dass für den mittleren Linienabstand  $\delta^k = \frac{\tilde{\nu}_{k2} - \tilde{\nu}_{k1}}{N}$  gilt, so erhalten wir als Endresultat

$$\begin{aligned}
\overline{(f-1)^{2^k}} &\approx N \cdot \frac{\sinh^2(2\pi y^k)}{\tilde{\nu}_{k2} - \tilde{\nu}_{k1}} \delta^k \frac{\cosh(2\pi y^k)}{\sinh^3(2\pi y^k)} - 1 \\
&= \frac{N \delta^k}{\tilde{\nu}_{k2} - \tilde{\nu}_{k1}} \coth(2\pi y^k) - 1 \\
&= \coth(2\pi y^k) - 1 \quad .
\end{aligned} \tag{A.25}$$

---

<sup>1</sup>Mit WolframAlpha bestimmt.

Damit wird die über die  $k$ -te Frequenzbande integrierte nach oben gerichtete Strahlungstransportgleichung (Gleichung A.20) zu

$$\frac{d}{dp}U^k = \frac{q}{g} \left\{ \left( \frac{7}{4} - \bar{\omega}^k \right) \left[ \bar{\kappa}_+^k U^k + \bar{\kappa}^k u^k \pi y^k \left( \coth(2\pi y^k) - 1 \right) \right] + \left( \frac{1}{4} - \bar{\omega}^k \right) \left[ \bar{\kappa}_+^k D^k + \bar{\kappa}^k d^k \pi y^k \left( \coth(2\pi y^k) - 1 \right) \right] - 2\pi(1 - \bar{\omega}^k) \bar{\kappa}_+^k B^k \right\} \quad (\text{A.26})$$

und analog für die nach unten gerichtete Strahlungstransportgleichung zu

$$\frac{d}{dp}D^k = \frac{q}{g} \left\{ - \left( \frac{7}{4} - \bar{\omega}^k \right) \left[ \bar{\kappa}_+^k D^k + \bar{\kappa}^k d^k \pi y^k \left( \coth(2\pi y^k) - 1 \right) \right] - \left( \frac{1}{4} - \bar{\omega}^k \right) \left[ \bar{\kappa}_+^k U^k + \bar{\kappa}^k u^k \pi y^k \left( \coth(2\pi y^k) - 1 \right) \right] + 2\pi(1 - \bar{\omega}^k) \bar{\kappa}_+^k B^k \right\} \quad (\text{A.27})$$

### A.11 Berechnung der Abweichungsamplituden

Wir beginnen mit der nach oben gerichteten Strahlungstransportgleichung 3.26a und setzen in diese die Näherung für die spektrale Bestrahlungsstärke aus Gleichungen 3.40 sowie die Näherung des Extinktionskoeffizienten aus Gleichung 3.36 ein.

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dp} U_\nu &= \frac{q\kappa_+}{g} \left[ \left( \frac{7}{4} - \omega \right) U_\nu + \left( \frac{1}{4} - \omega \right) D_\nu - 2\pi(1 - \omega)B_\nu \right] \\
\frac{d}{dp} \left( U^k + u^k \pi y^k \left( f(\nu, \delta^k, \gamma^k) - 1 \right) \right) &= \frac{q \left( \bar{\kappa}^k + \kappa^c + \bar{\kappa}^k \cdot \left( f(\nu, \delta^k, \gamma^k) - 1 \right) \right)}{g} \cdot \left[ \left( \frac{7}{4} - \bar{\omega}^k \right) \left( U^k + u^k \pi y^k \left( f(\nu, \delta^k, \gamma^k) - 1 \right) \right) \right. \\
&\quad \left. + \left( \frac{1}{4} - \bar{\omega}^k \right) \left( D^k + d^k \pi y^k \left( f(\nu, \delta^k, \gamma^k) - 1 \right) \right) - 2\pi(1 - \bar{\omega}^k) \underbrace{(\tilde{\nu}_{k2} - \tilde{\nu}_{k1})}_{B^k} \bar{B}^k \right] \\
\frac{d}{dp} \left( U^k + u^k \pi y^k \left( f(\nu, \delta^k, \gamma^k) - 1 \right) \right) &= \frac{q \left( 1 + \left( f(\nu, \delta^k, \gamma^k) - 1 \right) \right)}{g} \cdot \left[ \left( \frac{7}{4} - \bar{\omega}^k \right) \left( \bar{\kappa}^k U^k + \bar{\kappa}^k u^k \pi y^k \left( f(\nu, \delta^k, \gamma^k) - 1 \right) \right) \right. \\
&\quad \left. + \left( \frac{1}{4} - \bar{\omega}^k \right) \left( \bar{\kappa}^k D^k + \bar{\kappa}^k d^k \pi y^k \left( f(\nu, \delta^k, \gamma^k) - 1 \right) \right) - 2\pi(1 - \bar{\omega}^k) \bar{\kappa}^k B^k \right] \\
&\quad + \frac{q\kappa^c}{g} \cdot \left[ \left( \frac{7}{4} - \bar{\omega}^k \right) \left( U^k + u^k \pi y^k \left( f(\nu, \delta^k, \gamma^k) - 1 \right) \right) \right. \\
&\quad \left. + \left( \frac{1}{4} - \bar{\omega}^k \right) \left( D^k + d^k \pi y^k \left( f(\nu, \delta^k, \gamma^k) - 1 \right) \right) - 2\pi(1 - \bar{\omega}^k) B^k \right]
\end{aligned} \tag{A.28}$$

Gleichung A.26 wird nun von Gleichung A.28 abgezogen, wobei wir statt  $\left( f(\nu, \delta^k, \gamma^k) - 1 \right)$  nur  $(f - 1)$  schreiben und die folgenden Abkürzungen einführen:

$$\begin{aligned}
\frac{7}{4} - \bar{\omega}^k &=: a \quad , \\
\frac{1}{4} - \bar{\omega}^k &=: b \quad , \\
2\pi(1 - \bar{\omega}^k) &=: c \quad , \\
\coth(2\pi y^k) - 1 &= \overline{(f - 1)^{2^k}} \quad .
\end{aligned} \tag{A.29}$$

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dp} \left( U^k + u^k \pi y^k (f-1) - U^k \right) &= \frac{q(1+(f-1))}{g} \cdot \left[ a \left( \bar{\kappa}^k U^k + \bar{\kappa}^k u^k \pi y^k (f-1) \right) + b \left( \bar{\kappa}^k D^k + \bar{\kappa}^k d^k \pi y^k (f-1) \right) - c \bar{\kappa}^k B^k \right] \\
&\quad + \frac{q}{g} \cdot \left[ a \left( \kappa^c U^k + \kappa^c u^k \pi y^k (f-1) \right) + b \left( \kappa^c D^k + \kappa^c d^k \pi y^k (f-1) \right) - c \kappa^c B^k \right] \\
&\quad - \frac{q}{g} \left\{ a \left( \bar{\kappa}_+^k U^k + \bar{\kappa}^k u^k \pi y^k \overline{(f-1)^{2^k}} \right) + b \left( \bar{\kappa}_+^k D^k + \bar{\kappa}^k d^k \pi y^k \overline{(f-1)^{2^k}} \right) - c \bar{\kappa}_+^k B^k \right\} \\
\frac{d}{dp} \left( u^k \pi y^k (f-1) \right) &= \frac{q}{g} \cdot \left\{ a \left( \bar{\kappa}_+^k U^k + \bar{\kappa}_+^k u^k \pi y^k (f-1) \right) + b \left( \bar{\kappa}_+^k D^k + \bar{\kappa}_+^k d^k \pi y^k (f-1) \right) - c \bar{\kappa}_+^k B^k \right\} \\
&\quad + \frac{q(f-1)}{g} \cdot \left[ a \left( \bar{\kappa}^k U^k + \bar{\kappa}^k u^k \pi y^k (f-1) \right) + b \left( \bar{\kappa}^k D^k + \bar{\kappa}^k d^k \pi y^k (f-1) \right) - c \bar{\kappa}^k B^k \right] \\
&\quad - \frac{q}{g} \left\{ a \left( \bar{\kappa}_+^k U^k + \bar{\kappa}^k u^k \pi y^k \overline{(f-1)^{2^k}} \right) + b \left( \bar{\kappa}_+^k D^k + \bar{\kappa}^k d^k \pi y^k \overline{(f-1)^{2^k}} \right) - c \bar{\kappa}_+^k B^k \right\} \tag{A.30} \\
\frac{d}{dp} \left( u^k \pi y^k (f-1) \right) &= \frac{q}{g} \cdot \left\{ a \left( \bar{\kappa}_+^k u^k \pi y^k (f-1) - \bar{\kappa}^k u^k \pi y^k \overline{(f-1)^{2^k}} \right) + b \left( \bar{\kappa}_+^k d^k \pi y^k (f-1) - \bar{\kappa}^k d^k \pi y^k \overline{(f-1)^{2^k}} \right) \right\} \\
&\quad + \frac{q(f-1)}{g} \cdot \left[ a \left( \bar{\kappa}^k U^k + \bar{\kappa}^k \pi y^k u^k (f-1) \right) + b \left( \bar{\kappa}^k D^k + \bar{\kappa}^k d^k \pi y^k (f-1) \right) - c \bar{\kappa}^k B^k \right] \\
\frac{d}{dp} \left( \pi y^k u^k (f-1) \right) &= \frac{q}{g} \cdot \left\{ a \left( \bar{\kappa}_+^k u^k \pi y^k (f-1) + \bar{\kappa}^k U^k (f-1) + \bar{\kappa}^k u^k \pi y^k (f-1)^2 - \bar{\kappa}^k u^k \pi y^k \overline{(f-1)^{2^k}} \right) \right. \\
&\quad \left. + b \left( \bar{\kappa}_+^k d^k \pi y^k (f-1) + \bar{\kappa}^k D^k (f-1) + \bar{\kappa}^k d^k \pi y^k (f-1)^2 - \bar{\kappa}^k d^k \pi y^k \overline{(f-1)^{2^k}} \right) \right. \\
&\quad \left. - c \bar{\kappa}^k B^k (f-1) \right\}
\end{aligned}$$

65

Als nächstes streichen wir alle Terme, die nicht-linear bezüglich der Abweichungen vom Mittelwert (gestrichene Terme) sind, und dividieren (in Gedanken) durch  $\pi y^k (f-1)$ .

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dp} \left( u^k \pi y^k (f-1) \right) &= \frac{q}{g} \cdot \left\{ a \left( \bar{\kappa}_+^k u^k (f-1) + \bar{\kappa}^k U^k (f-1) + \bar{\kappa}^k u^k \pi y^k \left[ \underbrace{(f-1)^2 - \overline{(f-1)^{2k}}}_{\text{nichtlinear}} \right] \right) \right. \\
&\quad + b \left( \bar{\kappa}_+^k d^k \pi y^k (f-1) + \bar{\kappa}^k D^k (f-1) + \bar{\kappa}^k d^k \pi y^k \left[ \underbrace{(f-1)^2 - \overline{(f-1)^{2k}}}_{\text{nichtlinear}} \right] \right) \\
&\quad \left. - c \bar{\kappa}^k B^k (f-1) \right\}
\end{aligned} \tag{A.31}$$

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dp} \left( u^k \pi y^k (f-1) \right) &= \frac{q}{g} \cdot \left\{ a \left( \bar{\kappa}_+^k u^k \pi y^k (f-1) + \bar{\kappa}^k U^k (f-1) \right) \right. \\
&\quad + b \left( \bar{\kappa}_+^k d^k \pi y^k (f-1) + \bar{\kappa}^k D^k (f-1) \right) \\
&\quad \left. - c \bar{\kappa}^k B^k (f-1) \right\}
\end{aligned}$$

$$\frac{du^k}{dp} = \frac{q}{g} \cdot \left\{ a \left( \bar{\kappa}_+^k u^k + \frac{\bar{\kappa}^k U^k}{\pi y^k} \right) + b \left( \bar{\kappa}_+^k d^k + \frac{\bar{\kappa}^k D^k}{\pi y^k} \right) - \frac{c \bar{\kappa}^k B^k}{\pi y^k} \right\}$$

Analog erhalten wir für die nach unten gerichtete Abweichungsamplitude

$$\frac{d d^k}{dp} = \frac{q}{g} \cdot \left\{ -a \left( \bar{\kappa}_+^k d^k + \frac{\bar{\kappa}^k D^k}{\pi y^k} \right) - b \left( \bar{\kappa}_+^k u^k + \frac{\bar{\kappa}^k U^k}{\pi y^k} \right) + \frac{c \bar{\kappa}^k B^k}{\pi y^k} \right\} . \tag{A.32}$$

## A.12 Berechnung der Iterationsvorschrift

Im Differentialgleichungssystem 5.5 ersetzen wir die Funktionen  $f_i(\dots)$  durch die entsprechenden Terme aus den Strahlungstransportgleichungen 3.41 und 3.42

$$\begin{aligned}
(U^k)_{l-\frac{1}{2}} &= (U^k)_{l+\frac{1}{2}} - \frac{q\Delta p_l}{g} \left\{ \left[ \frac{7}{4} - (\bar{\omega}^k)_l \right] \left( (\bar{\kappa}_+^k)_l (U^k)_{l-\frac{1}{2}} + (\bar{\kappa}^k)_l (u^k)_{l+\frac{1}{2}} \cdot (\coth(2\pi y_l^k) - 1) \right) \right. \\
&\quad \left. + \left[ \frac{1}{4} - (\bar{\omega}^k)_l \right] \left( (\bar{\kappa}_+^k)_l (D^k)_{l+\frac{1}{2}} + (\bar{\kappa}^k)_l (d^k)_{l+\frac{1}{2}} \cdot (\coth(2\pi y_l^k) - 1) \right) \right. \\
&\quad \left. - 2\pi [1 - (\bar{\omega}^k)_l] (\bar{\kappa}_+^k)_l B_l^k \right\} \\
(u^k)_{l-\frac{1}{2}} &= (u^k)_{l+\frac{1}{2}} - \frac{q\Delta p_l}{g} \left\{ \left[ \frac{7}{4} - (\bar{\omega}^k)_l \right] \left( (\bar{\kappa}^k)_l (U^k)_{l+\frac{1}{2}} + (\bar{\kappa}_+^k)_l (u^k)_{l-\frac{1}{2}} \right) \right. \\
&\quad \left. + \left[ \frac{1}{4} - (\bar{\omega}^k)_l \right] \left( (\bar{\kappa}^k)_l (D^k)_{l+\frac{1}{2}} + (\bar{\kappa}_+^k)_l (d^k)_{l+\frac{1}{2}} \right) - 2\pi [1 - (\bar{\omega}^k)_l] (\bar{\kappa}^k)_l B_l^k \right\} \\
(D^k)_{l+\frac{1}{2}} &= (D^k)_{l-\frac{1}{2}} + \frac{q\Delta p_l}{g} \left\{ - \left[ \frac{7}{4} - (\bar{\omega}^k)_l \right] \left( (\bar{\kappa}_+^k)_l (D^k)_{l+\frac{1}{2}} + (\bar{\kappa}^k)_l (d^k)_{l-\frac{1}{2}} \cdot (\coth(2\pi y_l^k) - 1) \right) \right. \\
&\quad \left. - \left[ \frac{1}{4} - (\bar{\omega}^k)_l \right] \left( (\bar{\kappa}_+^k)_l (U^k)_{l-\frac{1}{2}} + (\bar{\kappa}^k)_l (u^k)_{l-\frac{1}{2}} \cdot (\coth(2\pi y_l^k) - 1) \right) \right. \\
&\quad \left. + 2\pi [1 - (\bar{\omega}^k)_l] (\bar{\kappa}_+^k)_l B_l^k \right\} \\
(d^k)_{l-\frac{1}{2}} &= (d^k)_{l-\frac{1}{2}} + \frac{q\Delta p_l}{g} \left\{ - \left[ \frac{7}{4} - (\bar{\omega}^k)_l \right] \left( (\bar{\kappa}^k)_l (D^k)_{l-\frac{1}{2}} + (\bar{\kappa}_+^k)_l (d^k)_{l+\frac{1}{2}} \right) \right. \\
&\quad \left. - \left[ \frac{1}{4} - (\bar{\omega}^k)_l \right] \left( (\bar{\kappa}^k)_l (U^k)_{l-\frac{1}{2}} + (\bar{\kappa}_+^k)_l (u^k)_{l-\frac{1}{2}} \right) + 2\pi [1 - (\bar{\omega}^k)_l] (\bar{\kappa}^k)_l B_l^k \right\} .
\end{aligned} \tag{A.33}$$

67

Wir führen folgende Abkürzungen ein und lösen das obige Gleichungssystem nach  $(U^k)_{l-\frac{1}{2}}$ ,  $(u^k)_{l-\frac{1}{2}}$ ,  $(D^k)_{l+\frac{1}{2}}$  und  $(d^k)_{l-\frac{1}{2}}$  auf.

$$\frac{7}{4} - (\bar{\omega}^k)_l =: \mathcal{A}_l, \quad \frac{1}{4} - (\bar{\omega}^k)_l =: \mathcal{B}_l, \quad 2\pi[1 - (\bar{\omega}^k)_l] =: \mathcal{C}_l, \quad \coth(2\pi y_l^k) - 1 =: \mathcal{D}_l \quad . \tag{A.34}$$

$$\begin{aligned}
(U^k)_{l-\frac{1}{2}} &= (U^k)_{l+\frac{1}{2}} - \frac{q\Delta pl}{g} \left\{ \mathcal{A}_l \left( (\bar{\kappa}_+^k)_l (U^k)_{l-\frac{1}{2}} + (\bar{\kappa}^k)_l (u^k)_{l+\frac{1}{2}} \cdot \mathcal{D}_l \right) + \mathcal{B}_l \left( (\bar{\kappa}_+^k)_l (D^k)_{l+\frac{1}{2}} + (\bar{\kappa}^k)_l (d^k)_{l+\frac{1}{2}} \cdot \mathcal{D}_l \right) - \mathcal{C}_l (\bar{\kappa}_+^k)_l B_l^k \right\} \\
(u^k)_{l-\frac{1}{2}} &= (u^k)_{l+\frac{1}{2}} - \frac{q\Delta pl}{g} \left\{ \mathcal{A}_l \left( (\bar{\kappa}^k)_l (U^k)_{l+\frac{1}{2}} + (\bar{\kappa}_+^k)_l (u^k)_{l-\frac{1}{2}} \right) + \mathcal{B}_l \left( (\bar{\kappa}^k)_l (D^k)_{l+\frac{1}{2}} + (\bar{\kappa}_+^k)_l (d^k)_{l+\frac{1}{2}} \right) - \mathcal{C}_l (\bar{\kappa}^k)_l B_l^k \right\} \\
(D^k)_{l+\frac{1}{2}} &= (D^k)_{l-\frac{1}{2}} + \frac{q\Delta pl}{g} \left\{ -\mathcal{A}_l \left( (\bar{\kappa}_+^k)_l (D^k)_{l+\frac{1}{2}} + (\bar{\kappa}^k)_l (d^k)_{l-\frac{1}{2}} \cdot \mathcal{D}_l \right) - \mathcal{B}_l \left( (\bar{\kappa}_+^k)_l (U^k)_{l-\frac{1}{2}} + (\bar{\kappa}^k)_l (u^k)_{l-\frac{1}{2}} \cdot \mathcal{D}_l \right) + \mathcal{C}_l (\bar{\kappa}_+^k)_l B_l^k \right\} \\
(d^k)_{l-\frac{1}{2}} &= (d^k)_{l-\frac{1}{2}} + \frac{q\Delta pl}{g} \left\{ -\mathcal{A}_l \left( (\bar{\kappa}^k)_l (D^k)_{l-\frac{1}{2}} + (\bar{\kappa}_+^k)_l (d^k)_{l+\frac{1}{2}} \right) - \mathcal{B}_l \left( (\bar{\kappa}^k)_l (U^k)_{l-\frac{1}{2}} + (\bar{\kappa}_+^k)_l (u^k)_{l-\frac{1}{2}} \right) + \mathcal{C}_l (\bar{\kappa}^k)_l B_l^k \right\}
\end{aligned} \tag{A.35}$$

