

АППАРАТУРА И МЕТОДЫ ОПТИЧЕСКОЙ ДИАГНОСТИКИ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ

УДК 519.245; 535.361

Метод локальной оценки потока в задачах широкополосного лазерного зондирования

Г.М. Креков*

Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН
634021, г. Томск, пл. Академика Зуева, 1

Поступила в редакцию 15.12.2008 г.

Методом Монте-Карло решается задача оценки пространственно-разрешенных сигналов широкополосного импульсного излучателя в аэрозольной атмосфере с учетом селективного молекулярного поглощения. Подобная задача возникает в связи с необходимостью априорного анализа потенциальных возможностей лидаров белого света для дистанционного контроля концентрации паров H_2O и парниковых газов в атмосфере. Оценка сигналов обратного рассеяния с высоким спектральным разрешением на основе нестационарного уравнения переноса требует применения прецезионных алгоритмов расчетов. В теории методов Монте-Карло таким алгоритмом считается *метод локальной оценки потоков*. Предложено сочетание этого алгоритма с высокоточным *line-by-line*-расчетом функций пропускания атмосферных газов, что дает возможность строгого количественного прогноза эффективности перспективных лидарных систем мониторинга окружающей среды.

Ключевые слова: метод Монте-Карло, лазерное зондирование; Monte Carlo method, laser sensing.

Введение

При оценке эффективности атмосферно-оптических каналов, использующих излучение в широких спектральных интервалах инфракрасного диапазона, важную роль наряду с рассеянием начинают играть процессы селективного поглощения молекулярной составляющей атмосферы. Расчет радиационных характеристик аэрозольных образований в ближнем и среднем участках ИК-диапазона, богатого линиями и полосами поглощения паров H_2O и парниковых газов, представляет собой традиционную и в то же время одну из самых трудных задач атмосферной оптики [1, 2]. Причина этого состоит в том, что в отличие от гладкого континуального поглощения материала аэрозольных частиц [3] спектры молекулярного поглощения формируются за счет большого количества отдельных линий поглощения, возникающих при переходах молекул из одного энергетического состояния в другое. Если регистрация излучения производится в спектральном интервале $\Delta\lambda$, охватывающем N_i линий некоторой конкретной молекулы, то представляется очевидным, что суммарный коэффициент поглощения этой молекулы $k_{\Delta\lambda}$ определится как

$$k_{\Delta\lambda} = \sum_{i=1}^{N_i} k_i(\lambda). \quad (1)$$

Оказывается, что соотношение (1) является приближенным, поскольку в его основе лежит

предположение о том, что вклад отдельных спектральных линий является аддитивным. На самом деле, как это следует из общей теории молекулярного поглощения в газах [3, 4], принцип аддитивности не выполняется ввиду интерференции спектральных линий. Существуют многочисленные методики учета этого эффекта, значимость которого зависит от вида молекул, термодинамического состояния окружающей среды и требуемого в эксперименте спектрального разрешения. В случае лоренцевской модели контура спектральной линии учет интерференции выполняется наиболее просто [4]:

$$f_R(v - v_0) = \frac{1}{\pi} \frac{\tilde{\eta}(v - v_0) + \gamma_L}{(v - v_0)^2 + \gamma_L^2}, \quad (2)$$

где $\tilde{\eta}$ — параметр интерференции; γ_L — полуширина линии поглощения; v_0 — центральная частота линии.

Таким образом, использование соотношения (1) вместо реальных эффективных значений коэффициентов молекулярного поглощения $k_{ef}(\Delta\lambda)$ может привести к существенным отклонениям от закономерностей линейной теории переноса, в частности от закона Бугера [3, 7], как ее основы. Можно указать и другие физические факторы, нарушающие линейный характер переноса широкополосного излучения в дисперсных средах с селективным поглощением. Например, закон квадратного корня Эльзассера [5], устанавливающий нелинейную зависимость $k_{ef}(\Delta\lambda, l)$ от оптической длины пути l , проходимого радиацией в среде или, что то же самое, от количества осажденного газа $\rho(l)$, рассчитанного

* Георгий Михайлович Креков (gm@iao.ru).

для столба единичного сечения. Отдельные частные случаи, в которых допустимо применение закона Бугера, рассмотрены в монографии [6].

1. Функция пропускания широкополосного излучения

Рациональный подход к проблеме учета поглощения атмосферными газами был сформулирован в ранних работах [7, 8]. Он основан на допущении, что в случае слабого относительного поглощения процессы рассеяния и поглощения в дисперсной среде проявляют себя независимо. Эта ситуация типична, например, в задаче оценки радиационного режима облачности в атмосферных окнах прозрачности ближнего ИК-диапазона. Сущность подхода опирается на использование такой абстрактной радиационной характеристики, как *распределение фотонов по пробегам*. Напомним ее содержание, следуя [7–10].

Пусть $J_\lambda(\mathbf{r}, \Omega, l)$ – интенсивность излучения с длиной волны λ , создаваемая источником единичной мощности в точке \mathbf{r} в направлении Ω и формируемая фотонами, прошедшими с момента пересечения границы дисперсной среды, например облака, до точки \mathbf{r} путь l . Эту функцию, определенную без учета поглощения атмосферными газами, называют распределением фотонов по пробегам. Полная спектральная интенсивность в данной точке фазового пространства $I_{0,\lambda}(\mathbf{r}, \Omega)$ связана с распределением фотонов по пробегам очевидным соотношением

$$I_{0,\lambda}(\mathbf{r}, \Omega) = \int_0^\infty J_\lambda(\mathbf{r}, \Omega, l) dl. \quad (3)$$

При наличии изотропного газового поглощения в среде и при указанном выше условии независимости процессов рассеяния и поглощения интенсивность света

$$I_\lambda(\mathbf{r}, \Omega) = \int_0^\infty J_\lambda(\mathbf{r}, \Omega, l) P_\lambda(l) dl, \quad (4)$$

