

А.А. Мицель, С.Ю. Золотов

Комбинированная методика расчета атмосферного поглощения со спектральным разрешением 20 см^{-1}

Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники
Институт оптического мониторинга СО РАН, г. Томск

Поступила в редакцию 19.12.2000 г.

Приводится описание новой методики расчета атмосферного поглощения, которое рассчитывается по параметрическим моделям полос поглощения. Параметры моделей подбираются на основе данных, полученных методом line-by-line (LBL). Предусмотрена возможность выбора оптимальной модели для заданного спектрального интервала. Представлены результаты моделирования и их сравнение с точными данными.

Введение

Основной характеристикой уравнения переноса излучения является функция пропускания слоя атмосферы в заданном зенитном направлении. Она используется для расчета потоков как тепловой, так и коротковолновой радиации в участках спектра, занятых полосами поглощения атмосферных газов.

В зависимости от решаемых задач оптики атмосферы функции пропускания должны быть известны с высоким (например, для интерпретации данных спутниковых приборов) либо грубым спектральным разрешением (например, для решения радиационно-климатических задач). В настоящее время для расчета функций пропускания со средним и низким спектральными разрешениями широко используются эмпирические методы, методы на основе моделей полос поглощения и метод прямого счета.

Метод прямого счета (или метод полинейного счета) функций пропускания не имеет ограничений, связанных со спектральным разрешением, и позволяет рассчитывать пропускание для любого спектрального интервала. Однако к основному его недостатку следует отнести большое время счета пропускания для широкого диапазона длин волн.

Эмпирические методы и методы на основе моделей полос поглощения являются параметрическими: параметры определяются путем подгонки к лабораторным данным либо к данным, полученным методом прямого счета. Они обычно используются для расчета ослабления атмосферного широкополосного излучения. На основе эмпирических методов разработаны соответствующие методики расчетов (основными из них являются четыре методики: ГОИ [1], ГИПО [2], LOWTRAN [3] и ГГО [4]). В этом случае функция пропускания зависит от поглощающей массы газа и некоторого параметра (или параметров). Как вид самой функции, так и параметры к ней подбираются на основе экспериментальных данных.

Наиболее широкое применение на практике получила методика LOWTRAN в виде пакета программ. Достоинством этой методики является быстрое действие, недостатком – невысокая точность. Кроме того, она не пригодна для аналитических вычислений при решении ряда радиационных задач.

Комбинированная методика расчета функций пропускания основана на модельном представлении полос поглощения (они также зависят от параметров) [5]. По за-

мыслу ее авторов каждая модель применяется к тому спектральному интервалу, в котором она обеспечивает наилучшую точность. Достоинством комбинированной методики являются: а) быстрый расчет пропускания (параметры для каждой длины волны считаются постоянными величинами); б) возможность проводить аналитические вычисления при решении радиационных задач.

К недостаткам методики [5] следует отнести отсутствие границ применимости и небольшую точность. Необходимо отметить и еще такой факт, что параметры методики [5] в разных диапазонах длин волн найдены при разных спектральных разрешениях.

В данной статье предлагается новая комбинированная методика, которая отличается от методики [5] тем, что:

- 1) все параметры подбираются при фиксированном спектральном разрешении 20 см^{-1} ;
- 2) для подбора самих параметров используются значения поглощения, рассчитанные методом LBL;
- 3) расчет параметров для всех газов (были рассмотрены водяной пар, углекислый газ, озон, закись азота N_2O и метан) осуществляется в диапазоне волновых чисел от 330 до 10000 см^{-1} (1–30 мкм) с шагом 5 см^{-1} .

Модели поглощения

Теоретические модели основаны на идеализированном представлении полос поглощения в виде различных моделей, допускающих их аналитическое описание. Эти модели – параметрические, причем сами параметры определяются на основе экспериментальных данных или рассчитываются прямым методом для различных значений термодинамических параметров среды. Подробное описание моделей спектров, их аппроксимации можно найти в [5–8, 12].