68

$$\begin{aligned}
(U^k)_{l-\frac{1}{2}} + \frac{q\Delta pl}{g} \mathcal{A}_l (\bar{\kappa}_+^k)_l (U^k)_{l-\frac{1}{2}} &= (U^k)_{l+\frac{1}{2}} - \frac{q\Delta pl}{g} \left\{ \mathcal{A}_l (\bar{\kappa}^k)_l (u^k)_{l+\frac{1}{2}} \mathcal{D}_l + \mathcal{B}_l \left( (\bar{\kappa}_+^k)_l (D^k)_{l+\frac{1}{2}} + (\bar{\kappa}^k)_l (d^k)_{l+\frac{1}{2}} \mathcal{D}_l \right) - \mathcal{C}_l (\bar{\kappa}_+^k)_l B_l^k \right\} \\
(u^k)_{l-\frac{1}{2}} + \frac{q\Delta pl}{g} \mathcal{A}_l (\bar{\kappa}_+^k)_l (u^k)_{l-\frac{1}{2}} &= (u^k)_{l+\frac{1}{2}} - \frac{q\Delta pl}{g} \left\{ \mathcal{A}_l (\bar{\kappa}^k)_l (U^k)_{l+\frac{1}{2}} + \mathcal{B}_l \left( (\bar{\kappa}^k)_l (D^k)_{l+\frac{1}{2}} + (\bar{\kappa}_+^k)_l (d^k)_{l+\frac{1}{2}} \right) - \mathcal{C}_l (\bar{\kappa}^k)_l B_l^k \right\} \\
(D^k)_{l+\frac{1}{2}} + \frac{q\Delta pl}{g} \mathcal{A}_l (\bar{\kappa}_+^k)_l (D^k)_{l+\frac{1}{2}} &= (D^k)_{l-\frac{1}{2}} + \frac{q\Delta pl}{g} \left\{ -\mathcal{A}_l (\bar{\kappa}^k)_l (d^k)_{l-\frac{1}{2}} \mathcal{D}_l - \mathcal{B}_l \left( (\bar{\kappa}_+^k)_l (U^k)_{l-\frac{1}{2}} + (\bar{\kappa}^k)_l (u^k)_{l-\frac{1}{2}} \mathcal{D}_l \right) + \mathcal{C}_l (\bar{\kappa}_+^k)_l B_l^k \right\} \\
(d^k)_{l-\frac{1}{2}} + \frac{q\Delta pl}{g} \mathcal{A}_l (\bar{\kappa}_+^k)_l (d^k)_{l+\frac{1}{2}} &= (d^k)_{l-\frac{1}{2}} + \frac{q\Delta pl}{g} \left\{ -\mathcal{A}_l (\bar{\kappa}^k)_l (D^k)_{l-\frac{1}{2}} - \mathcal{B}_l \left( (\bar{\kappa}^k)_l (U^k)_{l-\frac{1}{2}} + (\bar{\kappa}_+^k)_l (u^k)_{l-\frac{1}{2}} \right) + \mathcal{C}_l (\bar{\kappa}^k)_l B_l^k \right\}
\end{aligned} \tag{A.36}$$

$$\begin{aligned}
(U^k)_{l-\frac{1}{2}} \left[ 1 + \frac{q\Delta pl}{g} \mathcal{A}_l(\bar{\kappa}_+^k)_l \right] &= (U^k)_{l+\frac{1}{2}} - \frac{q\Delta pl}{g} \left\{ \mathcal{A}_l(\bar{\kappa}^k)_l (u^k)_{l+\frac{1}{2}} \mathcal{D}_l + \mathcal{B}_l \left( (\bar{\kappa}_+^k)_l (D^k)_{l+\frac{1}{2}} + (\bar{\kappa}^k)_l (d^k)_{l+\frac{1}{2}} \mathcal{D}_l \right) - \mathcal{C}_l(\bar{\kappa}_+^k)_l B_l^k \right\} \\
(u^k)_{l-\frac{1}{2}} \left[ 1 + \frac{q\Delta pl}{g} \mathcal{A}_l(\bar{\kappa}_+^k)_l \right] &= (u^k)_{l+\frac{1}{2}} - \frac{q\Delta pl}{g} \left\{ \mathcal{A}_l(\bar{\kappa}^k)_l (U^k)_{l+\frac{1}{2}} + \mathcal{B}_l \left( (\bar{\kappa}^k)_l (D^k)_{l+\frac{1}{2}} + (\bar{\kappa}_+^k)_l (d^k)_{l+\frac{1}{2}} \right) - \mathcal{C}_l(\bar{\kappa}^k)_l B_l^k \right\} \\
(D^k)_{l+\frac{1}{2}} \left[ 1 + \frac{q\Delta pl}{g} \mathcal{A}_l(\bar{\kappa}_+^k)_l \right] &= (D^k)_{l-\frac{1}{2}} + \frac{q\Delta pl}{g} \left\{ -\mathcal{A}_l(\bar{\kappa}^k)_l (d^k)_{l-\frac{1}{2}} \mathcal{D}_l - \mathcal{B}_l \left( (\bar{\kappa}_+^k)_l (U^k)_{l-\frac{1}{2}} + (\bar{\kappa}^k)_l (u^k)_{l-\frac{1}{2}} \mathcal{D}_l \right) + \mathcal{C}_l(\bar{\kappa}_+^k)_l B_l^k \right\} \\
(d^k)_{l-\frac{1}{2}} \left[ 1 + \frac{q\Delta pl}{g} \mathcal{A}_l(\bar{\kappa}_+^k)_l \right] &= (d^k)_{l-\frac{1}{2}} + \frac{q\Delta pl}{g} \left\{ -\mathcal{A}_l(\bar{\kappa}^k)_l (D^k)_{l-\frac{1}{2}} - \mathcal{B}_l \left( (\bar{\kappa}^k)_l (U^k)_{l-\frac{1}{2}} + (\bar{\kappa}_+^k)_l (u^k)_{l-\frac{1}{2}} \right) + \mathcal{C}_l(\bar{\kappa}^k)_l B_l^k \right\}
\end{aligned} \tag{A.37}$$

Als nächste Abkürzungen führen wir  $\text{facA}_l = \left[ 1 + \frac{q\Delta pl}{g} \mathcal{A}_l(\bar{\kappa}_+^k)_l \right]^{-1}$ ,  $\text{UKT}_l = \text{facA}_l \frac{q\Delta pl}{g} \mathcal{C}_l(\bar{\kappa}^k)_l B_l^k$  und  $c_l = \left( 1 + \frac{\kappa^c}{(\bar{\kappa}^k)_l} \right)$  ein. Es gilt also  $(\bar{\kappa}_+^k)_l = (\bar{\kappa}^k)_l + \kappa^c = (\bar{\kappa}^k)_l c_l$ . Damit wird aus dem obigen Differentialgleichungssystem

$$\begin{aligned}
(U^k)_{l-\frac{1}{2}} &= \text{facA}_l (U^k)_{l+\frac{1}{2}} - \text{facA}_l \frac{q\Delta pl}{g} \mathcal{A}_l(\bar{\kappa}^k)_l (u^k)_{l+\frac{1}{2}} \mathcal{D}_l - \text{facA}_l \frac{q\Delta pl}{g} \mathcal{B}_l(\bar{\kappa}^k)_l c_l (D^k)_{l+\frac{1}{2}} - \text{facA}_l \frac{q\Delta pl}{g} (\bar{\kappa}^k)_l (d^k)_{l+\frac{1}{2}} \mathcal{D}_l \mathcal{B}_l + c_l \text{UKT}_l \\
(u^k)_{l-\frac{1}{2}} &= \text{facA}_l (u^k)_{l+\frac{1}{2}} - \text{facA}_l \frac{q\Delta pl}{g} \mathcal{A}_l(\bar{\kappa}^k)_l (U^k)_{l+\frac{1}{2}} - \text{facA}_l \frac{q\Delta pl}{g} \mathcal{B}_l(\bar{\kappa}^k)_l (D^k)_{l+\frac{1}{2}} - \text{facA}_l \frac{q\Delta pl}{g} (\bar{\kappa}^k)_l c_l (d^k)_{l+\frac{1}{2}} \mathcal{B}_l + \text{UKT}_l \\
(D^k)_{l+\frac{1}{2}} &= \text{facA}_l (D^k)_{l-\frac{1}{2}} - \text{facA}_l \frac{q\Delta pl}{g} \mathcal{A}_l(\bar{\kappa}^k)_l (d^k)_{l-\frac{1}{2}} \mathcal{D}_l - \text{facA}_l \frac{q\Delta pl}{g} \mathcal{B}_l(\bar{\kappa}^k)_l c_l (U^k)_{l-\frac{1}{2}} - \text{facA}_l \frac{q\Delta pl}{g} (\bar{\kappa}^k)_l (u^k)_{l-\frac{1}{2}} \mathcal{D}_l \mathcal{B}_l + c_l \text{UKT}_l \\
(d^k)_{l-\frac{1}{2}} &= \text{facA}_l (d^k)_{l-\frac{1}{2}} - \text{facA}_l \frac{q\Delta pl}{g} \mathcal{A}_l(\bar{\kappa}^k)_l (D^k)_{l-\frac{1}{2}} - \text{facA}_l \frac{q\Delta pl}{g} \mathcal{B}_l(\bar{\kappa}^k)_l (U^k)_{l-\frac{1}{2}} - \text{facA}_l \frac{q\Delta pl}{g} (\bar{\kappa}^k)_l c_l (u^k)_{l-\frac{1}{2}} \mathcal{B}_l + \text{UKT}_l \quad .
\end{aligned} \tag{A.38}$$

Nun führen wir die Abkürzungen  $\text{facC}_l = \text{facA}_l \frac{q\Delta pl}{g} \mathcal{B}_l(\bar{\kappa}^k)_l$ ,  $\text{facE}_l = \text{facA}_l \frac{q\Delta pl}{g} \mathcal{A}_l(\bar{\kappa}^k)_l$  ein. Damit wird aus dem obigen Differentialgleichungssystem

$$\begin{aligned}
(U^k)_{l-\frac{1}{2}} &= \text{facA}_l (U^k)_{l+\frac{1}{2}} - \text{facE}_l (u^k)_{l+\frac{1}{2}} \mathcal{D}_l - \text{facC}_l c_l (D^k)_{l+\frac{1}{2}} - \text{facC}_l (d^k)_{l+\frac{1}{2}} \mathcal{D}_l + c_l \text{UKT}_l \\
(u^k)_{l-\frac{1}{2}} &= \text{facA}_l (u^k)_{l+\frac{1}{2}} - \text{facE}_l (U^k)_{l+\frac{1}{2}} - \text{facC}_l (D^k)_{l+\frac{1}{2}} - \text{facC}_l c_l (d^k)_{l+\frac{1}{2}} + \text{UKT}_l \\
(D^k)_{l+\frac{1}{2}} &= \text{facA}_l (D^k)_{l-\frac{1}{2}} - \text{facE}_l (d^k)_{l-\frac{1}{2}} \mathcal{D}_l - \text{facC}_l c_l (U^k)_{l-\frac{1}{2}} - \text{facC}_l (u^k)_{l-\frac{1}{2}} \mathcal{D}_l + c_l \text{UKT}_l \\
(d^k)_{l-\frac{1}{2}} &= \text{facA}_l (d^k)_{l-\frac{1}{2}} - \text{facE}_l (D^k)_{l-\frac{1}{2}} - \text{facC}_l (U^k)_{l-\frac{1}{2}} - \text{facC}_l c_l (u^k)_{l-\frac{1}{2}} + \text{UKT}_l \quad .
\end{aligned} \tag{A.39}$$

Zusammengefasst bekommen wir

$$\begin{aligned}
(U^k)_{l-\frac{1}{2}} &= \text{facA}_l (U^k)_{l+\frac{1}{2}} - \text{facE}_l \mathcal{D}_l (u^k)_{l+\frac{1}{2}} - \text{facC}_l c_l (D^k)_{l+\frac{1}{2}} - \text{facC}_l \mathcal{D}_l (d^k)_{l+\frac{1}{2}} + c_l \text{UKT}_l \\
(u^k)_{l-\frac{1}{2}} &= \text{facA}_l (u^k)_{l+\frac{1}{2}} - \text{facE}_l (U^k)_{l+\frac{1}{2}} - \text{facC}_l (D^k)_{l+\frac{1}{2}} - \text{facC}_l c_l (d^k)_{l+\frac{1}{2}} + \text{UKT}_l \\
(D^k)_{l+\frac{1}{2}} &= \text{facA}_l (D^k)_{l-\frac{1}{2}} - \text{facE}_l \mathcal{D}_l (d^k)_{l-\frac{1}{2}} - \text{facC}_l c_l (U^k)_{l-\frac{1}{2}} - \text{facC}_l \mathcal{D}_l (u^k)_{l-\frac{1}{2}} + c_l \text{UKT}_l \\
(d^k)_{l-\frac{1}{2}} &= \text{facA}_l (d^k)_{l-\frac{1}{2}} - \text{facE}_l (D^k)_{l-\frac{1}{2}} - \text{facC}_l (U^k)_{l-\frac{1}{2}} - \text{facC}_l c_l (u^k)_{l-\frac{1}{2}} + \text{UKT}_l \quad .
\end{aligned} \tag{A.40}$$

## A.13 Strahlungsparameter im KMCM

```

1      MODULE radpar
2      c
3      USE constants , ONLY: DBL
4      IMPLICIT NONE
5      C*****
6      c
7      C*****
8      c
9      DATA frb / 2.9380D13, ! lower bounds
10     &          3.8974D13, 2.9979D10, 1.8600D13, 2.0010D13, 2.0130D13,
11     &          3.2976D13, ! upper bounds
12     &          7.2958D13, 1.6189D13, 2.0010D13, 2.0130D13, 2.1450D13/
13
14 c Kai: Added wave number bands
15 DATA wnb / 980.0D0, ! lower bounds
16 &          1300.0D0, 1.0D0, 620.0D0, 667.0D0, 671.0D0,
17 &          1100.0D0, ! upper bounds
18 &          2100.0D0, 540.0D0, 667.0D0, 671.0D0, 715.0D0/
19 c
20 C*****
21 c O3-1 : 2.9380D13 3.2976D13 980.0D0 1100.0D0
22 c
23 c H2O-1 : 3.8974D13 7.2958D13 1300.0D0 2100.0D0
24 c H2O-2 : 2.9990D10 1.6189D13 1.0D0 540.0D0
25 c
26 c CO2-1 : 1.8600D13 2.0010D13 620.0D0 667.0D0
27 c CO2-2 : 2.0010D13 2.0130D13 667.0D0 671.0D0
28 c CO2-3 : 2.0130D13 2.1450D13 671.0D0 715.0D0
29 c
30 c earlier: CO2: 1.6189D13 2.3982D13 540.0D0 800.0D0
31 C*****
32 c dimensionless line strengths for SW bands (subject to tuning)
33 c 1: O3; 2: H2O; 3: O2; 4: VISO3 ; 5: absorption by clouds
34 REAL(KIND=DBL), DIMENSION(5) :: linstrsw
35 DATA linstrsw / 18.5D2 , 1.60d-1 , 400d0 , 14.5d0 , 0.0022d0 /
36 c
37 c grey reflection by clouds
38 REAL(KIND=DBL) :: rc10 = 0.0074d0
39
40 C*****
41 c
42 C*****
43
44 c parameters for mean linewidth
45 REAL(KIND=DBL), DIMENSION(kfr) :: gammaair
46 DATA gammaair / 0.0734D0, 0.0669D0,
47 &          0.0616D0,
48 &          0.0727D0, 0.07300, 0.0697D0 /
49 c Kai: Der Wert  $f\tilde{A}_{\frac{1}{4}}^r$  CO2 lag mal bei 0.0700D0
50
51 REAL(KIND=DBL), DIMENSION(kfr) :: gammaself
52 DATA gammaself / 0.0942D0, 0.3449D0,
53 &          0.3241D0,
54 &          0.0934D0, 0.0944D0, 0.0857D0 /
55 c Kai: Der Wert  $f\tilde{A}_{\frac{1}{4}}^r$  CO2 lag mal bei 0.0870D0
56
57 REAL(KIND=DBL), DIMENSION(kfr) :: nexponent
58 DATA nexponent / 0.7644D0, 0.4559D0,
59 &          0.4442D0,
60 &          0.7476D0, 0.7442D0, 0.7463D0 /