где $P_\lambda(l)$ – экспоненциальная функция пропускания [3], описывающая поглощение монохроматического излучения. Проинтегрируем (4) по λ в пределах конечного интервала $\Delta\lambda$. Следуя условиям теоремы эквивалентности Irvine [8, 11], $J_\lambda(\mathbf{r}, \Omega, l)$ зависит только от рассеивающих и поглощающих свойств диспергированной фазы среды (облака, туман, пыль и пр.), и эти свойства являются медленно меняющимися функциями длины волны. Соответственно размеры спектрального интервала $\Delta\lambda$ должны быть такими, чтобы $J_{\Delta\lambda}(\mathbf{r}, \Omega, l) \approx J_\lambda(\mathbf{r}, \Omega, l) \approx \text{const}$ при $\lambda \in \Delta\lambda$. Тогда из (4) следует

$$I_{\Delta\lambda}(\mathbf{r}, \Omega) = \int I_\lambda(\mathbf{r}, \Omega) d\lambda = \int_0^\infty J_{\Delta\lambda}(\mathbf{r}, \Omega, l) P_{\Delta\lambda}(l) dl, \quad (5)$$

где немонохроматическая функция пропускания $P_{\Delta\lambda}(l) = \int_{\Delta\lambda} P_\lambda(\mathbf{r}, \Omega) d\lambda$ уже не является экспоненциальной и может быть получена экспериментально либо расчетным путем на основе тех или иных моделей полос поглощения атмосферных газов. Физический смысл функции $P_{\Delta\lambda}$ остается прежним [3], она характеризует долю широкополосного излучения, прошедшего заданный участок среды в конечном спектральном интервале $\Delta\lambda = \lambda_2 - \lambda_1$. В соответствии с этим определением

$$P_{\Delta\lambda} = \frac{\int_{\lambda_1}^{\lambda_2} I(\lambda) d\lambda}{\int_{\lambda_1}^{\lambda_2} I_0(\lambda) d\lambda}, \quad (6)$$

где $I_0(\lambda)$, $I(\lambda)$ – спектральная интенсивность падающего и прошедшего среду излучения.

К настоящему времени физические механизмы селективного поглощения оптического излучения с интенсивностью, недостаточной для появления нелинейных спектроскопических эффектов, изучены достаточно детально. Это создало основу для разработки многочисленных методов расчета функций пропускания. Условно их можно разделить на четыре группы, отражающие, в частности, хронологию развития: параметрические методы; методы на основе моделей полос поглощения; методы прямого и быстрого счета. Первые две группы были развиты в «долазерную эпоху» [3] и применялись для расчета ослабления широкополосного излучения тепловых источников. Наибольшее распространение получили так называемая модель Mc Clatchey et al. [12] и модель ГИПО [13, 14]. В последнем случае использовалось представление спектральной функции пропускания в параметрическом виде

$$P_{\Delta\lambda}(L) = \exp\left\{-a_\lambda \int_0^L p(l) \left[\frac{p(l)}{p(0)}\right]^{b_\lambda} dl\right\}^{c_\lambda}, \quad (7)$$

где $p(l)$ – количество осажденного газа (поглощающего); $p(l)$ – давление в среде; $a_\lambda, b_\lambda, c_\lambda$ – эмпирические константы (параметры), определенные и застабилизованные для большинства активно поглащающих атмосферных газов [14].

Несмотря на некоторую громоздкость параметрического подхода (7), он прошел успешную валидацию в первых строгих расчетах радиационного режима слоистых облаков [9, 15, 16]. При этом распределение фотонов по пробегам $J_{\Delta\lambda}(\mathbf{r}, \Omega, l)$ рассчитывалось методом Монте-Карло, функция пропускания – на основе (6). К сожалению, такой подход оказался применим только для однородной оптической модели среды.

Другим принципиальным ограничением параметрических методов является низкое спектральное разрешение входных эмпирических констант. Впоследствии им на смену пришли так называемые быстрые методы расчета широкополосных функций пропускания [17, 18]. Эти методы основаны на ис-

пользовании моделей полос поглощения с параметрами, найденными не путем подгонки к экспериментальным данным, а расчетным путем. Новые результаты, связанные с созданием эффективных моделей расчета пропускания с низким спектральным разрешением в виде рядов экспонент (по другому: *метод k-распределения*), систематизированы в монографии [2]. Метод k-распределения наиболее органично сочетается с численными методами решения уравнения переноса относительно широкополосных потоков солнечного излучения в земной атмосфере [2, 19].

С развитием возможностей вычислительной техники на первый план выходит метод прямого счета [или метод полинейного счета, в иностранной литературе метод *line-by-line* (LBL)] функций пропускания, который по своей идее является точным методом и основан на учете вклада каждой линии поглощения. Этот метод не имеет ограничений, связанных со спектральным разрешением, и позволяет рассчитывать функции пропускания для любого спектрального интервала. Поскольку метод LBL остается достаточно трудоемким, большое количество работ, вышедших в последнее десятилетие, посвящено его оптимизации, например [20–23].

Одним из распространенных приемов, повышающих эффективность расчетов, является выбор упрощенной модели контура спектральных линий поглощения [21, 23]. Учитывая, что разрабатываемый нами математический аппарат предназначен для оценки потенциальных возможностей дистанционного газоанализа нижней тропосферы средствами широкополосного лазерного зондирования, приводимый далее упрощенный алгоритм опирается на лоренцевскую модель контура спектральных линий.

2. Упрощенный расчет спектральных функций пропускания

Математическая модель функции пропускания поглащающей атмосферы $P_{\Delta\lambda}$ для излучения с заданным спектральным составом определена выше соотношениями (5), (6). При моделировании натурного эксперимента необходимо сразу иметь в виду поправки на спектральную чувствительность предполагаемого спектрофотометра, так называемую аппаратурную функцию $g(\lambda - \lambda')$, искажающую реальный спектр $I(\lambda')$ на величину $g(\lambda - \lambda')$. Эффективная функция пропускания для излучения $I_0(\lambda)$ определится выражением [3]:

$$P_{\Delta\lambda} = \int_{\lambda-\Delta\lambda_0}^{\lambda+\Delta\lambda_0} I_0(\lambda') P_{\lambda}(\lambda') g(\lambda-\lambda') d\lambda' \int_{\lambda-\Delta\lambda_0}^{\lambda+\Delta\lambda_0} I_0(\lambda') g(\lambda-\lambda') d\lambda', \quad (8)$$