В комбинированной методике используются следующие модели [5]:

1. Приближение сильной линии модели Гуди:

$$A(\lambda) = 1 - \exp[-\sqrt{W^* k_1(\lambda)}], \quad (1)$$

где $A(\lambda)$ – поглощение газа для данной длины волны; $k_1(\lambda)$ – спектральный параметр; W^* – эквивалентная поглощающая масса, см ОС, вычисляемая по формуле для вертикальной трассы с зенитным углом θ :

$$W^* = \int_{z_1}^{z_2} \rho \frac{P(z)}{P_0} \left(\frac{T_0}{T(z)} \right)^{0.5} B(z, \theta) dz, \quad (2)$$

либо по формуле для горизонтальной трассы длиной L :

$$W^* = \rho \frac{P(z)}{P_0} \left(\frac{T_0}{T(z)} \right)^{0.5} L. \quad (3)$$

$$\text{Здесь } B(z, \theta) = \frac{(R+z)}{\sqrt{(R+z)^2 - (R+z_1)^2 \sin^2 \theta}} \quad (4)$$

– функция трассы луча; R – радиус Земли; ρ – концентрация газа, г/см³; z_1 и z_2 – границы поглощающего слоя; L – длина трассы, см; $P(z)$ – давление воздуха, торр; $T(z)$ – температура воздуха, К; $P_0 = 760$ торр; $T_0 = 273$ К. В этой модели подгоночным является один параметр $k_1(\lambda)$.

2. Модель полосы Гуды:

$$A(\lambda) = 1 - \exp \left(- \frac{S}{d} \frac{W}{\sqrt{1 + \frac{2}{\bar{p}} \frac{SW}{2\pi\gamma'_0}}} \right), \quad (5)$$

где $W = \rho(z)L$ – содержание поглощающего газа для горизонтальной трассы, а $W = \int_{z_1}^{z_2} \rho(z) B(z, \theta) dz$ для вертикальной;

$$\bar{p} = \frac{P_0}{W} W^*, \quad \gamma'_0 = \frac{\gamma_0}{P_0}, \quad (6)$$

γ_0 – лоренцевская полуширина, определенная при $p = P_0 = 760$ торр.

В этой модели подгоночными являются два параметра: S/d и $S/2\pi\gamma'_0$.

3. Модифицированная модель Гуды:

$$A(\lambda) = 1 - \exp \left(- \frac{W k_3(\lambda)}{\sqrt{1 + \frac{k_3(\lambda) W}{4 \bar{p} k_4(\lambda)}}} \right), \quad (7)$$

где $k_3(\lambda)$, $k_4(\lambda)$ – подгоночные параметры; W – содержание газа, вычисляемое по формуле

$$W = \int_{z_1}^{z_2} \frac{P_g(z)}{P(z)} \frac{P(z)}{P_0} \frac{T_0}{T(z)} B(z, \theta) dz, \quad (8)$$

в которой $P_g(z)$ – давление газа.

4. Модель Эльзассера:

$$A(\lambda) = \text{sh}\beta \int_0^b J_0(t) \exp(-t \text{ch}\beta) dt; \quad (9)$$

$$\beta = \frac{2\pi\gamma'_0}{d} \bar{p}; \quad \bar{p} = \frac{P_0}{W} W^*; \quad (10)$$

$$b = \frac{S/d}{\text{sh}\beta} W; \quad x = \frac{S/d}{(2\pi\gamma'_0/d) \bar{p}} W = \frac{b \text{sh}\beta}{\beta}, \quad (11)$$

где $J_0(t)$ – функция Бесселя нулевого порядка; W – содержание газа (8).

Остальные обозначения поясняются в вышеизложенных моделях.

Параметры данной модели: S/d и $2\pi\gamma'_0/d$.

5. Приближение сильной линии полосы Эльзассера:

$$A = \Phi(\sqrt{\beta^2 x / 2}), \quad (12)$$

где $\Phi(t) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^t e^{-z^2} dz$.