```

```

61 c Kai: Der Wert  $f\tilde{A}_{\frac{1}{4}r}$  CO2 lag mal bei 0.7387D0
62
63     REAL(KIND=DBL), DIMENSION(kfr) :: linesep
64 c
65 c     DATA linesep / 0.0026D0, 0.1183D0,
66 c     &                0.0895D0, 0.0043D0 /
67 c
68 c     DATA linesep / 0.0026D0, 0.1183D0,
69 c     &                0.0895D0,
70 c     &                1.2690D0, 0.1369D0, 1.2567D0 /
71 c Kai: Der Wert  $f\tilde{A}_{\frac{1}{4}r}$  CO2 lag mal bei 0.0139D0
72
73     REAL(KIND=DBL), DIMENSION(kfr) :: nu0
74     DATA nu0 / 1031.8D0, 1618.6D0,
75 c     &                212.0D0,
76 c     &                643.5D0, 669.0D0, 693.0D0 /
77 c Kai: Der Wert  $f\tilde{A}_{\frac{1}{4}r}$  CO2 lag mal bei 663.0D0, ich habe dar arithm. Mittel
78 c  $f\tilde{A}_{\frac{1}{4}r}$  die nu0 Werte genommen
79
80 c
81 c parameters for calculating omega
82 c
83     REAL(KIND=DBL), DIMENSION(kfr) :: A21
84     DATA A21 / 2.7307D0, 4.6553D0,
85 c     &                3.1200D0,
86 c     &                0.5903D0, 1.4469D0, 1.1404D0 /
87 c Kai: Der Wert  $f\tilde{A}_{\frac{1}{4}r}$  CO2 lag mal bei 0.9940D0
88
89     REAL(KIND=DBL), DIMENSION(kfr) :: statg1
90     DATA statg1 / 92.5590D0, 77.8008D0,
91 c     &                86.0043D0,
92 c     &                54.0000D0, 52.3333D0, 69.9444D0 /
93 c Kai: Der Wert  $f\tilde{A}_{\frac{1}{4}r}$  CO2 lag mal bei 146.2745D0
94
95     REAL(KIND=DBL), DIMENSION(kfr) :: statg2
96     DATA statg2 / 93.0639D0, 79.4678D0,
97 c     &                89.8874D0,
98 c     &                52.8421D0, 52.4667D0, 71.4444D0 /
99 c Kai: Der Wert  $f\tilde{A}_{\frac{1}{4}r}$  CO2 lag mal bei 146.3529D0
100
101 c
102 c These factors scale the collision rates with neutral air
103 c such as to raise the onset of nonLTE for larger values.
104     REAL(KIND=DBL), DIMENSION(kfr) :: Arhfac
105 c     DATA Arhfac / 750d0 , 800D0, 700D0, 700.0d0 /
106 c     DATA Arhfac / 750d0 , 800D0, 750D0, 750.0d0 /
107 c     DATA Arhfac / 700.0d0 , 700.0D0, 700.0D0,
108 c     &                350.0d0, 350.0d0, 350.0d0 /
109 c Kai: Der Wert  $f\tilde{A}_{\frac{1}{4}r}$  CO2 lag mal bei 850.0d0
110
111 c frequency averaged band strengths (temperature-dependence neglected)
112
113     REAL(KIND=DBL), DIMENSION(kfr) :: bandstr
114 c     DATA bandstr/ 20d0 , 0.07d0 , 7.0d0, 1.3d0 /
115 c     DATA bandstr/ 30d0 , 0.07d0 , 6.5d0,
116 c     &                56.9d0 , 1440.4d0 , 79.4d0 /
117 c     (Kai: war mal 1.3d0)
118
119     END MODULE radpar

```

Codes/radpar.f

## A.14 Strahlungstransportschema im KMCM

```

1      subroutine radiatransfer(jlat , pre , dipre , Ts,T,q,Ccl ,
2      &      Qsw,Qswtot , Qud,So , Sor , Sotot ,
3      &      Qlw, Qlwtot , Qbb,
4      &      Up,Do,uUp,dDo, Uptot , Dotot , Upbb,Dobb,
5      &      exLW,exSW, UkTorg,gamma0, graypar , scalbedo)
6      c
7      C*****
8      c* Computes short-wave and long-wave vertical energy fluxes owing      *
9      c* simple radiative-transfer model with 4 bands (+1 for cloud      *
10     c* effects) for direct solar (SW) radiation and with 6 bands for      *
11     c* thermal (LW) radiation.                                          *
12     c* This version includes the parameterization pi*y*(f-1).          *
13     c* ( RK & EB & KB / February 2011 – September 2016 )              *
14     C*****
15
16     C*****
17     c      ...
18     C*****
19
20     c
21     C *****
22     c long-wave mean extinction coefficients exLW
23     C *****
24     c
25     c NEW FROM KAI: CO2-Concentration shall decline exponentially at upper
26     c end of the atmosphere
27     do l = 1,10
28     CCO2(:,l,jlat) = CCO2(:,l,jlat)
29     &      *0.5d0*(tanh(3-0.5d0*(11.0d0-1))+1)
30     enddo
31     c Bis hier
32
33
34     c for ozone
35     do l = 1,lev
36     exLW(:,l,1) = CO3(:,l,jlat)*bandstr(1)
37     enddo
38     c for water vapor
39     do k = 2,3
40     do l = 1,lev
41     exLW(:,l,k) = q(:,l)*bandstr(k)
42     enddo; enddo
43     c for carbon dioxid
44     do k = 4,6
45     do l = 1,lev
46     exLW(:,l,k) = CCO2(:,l,jlat)*bandstr(k)
47     enddo; enddo
48
49     C*****
50     c      ...
51     C*****
52
53     c
54     C*****
55     c long wave-fluxes
56     C*****
57     c
58     c emission UKT
59     c
60     c map Ts and temperature onto [-1,1] and compute Legendre polynomials

```

```

61 c
62     dum1=Tmin+Tmax; dum2=Tmin-Tmax
63     tau(:,0) = (-2.0D0*Ts(:)+dum1)/dum2
64     do l=1,lev
65         tau(:,l) = (-2.0D0*T(:,l)+dum1)/dum2
66     enddo
67 c
68     do l = 1,lev
69     do i = 1,irie
70         if (tau(i,l).gt.1d0) then
71             print*, 'radiatransfer: i,l,fi,T = ',
72 &             i,l,int(fi(jlat)*180d0/pi),int(T(i,l))
73 c             print*, 'continue by setting tau=1'
74             tau(i,l)=1d0
75         elseif (tau(i,l).lt.-1d0) then
76             print*, 'radiatransfer: i,l,fi,T = ',
77 &             i,l,int(fi(jlat)*180d0/pi),int(T(i,l))
78 c             print*, 'continue by setting tau=-1'
79 c             stop '... KAD in radiation: T < 0 '
80         endif
81     enddo; enddo
82 c
83     do l=0,lev
84         PN(:,l,1) = tau(:,l)
85         PN(:,l,2) = 1.5d0*tau(:,l)*tau(:,l) - 0.5d0
86     enddo
87     do n=3,nlp
88         do l=0,lev
89             PN(:,l,n) = (dble(2*n-1)*tau(:,l)*PN(:,l,n-1)
90 &             -dble(n-1)*PN(:,l,n-2))/dble(n)
91         enddo
92     enddo
93 c
94 c compute emission UKT for all bands using the Legendre expansion
95 c
96     UKT = 0.0D0
97     do k=1,kfr
98     do l=0,lev
99         UKT(:,l,k)=ank(0,k)
100     enddo; enddo
101
102     do k=1,kfr ! order of loops rearranged (17.7.08)
103     do n=1,nlp
104     do l=0,lev
105         UKT(:,l,k) = UKT(:,l,k) + PN(:,l,n)*ank(n,k)
106     enddo; enddo; enddo
107 c     save UKT in UkTorg
108     UkTorg = UKT
109
110 c
111 c temperature- and pressure-dependent mean linewidth
112 c and grayness parameter for each band
113     Tref = 296.0D0
114     pfac = 101325.0D0
115 c
116     O3m = 48.0D0*1.0D-3/Naa
117     H2Om = 18.0D0*1.0D-3/Naa
118     CO2m = 44.0D0*1.0D-3/Naa
119
120     patm = pre/pfac ! neu von Kai statt der vorherigen Gleichung.
121
122 c Doppler factor

```

```

123     Dfac = ((2*kb*ln2*T)/(c*c))
124     Tfac = Tref/T
125 c
126 c ozone
127     do l=1,lev
128         do i=1,irie
129             psc = patm(i,l)*CO3(i,l,jlat)
130             gammap = Tfac(i,l)**nexponent(1)
131             & *(gammaair(1)*(patm(i,l)-psc)+gammasef(1)*psc)
132 c Kai: patm is pressure in atm and psc the partial pressure of absorber
133 c     in atm
134
135             gammaD = nu0(1)* sqrt(Dfac(i,l)/O3m)
136
137 c Voigt Profile Approximation
138             fG = gammaD
139             fL = gammap
140             gamma(i,l,1)=0.5346D0*fL+SQRT(0.2166D0*fL**2+fG**2)
141         end do
142     end do
143 c water vapor
144     do k=2,3
145         do l=1,lev
146             do i=1,irie
147                 psc = patm(i,l)*q(i,l)
148                 gammap = Tfac(i,l)**nexponent(k)
149                 & *(gammaair(k)*(patm(i,l)-psc)+gammasef(k)*psc)
150                 gammaD = nu0(k)*
151                 & sqrt(Dfac(i,l)/H2Om)
152 c Voigt Profile Approximation
153                 fG = gammaD
154                 fL = gammap
155                 gamma(i,l,k)=0.5346D0*fL+SQRT(0.2166D0*fL**2+fG**2)
156             end do
157         end do
158     end do
159 c CO2
160     do k=4,6
161         do l=1,lev
162             do i=1,irie
163                 psc = patm(i,l)*CCO2(i,l,jlat)
164                 gammap = Tfac(i,l)**nexponent(k)
165                 & *(gammaair(k)*(patm(i,l)-psc)+gammasef(k)*psc)
166
167                 gammaD = nu0(k)*
168                 & sqrt(Dfac(i,l)/CO2m)
169
170 c Voigt Profile Approximation
171                 fG = gammaD
172                 fL = gammap
173                 gamma(i,l,k)=0.5346D0*fL+SQRT(0.2166D0*fL**2+fG**2)
174             end do
175         end do
176     end do
177
178 c
179     gamma0 = gamma ! save line width (Kai: HWHM)
180 c
181     do k = 1,kfr
182     do l = 1,lev
183         graypar(:,l,k) = gamma(:,l,k) / linesep(k)
184         gamma(:,l,k) = pi2*graypar(:,l,k)

```

```

185 |         enddo; enddo
186 | c
187 | c *****
188 | c compute scattering albedo from two-level model
189 | c *****
190 | c
191 | c collision rates
192 |     do k=1,kfr
193 |         do l=1,lev
194 |             do i=1,irie
195 |                 Crate(i,l,k)=Arhfac(k)*dsqrt(T(i,l)/(300.0D0)) ! dsqrt instead of
196 |                 &      **bexp
197 |                 &      *(statg1(k)/statg2(k))*(pre(i,l)/(R0*T(i,l)))
198 |                 R0 -> R_th(1)
199 |             end do
200 |         end do
201 |     end do
202 | c CO2 collision rates corrected for atomic Oxygen
203 | c
204 |     do k=4,6
205 |         do l=1,lev
206 |             do i=1,irie
207 |                 Crate(i,l,k)=Crate(i,l,k)
208 |                 &      +Arhfac(k)*Ocols * dsqrt(T(i,l)/(300.0D0)) ! dsqrt instead of **
209 |                 &      bexp
210 |                 &      *(statg1(k)/statg2(k))
211 |                 &      *((pre(i,l)*CO(i,l,jlat))/(R0*T(i,l)))
212 |             end do
213 |         end do
214 |     end do
215 | c scattering albedo
216 | c
217 |     do k=1,kfr
218 |         fr0 = 0.5D0*(frb(k,2)+frb(k,1))
219 |         do l=1,lev
220 |             do i=1,irie
221 |                 efac = 1D0 - EXP( -(hh*fr0) / (kb*T(i,l)) )
222 |                 epsilon = Crate(i,l,k) / ( Crate(i,l,k) + A21(k)/efac )
223 |                 if( epsilon .lt. epsmin ) epsilon = epsmin
224 |                 scalbedo(i,l,k) = 1d0 - epsilon
225 |             end do
226 |         end do
227 |     end do
228 | c
229 | c *****
230 | c *****
231 | c prepare for vertical discretization (Eddington approximation)
232 | c *****
233 | c *****
234 | c
235 | c
236 | c broad-band correction coefficient (tropospheric clouds)
237 | c
238 |     do k=1,kfr
239 |         do l=1,ltrop-1
240 |             corbb(:,l,k) = 1d0
241 |         enddo; enddo
242 | c
243 | c troposphere (clouds)
244 | clex = 0.1d0/g ! [m**2/kg] / g

```

```

245 | do l = ltrop, lev
246 |     corbb(:,l,1) = 1d0
247 | enddo
248 | do k = 2, kfr
249 | do l = ltrop, lev
250 |     corbb(:,l,k) = 1d0 + clex*Ccl(:,l)/exLW(:,l,k)
251 | enddo; enddo
252 | c
253 | c factors for covariance terms
254 | c
255 |
256 | do k = 1, kfr
257 | do l = 1, lev
258 | do i = 1, irie
259 | c
260 | c Kai: remember that gamma is 2*pi*y
261 |     expy = max( 1d-16, dexp(-gamma(i,l,k)) )
262 | c Kai: If gamma = 2*pi*y > 36 (or y > 5.8d0), then expy could be too
263 | c small, so use 1d-16 instead.
264 |     if(gamma(i,l,k) > 36.0d0 .and. k /= 1) then
265 |         write(*,*) 'We have a grayness parameter which is too high!'
266 |         write(*,*) 'exp(-2 pi y)=', dexp(-gamma(i,l,k))
267 |         write(*,*) 'i=', i, ' l=', l, ' k=', k
268 |         print*, (2d0*expm)/((1d0/expm)-expm)
269 |         dummy = (2d0*dexp(-gamma(i,l,k)))
270 |     & / ((1d0/dexp(-gamma(i,l,k)))-expm)
271 |     print*, dummy
272 | endif
273 |
274 |     expy = 1d0/expm
275 |     cotgh1(i,l,k) = (2d0*expm)/(expy-expm)
276 | c Kai: cotgh1(i,l,k) = 1d0/tanh((gamma(i,l,k)))-1
277 | c with expm=exp(-y) and expy=exp(y)
278 |
279 | c
280 | c discretization factors
281 | c
282 |     fac1 = dipre(i,l)*exLW(i,l,k)/g
283 |     dum = fac1*(1.75d0-scalbedo(i,l,k))
284 |     faca(i,l,k) = 1d0 / ( 1d0 + dum*corbb(i,l,k) )
285 |     face(i,l,k) = faca(i,l,k)*dum
286 |     fac1 = fac1*faca(i,l,k)
287 |     facc(i,l,k) = fac1*(0.25d0-scalbedo(i,l,k))
288 |     UKT(i,l,k) = 2d0*fac1*(1.00d0-scalbedo(i,l,k))*UKT(i,l,k)
289 |     facy(i,l,k) = pi*graypar(i,l,k)
290 |     fact(i,l,k) = - cosh(facy(i,l,k))
291 |     & / (sinh(facy(i,l,k))-cosh(facy(i,l,k)))
292 | c This will not work for high greyness parameters!
293 | enddo; enddo; enddo
294 |
295 | c
296 | c *****
297 | c Start solving the RTEs
298 | c *****
299 | c
300 |
301 | c
302 | c reset Do, dDO, Up, and uUp
303 |     Up=0.0d0; uUp=0.0d0
304 |     Do=0.0d0; dDo=0.0d0
305 |
306 | c

```

```

307 c iterate downward and upward fluxes for the mean terms
308 c
309   do 100 iterate = 1 , 3
310     do k = 1,kfr ! band loop
311
312       Up(:,lev,k) = UKT(:,0, k)
313
314 c     downward integration of Do without covariance terms
315     do l = 1,lev
316       do i = 1,irie
317
318         Do(i,l,k) = faca(i,l,k)* Do(i,l-1,k)
319       &           - facc(i,l,k)* Up(i,l ,k)*corbb(i,l,k)
320       &           + UKT(i,l,k)*corbb(i,l ,k)
321
322 !         Do(i,l,k) = 0.8d0*Do(i,l,k) + 0.2d0*Do(i,l-1,k)
323         if(Do(i,l,k) .lt. 1d-18) Do(i,l,k)=1d-18
324
325       enddo; enddo
326
327 c     upward integration of Up without covariance terms
328     do l = lev,l,-1
329       do i = 1,irie
330         Up(i,l-1,k) = faca(i,l,k)* Up(i,l ,k)
331       &           - facc(i,l,k)* Do(i,l-1,k)*corbb(i,l,k)
332       &           + UKT(i,l,k)*corbb(i,l ,k)
333
334 !         Up(i,l-1,k) = 0.8d0*Up(i,l-1,k) + 0.2d0*Up(i,l,k)
335         if(Up(i,l-1,k) .lt. 1d-18) Up(i,l-1,k)=1d-18
336
337       enddo; enddo
338
339     enddo ! end of band loop
340
341   100 continue
342
343 c
344 c iterate downward and upward fluxes for the "eddy" terms
345 c
346   do 111 iterateall = 1, 13
347
348   do 101 iterate = 1 , 2
349     do k = 4,kfr
350 c     downward integration of dDo
351     do l = 1,lev
352       do i = 1,irie
353         dDo(i,l,k) = faca(i,l,k)*dDo(i,l-1,k)
354       &           - facc(i,l,k)* Up(i,l ,k) / facy(i,l,k)
355       &           - facc(i,l,k)*uUp(i,l ,k) * corbb(i,l,k)
356       &           - face(i,l,k)*Do(i,l ,k) / facy(i,l,k)
357       &           + UKT(i,l,k) / facy(i,l,k)
358
359         dDo(i,l,k) = 0.8d0*dDo(i,l,k) + 0.2d0*dDo(i,l-1,k)
360
361         if(dDo(i,l,k) .lt. 0.0d0) then
362           dDo(i,l,k) = max((1-fact(i,l,k))*Do(i,l,k)/facy(i,l,k) ,
363             &           dDo(i,l,k))
364         endif
365         if(dDo(i,l,k) .gt. 0.0d0) then
366           dDo(i,l,k) = min(fact(i,l,k)*Do(i,l,k)/facy(i,l,k) ,
367             &           dDo(i,l,k))
368         endif

```

```

369
370         enddo; enddo
371
372 c     upward integration of Uup
373 c     do l = lev,1,-1
374 c     do i = 1,irie
375         uUp(i,l-1,k) = faca(i,l,k)*uUp(i,l,k)
376 &         - facc(i,l,k)* Do(i,l-1,k) / facy(i,l,k)
377 &         - facc(i,l,k)*dDo(i,l-1,k)*corbb(i,l,k)
378 &         - face(i,l,k)* Up(i,l-1,k) / facy(i,l,k)
379 &         + UkT(i,l,k) / facy(i,l,k)
380
381         uUp(i,l-1,k) = 0.8d0*uUp(i,l-1,k) + 0.2d0*uUp(i,l,k)
382
383         if(uUp(i,l-1,k) .lt. 0.0d0) then
384             uUp(i,l-1,k) = max((1-fact(i,l,k))*Up(i,l-1,k)/facy(i,l,k),
385 &             uUp(i,l-1,k))
386         endif
387         if(uUp(i,l-1,k) .gt. 0.0d0) then
388             uUp(i,l-1,k) = min(fact(i,l,k)*Up(i,l-1,k)/facy(i,l,k),
389 &             uUp(i,l-1,k))
390         endif
391
392         enddo; enddo
393     enddo ! end of band loop
394
395 101 continue
396 c
397 c iterate downward and upward fluxes for the mean terms
398 c
399     do 102 iterate = 1 , 4
400 c
401
402         do k = 4,kfr ! band loop
403
404 c     downward integration of Do
405 c     do l = 1,lev
406 c     do i = 1,irie
407         Do(i,l,k)= faca(i,l,k)* Do(i,l-1,k)
408 &         - facc(i,l,k)*corbb(i,l,k)* Up(i,l,k)
409 &         - face(i,l,k)*cotgh1(i,l,k)*dDo(i,l,k)*facy(i,l,k)
410 &         - facc(i,l,k)*cotgh1(i,l,k)*uUp(i,l,k)*facy(i,l,k)
411 &         + UkT(i,l,k)*corbb(i,l,k)
412
413         Do(i,l,k) = 0.8d0*Do(i,l,k) + 0.2d0*Do(i,l-1,k)
414
415         if(Do(i,l,k) .lt. 1d-18) Do(i,l,k) = 1d-18
416
417         if(dDo(i,l,k) .lt. 0.0d0) then
418             dDo(i,l,k) = max((1-fact(i,l,k))*Do(i,l,k)/facy(i,l,k),
419 &             dDo(i,l,k))
420         endif
421         if(dDo(i,l,k) .gt. 0.0d0) then
422             dDo(i,l,k) = min(fact(i,l,k)*Do(i,l,k)/facy(i,l,k),
423 &             dDo(i,l,k))
424         endif
425
426         enddo; enddo
427 c
428 c     upward integration of Up
429 c     do l = lev,1,-1
430 c     do i = 1,irie