где $2\Delta\lambda_0$ — ширина аппаратной функции прибора; $P(\lambda')$ — спектральное пропускание на длине волны λ' , которое можно представить как

$$P(\lambda') = \exp\left\{-\sum_{i=1}^N \sum_{z_1}^{z_2} \sum_{j=1}^M \alpha_{i,j}(\lambda, z) B(z, \theta_z) dz\right\}, \quad (9)$$

где $\alpha_{i,j}(\lambda, z)$ — коэффициент поглощения i -й линии спектра j -го газа в пределах заданного участка $2\Delta\lambda_0$; $B(z, \theta_z)$ — функция трассы луча вдоль линии визирования, которая в простейшем случае (без учета рефракции) вычисляется по формуле [2]:

$$B(z, \theta_z) = (R_3 + z) / \sqrt{(R_3 + z)^2 - (R_3 + z_0)^2 \sin^2 \theta_z}, \quad (10)$$

где R_3 — радиус Земли; z_0 — минимальное расстояние трассы от поверхности Земли; θ_z — зенитный угол.

Объемный коэффициент поглощения $\alpha_i(\lambda, z)$ i -й линии представим в форме [26]:

$$\alpha_i(\lambda, z) = \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \frac{S_i(z)}{\gamma_{di}} f(\gamma, \gamma_{nn'}, T, p) \rho(z). \quad (11)$$

Здесь $S_i(z)$, γ_{di} — интенсивность i -й линии и ее доплеровская полуширина на высоте z ; $f(\gamma, \gamma_{nn'}, T, p)$ — контур линии поглощения. Для условий тропосферы форма линии удовлетворительно описывается теорией ударного уширения [26], которая приводит к лоренцевскому контуру:

$$f(\gamma, \gamma_{nn'}, T, p) = \frac{1}{\pi} \frac{\gamma_L(p, T)}{\gamma_L(p, T)^2 + [\gamma - (\gamma_{nn'} + \delta(p_{ref}, T_{ref})p)]^2}, \quad (12)$$

где T — температура, К; p — давление, атм; $\delta(p_{ref}, T_{ref})$ — коэффициент коррекции сдвига линии на атмосферное давление, $p_{ref} = 1$ атм, $T_{ref} = 296$ К.

Необходимая для расчета информация о параметрах спектральных линий (положение центра $\gamma_{nn'}$, атмосферное уширение линии $\gamma_{air}(p_{ref}, T_{ref})$, $\text{см}^{-1}/\text{атм}$, самоуширение $\gamma_{self}(p_{ref}, T_{ref})$, $\text{см}^{-1}/\text{атм}$ и коррекция сдвига линии $\delta(p_{ref}, T_{ref})$, $\text{см}^{-1}/\text{атм}$) и их зависимости от термодинамических условий атмосферы разных широт содержится в спектроскопических базах данных, которые постоянно модифицируются. Наиболее современными на данный момент времени являются базы данных HITRAN-2004 [24] и GEISA/IASI [25], на которые и опираются наши оценки.

Коррекция полуширины линии на температуру и давление осуществляется по формулам:

$$\gamma_L(p, T) = \left(\frac{T_{ref}}{T} \right)^n (\gamma_{air}(p_{ref}, T_{ref}) (p - p_s) + \gamma_{self}(p_{ref}, T_{ref}) p_s), \quad (13)$$

$$\gamma_{air}(p_{ref}, T) = \gamma_{air}(p_{ref}, T_{ref}) \left(\frac{T_{ref}}{T} \right)^n, \quad (14)$$

где n — коэффициент температурной зависимости уширения линии атмосферным давлением.

Коррекция интенсивности линии на температуру производится следующим образом:

$$S_{nn'}(T) = S_{nn'}(T_{ref}) \frac{Q(T_{ref})}{Q(T)} \frac{\exp(-hcE_i/kT)}{\exp(-hcE_i/kT_{ref})} \times \\ \times \left(\frac{1 - \exp(-hcv_0/kT)}{1 - \exp(-hcv_0/kT_{ref})} \right), \quad (15)$$

где $S_{nn'}(T_{ref})$ — интенсивность линии при температуре T_{ref} ; E_i — нижний энергетический уровень перехода, см^{-1} ; k — коэффициент Больцмана; $hc/k = 1,4388 \text{ см}\cdot\text{К}$ — вторая радиационная константа; c — скорость света; h — постоянная Планка. $Q(T) = \sum_i \exp(-hcE_i/kT)$ является общей внутренней частичной функцией, где суммирование проводится по всем энергетическим уровням молекулы. Данную функцию для увеличения скорости расчетов можно заменить полиномом третьей степени $Q(T) = a - bT - cT^2 - dT^3$. Коэффициенты полинома находятся с помощью процедуры фитинга для каждой молекулы отдельно, в заданном диапазоне температур (70–500 К).

Для оптимизации расчетной процедуры, требующей учитывать вклад каждой линии в поглощение на данной длине волн, этот расчет целесообразно выполнить заранее, на сетке высокого спектрального разрешения.

Существенные затраты времени счета требуются для вычисления интегрального пропускания неоднородной трассы. В этом случае для каждого узла частотной сетки необходимо вычислить N интегралов по высоте z , имеющих для лоренцевского контура вид

$$\chi(\gamma) = \int_{z_1}^{z_2} f(\gamma, \gamma_{nn'}, T(z), p(z)) S(T(z)) dz. \quad (16)$$

Для оптимизации расчетов использовалась модификация схемы Куртиса–Годсона [27], основанная на замене неоднородной трассы эквивалентной однородной. Заметный выигрыш времени счета может быть получен при надлежащей селекции значимых линий поглощения на основе предварительной оценки коэффициентов поглощения или оптических толщин [28].

Современные методы оценки функции пропускания на основе алгоритма расчета *line-by-line* или методом k -распределения позволяют отказаться от громоздкой параметрической схемы расчета (7) введением оценки спектрального пропускания непосредственно в процедуру статистического моделирования.