Для расчета поглощения по формуле (12) используются данные, по которым предварительно рассчитываются параметр β по формуле (10) и параметр x по формуле (11).

Величина W^* вычисляется по формуле

$$W^* = \int_{z_1}^{z_2} \frac{P_g(z)}{P(z)} \left(\frac{P(z)}{P_0} \right)^2 \left(\frac{T_0}{T(z)} \right)^{1.5} B(z, \theta) dz. \quad (13)$$

Параметры данной модели совпадают с параметрами простой модели Эльзассера (S/d и $2\pi\gamma'_0/d$).

Для некоторых участков спектра вместо (12) используется формула

$$A(\lambda) = \Phi \left[\sqrt{W^* k_5(\lambda)} \right], \quad (14)$$

где W^* рассчитывается по формуле (13), а $\Phi(t)$ – по формуле (12); $k_5(\lambda)$ – параметр модели.

6. Модель Эльзассера с температурной зависимостью

Основные расчетные формулы – (9)–(11), в которых параметры S/d и $2\pi\gamma'_0/d$ задаются следующими формулами:

$$\frac{S}{d} = \frac{a_1 \exp(-a_2/T_h)}{T_h^2}; \quad (15)$$

$$\frac{2\pi\gamma'_0}{d} \frac{S}{d} = \frac{a_3 \exp(-a_4/T_h)}{T_h^2},$$

которые выражаются через четыре подгоночных параметра: a_1 , a_2 , a_3 , a_4 . В формуле (15) T_h – температура однородного эквивалентного слоя.

7. Модифицированная модель Эльзассера

Функция поглощения определяется формулой (9), а параметр β конструируется в форме

$$\beta = \left(\frac{2\pi\gamma'_0}{d} \right) \left(\frac{\bar{p}}{P_0} \right)^{c(\lambda)} = \beta_0 \left(\frac{\bar{p}}{P_0} \right)^{c(\lambda)}. \quad (16)$$

Параметрами здесь являются β_0 , $c(\lambda)$ и S/d . Давление \bar{p} вычисляется по формуле (10), а W и W^* – по формулам (8) и (13).

Расчет параметров моделей

Определение параметров $k_1(\lambda)$, ..., $k_m(\lambda)$ некоторой модели осуществляется с помощью метода наименьших квадратов. Исходные данные получают при помощи метода LBL на основе атласа спектральных данных HITRAN-96. В качестве минимизируемого функционала используется $Q[k_1(\lambda), \dots, k_m(\lambda)]$, который определяется выражением:

$$Q[k_1(\lambda), \dots, k_m(\lambda)] = \sum_{i=1}^n \{A_i(\lambda) - f[W_i, k_1(\lambda), \dots, k_m(\lambda)]\}^2 \rightarrow \min, (17)$$

где $A_i(\lambda) = A(W_i, \lambda)$ – поглощение, рассчитанное методом полинейного счета с разрешением 20 см^{-1} , $f[W_i, k_1(\lambda), \dots, k_m(\lambda)]$ – модель поглощения, W_i – поглощающая масса газа, $k_1(\lambda), \dots, k_m(\lambda)$ – параметры данной модели.

Параметры $k_1(\lambda), \dots, k_m(\lambda)$ после их определения заносятся в файл. Фрагмент данного файла показан в табл. 1.

Таблица 1

Пример таблицы параметров для озона после подбора в диапазоне поглощающих масс от 0,0006876638 до 0,0017392 см ОС

Идентификатор модели	Длина волны, см^{-1}	Первый параметр	Второй параметр
3	770	0,04949438	0,2247906
2	775	0,04140093	0,02793893
3	780	0,03363267	0,1807833
3	785	0,02724842	0,1463426
3	790	0,02093796	0,1234225
3	795	0,01681563	0,09007432
3	800	0,01319392	0,07917236

В первой колонке таблицы находится идентификационный номер модели (в данной таблице модель № 2 – модель полосы Гуди, модель № 3 – модифицированная модель Гуди и т. д.). Во второй записана частота в обратных сантиметрах. Последующие колонки таблицы содержат сами модельные параметры.