```

```

431     Up(i,l-1,k)=faca(i,l,k)*           Up(i,l-1,k)
432     &      - facc(i,l,k)*corbb(i,l,k)*Do(i,l-1,k)
433     &      - face(i,l,k)*cotgh1(i,l,k)*uUp(i,l-1,k)*facy(i,l,k)
434     &      - facc(i,l,k)*cotgh1(i,l,k)*dDo(i,l-1,k)*facy(i,l,k)
435     &      + Ukt(i,l,k)*corbb(i,l,k)
436
437     Up(i,l-1,k) = 0.8d0*Up(i,l-1,k) + 0.2d0*Up(i,l,k)
438
439     if(Up(i,l-1,k) .lt. 1d-18) Up(i,l-1,k) = 1d-18
440
441     if(uUp(i,l-1,k) .lt. 0.0d0) then
442         uUp(i,l-1,k) = max((1-fact(i,l,k))*Up(i,l-1,k)/facy(i,l,k),
443     &      uUp(i,l-1,k))
444     endif
445     if(uUp(i,l-1,k) .gt. 0.0d0) then
446         uUp(i,l-1,k) = min(fact(i,l,k)*Up(i,l-1,k)/facy(i,l,k),
447     &      uUp(i,l-1,k))
448     endif
449
450     enddo; enddo
451
452     enddo ! end of band loop
453 c
454 102 continue
455 c
456
457 c
458 111 continue ! big block
459
460 c
461 c *****
462 c atmospheric temperature tendencies in K/s
463 c *****
464 c
465     QLW = 0.0D0
466     do l=1,lev; facp(:,l)=g/(cp_th(l)*dipre(:,l)); enddo ! rewrite facp !!
467     do k = 1,kfr
468     do l = 1,lev
469         QLW(:,l,k) = facp(:,l) * ( Up(:,l,k)-Up(:,l-1,k)
470     &      -Do(:,l,k)+Do(:,l-1,k) )
471     enddo; enddo
472
473 c *****
474 c      ...
475 c *****
476
477     return
478     end

```

Codes/radiation\_with\_y.f

## A.15 Fortran-style Spezifikationssymbole

Mögliche FORTRAN-Formate sehen wie folgt aus:

|        |  |
|--------|--|
| $Ix$   | integer (Ganzzahl) der Länge $x$ ,                                 |
| $yIx$  | $y$ -Mal integer der Länge $x$ ,                                   |
| $Fx.y$ | float (Fließkommazahl) der Länge $x$ , davon $y$ Nachkommastellen, |
| $Ax$   | string (Zeichenkette) der Länge $x$ .                              |

## A.16 R-Skripte (Quelltexte)

Nachfolgend stehen die wichtigsten R-Skripte. Falls das Interesse besteht, werden die Funktionen zu einem R-Paket zusammengefasst, das die Handhabbarkeit erheblich vereinfachen würde. Nicht gezeigt werden an dieser Stelle die kurzen Skripte namens `ArtAbsSpectrum.R`, `co2concentration.R`, `CoolingToSpace.R`, `delStronLines.R`, `GlobalTemp.R`, `graynessparameter.R`, `plotAbsKoeffEx.R`, `plotHITRANdata.R`, `plotPlanckAbsorption.R`, `QuickCheckplanck.R`.

### A.16.1 importHITRANdata.R

```
1 #####
2 ##
3 ## Script to import HITRAN Data
4 ## Startet:          01.04.2016
5 ## Last modification: 19.09.2016
6 ##
7 #####
8
9
10 ##### Parameter section #####
11 directory <- "C:/Budde/HITRAN/"
12 file.name <- "CO2HitranDataIso1_20160729.par"
13
14 ##### Programming details #####
15 options( stringsAsFactors = FALSE )
16
17 ##### Definition section #####
18 column.names <- c("Molecule.number", "Isotopologue.number",
19                  "Transition.wavenumber", "Line.Intensity",
20                  "Einstein.A.coefficient", "Air.broadened.width",
21                  "Self.broadened.width", "lower.state.Energy",
22                  "Temperature.dependence.of.air.width", "Pressure.shift",
23                  "upper.vibrational.quanta", "lower.vibrational.quanta",
24                  "upper.local.quanta", "lower.local.quanta", "Error.codes",
25                  "Reference.codes", "Flag.for.line-mixing",
26                  "upper.statistical.weight", "lower.statistical.weight")
27 field.lengths <- c(2,1,12,10,10,5,5,10,4,8,15,15,15,15,6,12,1,7,7)
28 data.types <- c("Integer", "Integer", "Real", "Real", "Real", "Real",
29               "Real", "Real", "Real", "Real", "Text", "Text", "Text",
30               "Text", "Text", "Text", "Text", "Real", "Real")
31
32 df.HITRAN.DB.format <- data.frame(column.names, field.lengths)
33
34 ##### Read in file #####
35
36 original.directory <- getwd()
37 setwd(directory)
```

```

38
39 df.HITRAN.data <- read.fwf(file.name, widths = field.lengths)
40
41 ##### Clean data.frame #####
42
43 # Save column names
44 names(df.HITRAN.data) <- column.names
45
46
47 # Save entries as correct data type
48 end <- length(data.types)
49
50 for(i in 1:end){
51   if(grepl("int", data.types[[i]], ignore.case = TRUE)){
52     # Delete possible spaces in cells
53     df.HITRAN.data[[i]] <- gsub(" ", "", df.HITRAN.data[[i]])
54     # Save as integer
55     df.HITRAN.data[[i]] <- as.integer(df.HITRAN.data[[i]])
56   }else{
57     if(grepl("real", data.types[[i]], ignore.case = TRUE)){
58       # Save as real value
59       df.HITRAN.data[[i]] <- as.numeric(df.HITRAN.data[[i]])
60     }else
61     {
62       if(grepl("text", data.types[[i]], ignore.case = TRUE)){
63         # Save as character value
64         df.HITRAN.data[[i]] <- as.character(df.HITRAN.data[[i]])
65       }else
66       {
67         print("We have encountered a new species.")
68       }
69     }
70   }
71 }
72
73 ##### Save data frame #####
74
75 save(df.HITRAN.data, file = "df.HITRAN.data.RData")
76
77 print("Successfully imported and saved HITRAN data")
78
79 ##### Set back directory #####
80 setwd(original.directory)
81
82
83 ##### End of Script #####
84 rm(column.names, field.lengths, data.types, file.name, i, end)

```

R/importHITRANdata.R

## A.16.2 mainHITRAN.R

```

1 #####
2 ##
3 ## Main Programm to work with HITRAN Data
4 ## Started: 01.04.2016
5 ## Last modification: 19.09.2016
6 ##
7 #####
8
9

```

```

10 ##### Parameter section #####
11
12 min.wave.num <- 620
13 max.wave.num <- 715
14 filter.isotopologue.number <- c(1)
15 cuts <- c(667, 671) # Define cut lines to split bands into smaller sub-bands
16 delete.outliers <- TRUE # Mark if you want all lines with small intensities
17                       # to be deleted
18
19
20 # Define outliers (line number) -> they might be responsible for
21 # deleting too many points while filtering
22 #n.outlier.ln <- c(3656, 3660)
23 n.outlier.ln <- 0 # no outliers
24
25 ##### Programming Details #####
26 options(stringsAsFactors=FALSE)
27 library(ggplot2)
28 library(plotly)
29
30 original.directory <- getwd()
31 directory <- "C:/Budde/RFiles/Hitran"
32 setwd(directory)
33
34 source("HelpersFunctions.R")
35
36 ##### Import data frame if not already in the environment #####
37 if(file.exists("df.HITRAN.data.Rdata") &&
38     !(exists("df.HITRAN.data") &&
39         is.data.frame(df.HITRAN.data)))
40     load("df.HITRAN.data.Rdata")
41 if(!(exists("df.HITRAN.data")&& is.data.frame(df.HITRAN.data)))
42     source("importHITRANdata.R")
43
44
45 ##### Only keep lines with wave numbers in specific range #####
46 df.HITRAN.data.reduced <- df.HITRAN.data
47 df.HITRAN.data.reduced <- df.HITRAN.data.reduced [
48     df.HITRAN.data.reduced[["Transition.wavenumber"]] > min.wave.num,]
49
50 df.HITRAN.data.reduced <- df.HITRAN.data.reduced [
51     df.HITRAN.data.reduced[["Transition.wavenumber"]] < max.wave.num,]
52
53 ##### Only keep lines with specific isotopologue numbers #####
54 df.HITRAN.data.reduced <- df.HITRAN.data.reduced [
55     df.HITRAN.data.reduced$Isotopologue.number %in%
56     filter.isotopologue.number,]
57
58 ##### Save log(line.intensity) [natural logarithm] #####
59 df.HITRAN.data.reduced$log.line.intensity <-
60     log(df.HITRAN.data.reduced$Line.Intensity)
61
62
63 ##### Calculate four main properties #####
64 print("Calculating the main properties for df.HITRAN.data.reduced")
65 CalcGrayness(df.HITRAN.data.reduced)
66 print("-----")
67
68
69
70 ##### Delete outliers #####
71 if(delete.outliers){

```

```

72 df.HITRAN.data.no.outliers <- df.HITRAN.data.reduced
73 df.HITRAN.data.no.outliers$line.number <-
74   1:dim(df.HITRAN.data.no.outliers)[[1]]
75
76 if(sum(n.outlier.ln != 0) > 0){
77   df.HITRAN.data.no.outliers <- df.HITRAN.data.no.outliers [
78     !(df.HITRAN.data.no.outliers$line.number %in%
79       n.outlier.ln),]
80 }
81
82
83 ##### Only keep lines with certain minimum intensity #####
84 # (Smoothen the lines)
85 # Go through every block (sub-band) and delete smaller lines
86
87 n.of.subbands <- length(cuts)+1
88 n.max.subband <- 1:n.of.subbands # initialize a vector which will
89 # eventually contain the maxima of each subband
90
91 # Mark the block of the lines and whether they are smaller or greater than
92 # the largest line in that block
93
94 for(i in 1:n.of.subbands){
95   left.border <-
96     ifelse(i==1,df.HITRAN.data.no.outliers$Transition.wavenumber[1],
97           cuts[i-1])
98   right.border <- ifelse(
99     i==length(cuts)+1, df.HITRAN.data.no.outliers$Transition.wavenumber[
100     length(df.HITRAN.data.no.outliers$Transition.wavenumber)], cuts[i])
101
102   n.max.intensity <- max(df.HITRAN.data.no.outliers$Line.Intensity [
103     df.HITRAN.data.no.outliers$Transition.wavenumber >= left.border &
104     df.HITRAN.data.no.outliers$Transition.wavenumber <= right.border])
105
106   middle.border <- df.HITRAN.data.no.outliers$Transition.wavenumber [
107     df.HITRAN.data.no.outliers$Line.Intensity == n.max.intensity]
108
109
110   df.HITRAN.data.no.outliers$subband.number [
111     df.HITRAN.data.no.outliers$Transition.wavenumber >= left.border &
112     df.HITRAN.data.no.outliers$Transition.wavenumber <= right.border]
113   <- i
114
115   # save whether it is the left part of a subband (= -2) or the right (= -1)
116   df.HITRAN.data.no.outliers$subband.part [
117     df.HITRAN.data.no.outliers$Transition.wavenumber >= left.border &
118     df.HITRAN.data.no.outliers$Transition.wavenumber <= middle.border]
119   <- -2
120
121   df.HITRAN.data.no.outliers$subband.part [
122     df.HITRAN.data.no.outliers$Transition.wavenumber > middle.border &
123     df.HITRAN.data.no.outliers$Transition.wavenumber <= right.border]
124   <- -1
125 }
126
127 # Test whether we have produced any NAs
128 b.test1 <- sum(is.na(df.HITRAN.data.no.outliers$subband.number))
129 b.test2 <- sum(is.na(df.HITRAN.data.no.outliers$subband.part))
130 b.test3 <- sum(is.na(df.HITRAN.data.no.outliers$Transition.wavenumber))
131 b.test4 <- sum(is.na(df.HITRAN.data.no.outliers$Line.Intensity))
132
133 if(b.test1+b.test2+b.test3+b.test4 > 0){

```

```

134   print("Something went really wrong.")
135 }
136
137
138 # Delete smaller lines
139 for(i in 1:n.of.subbands){
140   # go through left and right part of subband and delete small lines
141   # left
142   n.length.of.left.subband <- sum(
143     df.HITRAN.data.no.outliers$subband.number==i &
144     df.HITRAN.data.no.outliers$subband.part == -2, na.rm = TRUE)
145   b.removed <- TRUE
146   j <- 1
147   # go through lines and delete smaller ones as long as there are some to
148   # be removed
149
150   while(b.removed){
151     comp <- df.HITRAN.data.no.outliers$Line.Intensity[
152       df.HITRAN.data.no.outliers$subband.number == i &
153       df.HITRAN.data.no.outliers$subband.part == -2][j]
154     last.wave.number <- df.HITRAN.data.no.outliers$Transition.wavenumber[
155       df.HITRAN.data.no.outliers$Line.Intensity == comp][1]
156     if(is.na(comp)){
157       print("Warning!!!")
158       b.removed <- FALSE
159     }
160     old.dim <- dim(df.HITRAN.data.no.outliers)
161     # Break hier stimmt was nicht
162     df.HITRAN.data.no.outliers <- df.HITRAN.data.no.outliers[
163       !(df.HITRAN.data.no.outliers$subband.number == i &
164         df.HITRAN.data.no.outliers$subband.part == -2 &
165         df.HITRAN.data.no.outliers$Line.Intensity < comp &
166         df.HITRAN.data.no.outliers$Transition.wavenumber >
167         last.wave.number) ,]
168     new.dim <- dim(df.HITRAN.data.no.outliers)
169     if(old.dim[1] == new.dim[1]){
170       b.removed <- FALSE
171     }
172     j <- j+1
173     #print(j)
174   }
175
176 # right
177 n.length.of.right.subband <- sum(
178   df.HITRAN.data.no.outliers$subband.number==i &
179   df.HITRAN.data.no.outliers$subband.part == -1,
180   na.rm = TRUE)
181 b.removed <- 0
182 j <- n.length.of.right.subband
183 k <- 0
184 # go through lines and delete smaller ones as long as there are some to
185 # be removed
186
187 while(b.removed < 2){
188   # 2 means that there might be the case where the function is not
189   # exactly monotonous
190   comp <- df.HITRAN.data.no.outliers$Line.Intensity[
191     df.HITRAN.data.no.outliers$subband.number == i &
192     df.HITRAN.data.no.outliers$subband.part == -1][j-k]
193   last.wave.number <- df.HITRAN.data.no.outliers$Transition.wavenumber[
194     df.HITRAN.data.no.outliers$Line.Intensity == comp][length(
195     df.HITRAN.data.no.outliers$Transition.wavenumber[

```

```

196         df.HITRAN.data.no.outliers$Line.Intensity == comp)])
197 if (is.na(comp)) {
198     print("Warning!!!")
199     b.removed <- FALSE
200 }
201 old.dim <- dim(df.HITRAN.data.no.outliers)
202 df.HITRAN.data.no.outliers <- df.HITRAN.data.no.outliers[
203     !(df.HITRAN.data.no.outliers$subband.number == i &
204       df.HITRAN.data.no.outliers$subband.part == -1 &
205       df.HITRAN.data.no.outliers$Line.Intensity < comp &
206       df.HITRAN.data.no.outliers$Transition.wavenumber <
207         last.wave.number),]
208 new.dim <- dim(df.HITRAN.data.no.outliers)
209 if (old.dim[1] == new.dim[1]) {
210     b.removed <- b.removed+1
211 }
212 n.length.of.right.subband <- sum(
213     df.HITRAN.data.no.outliers$subband.number==i &
214     df.HITRAN.data.no.outliers$subband.part == -1, na.rm = TRUE)
215 j <- n.length.of.right.subband
216 k <- k+1
217 #print(k)
218 }
219 }
220 }
221 }
222 }
223 }
224 }
225 ##### Calculate average line distance and mean intensity #####
226 print("Calculating the main properties for df.HITRAN.data.no.outliers")
227 CalcGrayness(df.HITRAN.data.no.outliers)
228 print("-----")
229
230
231
232 ##### Plot data #####
233 breaks <- 1:6*5.0e-20
234
235 plot.HITRAN.data.reduced <- ggplot(df.HITRAN.data.reduced,
236     aes(x = Transition.wavenumber,
237         y = Line.Intensity)) +
238     geom_point() + theme_bw() +
239     theme(text = element_text(size=22),
240         panel.grid.minor = element_line(color = "lightgrey", size = 0.7),
241         panel.grid.major = element_line(color = "lightgrey", size = 0.8)) +
242     scale_x_continuous(expand = c(0,0)) +
243     scale_y_continuous(
244         breaks = breaks,
245         limits = c(0, 1.05*max(df.HITRAN.data.reduced$Line.Intensity)),
246         expand = c(0,0),
247         labels = ThreeDigits) +
248     labs(x = expression(paste("Wellenzahl / ", cm^{-1})),
249         y = expression(paste("S / (", cm^{-1}, " / (molec ", cm^{-2}, ")")))+
250     geom_vline(xintercept = cuts[1]) +
251     geom_vline(xintercept = cuts[2]) +
252     annotate("text", x = 643.5, y = 3.06e-19,
253         label = "B1", color = "black", size = 5) +
254     annotate("text", x = 669, y = 3.06e-19,
255         label = "B2", color = "black", size = 5) +
256     annotate("text", x = 693, y = 3.06e-19,
257         label = "B3", color = "black", size = 5)