3. Метод локальной оценки потоков широкополосного излучения в селективно поглощающей атмосфере

Ставится задача оценки пространственно-разрешенных сигналов широкополосного импульсного излучателя в аэрозольной атмосфере с учетом селективного молекулярного поглощения. Подобная задача возникает в связи с необходимостью априорного анализа потенциальных возможностей лидаров нового поколения, так называемых *лидаров белого света*, использующих технологию дифференциальной оптической абсорбционной спектроскопии (DOAS — в англоязычной аббревиатуре) для дистанционного контроля концентрации паров H_2O и парниковых газов в атмосфере [29]. Традиционно такой анализ состоит в количественном установлении границ применимости лидарного уравнения, в данном случае системы лидарных уравнений для конечного набора длин волн $\lambda_i, i = 1, 2, \dots$, в условиях возможных помех реальной атмосферы. В видимом и ближнем ИК-участках спектра длин волн это прежде всего помехи за счет многократного рассеяния на частицах аэрозоля. Интенсивность многократно рассеянного излучения I_λ в транспортном приближении удовлетворяет, как известно [30], интегродифференциальному уравнению переноса. Для импульсного излучателя в неоднородной аэро-зольно-газовой среде уравнение переноса принимает вид

$$[c^{-1} \frac{\partial}{\partial t} + \Omega \nabla + \sigma(\mathbf{r}, \lambda)] I_\lambda(\mathbf{r}, \Omega, t) = \\ = 1/4\pi \int_{4\pi} G(\mathbf{r}, \lambda, \Omega', \Omega) I_\lambda(\mathbf{r}, \Omega', t) d\Omega' + S_\lambda(\mathbf{r}, \Omega, t), \quad (17)$$

где $S_\lambda(\mathbf{r}, \Omega, t)$ — функция источников; $I_\lambda(\mathbf{r}, \Omega, t) = I_\lambda(x)$ — интенсивность на длине волны λ в точке \mathbf{r} в направлении Ω в момент времени t ; $x = (\mathbf{r}, \Omega, t)$ — точка фазового пространства, $x \in X$,

$$X = \{(\mathbf{r}, \Omega, t, \lambda) : \mathbf{r} \in \hat{Q} \subset R^3,$$

$$\Omega \in \hat{W} = \{(a, b, c) \in R^3 : a^2 + b^2 + c^2 = 1\}, t \in \hat{T}\}$$

или $X = \hat{Q} \times \hat{W} \times \hat{T}$ — семимерное фазовое пространство; $G(\mathbf{r}, \lambda, \Omega, \Omega') = \sigma_s(\mathbf{r}, \lambda) g(\mu, \mathbf{r}', \lambda)$ — объемный коэффициент направленного упругого светорассеяния, в основном рассеянии Ми в направлении (Ω, Ω') ; $g(\mu, \mathbf{r}', \lambda)$ — индикаторика рассеяния; $\mu = \cos\theta$; θ — угол рассеяния; $\sigma(\mathbf{r}, \lambda)$ — полный коэффициент ослабления на длине волны λ , т.е.

$$\sigma(\mathbf{r}, \lambda) = \sigma_a(\mathbf{r}, \lambda) + \sigma_S(\mathbf{r}, \lambda) + \alpha_m(\mathbf{r}, \lambda), \quad (18)$$

где $\sigma_a(\mathbf{r}, \lambda)$ и $\sigma_S(\mathbf{r}, \lambda)$ — коэффициенты соответственно поглощения и рассеяния дисперсной среды; $\alpha_m(\mathbf{r}, \lambda)$ — коэффициент молекулярного поглощения.

Уравнение переноса (17) записано в скалярном приближении, т.е. без учета поляризационных эффектов. Тем не менее его строгое аналитическое решение не достигнуто. Среди численных методов наиболее рациональным является метод Монте-Карло. Хотя данный метод не требует строгой записи уравнения переноса, построение эффективных весовых алгоритмов метода [30–32] основано на преобразованиях интегрального уравнения переноса, адекватного исходной задаче. Преобразование нестационарного уравнения (17), содержащего спектральную зависимость оцениваемых функционалов, в интегральную форму приведено в [32], где показано, что оно сохраняет свою каноническую форму Фредгольма 2-го рода:

$$f(x) = \hat{k}(x', x)f(x')dx' + \psi(x), \quad (19)$$

или

$$f = Kf + \psi, \quad (20)$$

$$f(x) = \sigma(x)I_\lambda(x), \quad (21)$$

и имеет смысл плотности столкновений фотонов. Далее, ядро нестационарного интегрального уравнения (19), следуя [33], имеет вид

$$\begin{aligned} \hat{k}(x', x) = & \frac{\Lambda(\mathbf{r}')\sigma(\mathbf{r}, \lambda)g(\mu, \mathbf{r}', \lambda)\exp[-\tau(\mathbf{r}', \mathbf{r}; \lambda)]}{2\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \times \\ & \times \delta(\Omega - \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|})\delta\left[t' - (t + \frac{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|}{c})\right], \end{aligned} \quad (22)$$

где $\Lambda(\mathbf{r}') = \sigma(\mathbf{r}')/\sigma(\mathbf{r}')$ — вероятность выживания кванта;

$$\tau(\mathbf{r}', \mathbf{r}; \lambda) = \int_0^l \sigma(\lambda, \mathbf{r}, l')dl'$$

— оптическая длина отрезка $l = |\mathbf{r}' - \mathbf{r}|$;

$$\psi(x) = \hat{p}(\mathbf{r}_0)\hat{p}(\Omega_0)\hat{p}(t_0)$$

— мультипликативная плотность внешних источников; $\hat{p}(m_0)$ — парциальные плотности соответствующих начальных координат m_0 ; естественно $\int_R \hat{p}(m_0)dm = 1$.

Рациональность метода Монте-Карло состоит в том, что он позволяет получать оценку как потоков излучения, так и линейных функционалов вида

$$\Phi_\phi = (f, \phi) = \int_D f(x)\phi(x)dx \quad (23)$$

по заданной области фазового пространства $D \subset X$, ($\phi(x)$ — характеристическая функция). При этом интегрирование по части переменных в (22) реали-

зуется в процессе моделирования, что существенно оптимизирует процесс счета.