Для сравнения в табл. 2 приведены параметры методики [5].

Таблица 2

Пример таблицы параметров комбинированной методики [5] для озона

Идентификатор модели	Длина волны, см^{-1}	Первый параметр	Второй параметр
3	769,8229	0,0365	1,14
3	772,2008	0,0338	1,14
3	773,9938	0,0315	1,14
3	775,7952	0,0292	1,14
3	778,2101	0,0271	1,14
3	780,0312	0,0251	1,14
3	781,8608	0,0230	1,14
3	783,6991	0,0210	1,14
3	786,1635	0,0192	1,14
3	788,0221	0,0176	1,14
3	789,8894	0,0161	1,14
3	791,7656	0,0144	1,14
3	794,2812	0,0133	1,14
3	796,1783	0,0120	1,14
3	798,0846	0,0109	1,14
3	800,0000	0,0100	1,14

В компьютерной программе предусмотрена возможность выбора оптимальной модели для заданной длины волны путем минимизации функционала (17) по моделям поглощения: та модель поглощения $f[k_1(\lambda), \dots, k_m(\lambda)]$, для которой (17) принимает минимальное значение, принимается в качестве оптимальной.

Расчет пропускания смеси газов

Теперь следует рассмотреть вопрос, касающийся поглощения излучения смесью газов. Для монохроматического излучения пропускание смеси газов $T_1(\nu)$ и $T_2(\nu)$ на частоте ν равно произведению пропусканий:

$$T_{\Sigma}(\nu) = T_1(\nu) T_2(\nu), (18)$$

где T_1 – пропускание 1-го (при отсутствии 2-го) газа, T_2 – пропускание 2-го (при отсутствии 1-го) газа.

При расчете пропускания со средним (20 см^{-1}) спектральным разрешением точного решения проблемы перекрытия полос смеси газов в модельном представлении спектров поглощения не существует.

Тем не менее в расчетах используется правило (18). В работах Берга [9], Хувера [10] и Тубса [11] показано, что правило произведения выполняется с точностью до нескольких процентов при следующих условиях:

1) интервал $\Delta\nu$ должен быть достаточно широким, чтобы в нем находились, как минимум, несколько линий каждого газа;

2) центры линий двух газов не связаны между собой какой-либо функциональной зависимостью;

3) парциальное давление ушряющего газа много больше парциального давления поглощающих газов.

Правило (18) позволяет свести расчет пропускания смеси газов к расчету пропускания отдельных газов, что значительно облегчает решение общей задачи.

Результаты моделирования

Для анализа результатов необходимо провести сравнение расчета поглощения разными методами с точными значениями на основе современных спектроскопических данных.

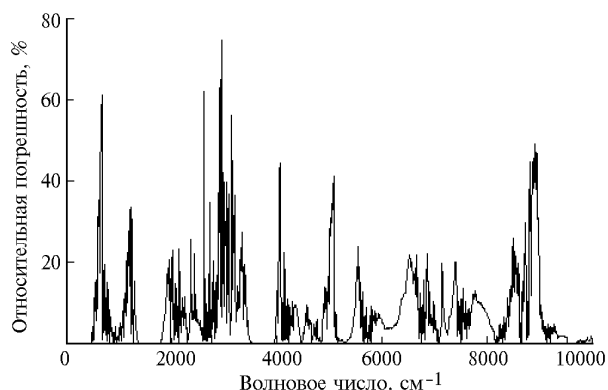


Рис. 1. Относительная погрешность расчета поглощения водяного пара методикой [5]. Вертикальная трасса (0–100 км), зенитный угол равен нулю, метеомодель лета средних широт