```

```

258
259 plot.HITRAN.data.no.outliers <-
260   ggplot(df.HITRAN.data.no.outliers , aes(x = Transition.wavenumber ,
261                                           y = Line.Intensity)) +
262   geom_point() + theme_bw() +
263   theme(text = element_text(size=22),
264         panel.grid.minor = element_line(color = "lightgrey", size = 0.7),
265         panel.grid.major = element_line(color = "lightgrey", size = 0.8)) +
266   scale_x_continuous(expand = c(0,0)) +
267   scale_y_continuous(
268     breaks = breaks ,
269     limits = c(0, 1.05*max(df.HITRAN.data.reduced$Line.Intensity)),
270     expand = c(0,0),
271     labels = ThreeDigits) +
272   labs(x = expression(paste("Wellenzahl / " , cm{-1})),
273        y = expression(paste("S / ( " , cm{-1} , "/( molec" , cm{-2},") "))) +
274   geom_vline(xintercept = cuts[1]) +
275   geom_vline(xintercept = cuts[2]) +
276   annotate("text", x = 643.5, y = 3.06e-19,
277           label = "B1", color = "black", size = 5) +
278   annotate("text", x = 669, y = 3.06e-19,
279           label = "B2", color = "black", size = 5) +
280   annotate("text", x = 693, y = 3.06e-19,
281           label = "B3", color = "black", size = 5)
282
283
284
285 # plot.HITRAN.dynamic <- plot_ly(df.HITRAN.data.reduced ,
286 #                                x = Transition.wavenumber ,
287 #                                y = Line.Intensity ,
288 #                                color = factor(Isotopologue.number) ,
289 #                                name = "CO2 HITRAN Data")
290
291 #plot.HITRAN.dynamic.reduced.intensity <-
292 # plot_ly(df.HITRAN.data.no.outliers , x = Transition.wavenumber ,
293 #         y = Line.Intensity , color = factor(Isotopologue.number) ,
294 #         name = "CO2 HITRAN Data")
295
296 ##### Plot log data #####
297 #plot.log.HITRAN.data.static <-
298 # ggplot(df.HITRAN.data.reduced ,
299 #        aes(x = Transition.wavenumber ,
300 #            y = log.line.intensity ,
301 #            color = factor(Isotopologue.number))) +
302 # geom_point()
303
304 # plot.log.HITRAN.dynamic <- plot_ly(df.HITRAN.data.reduced ,
305 #                                    x = Transition.wavenumber ,
306 #                                    y = log.line.intensity ,
307 #                                    color = factor(Isotopologue.number) ,
308 #                                    name = "CO2 HITRAN Data")
309
310 #plot.log.HITRAN.data.static.reduced.intensity <-
311 # ggplot(df.HITRAN.data.no.outliers ,
312 #        aes(x = Transition.wavenumber ,
313 #            y = log.line.intensity ,
314 #            color = factor(Isotopologue.number))) +
315 # geom_point()
316
317
318 #plot.log.HITRAN.dynamic.reduced.intensity <-
319 # plot_ly(df.HITRAN.data.no.outliers , x = Transition.wavenumber ,

```

```

320 #           y = log.line.intensity ,
321 #           color = factor(Isotopologue.number),name = "CO2 HITRAN Data")
322
323
324
325 ##### Save data frames for every block #####
326 df.HITRAN.data.reduced.B1 <- df.HITRAN.data.reduced [
327   df.HITRAN.data.reduced$Transition.wavenumber >= min.wave.num &
328   df.HITRAN.data.reduced$Transition.wavenumber <= cuts [1] ,]
329
330 df.HITRAN.data.reduced.B2 <- df.HITRAN.data.reduced [
331   df.HITRAN.data.reduced$Transition.wavenumber >= cuts [1] &
332   df.HITRAN.data.reduced$Transition.wavenumber <= cuts [2] ,]
333
334 df.HITRAN.data.reduced.B3 <- df.HITRAN.data.reduced [
335   df.HITRAN.data.reduced$Transition.wavenumber >= cuts [2] &
336   df.HITRAN.data.reduced$Transition.wavenumber <= max.wave.num ,]
337
338
339 df.HITRAN.data.no.outliers.B1 <- df.HITRAN.data.no.outliers [
340   df.HITRAN.data.no.outliers$Transition.wavenumber >= min.wave.num &
341   df.HITRAN.data.no.outliers$Transition.wavenumber <= cuts [1] ,]
342
343 df.HITRAN.data.no.outliers.B2 <- df.HITRAN.data.no.outliers [
344   df.HITRAN.data.no.outliers$Transition.wavenumber >= cuts [1] &
345   df.HITRAN.data.no.outliers$Transition.wavenumber <= cuts [2] ,]
346
347 df.HITRAN.data.no.outliers.B3 <- df.HITRAN.data.no.outliers [
348   df.HITRAN.data.no.outliers$Transition.wavenumber >= cuts [2] &
349   df.HITRAN.data.no.outliers$Transition.wavenumber <= max.wave.num ,]
350
351
352 ### Calculate average line distance and mean intensity for every block #####
353 print("Calculating the main properties for df.HITRAN.data.reduced.B1")
354 CalcGrayness(df.HITRAN.data.reduced.B1)
355 print("_____")
356
357 print("Calculating the main properties for df.HITRAN.data.reduced.B2")
358 CalcGrayness(df.HITRAN.data.reduced.B2)
359 print("_____")
360
361 print("Calculating the main properties for df.HITRAN.data.reduced.B3")
362 CalcGrayness(df.HITRAN.data.reduced.B3)
363 print("_____")
364
365
366 print("Calculating the main properties for df.HITRAN.data.no.outliers.B1")
367 CalcGrayness(df.HITRAN.data.no.outliers.B1)
368 print("_____")
369
370 print("Calculating the main properties for df.HITRAN.data.no.outliers.B2")
371 CalcGrayness(df.HITRAN.data.no.outliers.B2)
372 print("_____")
373
374 print("Calculating the main properties for df.HITRAN.data.no.outliers.B3")
375 CalcGrayness(df.HITRAN.data.no.outliers.B3)
376 print("_____")
377
378 ##### Set back directory #####
379 setwd(original.directory)
380
381 ##### End of Script #####

```

```

382 rm(b.removed, b.test1, b.test2, b.test3, b.test4, comp, delete.outliers,
383     filter.isotopologue.number, i, j, k, last.wave.number, left.border,
384     max.wave.num, middle.border, min.wave.num, n.length.of.left.subband,
385     n.length.of.right.subband, n.max.intensity, n.max.subband, n.of.subbands,
386     n.outlier.ln, new.dim, old.dim, right.border, breaks)

```

R/mainHITRAN.R

### A.16.3 abscoeffHITRAN.R

```

1 #####
2 ##
3 ## Sub program to calculate the average mass absorption coefficient from
4 ## HITRAN Data and plot Elsasser function
5 ##
6 ## Established:      08.06.2016
7 ## Last modification: 17.08.2016
8 ##
9 #####
10
11 ##### Programming details #####
12 library(reshape2) # damit man aus mehrere Spalten zwei machen kann
13 library(ggplot2)
14 source("mainHITRAN.R") # in order to get the HITRAN data
15
16 ##### Parameter section #####
17
18 # Choose which data range to work with (1: full range, 2: 15\mu m range,
19 #                                     3: 15\mu m range without outliers,
20 #                                     4: free range ("add elssasser"
21 #                                     doesn't work here))
22 data.range <- 4
23
24 # free range (if data.range == 4)
25 from <- 620.0 # wave number
26 to   <- 715.0 # wave number
27
28 # Temperature and pressure to calculate the mean absorption coefficient
29
30 #Gamma <- c(295, 215, 240, 170, 310)
31 #p <- c(1013, 100, 1, 1e-3, 1e-5) # in hPa
32
33 T <- c(296)
34 p <- c(1013.15)
35 ##### Natural constants #####
36 N_A <- 6.022140857e23 # Avogadro constant
37 M_CO2 <- 44e-3 # molar mass of carbon dioxide in kg/mol
38 h <- 6.626070040e-34
39 c <- 299792458
40 kb <- 1.38064852e-23
41 conc <- 400e-6 # Teilchenzahldichte von CO2
42 T0 <- 296
43 a <- h*c/kb
44 p0 <- 1013.25 # reference pressure in hPa
45
46 ##### Data selection #####
47 ## Select correct data and define the wave number range for calculating the
48 # absorption coefficient (x axis (wavenumber)) as well as define the correct
49 # breaks for plotting
50
51 if(data.range == 1) #all lines

```

```

52 {
53   df. absorption <- df.HITRAN.data
54   x <- seq(0, 20000, 0.05)
55   x <- c(x, df. absorption$Transition.wavenumber)
56   x <- x[!duplicated(x)]
57   x <- sort(x)
58   breaks <- 10**(-8:6)
59   minorbreaks <- sort(unlist(lapply(1:10, function(i) i*breaks)))
60 } else if(data.range == 2){ #lines from 15\mu m band
61   df. absorption <- df.HITRAN.data.reduced
62   x <- seq(620, 715, 0.01)
63   x <- c(x, df. absorption$Transition.wavenumber)
64   x <- x[!duplicated(x)]
65   x <- sort(x)
66   breaks <- 10**(-6:5)
67   minorbreaks <- sort(unlist(lapply(1:10, function(i) i*breaks)))
68 } else if(data.range == 3){ #ines from cleande 15\mu m band
69   df. absorption <- df.HITRAN.data.no.outliers
70   x <- seq(620, 715, 0.01)
71   x <- c(x, df. absorption$Transition.wavenumber)
72   x <- x[!duplicated(x)]
73   x <- sort(x)
74   breaks <- 10**(-6:5)
75   minorbreaks <- sort(unlist(lapply(1:10, function(i) i*breaks)))
76 } else if(data.range == 4){
77   df. absorption <-
78     df.HITRAN.data[df.HITRAN.data$Transition.wavenumber >= from &
79     df.HITRAN.data$Transition.wavenumber <= to,]
80   x <- seq(from, to, 0.005)
81   x <- c(x, df. absorption$Transition.wavenumber)
82   x <- x[!duplicated(x)]
83   x <- sort(x)
84   breaks <- 10**(-8:6)
85   minorbreaks <- sort(unlist(lapply(1:10, function(i) i*breaks)))
86   } else {
87     print(paste("You have not set the data.range correctly.",
88               "We could not choose the absorption lines.", sep=" "))
89   }
90
91 ### Calculate line intensity depending on temperature #####
92 # T is one single temperature
93
94 f.line.intensities <- function(T, df, T0, a, block){
95   if(block != 0){
96     df <- df[df$subband.number==block,]
97   }
98
99   v.line.intesity <- df$Line.Intensity
100   v.exponent <- df$Temperature.dependence.of.air.width
101   v.low.frequency <- df$lower.state.Energy
102   v.S <- rep(NA, length(v.line.intesity))
103
104   for (i in 1:length(v.line.intesity)){
105     v.S[i] <- v.line.intesity[i]*(T/T0)^v.exponent[i]*
106     exp(-v.low.frequency[i]*100*a*(1/T-1/T0))
107   }
108   result <- v.S
109   return(result)
110 }
111
112
113 ### Calculate line width depending on temperature and pressure #####

```

```

114 f.line.width <- function(T, p, df, T0, p0, conc, block){
115   # if you don't want to choose a block, call it by block=0
116
117   # p in hPa otherwise convert (does not work with low pressures)
118   if(p > 1100){
119     p <- p/100
120   }
121   if(block != 0){
122     df <- df[df$subband.number==block,]
123   }
124
125   v.air.broadened.width <- df$Air.broadened.width
126   v.self.broadened.width <- df$Self.broadened.width
127   v.exponent <- df$Temperature.dependence.of.air.width
128   v.gamma <- rep(NA, length(v.air.broadened.width))
129   ppart <- p*conc/p0
130   p <- p/p0
131
132   for (i in 1:length(v.air.broadened.width)){
133     v.gamma[i] <- (T0/T)^v.exponent[i]*(v.air.broadened.width[i]*(p-ppart)-
134                                           v.self.broadened.width[i]*ppart)
135   }
136   result <- v.gamma
137   return(result)
138 }
139
140 ### Add Columns with new values of band strength and line width #####
141 if(length(T) == length(p)){
142   for(i in 1:length(T)){
143     .col.name.S <- paste("S(T",i,")",sep="")
144     .col.name.Gamma <- paste("Gamma(T",i,")",sep="")
145     df.absorption[[".col.name.S"]] <-
146       f.line.intensities(T[i], df=df.absorption, T0, a, block=0)
147     df.absorption[[".col.name.Gamma"]] <-
148       f.line.width(T[i], p[i], df=df.absorption, T0, p0, conc, block=0)
149   }
150 }else{
151   stop("Eingabe der Temperatur und des Druckes ist falsch.")
152 }
153
154
155
156 ### 1. way: calculate the mass absorptioncoeff for every line and then #####
157 ###
158 # (Does not work for many lines due to too much memory
159 # consumption) -> Only use for small range
160
161 if(length(df.absorption[[1]]) <= 5000){
162
163   # First the absorption coefficient at the reference point #####
164   wn_c <- df.absorption$Transition.wavenumber
165   S <- df.absorption$Line.Intensity
166   S <- S * N_A * 1e-4 / (M_CO2 * pi)
167   gamma <- df.absorption$Air.broadened.width
168
169   # schreibe data.frame mit wn-wn_c als Spalten (Anzahl der Spalte =
170   # Anzahl der betrachteten x-Werte)
171   df.data <- as.data.frame(-sapply(wn_c, function(wn_c) wn_c-x))
172
173   # dividiere die erste Spalte mit dem ersten Eintrag aus Vektor gamma, die
174   # zweite mit dem zweiten Eintrag usw
175   df.data <- as.data.frame(sapply(1:ncol(df.data),

```

```

176         function(i) df.data[i]/gamma[i]))
177
178 # Berechne die Linienform
179 df.data <- as.data.frame(1/(1+df.data^2))
180
181 # Berechne kappa
182 df.data <- as.data.frame(sapply(1:ncol(df.data),
183                               function(i) df.data[i]*S[i]/gamma[i]))
184
185 # Benenne die Spalten korrekt
186 colnames(df.data) <- paste("Line",1:length(wn_c), sep="")
187
188 # Hänge die x-Werte (Wellenzahlen) an
189 df.data$wavenumber <- x
190
191 # Bringe die Tabelle ins richtige Format
192 df.AbsCoeff <- melt(df.data, id="wavenumber")
193 colnames(df.AbsCoeff) <- c("wavenumber", "line", "kappa")
194
195
196 # Lösche zum Addieren der Spalten die letzte Spalte mit den Wellenzahlen
197 df.data <- df.data[,-dim(df.data)[2]]
198
199 # Addiere die Werte der Massenabsorptionskoeffizienten
200 v.massabscoeff <- rowSums(df.data)
201
202 df.MassAbsCoef <- data.frame(wavenumber = x,
203                              MassAbsCoeff = v.massabscoeff)
204 df.MassAbsCoef$run <- 0
205
206 #### Plotting
207 # all individual lines
208 plot.abscoeff.all.lines <- ggplot(df.AbsCoeff,
209                                   aes(x = wavenumber,
210                                       y = kappa,
211                                       color = factor(line))) +
212   geom_line() + theme_bw() +
213   theme(text = element_text(size=11),
214         legend.position = "none",
215         panel.grid.minor = element_line(color = "lightgrey", size = 0.7),
216         panel.grid.major = element_line(color = "lightgrey", size = 0.8))+
217   scale_x_continuous(expand = c(0,0)) +
218   scale_y_continuous(
219     limits = c(0, 1.05*max(df.AbsCoeff$kappa)),
220     expand = c(0,0)) +
221   labs(x = expression(paste("Wellenzahl / ", cm^{-1})),
222        y = expression(paste(kappa, "*", " / (", m^{2}, " / kg))))
223
224
225 # mass absorption coefficient (sum of all lines)
226 plot.abscoeff.sum.of.all.lines <- ggplot(df.MassAbsCoef,
227                                           aes(x = wavenumber,
228                                               y = MassAbsCoeff)) +
229   geom_line() + theme_bw() +
230   theme(text = element_text(size=11),
231         legend.position = "none",
232         panel.grid.minor = element_line(color = "lightgrey", size = 0.7),
233         panel.grid.major = element_line(color = "lightgrey", size = 0.8))+
234   scale_x_continuous(expand = c(0,0)) +
235   scale_y_continuous(expand = c(0,0),
236                       limits = c(0,1.05*max(df.MassAbsCoef$MassAbsCoeff)))+
237   labs(x = expression(paste("Wellenzahl / ", cm^{-1})),

```

```

238     y = expression(paste(kappa, " / (", m^{2}, " / kg)"))
239
240
241 plotymin <- ifelse(min(df.MassAbsCoef$MassAbsCoeff[
242   !is.na(df.MassAbsCoef$MassAbsCoeff)] < 1e-8, 1e-8,
243   min(df.MassAbsCoef$MassAbsCoeff[!is.na(df.MassAbsCoef$MassAbsCoeff)]))
244
245 plot.abscoeff.sum.of.all.lines.log <- ggplot(df.MassAbsCoef,
246                                           aes(x = wavenumber,
247                                               y = MassAbsCoeff)) +
248   geom_line() +
249   theme_bw()+
250   theme(text = element_text(size=11),
251         panel.grid.minor = element_line(color = "lightgrey", size = 0.7),
252         panel.grid.major = element_line(color = "lightgrey", size = 0.8))+
253   scale_x_continuous(expand = c(0,0)) +
254   scale_y_log10(breaks = breaks, minor_breaks = minorbreaks,
255               labels = breaks,
256               limits = c(plotymin,
257                          1.05*max(df.MassAbsCoef$MassAbsCoeff,
258                                  na.rm = TRUE)),
259               expand = c(0,0)) +
260   labs(x = expression(paste("Wellenzahl / ", cm^{-1})),
261        y = expression(paste(kappa, " / (", m^{2}, " / kg)"))
262
263
264 save(df.MassAbsCoef, file="df.MassAbsCoef1.Rdata")
265
266
267 # Second the absorption coefficient at the other points #####
268 for(i in 1:length(T)){
269   #wn_c <- df.absorption$Transition.wavenumber
270   .col.name.S <- paste("S(T", i, ")", sep="")
271   .col.name.Gamma <- paste("Gamma(T", i, "p", i, ")", sep="")
272
273   S <- df.absorption[[".col.name.S"]]
274   S <- S * N_A * 1e-4 / (M_CO2 * pi)
275   gamma <- df.absorption[[".col.name.Gamma"]]
276
277   # schreibe data.frame mit wn-wn_c als Spalten (Anzahl der Spalte =
278   # Anzahl der betrachteten x-Werte)
279   df.data <- as.data.frame(-sapply(wn_c, function(wn_c) wn_c-x))
280
281   # Es kann sein, dass wir irgendwo eine 0 haben.
282
283   # dividiere die erste Spalte mit dem ersten Eintrag aus Vektor gamma,
284   # die zweite mit dem zweiten Eintrag usw
285   df.data <- as.data.frame(sapply(1:ncol(df.data),
286                                  function(i) df.data[i]/gamma[i]))
287
288   # Berechne die Linienform
289   df.data <- as.data.frame(1/(1+df.data^2))
290
291   # Berechne kappa
292   df.data <- as.data.frame(sapply(1:ncol(df.data),
293                                  function(i) df.data[i]*S[i]/gamma[i]))
294
295   # Benenne die Spalten korrekt
296   colnames(df.data) <- paste("Line", 1:length(wn_c), sep="")
297
298   # Hänge die x-Werte (Wellenzahlen) an
299   df.data$wavenumber <- x