Среди многочисленных модификаций метода Монте-Карло для задач оптической локации, где источники и приемники излучения локализованы, эффективен так называемый «метод локальной оценки». Кратко сущность этого метода состоит в следующем. Пусть $x^*(r^*, \Omega^*, t) \in D$, где D — фазовый объем некоторого оптического детектора, $D \in X$, $D \ll X$. Предположим, что в (19) $x = x^*$, $\psi(x^*) = 0$; $\sigma_s = \sigma$. Подставляя x^* в (20) и поделив обе части полученного выражения на $\sigma(r^*, \lambda)$, получаем

$$I_\lambda(x^*) = \int_X \frac{k(x', x^*)}{\sigma(r^*, \lambda)} f(x') dx'. \quad (24)$$

Таким образом, величина плотности спектрального потока $I_\lambda(x^*)$ формально представлена в виде линейного функционала от плотности столкновений. Однако ядро $k(x', x^*)$ — обобщенные δ -функции. Для их устранения можно проинтегрировать последовательно (24) по некоторым ограниченным областям направлений $\Omega_i \in W$ и времени регистрации фотона $T_j \in T$ ($\Omega_i \ll W$ и $T_j \ll T$). В результате приходим к статистической оценке потока монохроматической радиации в области локализованного детектора $D_{ij} = \Omega_i T_j$ в виде

$$\begin{aligned} \tilde{I}_\lambda(r^*) = & \int_{D_{ij}} I_\lambda(r^*, \Omega^*, t^*) d\Omega^* dt^* = \\ = & \iint_{T_j \Omega_i} I_\lambda(r^*, \Omega^*, t^*) d\Omega^* dt^* = \\ = & \int_X \xi_{ij}(x', x^*) f(x') dx' = M \sum_{n=0}^N q_n \xi_{ij}(x_n, x^*), \end{aligned} \quad (25)$$

где

$$\xi_{ij}(x_n, x^*) = \frac{\exp[-\tau(r_n, r^*, \lambda)g(\mu^*, r, \lambda)]}{2\pi|r_n - r^*|^2} \Delta_i(s^*) \Delta_j(t^*). \quad (26)$$

Здесь $\Delta_i(s^*)$ и $\Delta_j(t^*)$ — индикаторы соответственно областей Ω_i и T_j ;

$$s^* = \frac{r_n - r^*}{|r_n - r^*|}; \quad t^* = \left(t + \frac{|\mathbf{r}^* - \mathbf{r}|}{c} \right); \quad \mu^* = (\Omega_n, s^*);$$

M — символ математического ожидания; $n = 1, 2, \dots, N$ — номер случайного столкновения фотона; q_n — статистический вес фотона, компенсирующий фиктивный характер переходов $k(x_n \rightarrow x^*)$.

Перейдем к обобщению локальной оценки потока рассеянного излучения в конечном спектральном интервале $\Delta\lambda$. Выражение (24) для плотности спектрального потока в области $x^* \in D$ заданного

локализованного детектора D с учетом (5) примет вид

$$I_{\Delta\lambda}(x) = (\Delta\lambda)^{-1} \int_{\Delta\lambda} \int_X \frac{k(x', x^*, \lambda)}{\sigma(r, \lambda)} f(x', \lambda) dx' d\lambda. \quad (27)$$

Следуя (25), (26), статистическую оценку $\tilde{I}_{\Delta\lambda}(\mathbf{r}, \Omega, t)$ получаем в виде

$$\begin{aligned} \tilde{I}_{\Delta\lambda}(r^*) &= \sum_{n=0}^N q_n \{(\Delta\lambda)^{-1} \times \\ &\times \int_{\Delta\lambda} \frac{\exp[-\tau(r_n, r^*, \lambda)] g(\mu^*, r, \lambda)}{2\pi|r_n - r^*|^2} d\lambda \} \Delta_i(s^*) \Delta_j(t^*). \end{aligned} \quad (28)$$

Допускаем правомочность теоремы эквивалентности Irvine [8], т.е. полагаем, что в достаточно узком спектральном интервале $\Delta\lambda$ значения оптических параметров рассеяния среды в каждой точке r являются квазипостоянными. В данном случае

$$\sigma(r, \lambda) \approx \sigma(r), \quad g(\mu^*, r, \lambda) \approx g(\mu^*, r)$$

и оптическое расстояние

$$\tau(r_n, r^*, \lambda) \approx \tau_a(r_n, r^*) + \tau_m(r_n, r^*, \lambda),$$

где $\tau_a(r_n, r^*)$ и $\tau_m(r_n, r^*, \lambda)$ – соответственно аддитивные независимые составляющие аэрозольного и молекулярного ослабления. С учетом сделанного допущения выражение (28) существенно упростится:

$$\begin{aligned} \tilde{I}_{\Delta\lambda}^{ij}(r, \Omega, t) &= \\ &= MO \sum_{n=0}^N q_n \frac{\exp[-\tau_a(r_n, r^*)] g(\mu^*, r) P_{\Delta\lambda}^*(r_n, r^*, \Delta\lambda)}{2\pi|r_n - r^*|^2} \Delta_i(s^*) \Delta_j(t^*), \end{aligned} \quad (29)$$

где функция пропускания

$$\begin{aligned} P_{\Delta\lambda}^*(r_n, r^*, \Delta\lambda) &= (\Delta\lambda)^{-1} \int_{\Delta\lambda} \exp[-\tau_m(r_n, r^*, \lambda)] d\lambda = \\ &= (\Delta\lambda)^{-1} \int_{\Delta\lambda} \exp\left\{-\int_0^{|r_n - r^*|} \alpha_m(\lambda, r') dr'\right\} d\lambda. \end{aligned} \quad (30)$$

Таким образом, канонический алгоритм локальной оценки дополняетсяомножителем (30), требующим дополнительного вычисления. Спектральное поглощение по пробегам фотонов между очередными случайными столкновениями $\{r_n\}$, $n = 0, 1, 2, \dots$ учитывается преобразованием статистических весов

$$q_{n+1} = q_n P_{\Delta\lambda}^n(r_n, r_{n+1}, \Delta\lambda), \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (31)$$

где

$$P_{\Delta\lambda}^n(r_n, r_{n+1}, \Delta\lambda) = (\Delta\lambda)^{-1} \int_{\Delta\lambda} \exp\left\{-\int_0^{|r_{n+1} - r_n|} \alpha_m(\lambda, r') dr'\right\} d\lambda. \quad (32)$$

Остается проблема реализации эффективного алгоритма расчета спектральных функций пропускания (30) и (32).