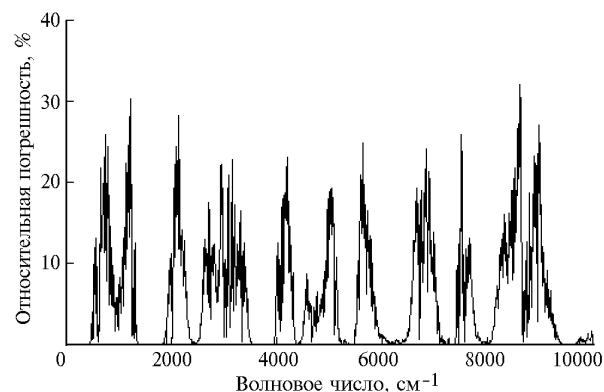


Рис. 2. Относительная погрешность расчета поглощения водяного пара методикой LOWTRAN-7. Условия расчета см. в подпункте к рис. 1

Рис. 1 показывает относительную погрешность расчета поглощения водяного пара методикой [5]. Из этого графика можно сделать вывод: расчет по методике [5] часто не сходится с точными данными. Это можно объяснить прежде всего тем, что комбинированная методика была создана более 20 лет назад и тогда не было столь точных данных (по сравнению с сегодняшним днем).

На рис. 2 приведена относительная погрешность расчета поглощения водяного пара с помощью методики LOWTRAN-7 (было взято спектральное разрешение 20 см^{-1}). Видно, что средняя погрешность составляет 15% и на некоторых длинах волн превышает 30, это можно объяснить вышеописанными недостатками эмпирических методов.

Рис. 3 изображает относительную погрешность расчета поглощения водяного пара с помощью новой методики. Расчет был произведен для модели лета средних широт после подбора параметров моделей по 100 метеофайлам (диапазон поглощающих масс был взят максимально возможным: от $2,8 \cdot 10^{-15}$ до $25,6 \text{ см ОС}$).

Из этого рисунка можно сделать вывод: расчет по новой методике не всегда сходится с точными данными и осуществляется на уровне погрешности методики LOWTRAN-7.

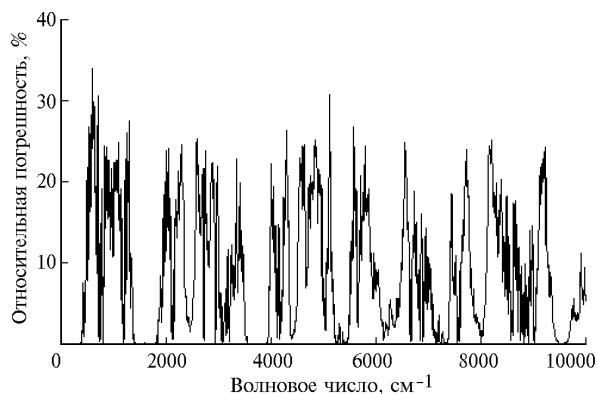


Рис. 3. Относительная погрешность расчета поглощения водяного пара новой методикой после подбора параметров выражения (17) по одному максимально возможному диапазону поглощающих масс. Условия расчета см. в подписи к рис. 1

Для дальнейшего улучшения точности максимально возможный диапазон поглощающих масс разбивается на 100 поддиапазонов. Теперь минимизация выражения (17) (а также поиск соответствующих параметров) осуществляется в каждом полученном поддиапазоне. После введения этого условия максимальная относительная погрешность уменьшилась до нескольких процентов (рис. 4).

Из приведенных рисунков видно существенное увеличение точности новой комбинированной методики (погрешность не превосходит 3%) по водяному пару. Аналогичная картина наблюдается и для других газов. Повышение точности достигнуто благодаря разбиению интервала поглощающих масс на поддиапазоны, что приводит фактически к увеличению объема информации о параметрах, требующих хранения в памяти ЭВМ.

Это является «неизбежной платой» за увеличение точности методики.