```

```

300
301 # Bringe die Tabelle ins richtige Format
302 df.AbsCoeff <- melt(df.data, id="wavenumber")
303 colnames(df.AbsCoeff) <- c("wavenumber", "line", "kappa")
304
305
306 # Lösche zum Addieren der Spalten die letzte Spalte mit den Wellenzahlen
307 df.data <- df.data[,-dim(df.data)[2]]
308
309 # Addiere die Werte der Massenabsorptionskoeffizienten
310 v.massabscoeff <- rowSums(df.data)
311
312 df.MassAbsCoef <- rbind(df.MassAbsCoef,
313                        data.frame(wavenumber = x,
314                                  MassAbsCoeff = v.massabscoeff,
315                                  run = i))
316
317
318 ### Plotting
319
320 # mass absorption coefficient (sum of all lines)
321 .df.plot <- df.MassAbsCoef[df.MassAbsCoef$run==i,]
322
323 plotymin <- ifelse(min(.df.plot$MassAbsCoeff[
324 !is.na(.df.plot$MassAbsCoeff)])<1e-10, 1e-10,
325 min(.df.plot$MassAbsCoeff[!is.na(.df.plot$MassAbsCoeff)]))
326
327 breaks <- 10**(-10:12)
328 minorbreaks <- sort(unlist(lapply(1:10, function(i) i*breaks)))
329
330 plot.abscoeff.sum.of.all.lines.log <- ggplot(.df.plot,
331                                             aes(x = wavenumber,
332                                                y = MassAbsCoeff)) +
333   geom_line() +
334   theme_bw()+
335   theme(
336     text = element_text(size=11),
337     panel.grid.minor = element_line(color = "lightgrey", size = 0.7),
338     panel.grid.major = element_line(color = "lightgrey", size = 0.8)) +
339   scale_x_continuous(expand = c(0,0)) +
340   scale_y_log10(
341     breaks = breaks, minor_breaks = minorbreaks,
342     labels = breaks,
343     limits = c(plotymin, 1.05*max(.df.plot$MassAbsCoeff, na.rm = TRUE)),
344     expand = c(0,0)) +
345   labs(x = expression(paste("Wellenzahl / ", cm-1)),
346        y = expression(paste(kappa, " / (", m2, " / kg)")))
347
348 assign(paste("plot.abscoeff.sum.of.all.lines.", i, sep=""),
349        plot.abscoeff.sum.of.all.lines.log)
350
351 save(plot.abscoeff.sum.of.all.lines.log,
352      file=paste("plot.MassAbsCoef.Tp.", i, ".Rdata", sep=""))
353 }
354
355 save(df.MassAbsCoef, file="df.MassAbsCoef.all.Rdata")
356
357 ### Calculate an approximate kappa for given T and p #####
358
359 .df.HITRAN.data <- df.absorption
360
361 #Add line numbers to df.HITRAN.data

```

```

362 .df.HITRAN.data$line <- 1:dim(.df.HITRAN.data)[1]
363
364 wn <- x
365 number.of.bands <- length(cuts)+1
366
367 for(j in 1:length(T)){
368
369   .df.MassAbsCoef <- df.MassAbsCoef[df.MassAbsCoef$run==j,]
370   .df.MassAbsCoef$line <- 1:dim(.df.MassAbsCoef)[1]
371
372   for(i in 1:number.of.bands){
373     .left.border <- ifelse(i==1, wn[1], cuts[i-1])
374     .right.border <- ifelse(i==number.of.bands, wn[length(wn)], cuts[i])
375
376     .lines <- .df.HITRAN.data$line [
377       .df.HITRAN.data$Transition.wavenumber > .left.border &
378       .df.HITRAN.data$Transition.wavenumber < .right.border ]
379
380     .col.name.Gamma <- paste("Gamma(T",j," ,p",j," )",sep="")
381     delta <- mean(diff(.df.HITRAN.data$Transition.wavenumber[.lines]))
382     gamma <- mean(.df.HITRAN.data[.col.name.Gamma][.lines])
383     y <- gamma/delta
384
385     .col.name.S <- paste("S(T",j," )",sep="")
386     .S <- sum(.df.HITRAN.data[.col.name.S][.lines])
387     .S <- .S/ (.right.border-.left.border)
388     .S <- .S* N_A * 1e-4 / (M_CO2)
389
390     .wn.left <- ifelse(i==1, wn[1], cuts[i-1])
391     .wn.right <- ifelse(i==number.of.bands, wn[length(wn)], cuts[i])
392     .wn <- wn[wn >= .wn.left & wn <= .wn.right]
393
394     .lines2 <- .df.MassAbsCoef$line [
395       .df.MassAbsCoef$wavenumber >= .left.border &
396       .df.MassAbsCoef$wavenumber <= .right.border ]
397
398     .kappamean <- mean(.df.MassAbsCoef$MassAbsCoeff[.lines2])
399
400     print(paste("The mean mass absorption coefficient for band",
401               i,"and temperature and pressure value",j," is",
402               .kappamean, "and the grayness parameter is", y,
403               "and the mean line intensity is ", .S,
404               sep=" "))
405
406     #df.MassAbsCoefWithElsasser$MassAbsCoeff.elsasser[.lines2] <-
407     # .kappamean * f.elsasser(.wn, y, delta)
408   }
409 }
410 }
411
412
413
414
415
416 ##### 2. way: Integrate as stated in the text #####
417 if(length(df.absorption[[1]]) > 5000){
418   start <- x[1] # start of integration
419   end <- x[length(x)] # end of integration
420
421   n.steps <- length(x) # number of steps for integration
422
423   # import data frame which has already been calculated if we are dealing

```

```

424 # with the complete range (0-20000 cm-1) -> 400001 steps
425 if(n.steps == 400001 & file.exists("df.MassAbsCoef2_400001.Rdata")){
426   load("df.MassAbsCoef2_400001.Rdata")
427 }else if(n.steps == 9501 & file.exists("df.MassAbsCoef2_9501.Rdata")){
428   load("df.MassAbsCoef2_9501.Rdata")
429 }else if(n.steps == 16559 & file.exists("df.MassAbsCoef2_16559.Rdata")){
430   load("df.MassAbsCoef2_9501.Rdata")
431 }else if(n.steps == 20162 & file.exists("df.MassAbsCoef2_20162.Rdata")){
432   load("df.MassAbsCoef2_20162.Rdata")
433 }else{
434   delta_wn <- (x[length(x)]-x[1])/(length(x)-1)
435   half.interval <- delta_wn/2
436
437   v.sigma <- rep(NA, n.steps) # Initialisierung vom Vektor v.sigma
438   .nu <- start #=nu_i that goes through entire x range
439
440   # add line numbers to df.absorption
441   df.absorption$line.number <- 1:dim(df.absorption)[1]
442
443   for (i in 1:n.steps){
444     .res <- 0
445
446     # consider only lines within plus/minus 10cm-1 of .nu
447     .lines <- df.absorption$line.number[
448       df.absorption$Transition.wavenumber > (.nu - 10) &
449       df.absorption$Transition.wavenumber < (.nu + 10)]
450
451     for (j in .lines){
452
453       .S <- df.absorption$Line.Intensity[j]
454       .nu_c <- df.absorption$Transition.wavenumber[j]
455       .gamma <- df.absorption$Air.broadened.width[j]
456
457       .a1 <- atan((.nu+half.interval-.nu_c)/.gamma)
458       .a2 <- atan((.nu-half.interval-.nu_c)/.gamma)
459       .res <- .res + .S*(.a1-.a2)
460     }
461
462     print(paste("Durchlauf",i,"von",n.steps,"geschafft.", sep=" "))
463     .nu <- .nu+delta_wn
464     v.sigma[i] <- .res
465   }
466
467   save(v.sigma, file="vsigma.Rdata")
468
469   v.sigma <- (v.sigma * 1e-4) / (pi*delta_wn)
470   v.massabscoeff2 <- v.sigma * (N_A / M_CO2)
471
472   df.MassAbsCoef2 <- data.frame(wavenumber = x,
473                                 MassAbsCoeff = v.massabscoeff2)
474
475 }
476
477 plot.abscoeff.sum.of.all.lines2 <- ggplot(df.MassAbsCoef2,
478                                           aes(x = wavenumber,
479                                               y = MassAbsCoeff)) +
479
480 geom_line() + theme_bw()+
481 theme(text = element_text(size=11),
482       legend.position = "none",
483       panel.grid.minor = element_line(color = "lightgrey", size = 0.7),
484       panel.grid.major = element_line(color = "lightgrey", size = 0.8),
485       plot.margin = margin(t = 5.5, r = 15, b = 5.5, l = 5.5,

```

```

486         unit = "pt")) +
487 scale_x_continuous(expand = c(0,0)) +
488 scale_y_continuous(expand = c(0,0),
489                   limits = c(0,1.05*max(df.MassAbsCoef2$MassAbsCoeff,
490                                       na.rm = TRUE))) +
491 labs(x = expression(paste("Wellenzahl / " , cm^{-1})),
492      y = expression(paste(kappa, " / ( " , m^{2} , " / kg)")))
493
494
495 # Before plotting the log plot, make all zeros to NA
496 df.MassAbsCoef2$MassAbsCoeff[df.MassAbsCoef2$MassAbsCoeff == 0] <- NA
497 plotymin <- ifelse(min(df.MassAbsCoef2$MassAbsCoeff[
498   !is.na(df.MassAbsCoef2$MassAbsCoeff)]) < 1e-8, 1e-8,
499   min(df.MassAbsCoef2$MassAbsCoeff[!is.na(df.MassAbsCoef2$MassAbsCoeff)]))
500
501 if(n.steps == 400001){
502   plot.abscoeff.sum.of.all.lines2.log <- ggplot(df.MassAbsCoef2,
503                                                aes(x = wavenumber,
504                                                  y = MassAbsCoeff)) +
505
506   geom_line() +
507   theme_bw()+
508   theme(
509     text = element_text(size=11),
510     panel.grid.minor = element_line(color = "lightgrey", size = 0.7),
511     panel.grid.major = element_line(color = "lightgrey", size = 0.8),
512     plot.margin = margin(t = 5.5, r = 15, b = 5.5, l = 5.5,
513                          unit = "pt")) +
514   scale_x_continuous(expand = c(0,0)) +
515   scale_y_log10(breaks = breaks, minor_breaks = minorbreaks,
516               labels = breaks,
517               limits = c(plotymin,
518                          1.05*max(df.MassAbsCoef2$MassAbsCoeff,
519                                    na.rm = TRUE)),
520               expand = c(0,0)) +
521   labs(x = expression(paste("Wellenzahl / " , cm^{-1})),
522      y = expression(paste(kappa, " / ( " , m^{2} , " / kg)"))) +
523   geom_vline(xintercept=225.25, color="red",
524             linetype="dashed", size = 1)+
525   geom_vline(xintercept=1053.15, color="red",
526             linetype="dashed", size = 1)+
527   geom_vline(xintercept=4665.95, color="red",
528             linetype="dashed", size = 1) +
529   annotate("text", x = 639, y = 10500, label = "1", color = "red") +
530   annotate("text", x = 11250, y = 10500, label = "2", color = "red")
531 }else{
532   plot.abscoeff.sum.of.all.lines2.log <- ggplot(df.MassAbsCoef2,
533                                                aes(x = wavenumber,
534                                                  y = MassAbsCoeff)) +
535
536   geom_line() +
537   theme_bw()+
538   theme(
539     text = element_text(size=11),
540     panel.grid.minor = element_line(color = "lightgrey", size = 0.7),
541     panel.grid.major = element_line(color = "lightgrey", size = 0.8)) +
542   scale_x_continuous(expand = c(0,0)) +
543   scale_y_log10(breaks = breaks, minor_breaks = minorbreaks,
544               labels = breaks,
545               limits = c(plotymin,
546                          1.05*max(df.MassAbsCoef2$MassAbsCoeff,
547                                    na.rm = TRUE)),
548               expand = c(0,0)) +
549   labs(x = expression(paste("Wellenzahl / " , cm^{-1})),

```

```

548     y = expression(paste(kappa, " / (", m^{2} , " / kg)"))
549 }
550
551
552
553 # Zum Plotten mit horizontaler Linie:
554 #p1 <- ggplot(df.MassAbsCoef3,
555 #            aes(x = wavenumber,
556 #                y = MassAbsCoeff)) +
557 # geom_line() +
558 # theme_bw()+
559 # scale_x_continuous(expand = c(0,0))+
560 # scale_y_log10(breaks = breaks, minor_breaks = minorbreaks,
561 #              labels = breaks,
562 #              limits = c(1e-9,2*max(df.MassAbsCoef$MassAbsCoeff)),
563 #              expand = c(0,0)) +
564 # geom_hline(yintercept=0.35, color="red", linetype="dashed", size = 1)+
565 # geom_hline(yintercept=0.25, color="red", linetype="dashed", size = 1)+
566 # geom_hline(yintercept=0.08, color="red", linetype="dashed", size = 1)
567
568 save(df.MassAbsCoef2, file="df.MassAbsCoef2.Rdata")
569
570 # Second the absorption coefficient at the other points #####
571 for(i in 1:length(T)){
572   #wn_c <- df.absorption$Transition.wavenumber
573   .col.name.S <- paste("S(T",i,")",sep="")
574   .col.name.Gamma <- paste("Gamma(T",i,"",p",i,")",sep="")
575
576   S <- df.absorption[[".col.name.S"]]
577   S <- S * N_A * 1e-4 / (M_CO2 * pi)
578   gamma <- df.absorption[[".col.name.Gamma"]]
579
580   # schreibe data.frame mit wn-wn_c als Spalten (Anzahl der Spalte =
581   # Anzahl der betrachteten x-Werte)
582   df.data <- as.data.frame(-sapply(wn_c, function(wn_c) wn_c-x))
583
584   # Es kann sein, dass wir irgendwo eine 0 haben.
585
586   # dividiere die erste Spalte mit dem ersten Eintrag aus Vektor gamma,
587   # die zweite mit dem zweiten Eintrag usw
588   df.data <- as.data.frame(sapply(1:ncol(df.data),
589                                 function(i) df.data[i]/gamma[i]))
590
591   # Berechne die Linienform
592   df.data <- as.data.frame(1/(1+df.data^2))
593
594   # Berechne kappa
595   df.data <- as.data.frame(sapply(1:ncol(df.data),
596                                 function(i) df.data[i]*S[i]/gamma[i]))
597
598   # Benenne die Spalten korrekt
599   colnames(df.data) <- paste("Line",1:length(wn_c), sep="")
600
601   # Hänge die x-Werte (Wellenzahlen) an
602   df.data$wavenumber <- x
603
604   # Bringe die Tabelle ins richtige Format
605   df.AbsCoeff <- melt(df.data, id="wavenumber")
606   colnames(df.AbsCoeff) <- c("wavenumber", "line", "kappa")
607
608
609   # Lösche zum Addieren der Spalten die letzte Spalte mit den

```

```

610 # Wellenzahlen
611 df.data <- df.data[,-dim(df.data)[2]]
612
613 # Addiere die Werte der Massenabsorptionskoeffizienten
614 v.massabscoeff <- rowSums(df.data)
615
616 df.MassAbsCoef <- rbind(df.MassAbsCoef,
617                        data.frame(wavenumber = x,
618                                  MassAbsCoef = v.massabscoeff,
619                                  run = i))
620
621
622 ### Plotting
623
624 # mass absorption coefficient (sum of all lines)
625 .df.plot <- df.MassAbsCoef[df.MassAbsCoef$run==i,]
626
627 plotymin <- ifelse(min(.df.plot$MassAbsCoef[
628 !is.na(.df.plot$MassAbsCoef)])<1e-10, 1e-10,
629 min(.df.plot$MassAbsCoef[!is.na(.df.plot$MassAbsCoef)]))
630
631 breaks <- 10**(-10:12)
632 minorbreaks <- sort(unlist(lapply(1:10, function(i) i*breaks)))
633
634 plot.abscoeff.sum.of.all.lines.log <- ggplot(.df.plot,
635                                             aes(x = wavenumber,
636                                                 y = MassAbsCoef)) +
637   geom_line() +
638   theme_bw()+
639   theme(
640     text = element_text(size=11),
641     panel.grid.minor = element_line(color = "lightgrey", size = 0.7),
642     panel.grid.major = element_line(color = "lightgrey", size = 0.8)) +
643   scale_x_continuous(expand = c(0,0)) +
644   scale_y_log10(
645     breaks = breaks, minor_breaks = minorbreaks,
646     labels = breaks,
647     limits = c(plotymin, 1.05*max(.df.plot$MassAbsCoef, na.rm = TRUE)),
648     expand = c(0,0)) +
649   labs(x = expression(paste("Wellenzahl / ", cm-1)),
650        y = expression(paste("kappa", " / (", m2, " / kg)")))
651
652 assign(paste("plot.abscoeff.sum.of.all.lines.", i, sep=""),
653       plot.abscoeff.sum.of.all.lines.log)
654
655 save(plot.abscoeff.sum.of.all.lines.log,
656      file=paste("plot.MassAbsCoef.Tp.", i, ".Rdata", sep=""))
657 }
658
659 save(df.MassAbsCoef, file="df.MassAbsCoef.all.Rdata")
660
661 ### Calculate an approximate kappa for given T and p #####
662
663 .df.HITRAN.data <- df.absorption
664
665 #Add line numbers to df.HITRAN.data
666 .df.HITRAN.data$line <- 1:dim(.df.HITRAN.data)[1]
667
668 wn <- x
669 number.of.bands <- length(cuts)+1
670
671 for(j in 1:length(T)){

```

```

672 |
673 | .df.MassAbsCoef <- df.MassAbsCoef[df.MassAbsCoef$run==j,]
674 | .df.MassAbsCoef$line <- 1:dim(.df.MassAbsCoef)[1]
675 |
676 | for(i in 1:number.of.bands){
677 |   .left.border <- ifelse(i==1, wn[1], cuts[i-1])
678 |   .right.border <- ifelse(i==number.of.bands, wn[length(wn)], cuts[i])
679 |
680 |   .lines <- .df.HITRAN.data$line [
681 |     .df.HITRAN.data$Transition.wavenumber > .left.border &
682 |     .df.HITRAN.data$Transition.wavenumber < .right.border ]
683 |
684 |   .col.name.Gamma <- paste("Gamma(T",j,"p",j,")",sep="")
685 |   delta <- mean(diff(.df.HITRAN.data$Transition.wavenumber[.lines]))
686 |   gamma <- mean(.df.HITRAN.data[.col.name.Gamma][.lines])
687 |   y <- gamma/delta
688 |   .wn.left <- ifelse(i==1, wn[1], cuts[i-1])
689 |   .wn.right <- ifelse(i==number.of.bands, wn[length(wn)], cuts[i])
690 |   .wn <- wn[wn >= .wn.left & wn <= .wn.right]
691 |
692 |   .lines2 <- .df.MassAbsCoef$line [
693 |     .df.MassAbsCoef$wavenumber >= .left.border &
694 |     .df.MassAbsCoef$wavenumber <= .right.border ]
695 |
696 |   .kappamean <- mean(.df.MassAbsCoef$MassAbsCoeff[.lines2])
697 |
698 |   print(paste("The mean mass absorption coefficient for band",
699 |             i,"and temperature and pressure value",j,"is",
700 |             .kappamean, "and the grayness parameter is", y,
701 |             sep=" "))
702 |
703 |   #df.MassAbsCoefWithElsasser$MassAbsCoeff.elsasser[.lines2] <-
704 |   # .kappamean * f.elsasser(.wn, y, delta)
705 | }
706 | }
707 |
708 | }
709 |
710 | ### Add Elsasser Ansatzfunktion #####
711 | f.elsasser <- function(wn, y, delta){
712 |   pi2 <- 2*pi
713 |   res <- sinh(pi2*y)/(cosh(pi2*y)-cos(pi2*wn/delta))
714 |   return(res)
715 | }
716 |
717 | wn <- x
718 | if(exists("df.MassAbsCoef2")){
719 |   df.MassAbsCoefWithElsasser <- df.MassAbsCoef2[df.MassAbsCoef2$run==0,]
720 | }else{
721 |   df.MassAbsCoefWithElsasser <- df.MassAbsCoef[df.MassAbsCoef$run==0,]
722 | }
723 |
724 | df.MassAbsCoefWithElsasser$MassAbsCoeff.elsasser <- 0
725 |
726 | number.of.bands <- length(cuts)+1
727 |
728 |
729 | # depending on data.range, choose which data.frame with data from HITRAN
730 | #to use
731 | if(data.range == 3){
732 |   .df.HITRAN.data <- df.HITRAN.data.no.outliers
733 | }else{