4. Результаты модельных оценок

Для валидации предложенного алгоритма локальной оценки потоков широкополосного излучения в селективно поглощающей атмосфере выполнен численный эксперимент по лазерному зондированию концентрации паров H_2O в тропосфере Земли. Зондирование паров H_2O возможно в диапазоне 712–735 нм, поскольку участок спектра совпадает с излучением широкополосного Ti:Sa-лазера [36] и содержит заметную полосу поглощения водяного пара. Содержание численного эксперимента состояло в имитации методом Монте-Карло сигналов обратного рассеяния, разрешенных по пространству и длине волны с высоким спектральным разрешением.

Границные условия задачи соответствовали конструктиву реального широкополосного лидара, созданного специалистами франко-германского научного коллектива [34, 35]. В 1998 г. ими проведен исторический натурный эксперимент, в котором излучение мощного фемтосекундного Ti:Sa-лазера впервые было направлено в атмосферу. На расстоянии нескольких десятков метров возник протяженный плазменный канал белого света, излучение которого было зарегистрировано с высоты более 12 км. Уже первые предварительные опыты показали, что новый когерентный источник широкополосного излучения открывает принципиально новые возможности исследования атмосферы. Созданный в короткий срок мобильный вариант фемтосекундного лидара белого света «Teramobile» [35] позволил получить ряд уникальных результатов в плане комплексного зондирования аэрозольного и газового состава атмосферы.

В частности, в работах [34, 35] представлены пространственно-разрешенные дифференциальные спектры пропускания для наиболее характерных полос H_2O (725 и 830 нм) и O_2 (687 и 761 нм). Спектры сняты с помощью скоростного многоканального анализатора (Scientific Instrument) с разным высотным разрешением в интервале 0,15–1,1 км.

Геометрическая схема зондирования близка к моностатической, т.е. обеспечивает полное перекрытие углов поля зрения излучателя и приемного телескопа до нижней границы зондируемого объема. Последовательность ультракоротких импульсов (с длительностью $t_i = 70$ фс и длиной волны $\lambda = 793$ нм) создает на расстоянии $z = 30$ –70 м цилиндрический филамент диаметром ~50 мм. Он является источником направленного в конусе «белого» света (суперконтиинума). Направление распространения выберем вертикально вверх (по оси OZ). Угол расходимости излучения суперконтиинума по известным оценкам лежит в пределах $2\phi_s = 1$ –30 мрад. Углы приема традиционных лидарных систем существенно меньше, поэтому они

задаются как параметры $2\phi_d = 2, 10, 20, 35$ мрад. Условная геометрическая схема лазерного зондирования на базе широкополосного лидара приведена на рис. 1.

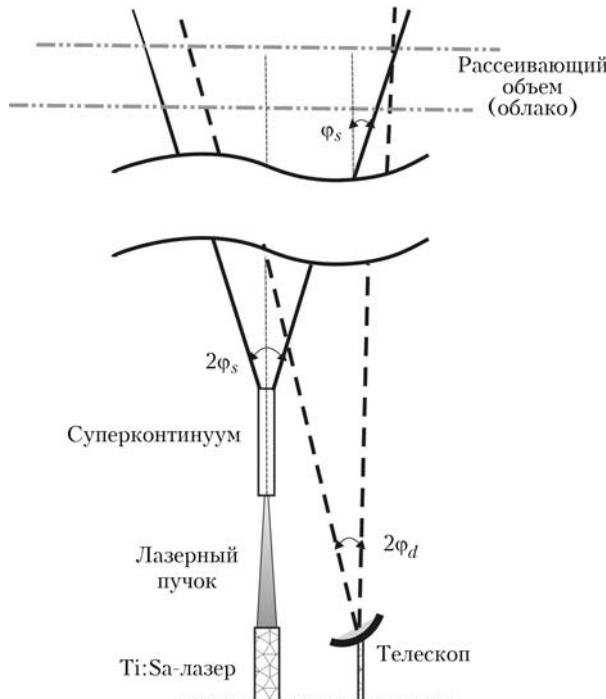


Рис. 1. Структурная схема широкополосного лидара на базе Ti:Sa-лазера

Пространственно-разрешенные дифференциальные спектры пропускания для наиболее характерной полосы паров H_2O (725 нм) рассчитывались для 400 опорных длин волн. Спектральная разрешающая способность приемника являлась параметром задачи. Для проведения расчетов методом Монте-Карло были сформированы входные данные, содержащие коэффициенты аэрозольного ослабления и рассеяния, а также индикаторы рассеяния; высотная сетка была взята с шагом 0,1 км от 0 до 12 км, сетка по длинам волн – с шагом 0,01 нм. В качестве исходных данных для моделирования использовалась оптическая аэрозольная модель [3], в качестве газовой атмосферной модели – банк спектроскопических данных HITRAN-2004 [24], включающий все поглащающие газы в данном диапазоне длин волн. Кроме воды в данном диапазоне длин волн линии поглощения имеет гидроокисел OH, но его вклад в поглощение, как и других газов, достаточно мал. На рис. 2 приведен пример расчетов сигналов локационного рассеяния в указанной полосе поглощения паров H_2O с разрешением по высоте и по спектру длин волн.

Расчеты выполнены с применением изложенной модификации локальной оценки для вертикальной моностатической схемы зондирования со спектральным разрешением приемной системы $\Delta\lambda = 0,05$ нм. Спектральные сигналы обратного рассеяния скорректированы на квадрат расстояния по

трассе зондирования. Влияние многократного рассеяния минимально и не превышает нескольких процентов, несмотря на достаточно широкий, по сравнению с типовыми лидарами, угол приема, который в данном примере составлял $2\phi_d = 20$ мрад.