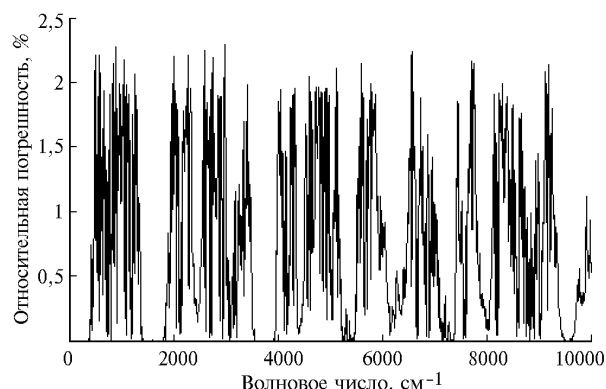


Рис. 4. Относительная погрешность расчета поглощения водяного пара новой методикой после подбора параметров выражения (17) по 100 разным поддиапазонам, входящим в максимально возможный диапазон поглощающих масс. Условия расчета см. в подписи к рис. 1

Данная статья написана при частичной поддержке РФФИ (грант № 00-07-90175).

1. Киселева М.С., Непорент В.С., Федорова Е.О. Поглощение инфракрасной радиации при неразрешенной структуре спектра для наклонных путей в атмосфере (действие H_2O и CO_2) // Изв. АН СССР. Сер. ФАО. 1967. Т. 3. № 5. С. 640–649.
2. Филиппов В.Л., Козлов С.Д., Румянцев Н.А., Зиятдинова Н.М., Макаров А.С. Прозрачность атмосферы в диапазоне 1–14 мкм при высокой дальности видимости // Изв. вузов. Физика. 1984. Деп. в ВИНТИ. Пер. № 2483-84. 52 с.
3. Kneizys F.X., Shettle E.P., Gallery W.O., Chetwynd J.H., Abreu L.W., Selby J.E.A., Clough S.A., Fenn R.W. Atmospheric Transmittance / Radiance. Computer Code LOWTRAN 6 // AFGL-TR-83-0187. Hanscom. AFB. Mass. 1983. 200 p.
4. Броунштейн А.М., Фролов А.Д. О методике расчета спектрального пропускания в ИК-окнах прозрачности атмосферы для приземных горизонтальных трасс // Труды ГГО. 1985. Вып. 496. С. 70–79.
5. *The Infrared Handbook* / Editor W.L. Wolf, G.J. Zissis, S. Chapter, A.J. La Rocca // Atmospheric Absorption. Washington, 1978. P. 5-1–5-132.
6. Гуди Р. Атмосферная радиация. М.: Мир, 1966. 417 с.
7. Пеннер С.С. Количественная молекулярная спектроскопия и излучательная способность газов. М.: ИЛ, 1963. 494 с.
8. Зуев В.Е. Распространение видимых и инфракрасных волн в атмосфере. М.: Советское радио, 1970. 496 с.
9. Burch D.E., Howard J.N., Williams D. Infrared transmission in synthetic atmospheres: Absorption laws for overlapping bands // J. Opt. Soc. Am. 1956. N 46. P. 452–455.
10. Hoover G.M., Hathaway C.E., and Williams D. Infrared Absorption of overlapping bands of atmospheric gases // Appl. Opt. 1967. N 6. P. 481–487.
11. Tubbs L.D., Hathaway C.E., and Williams D. Further studies of overlapping bands of atmospheric gases // Appl. Opt. 1967. N 6. P. 1422–1423.
12. Мицель А.А., Фирсов К.М. Развитие моделей молекулярного поглощения в задачах переноса излучения в атмосфере Земли // Оптика атмосферы и океана. 2000. № 2. С. 179–197.

A.A. Mitsel, S.Yu. Zolotov. Aggregate method for calculation of atmospheric absorption with 20 cm^{-1} resolution.

A new method for calculation of atmospheric absorption is presented. The absorption is calculated on the basis of parametric models of absorption bands. The model parameters are selected on the data obtained by the line-by-line method (LBL). A possibility is provided to select an optimal model for the given spectral range. The results of modeling are presented, as well as their comparison with realistic data.