```

```

734 | .df.HITRAN.data <- df.HITRAN.data
735 | }
736 |
737 | #Add line numbers to df.HITRAN.data
738 | .df.HITRAN.data$line.number <- 1:dim(.df.HITRAN.data)[1]
739 | df.MassAbsCoefWithElsasser$line.number <- 1:dim(
740 |   df.MassAbsCoefWithElsasser)[1]
741 |
742 | for(i in 1:number.of.bands){
743 |   .left.border <- ifelse(i==1, wn[1], cuts[i-1])
744 |   .right.border <- ifelse(i==number.of.bands, wn[length(wn)], cuts[i])
745 |
746 |   .lines <- .df.HITRAN.data$line.number [
747 |     .df.HITRAN.data$Transition.wavenumber > .left.border &
748 |     .df.HITRAN.data$Transition.wavenumber < .right.border ]
749 |   delta <- mean(diff(.df.HITRAN.data$Transition.wavenumber[.lines]))
750 |   gamma <- mean(.df.HITRAN.data$Air.broadened.width[.lines])
751 |   y <- gamma/delta
752 |   .wn.left <- ifelse(i==1, wn[1], cuts[i-1])
753 |   .wn.right <- ifelse(i==number.of.bands, wn[length(wn)], cuts[i])
754 |   .wn <- wn[wn >= .wn.left & wn <= .wn.right]
755 |
756 |   .lines2 <- df.MassAbsCoefWithElsasser$line.number [
757 |     df.MassAbsCoefWithElsasser$wavenumber >= .left.border &
758 |     df.MassAbsCoefWithElsasser$wavenumber <= .right.border ]
759 |
760 |   .kappamean <- mean(df.MassAbsCoefWithElsasser$MassAbsCoeff[.lines2])
761 |
762 |   print(paste("The mean mass absorption coefficient for band",
763 |             i, "is", .kappamean, sep=" "))
764 |
765 |   df.MassAbsCoefWithElsasser$MassAbsCoeff.elsasser[.lines2] <-
766 |     .kappamean * f.elsasser(.wn, y, delta)
767 | }
768 |
769 | df.MassAbsCoefWithElsasser <- df.MassAbsCoefWithElsasser[,c(1:3)]
770 |
771 | df.AbsCoeff.compare <- melt(df.MassAbsCoefWithElsasser, id="wavenumber")
772 |
773 | plotymin <- ifelse(min(df.AbsCoeff.compare$value, na.rm = TRUE) < 1e-8, 1e-8,
774 |                   min(df.AbsCoeff.compare$value, na.rm = TRUE))
775 |
776 | plot.massabs.compare.log <- ggplot(df.AbsCoeff.compare,
777 |                                   aes(x = wavenumber,
778 |                                       y = value,
779 |                                       color = variable)) +
780 |   geom_line() +
781 |   theme_bw() +
782 |   theme(text = element_text(size=11),
783 |         panel.grid.minor = element_line(color = "lightgrey", size = 0.7),
784 |         panel.grid.major = element_line(color = "lightgrey", size = 0.8),
785 |         legend.position="none") +
786 |   scale_x_continuous(expand = c(0,0)) +
787 |   scale_y_log10(breaks = breaks, minor_breaks = minorbreaks,
788 |                labels = breaks,
789 |                limits = c(plotymin,
790 |                            1.05*max(df.AbsCoeff.compare$value,
791 |                                       na.rm = TRUE)),
792 |                expand = c(0,0)) +
793 |   labs(x = expression(paste("Wellenzahl / ", cm^{-1})),
794 |        y = expression(paste(kappa, " / (", m^{2}, " / kg)")))
795 |

```

```

796
797
798 ##### End of Script #####
799 rm(data.range, cuts, .df.HITRAN.data)

```

R/abscoeffHITRAN.R

#### A.16.4 ParameterCalc.R

```

1 #####
2 ##
3 ## Sub program to calculate certain values for getting parameters
4 ##
5 ## Established:      16.06.2016
6 ## Last modification: 20.06.2016
7 ##
8 #####
9
10 ##### Natural constants #####
11 N_A <- 6.022140857e23 # Avogadro constant
12 M_CO2 <- 44e-3      # molar mass of carbon dioxide in kg/mol
13
14
15 ##### Definitions for all calculations #####
16 wn.range <- max(df.HITRAN.data$Transition.wavenumber) -
17   min(df.HITRAN.data$Transition.wavenumber)
18 wn.range_unfiltered <- max(copy.df.HITRAN.data3$Transition.wavenumber) -
19   min(copy.df.HITRAN.data3$Transition.wavenumber)
20
21 .lines.left <- df.HITRAN.data$Transition.wavenumber >= 620 &
22   df.HITRAN.data$Transition.wavenumber < 667
23 .lines.center <- df.HITRAN.data$Transition.wavenumber > 667 &
24   df.HITRAN.data$Transition.wavenumber < 671
25 .lines.right <- df.HITRAN.data$Transition.wavenumber > 671 &
26   df.HITRAN.data$Transition.wavenumber <= 715
27
28 ##### Mean band strengths #####
29
30 # Calculation of band strength for filtered lines
31 K_BS <- sum(df.HITRAN.data$Line.Intensity)*1e-4*N_A/M_CO2
32 K_BS <- K_BS/wn.range
33 print(paste("Mean band strength for filtered data is", K_BS), sep="")
34
35
36 # Calculation of band strength for unfiltered lines
37 K_BS_unfiltered <- sum(copy.df.HITRAN.data3$Line.Intensity)*1e-4*N_A/M_CO2
38 K_BS_unfiltered <- K_BS_unfiltered/wn.range_unfiltered
39 print(paste("Mean band strength for unfiltered data is", K_BS_unfiltered),
40   sep="")
41
42 # Calculation of band strength for filtered lines for left band
43 K_BS <- sum(df.HITRAN.data$Line.Intensity[.lines.left])*1e-4*N_A/M_CO2
44 wn.range <- max(df.HITRAN.data$Transition.wavenumber[.lines.left]) -
45   min(df.HITRAN.data$Transition.wavenumber[.lines.left])
46 K_BS <- K_BS/wn.range
47 print(paste("Mean band strength for filtered data for left band is", K_BS),
48   sep="")
49
50 # Calculation of band strength for filtered lines for central band
51 K_BS <- sum(df.HITRAN.data$Line.Intensity[.lines.center])*1e-4*N_A/M_CO2
52 wn.range <- max(df.HITRAN.data$Transition.wavenumber[.lines.center]) -

```

```

53 | min(df.HITRAN.data$Transition.wavenumber[.lines.center])
54 | K_BS <- K_BS/wn.range
55 | print(paste("Mean band strength for filtered data for central band is",
56 |           K_BS), sep="")
57 |
58 | # Calculation of band strength for filtered lines for right band
59 |
60 | K_BS <- sum(df.HITRAN.data$Line.Intensity[.lines.right])*1e-4*N_A/M_CO2
61 | wn.range <- max(df.HITRAN.data$Transition.wavenumber[.lines.right]) -
62 |   min(df.HITRAN.data$Transition.wavenumber[.lines.right])
63 | K_BS <- K_BS/wn.range
64 | print(paste("Mean band strength for filtered data for right band is",
65 |           K_BS), sep="")
66 |
67 |
68 | ##### Mean line width #####
69 | # air broadened
70 | gamma_air.left <- mean(df.HITRAN.data$Air.broadened.width[.lines.left])
71 | gamma_air.center <- mean(df.HITRAN.data$Air.broadened.width[.lines.center])
72 | gamma_air.right <- mean(df.HITRAN.data$Air.broadened.width[.lines.right])
73 | print(paste("The mean air broadened line width for the filtered data",
74 |           " for the left band is", gamma_air.left), sep="")
75 | print(paste("The mean air broadened line width for the filtered data",
76 |           " for the center band is", gamma_air.center), sep="")
77 | print(paste("The mean air broadened line width for the filtered data",
78 |           " for the right band is", gamma_air.right), sep="")
79 |
80 | # self broadened
81 | gamma_self.left <- mean(df.HITRAN.data$Self.broadened.width[.lines.left])
82 | gamma_self.center <- mean(
83 |   df.HITRAN.data$Self.broadened.width[.lines.center])
84 | gamma_self.right <- mean(
85 |   df.HITRAN.data$Self.broadened.width[.lines.right])
86 | print(paste("The mean self broadened line width for the filtered data",
87 |           " for the left band is", gamma_self.left), sep="")
88 | print(paste("The mean self broadened line width for the filtered data",
89 |           " for the center band is", gamma_self.center), sep="")
90 | print(paste("The mean self broadened line width for the filtered data",
91 |           " for the right band is", gamma_self.right), sep="")
92 |
93 | ##### n exponent (Temperature dependence of air width) #####
94 | n.left <- mean(
95 |   df.HITRAN.data$Temperature.dependence.of.air.width[.lines.left])
96 | n.center <- mean(
97 |   (df.HITRAN.data$Temperature.dependence.of.air.width[.lines.center])
98 |   n.right <- mean(
99 |     df.HITRAN.data$Temperature.dependence.of.air.width[.lines.right])
100 | print(paste("The temperature dependence of air width (n) for the filtered",
101 |           " data for the left band is", n.left), sep="")
102 | print(paste("The temperature dependence of air width (n) for the filtered",
103 |           " data for the center band is", n.center), sep="")
104 | print(paste("The temperature dependence of air width (n) for the filtered",
105 |           " data for the right band is", n.right), sep="")
106 |
107 | ##### mean line separation #####
108 | delta.left <- mean(diff(df.HITRAN.data$Transition.wavenumber[.lines.left]))
109 | delta.center <- mean(
110 |   diff(df.HITRAN.data$Transition.wavenumber[.lines.center]))
111 | delta.right <- mean(
112 |   diff(df.HITRAN.data$Transition.wavenumber[.lines.right]))
113 | print(paste("The mean line separation delta for the filtered data for the",
114 |           " left band is", delta.left), sep="")

```

```

115 print(paste("The mean line separation delta for the filtered data for the",
116           " center band is", delta.center), sep="")
117 print(paste("The mean line separation delta for the filtered data for the",
118           " right band is", delta.right), sep="")
119
120 ##### mean Einstein coefficient #####
121 A21.left <- mean(df.HITRAN.data$Einstein.A.coefficient[.lines.left])
122 A21.center <- mean(df.HITRAN.data$Einstein.A.coefficient[.lines.center])
123 A21.right <- mean(df.HITRAN.data$Einstein.A.coefficient[.lines.right])
124 print(paste("The mean Einstein coefficient for the filtered data for the",
125           " left band is", A21.left), sep="")
126 print(paste("The mean Einstein coefficient for the filtered data for the",
127           " center band is", A21.center), sep="")
128 print(paste("The mean Einstein coefficient for the filtered data for the",
129           " right band is", A21.right), sep="")
130
131 ##### mean lower level statistical weight #####
132 g1.left <- mean(df.HITRAN.data$lower.statistical.weight[.lines.left])
133 g1.center <- mean(df.HITRAN.data$lower.statistical.weight[.lines.center])
134 g1.right <- mean(df.HITRAN.data$lower.statistical.weight[.lines.right])
135 print(paste("The mean lower level statistical weight for the filtered data",
136           " for the left band is", g1.left), sep="")
137 print(paste("The mean lower level statistical weight for the filtered data",
138           " for the center band is", g1.center), sep="")
139 print(paste("The mean lower level statistical weight for the filtered data",
140           " for the right band is", g1.right), sep="")
141
142 ##### mean upper level statistical weight #####
143 g2.left <- mean(df.HITRAN.data$upper.statistical.weight[.lines.left])
144 g2.center <- mean(df.HITRAN.data$upper.statistical.weight[.lines.center])
145 g2.right <- mean(df.HITRAN.data$upper.statistical.weight[.lines.right])
146 print(paste("The mean upper level statistical weight for the filtered data",
147           " for the left band is", g2.left), sep="")
148 print(paste("The mean upper level statistical weight for the filtered data",
149           " for the center band is", g2.center), sep="")
150 print(paste("The mean upper level statistical weight for the filtered data",
151           " for the right band is", g2.right), sep="")

```

R/ParameterCalc.R

## A.16.5 HelpersFunction.R

```

1 #####
2 ##
3 ## Helper's functions for working with HITRAN DB
4 ## Started: 01.04.2016
5 ## Last modification: 03.08.2016
6 ##
7 #####
8
9
10 ##### Elsasser Band function #####
11 f.elsasser <- function(delta, gamma, nu){
12   y <- gamma / delta
13   .factor <- 2*pi
14   .denominator <- cosh(.factor * y) - cos(.factor*nu/delta)
15   .result <- sinh(.factor * y)/.denominator
16   return(.result)
17 }
18
19 ##### Function for wavenumber infrequency conversion #####

```

```

20 # frequency will be saved in 1/s (wavenumber in cm(-1))
21 f.wave.num.fr <- function(wave.num){
22   wave.num <- wave.num * 100
23   .result <- wave.num * c
24   return(.result)
25 }
26
27 ##### Function for frequency in wavenumber conversion #####
28 # wave number will be saved in cm(-1) (nu in 1/s)
29 f.fr.wave.num <- function(nu, c){
30   .result <- nu / c
31   .result <- .result / 100
32   return(.result)
33 }
34
35 ##### Function for wave length in wavenumber conversion #####
36 # wave number will be saved in cm(-1) (wave length in mm)
37 f.wave.num.wl <- function(wave.length){
38   .result <- wave.length * 1e-9 # conversion from mm in m
39   .result <- 1/.result
40   .result <- .result / 100
41   return(.result)
42 }
43
44
45 ##### Calculate four main properties #####
46
47 # line separation
48 CalcGrayness <- function(data.frame){
49   n.line.numbers <- length(data.frame[[1]])
50   n.avg.line.sep <- (max(data.frame$Transition.wavenumber) -
51                     min(data.frame$Transition.wavenumber)) /
52     (n.line.numbers-1)
53
54
55   print(
56     paste("The average line separation (delta) for isotopologue number(s):",
57           filter.isotopologue.number,
58           "is",
59           n.avg.line.sep),
60     sep=" ")
61
62
63 # line width
64 n.avg.line.width <- mean(data.frame$Air.broadened.width)
65 print(paste("The average (air-broadened line width (gamma) for",
66             "isotopologue number(s):", filter.isotopologue.number,
67             "is", n.avg.line.width), sep=" ")
68
69 # grayness parameter
70 print(paste("This leads to a grayness parameter (gamma/delta) of",
71             n.avg.line.width/n.avg.line.sep),
72       sep=" ")
73
74 # mean intensity
75 n.mean.intensity <- mean(data.frame$Line.Intensity)
76 print(paste("The mean intensity (line strength) is:",
77             n.mean.intensity, sep=" "))
78 }
79
80 ##### Only show a certain amount of digits #####
81

```

```

82 TwoDigits = function(x) format(x, digits=2)
83 ThreeDigits = function(x) format(x, digits=3)

```

R/HelpersFunctions.R

## A.16.6 PlanckAndAbsCoeff.R

```

1 # script for product of mass absorption coefficient with Planck function
2 # and Raumwinkel
3
4 library(ggplot2)
5
6 # for T=280 K
7 df.AbsPlanck1 <- df.MassAbsCoef2
8 df.AbsPlanck1 <- df.AbsPlanck1[-1,]
9 df.AbsPlanck1$Temp <- 280
10 df.AbsPlanck1$spectrrad <-
11   df.planck$spectral.radiance[df.planck$Temperature==280] * 100
12 df.AbsPlanck1$angle <- 3.141593
13 df.AbsPlanck1$product <- df.AbsPlanck1$MassAbsCoef *
14   df.AbsPlanck1$spectrrad * df.AbsPlanck1$angle
15
16 # for T=5800 K
17 df.AbsPlanck2 <- df.MassAbsCoef2
18 df.AbsPlanck2 <- df.AbsPlanck2[-1,]
19 df.AbsPlanck2$Temp <- 5800
20 df.AbsPlanck2$spectrrad <-
21   df.planck$spectral.radiance[df.planck$Temperature==5800] * 100
22 df.AbsPlanck2$angle <- 1.14e-8
23 df.AbsPlanck2$product <- df.AbsPlanck2$MassAbsCoef *
24   df.AbsPlanck2$spectrrad *
25   df.AbsPlanck2$angle
26
27 df.AbsPlanck <- rbind(df.AbsPlanck1, df.AbsPlanck2)
28
29 # Plotting
30 xbreaks <- c(0,667,2363,5000,10000,15000,20000)
31 breaks <- 10**(-10:12)
32 minorbreaks <- sort(unlist(lapply(1:10, function(i) i*breaks)))
33 plotymin <- ifelse(min(df.AbsPlanck$product[
34   !is.na(df.AbsPlanck$product)]) < 1e-10, 1e-10,
35   min(df.AbsPlanck$product[!is.na(df.AbsPlanck$product)]))
36
37 plot.prod.abscoeff.planck <- ggplot(
38   df.AbsPlanck,
39   aes(x = wavenumber, y = product, color=as.factor(Temp))) +
40   geom_line() +
41   theme_bw()+
42   theme(legend.position="none",
43         text = element_text(size=11),
44         panel.grid.minor = element_line(color = "lightgrey", size = 0.6),
45         panel.grid.major = element_line(color = "lightgrey", size = 0.7),
46         plot.margin = margin(t = 5.5, r = 15, b = 5.5, l = 5.5,
47                               unit = "pt")) +
48   scale_x_continuous(breaks = xbreaks, expand = c(0,0)) +
49   scale_y_log10(breaks = breaks, minor_breaks = minorbreaks,
50               labels = breaks,
51               limits = c(plotymin,
52                           1.05*max(df.AbsPlanck$product,
53                                   na.rm = TRUE)),
54               expand = c(0,0)) +