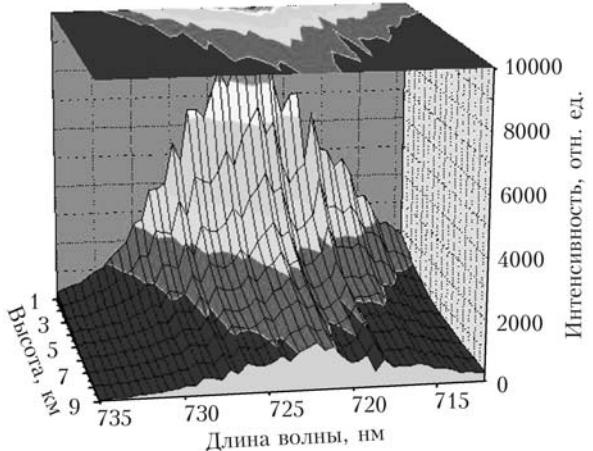


Рис. 2. Результаты расчетов сигналов локационного рассеяния в полосе поглощения паров H_2O с разрешением по высоте и спектру длин волн

Можно отметить, что в условиях средней загрязненности тропосферного слоя спектральные сигналы сохраняют свою информативность до высот 7–8 км. Это подтверждается результатами обращения полученных спектральных сигналов относительно заданного модельного профиля концентрации паров H_2O . Они показаны на рис. 3 в единицах парциального давления.

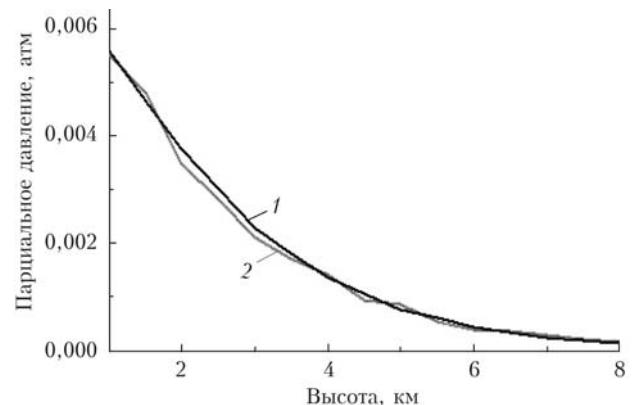


Рис. 3. Модельный (кривая 1) и восстановленный (2) профили концентрации паров H_2O в тропосферном слое

Видно хорошее качество восстановления, что не в последнюю очередь связано с высокой устойчивостью выбранного метода решения обратной задачи. Речь идет о генетическом алгоритме обращения дифференциальных спектров пропускания. Вопросы адаптации генетических алгоритмов к задачам атмосферной оптики и технические детали их реализации обсуждаются в работе [37].

Заключение

Результаты замкнутого численного эксперимента по лазерному зондированию атмосферы показали перспективность применения технологии DOAS для контроля концентрации водяного пара в тропосферном слое при использовании атмосферного аэрозоля в качестве распределенного трассового отражателя. Оценка сигналов обратного рассеяния с высоким спектральным разрешением на основе нестационарного уравнения переноса требует применения прецезионных алгоритмов расчетов. В теории методов Монте-Карло таким алгоритмом считается *метод локальной оценки потоков*. Сочетание этого алгоритма с высокоточным расчетом функций пропускания атмосферных газов на основе техники LBL дает возможность строгого количественного прогноза эффективности разрабатываемых лидарных систем мониторинга окружающей среды.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты № 07-01-00509, 09-01-00698, 09-05-00738, 09-07-00477).

1. Малкевич М.С. Оптические исследования атмосферы со спутников. М.: Наука, 1973. 303 с.
2. Мицель А.А., Фирсов К.М., Фомин Б.А. Перенос оптического излучения в молекулярной атмосфере. Томск: Изд-во СТТ, 2001. 443 с.
3. Зуев В.Е., Креков Г.М. Оптические модели атмосферы. Л.: Гидрометеоиздат, 1986. 256 с.
4. Goody R.M., Yung Y.L. Atmospheric Radiation. Theoretical Basis. N.Y.: Oxford Univ. Press, 1989. 519 р.
5. Кондратьев К.Я. Перенос длинноволнового излучения в атмосфере. М.: Госиздат, 1950. 287 с.
6. Зуев В.Е., Кабанов М.В. Перенос оптических сигналов в земной атмосфере. М.: Сов. радио, 1977. 368 с.
7. Романова Л.М. Предельные случаи функции распределения по пробегам фотонов, выходящих из толстого светорассеивающего слоя // Изв. АН СССР. Физ. атмосф. и океана. 1965. Т. 1. № 4. С. 599–606.
8. Irvine W.M. The formation of absorption bands and the distribution of photon optical paths in scattering atmosphere // Bull. Astron. Inst. Nether. 1964. V. 17. N 1. P. 266–279.
9. Крекова М.М., Креков Г.М., Титов Г.А., Фейгельсон Е.М. Возможности расчета спектрального альбедо Венеры в ближнем ИК-диапазоне // Косм. исслед. 1973. Т. 11. № 3. С. 607–611.
10. Зуев В.Е., Титов Г.А. Оптика атмосферы и климат. Л.: Гидрометеоиздат, 1996. 271 с.
11. Partain P.T., Heidinger A.K., Stephens G.L. High spectral resolution atmospheric radiative transfer: Application of the equivalence theorem // J. Geophys. Res. D. 2000. V. 105. N 2. P. 2163–2177.
12. McClatchey R.A., Fenn R.W., Selby J.E. Optical Properties of the Atmosphere. 3d ed. Report – AFCRL-72-0497, Bedford. AFCRL. 1972. 107 р.
13. Москаленко Н.И. Экспериментальные исследования прозрачности паров H_2O , CO_2 , CH_4 , NO_2 , CO в условиях искусственной атмосферы // Изв. АН СССР. Физ. атмосф. и океана. 1969. Т. 5. № 2. С. 262–271.
14. Москаленко Н.И., Мирумянц С.О. Методы расчета спектрального поглощения инфракрасной радиации атмосферными газами // Изв. АН СССР. Физ. атмосф. и океана. 1970. Т. 6. № 11. С. 1110–1126.
15. Каргин Б.А., Краснокутская Л.Д., Креков Г.М. Спектральное отражение и пропускание облаками солнечной радиации при учете полос поглощения атмосферных газов // Рассеяние света в земной атмосфере. Алма-Ата: Наука, 1972. С. 192–195.
16. Каргин Б.А. Статистическое моделирование поля солнечной радиации в атмосфере. Новосибирск: Изд. ВЦ СО АН СССР, 1984. 206 с.
17. Мицель А.А., Фирсов К.М. Быстрые методы расчета функций поглощения // Изв. АН СССР. Физ. атмосф. и океана. 1987. Т. 23. № 11. С. 1221–1227.
18. Осипов В.М. Быстрый метод расчета спектральных функций пропускания для неоднородных атмосферных трасс // Изв. АН СССР. Физ. атмосф. и океана. 1987. Т. 23. № 11. С. 140–147.
19. Чеснокова Т.Ю., Фирсов К.М., Применение рядов экспонент при моделировании широкополосных потоков солнечного излучения в атмосфере Земли // Оптика атмосф. и океана. 2007. Т. 20. № 4. С. 799–804.
20. Matricardi M., Masiello G., Serio C. An inter-comparison of line-by-line models using different molecular databases. <http://smsc.cnes.fr/IASI/PDF/conf1/Matricardi-paper.pdf>
21. Matricardi M., Chevallier F., Kelly G., Thepaut J.-N. An improved general fast radiative transfer model for the assimilation of radiance observations // Quart. J. Roy. Meteorol. Soc. 2004. V. 130. N 11. P. 153–173.
22. Fomin B.A. Effective interpolation technique for line-by-line calculation of radiation absorption in gases // J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer. 1995. V. 53. N 6. P. 663–669.
23. Siegel R., Howell J.R. Thermal Radiation Heat Transfer. London: Taylor & Francis, 2002. 868 p.
24. Rothman L.S., Jacquemart D., Barbe A., Chris B.D., Birk M., Brown L.R., Carleer M.R., Chackerian C., Jr., Chance K., Coudert L.H., Dana V., Devi V.M., Flaud J.-M., Gamache R.R., Goldman A., Hartmann J.-M., Jucks K.W., Maki A.G., Mandin J.-Y., Massie S.T., Orphal J., Perrin A., Rinsland C.P., Smith M.A.H., Tennyson J., Tolchenov R.N., Toth R.A., Auwera J.V., Varanasi P., Wagner G. The HITRAN 2004 molecular spectroscopic database // J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer. 2005. V. 96. N 2. P. 139–204.
25. Jacquinot-Husson N., Scott N.A., Chedin A., Garceran K., Aramante R., Churkin A.A., Barbe A., Birk M., Brown L.R., Camy-Peyret C., Claveau C., Clerbaux C., Coheur P.F., Dana V., Daumont L., Debacker-Barily M.R., Flaud J.-M., Goldman A., Hamdouni A., Hess M., Jacquemart D., Kopke P., Mandin J.-Y., Massie S., Mikhailenko S., Nemtchinov V., Nikitin A., Newnham D., Perrin A., Peralvalov V.I., Regalia-Jarlot L., Rublev A., Schreier F., Schult I., Smith K.M., Tashkun S.A., Teffo J.L., Toth R.A., Tyuterev Vl.G., Vander Auwera J., Varanasi P., Wagner G. The 2003 edition of the GEISA/IASI spectroscopic database // J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer. 2005. V. 95. N 2. P. 429–467.
26. Кондратьев К.Я., Тимофеев Ю.М. Термическое зондирование атмосферы со спутников. Л.: Гидрометеоиздат, 1970. 410 с.
27. Мицель А.А., Пташник И.В., Фирсов К.М., Фомин Б.А. Эффективный метод полинейного счета пропускания поглощающей атмосферы // Оптика атмосф. и океана. 1995. Т. 8. № 10. С. 1547–1548.
28. Информационно-программное обеспечение задач атмосферной оптики / Под ред. Г.М. Крекова. Новосибирск: Наука, 1988. 142 с.
29. Platt U. Air Pollution Monitoring Systems—Past—Present—Future // Advanced Environmental Monito-

- ring / Y.J. Kim and U. Platt (eds.). Berlin; Heidelberg: Springer, 2008. P. 3–20.
30. Михайлов Г.А. Некоторые вопросы теории методов Монте-Карло. Новосибирск: Наука, 1974. 142 с.
31. Михайлов Г.А. Оптимизация весовых методов Монте-Карло. М.: Наука, 1987. 187 с.
32. Метод Монте-Карло в атмосферной оптике / Под ред. Г.И. Марчука. Новосибирск: Наука, 1976. 284 с.
33. Креков Г.М., Михайлов Г.А., Каргин Б.А. Об алгоритмах метода Монте-Карло для решения задач теории распространения узких пучков света // Изв. вузов. Физ. 1968. № 4. С. 110–115.
34. Rairoux P., Schillinger H., Niedermeier S. Remote sensing of the atmosphere using ultrashort laser pulses // Appl. Phys. B. 2000. V. 71. N 4. P. 573–580.
35. Wille H., Rodrigues M., Kasparian J., Teramobile: a mobile femtosecond-terawatt laser and detection system // Eur. Phys. J. Appl. Phys. 2002. V. 20. N 1. P. 183–190.
36. Dell'Aglio M., Kholodnykh A., Lassandro R., De Pascale O. Development of a Ti : Sapphire DIAL system for pollutant monitoring and meteorological applications // Opt. and Lasers in Eng. 2002. V. 37. N 1. P. 233–244.
37. Креков Г.М., Крекова М.М., Суханов А.Я. Оценка эффективности использования перспективных лидаров белого света для зондирования микрофизических параметров слоистой облачности: З. Решение обратной задачи // Оптика атмосф. и океана. 2009. Т. 22. № 9. С. 862–872.

G.M. Krekov. Method of local estimation of fluxes in the broadband lidar sounding problem.

Using the Monte-Carlo method we solve the problem of evaluating spatially-resolved signals of a broadband pulse emitter in the aerosol atmosphere with taking into account the selective molecular absorption. The problem of this type occurs due to the necessity of a priori analysis of potentialities of white light lidars for remote sensing of H_2O vapor concentration and greenhouse gases in the atmosphere. When estimating the back-scattering signals with high spectral resolution, based on the nonstationary transfer equation, the application is required of precision calculational algorithms. In the theory of the Monte-Carlo methods such an algorithm is the method of local estimation of fluxes. The paper describes the combination of this algorithm with high-precision, *line-by-line* calculation of the functions of atmospheric gases transmission that provides a possibility of a rigorous quantitative forecast of the efficiency of promising lidar systems of the environmental monitoring.