```

```

55 labs(x = expression(paste("Wellenzahl / " , cm^{-1})),
56       y = expression(paste(kappa, " ", Omega,
57                             " B / (W / kg", cm^{-1}, ")"))) +
58 geom_vline(xintercept=667.55, color="black",
59            linetype="dotted", size = 1) +
60 geom_vline(xintercept=2362.80, color="black",
61            linetype="dotted", size = 1)
62
63 save(plot.prod.abscoeff.planck, file="plot.kappaproduktvoll.Rdata")
64
65
66
67 plot.prod.abscoeff.planck2 <- ggplot(df.AbsPlanck,
68                                     aes(x = wavenumber,
69                                           y = product,
70                                           color=as.factor(Temp))) +
71
72 geom_line() +
73 theme_bw()+
74 theme(legend.position="none",
75        text = element_text(size=11),
76        panel.grid.minor = element_line(color = "lightgrey", size = 0.6),
77        panel.grid.major = element_line(color = "lightgrey", size = 0.7),
78        plot.margin = margin(t = 5.5, r = 15, b = 5.5, l = 5.5,
79                               unit = "pt")) +
79 scale_x_continuous(breaks = xbreaks,
80                   limits = c(620,715),
81                   expand = c(0,0)) +
82 scale_y_log10(breaks = breaks, minor_breaks = minorbreaks,
83              labels = breaks,
84              limits = c(plotymin,
85                          1.05*max(df.AbsPlanck$product,
86                                    na.rm = TRUE)),
87              expand = c(0,0)) +
88 labs(x = expression(paste("Wellenzahl / " , cm^{-1})),
89       y = expression(paste(kappa, " ",
90                             Omega, " B / (W / kg", cm^{-1}, ")")))+
91 geom_vline(xintercept=667.55, color="black",
92            linetype="dotted", size = 1) +
93 geom_vline(xintercept=2362.80, color="black",
94            linetype="dotted", size = 1)
95
96 plot.prod.abscoeff.planck3 <- ggplot(df.AbsPlanck,
97                                     aes(x = wavenumber,
98                                           y = product,
99                                           color=as.factor(Temp))) +
100
101 geom_line() +
102 theme_bw()+
103 theme(legend.position="none",
104        text = element_text(size=11),
105        panel.grid.minor = element_line(color = "lightgrey", size = 0.6),
106        panel.grid.major = element_line(color = "lightgrey", size = 0.7),
107        plot.margin = margin(t = 5.5, r = 15, b = 5.5, l = 5.5,
108                               unit = "pt")) +
109 scale_x_continuous(breaks = xbreaks,
110                   limits = c(2300,2400),
111                   expand = c(0,0)) +
112 scale_y_log10(breaks = breaks, minor_breaks = minorbreaks,
113              labels = breaks,
114              limits = c(plotymin,
115                          1.05*max(df.AbsPlanck$product,
116                                    na.rm = TRUE)),
117              expand = c(0,0)) +

```

```

117 labs(x = expression(paste("Wellenzahl / " , cm^{-1})),
118       y = expression(paste(kappa, " ", Omega,
119                             " B / (W / kg", cm^{-1}, ")")))+
120 geom_vline(xintercept=667.55, color="black",
121            linetype="dotted", size = 1) +
122 geom_vline(xintercept=2362.80, color="black",
123            linetype="dotted", size = 1)
124
125 save(plot.prod.abscoeff.planck, file="plot.kappaproduktvoll.Rdata")
126
127 rm(df.AbsPlanck1, df.AbsCoeff2)

```

R/PlanckAndAbsCoeff.R

### A.16.7 planck.R

```

1 #####
2 ##
3 ## Sub program to calculate the Planck functino for a given temperature
4 ##
5 ## Established:      15.06.2016
6 ## Last modification: 03.08.2016
7 ##
8 #####
9
10
11 ##### Parameter section #####
12
13 # x axis (wavenumber)
14 start <- 0
15 end <- 20000.00
16 step <- 0.05
17
18 Temp1 <- 280 # temperature in K for earth
19 Temp2 <- 5800 # temperature in K for sun
20
21 ##### Program details #####
22 library(ggplot2)
23
24 ##### Natural constants #####
25 h <- 6.626070040e-34 # Planck constant in J*s
26 c <- 299792458 # speed of light in m/s
27 kb <- 1.38064852e-23 # Boltzmann constant in J/K
28 sigma <- 5.670367 # Stefan-Boltzmann constant in W/(m^2 K^2)
29
30 ##### Helper's function: Planck #####
31 # x is wave number in cm^{-1}
32 a1 <- 2*h*c^2
33 a2 <- (h*c)/kb
34
35 f.planck <- function(x, Temp, a1, a2){
36   a <- a1
37   b <- a2/Temp
38   x <- x*100 # x in m
39   res <- a*x^3 / (exp(b*x)-1)
40   return(res)
41 }
42
43 ##### Calculate B(x, T) #####
44 x <- seq(start, end, step)
45 y1 <- f.planck(x, Temp1, a1, a2)

```

```

46 y2 <- f.planck(x, Temp2, a1, a2)
47
48 df.planck1 <- data.frame(wave.number=x, spectral.radiance = y1,
49                           Temperature = Temp1)
50 df.planck2 <- data.frame(wave.number=x, spectral.radiance = y2,
51                           Temperature = Temp2)
52
53 df.planck <- rbind(df.planck1, df.planck2)
54 df.planck <- df.planck[!is.na(df.planck$spectral.radiance),]
55
56 rm(df.planck1, df.planck2)
57
58 ##### Calculate B(x, T)/ max(B(x,T)) #####
59
60 #Temp1
61 df.planck$spectral.radiance.normalized[df.planck$Temperature == Temp1] <-
62   df.planck$spectral.radiance[df.planck$Temperature == Temp1] /
63   max(df.planck$spectral.radiance[df.planck$Temperature == Temp1])
64
65 #Temp2
66 df.planck$spectral.radiance.normalized[df.planck$Temperature == Temp2] <-
67   df.planck$spectral.radiance[df.planck$Temperature == Temp2] /
68   max(df.planck$spectral.radiance[df.planck$Temperature == Temp2])
69
70 ##### End of Script #####
71 rm(a1, a2, c, end, h, kb, sigma, start, step, Temp1, Temp2, x, y1, y2)

```

R/planck.R

### A.16.8 LineByLineCoolingToSpace.R

```

1 #####
2 ##
3 ## Program to calculate the line-by-line Cooling to space for a given
4 ## set of mass absorption coefficient at a given temperature and pressure
5 ##
6 ## Established:      30.08.2016
7 ## Last modification: 30.08.2016
8 ##
9 #####
10
11 ##### Programming details #####
12 library(reshape2) # damit man aus mehrere Spalten zwei machen kann
13 library(ggplot2)
14
15 # if you don't have data, source the following:
16 #source("abscoeffHITRAN.R") # in order to get the HITRAN data
17 ##### Parameter section #####
18 run <- 1 # Equals the vector position of T und p in abscoeffHITRAN.R
19 lower.wn.limit <- 620.0
20 upper.wn.limit <- 667.0
21 df.cts <- df.MassAbsCoef[df.MassAbsCoef$run == run,]
22
23 # Die folgenden drei Zeilen einschalten, falls man ArtAbsSpectrum.R benutzt.
24 #colname <- paste("kappa",i, sep="")
25 #df.cts <- df.artificialAbsorption[,c("wn",colname)]
26 #names(df.cts) <- c("wavenumber", "MassAbsCoef")
27 # Bis hier.
28
29 df.cts <- df.cts[df.cts$wavenumber >= lower.wn.limit &
30                 df.cts$wavenumber <= upper.wn.limit,]

```

```

31 #rm(list=setdiff(ls(), c("run", "df.cts", "lower.wn.limit",
32 #                          "upper.wn.limit")))
33 Temp <- 240 # in K; should be the same as in abscoeffHITRAN.R
34 p <- 1 # pressure in hPa
35 q <- 480e-6
36
37 ##### Calculate wave number interval #####
38 df.cts$wndiff <- NA
39
40 df.cts$wndiff[2:(length(df.cts$wavenumber)-1)] <-
41   unlist(sapply(2:(length(df.cts$wavenumber)-1), function(i){
42     diff <- 0.5*(df.cts$wavenumber[i+1]-df.cts$wavenumber[i-1]))})
43
44 df.cts <- df.cts[!is.na(df.cts$wndiff),]
45
46 ##### Calculate integrated Planck (in W/(m^2 sr) ) #####
47 hh <- 6.626e-34
48 c <- 299792458
49 Kb <- 1.381e-23
50
51 df.cts$IntPlanck <- 0
52 index <- 1:length(df.cts$wavenumber)
53 df.cts$IntPlanck[index] <-
54   unlist(sapply(index, function(i){
55     wn_middle <- df.cts$wavenumber[i]
56     wn_middle <- wn_middle * 100
57     wn_diff <- df.cts$wndiff[i]
58     wn_diff <- wn_diff * 100
59     .res <- (2.0*hh*(c**2)*(wn_middle**3))/(exp((hh*c*wn_middle)/
60                                               (Kb*Temp))-1)
61     B <- .res*wn_diff
62     return(B)
63   })))
64
65 ##### Calculate factors #####
66 c_p <- 1005 #in J/(kg K)
67 mu <- 0.6
68 g <- 9.81 # in m/s^2
69
70 # factors
71 p <- p*100 # pressure in Pa
72 df.cts$facA <- 0
73 df.cts$facA[index] <-
74   unlist(sapply(index, function(i){
75     a <- pi*df.cts$IntPlanck[i]*q/(c_p*mu)
76   })))
77 df.cts$facB <- q*p / (mu*g)
78
79 ##### Calculate Cooling to space #####
80 df.cts$CoolingToSpace <- 0
81 df.cts$CoolingToSpace[index] <-
82   unlist(sapply(index, function(i){
83     CTS <- - df.cts$facA[i]*df.cts$MassAbsCoeff[i]*
84     exp(-df.cts$facB[i]*df.cts$MassAbsCoeff[i])*86400
85   })))
86 print(paste("Die Summe der AbkÄ¼hlungsrate im Bereich ", lower.wn.limit,
87             " cm^(-1) und ", upper.wn.limit, " cm^(-1) betr¼gt ",
88             round(sum(df.cts$CoolingToSpace), digits = 4), " K/Tag.",
89             sep=""))

```

R/LineByLineCoolingToSpace.R

## Literaturnachweis und Quellenverzeichnis

- [1] J. Lovelock and J. E. Lovelock. *Gaia: A new look at life on earth*. Oxford Paperbacks, 2000.
- [2] P. Noterdaeme, P. Petitjean, R. Srianand, C. Ledoux, and S. López. The evolution of the cosmic microwave background temperature-measurements of tcmb at high redshift from carbon monoxide excitation. *Astronomy & Astrophysics*, 526:L7, 2011.
- [3] J. Hansen, R. Ruedy, M. Sato, and K. Lo. Global surface temperature change. *Reviews of Geophysics*, 48(4), 2010.
- [4] G. Kopp and J. L. Lean. A new, lower value of total solar irradiance: Evidence and climate significance. *Geophysical Research Letters*, 38(1), 2011.
- [5] D. L. Hartmann. *Global physical climatology*, volume 103. Newnes, 2015.
- [6] C. Starr, C. Evers, and L. Starr. *Biology: Concepts and applications without physiology*. Cengage Learning, 2010.
- [7] J. T. Kiehl and K. E. Trenberth. Earth’s annual global mean energy budget. *Bulletin of the American Meteorological Society*, 78(2):197–208, 1997.
- [8] E. Dlugokencky, P. Tans, and NOAA/ESRL. <http://www.esrl.noaa.gov/gmd/ccgg/trends/>. Zugriff: 2016-09-09.
- [9] U. Siegenthaler and J.L. Sarmiento. Atmospheric carbon dioxide and the ocean. *Nature*, 365(6442):119–125, 1993.
- [10] D. Lüthi, M. Le Floch, B. Bereiter, T. Blunier, J.-M. Barnola, U. Siegenthaler, D. Raynaud, J. Jouzel, H. Fischer, K. Kawamura, et al. High-resolution carbon dioxide concentration record 650,000–800,000 years before present. *Nature*, 453(7193):379–382, 2008.
- [11] D. Archer, M. Eby, V. Brovkin, A. Ridgwell, L. Cao, U. Mikolajewicz, K. Caldeira, K. Matsumoto, G. Munhoven, A. Montenegro, et al. Atmospheric lifetime of fossil fuel carbon dioxide. *Annual Review of Earth and Planetary Sciences*, 37(1):117, 2009.
- [12] W. D. Collins, V. Ramaswamy, M. D. Schwarzkopf, Y. Sun, R. W. Portmann, Q. Fu, S. E. B. Casanova, J.-L. Dufresne, D. W. Fillmore, P. M. D. Forster, et al. Radiative forcing by well-mixed greenhouse gases: Estimates from climate models in the inter-governmental panel on climate change (ipcc) fourth assessment report (ar4). *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 111(D14), 2006.
- [13] G. W. Petty. *A first course in atmospheric radiation*. Sundog Pub, 2006.
- [14] R. Knöpfel and E. Becker. An idealized radiative transfer scheme for use in a mechanistic general circulation model from the surface up to the mesopause region. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 112(9):1460–1478, 2011.
- [15] V. I. Fomichev, A. I. Jonsson, J. De Grandpre, S. R. Beagley, C. McLandress, K. Semeniuk, and T. G. Shepherd. Response of the middle atmosphere to co2 doubling: Results from the canadian middle atmosphere model. *Journal of climate*, 20(7):1121–1144, 2007.
- [16] K. E. Trenberth, J. T. Fasullo, and J. Kiehl. Earth’s global energy budget. *Bulletin of the American Meteorological Society*, 90(3):311–323, 2009.

- [17] M. Hantel. *Einführung Theoretische Meteorologie*. Springer-Verlag, 2013.
- [18] S. Chandrasekhar. *Radiative transfer*. 1960.
- [19] G. E. Thomas and K. Stamnes. *Radiative transfer in the atmosphere and ocean*. Cambridge University Press, 2002.
- [20] K.-N. Liou. *An introduction to atmospheric radiation*, volume 84. Academic press, 2002.
- [21] A. Marshak and A. Davis. *3D radiative transfer in cloudy atmospheres*. Springer Science & Business Media, 2005.
- [22] W. M. Elsasser. Mean absorption and equivalent absorption coefficient of a band spectrum. *Physical Review*, 54(2):126, 1938.
- [23] A. Picard, R. S. Davis, M. Gläser, and K. Fujii. Revised formula for the density of moist air (cipm-2007). *Metrologia*, 45(2):149, 2008.
- [24] L. S. Rothman, R. R. Gamache, A. Goldman, L. R. Brown, R. A. Toth, H. M. Pickett, R. L. Poynter, J.-M. Flaud, C. Camy-Peyret, A. Barbe, et al. The hitran database: 1986 edition. *Applied Optics*, 26(19):4058–4097, 1987.
- [25] L. S. Rothman, C.P. Rinsland, A. Goldman, S.T. Massie, D.P. Edwards, J.M. Flaud, A. Perrin, C. Camy-Peyret, V. Dana, J.-Y. Mandin, et al. The hitran molecular spectroscopic database and hawks (hitran atmospheric workstation): 1996 edition. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 60(5):665–710, 1998.
- [26] L. S. Rothman, A. Barbe, D. C. Benner, L. R. Brown, C. Camy-Peyret, M. R. Carleer, K. Chance, C. Clerbaux, V. Dana, V. M. Devi, et al. The hitran molecular spectroscopic database: edition of 2000 including updates through 2001. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 82(1):5–44, 2003.
- [27] L. S. Rothman, I. E. Gordon, Y. Babikov, A. Barbe, D. C. Benner, P. F. Bernath, M. Birk, L. Bizzocchi, V. Boudon, L. R. Brown, et al. The hitran 2012 molecular spectroscopic database. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 130:4–50, 2013.
- [28] Skriptum zur Vorlesung: Laser und Anwendungen. <https://www.tu-braunschweig.de/Medien-DB/ihf/laserundaw.pdf>. Zugriff: 2016-06-07.
- [29] R. T. Pierrehumbert. *Principles of planetary climate*. Cambridge University Press, 2010.
- [30] Calculation of molecular spectra with the spectral calculator. <http://www.spectralcalc.com/info/CalculatingSpectra.pdf>. Zugriff: 2016-06-06.
- [31] L. L. Abels and L. M. DeBall. Deviation from lorentzian shape in the wings of collision-broadened infrared absorption lines of no. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 13(7):663–667, 1973.
- [32] J. J. Olivero and R. L. Longbothum. Empirical fits to the voigt line width: A brief review. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 17(2):233–236, 1977.

- [33] R.R. Gamache and J. Lamouroux. Predicting accurate line shape parameters for CO<sub>2</sub> transitions. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer (in press)*, 130:158–171, 2013.
- [34] V. I. Perevalov and S. A. Tashkun. Cdsd-296 (carbon dioxide spectroscopic databank): updated and enlarged version for atmospheric applications. 2008.
- [35] S. A. Tashkun and V. I. Perevalov, 2012. Private communication: Line positions calculated from empirical energy levels, derived using RITZ approach.
- [36] S. A. Tashkun and V. I. Perevalov, unknown year. Private communication: Intensities calculated using the effective dipole moment function.
- [37] P. De Bièvre, M. Gallet, N. E. Holden, and I. L. Barnes. Isotopic abundances and atomic weights of the elements. *Journal of physical and chemical reference data*, 13(3):809–891, 1984.
- [38] Wikipediaeintrag: R (Programmiersprache). [https://de.wikipedia.org/wiki/R\\_\(Programmiersprache\)](https://de.wikipedia.org/wiki/R_(Programmiersprache)). Zugriff: 2016-08-01.
- [39] A. J. Simmons and D. M. Burridge. An energy and angular-momentum conserving vertical finite-difference scheme and hybrid vertical coordinates. *Monthly Weather Review*, 109(4):758–766, 1981.
- [40] K. Strehmel and R. Weiner. *Numerik gewöhnlicher Differentialgleichungen*. BG Teubner, 1995.
- [41] M. D. Schwarzkopf and S. Fels. The simplified exchange method revisited- an accurate, rapid method for computation of infrared cooling rates and fluxes. *Journal of Geophysical Research*, 96(D5):9075–9096, 1991.
- [42] D. G. Andrews, J. R. Holton, and C. B. Leovy. *Middle atmosphere dynamics*, volume 40. Academic press, 1987.

## **Selbstständigkeitserklärung**

Ich versichere hiermit an Eides statt, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig angefertigt und ohne fremde Hilfe verfasst habe, keine außer den von mir angegebenen Hilfsmitteln und Quellen dazu verwendet habe und die den benutzten Werken inhaltlich und wörtlich entnommenen Stellen als solche kenntlich gemacht habe.

Kai Budde

Rostock, 23.09.2016