«Оптика атмосферы и океана», **14,** № 9 (2001)

УДК 535.33.34

С.Д. Творогов

О построении ряда экспонент непосредственно по информации о функции пропускания

Институт оптики атмосферы СО РАН, г. Томск

Поступила в редакцию 16.07.2001 г.

Обсуждается возможность разложения функции пропускания P в ряд экспонент непосредственно по эмпирической (или иной) информации относительно интегральной по спектру величины P. В этом варианте не требуется сложный расчет спектрального коэффициента молекулярного поглощения с его многочисленными приближениями, эмпирическими константами и сложными вычислительными проблемами.

1. Постановка задачи

Представление функции пропускания

$$P(x) = \frac{1}{\Delta\omega}\int\limits_{\omega'}^{\omega''} \mathrm{e}^{-x\kappa(\omega)}\, d\omega, \quad \Delta\omega = \omega'' - \omega' \tag{1}$$

для «безразмерной» толщины x слоя поглощающего газа с молекулярным коэффициентом поглощения $\kappa(\omega)$ света частоты ω рядом экспонент

$$P(x) = \int\limits_0^1 \mathrm{e}^{-xs(g)}\, dg = \sum_\nu b_\nu\, \mathrm{e}^{-xs(g_\nu)} \tag{2}$$

(b_ν и g_ν – ординаты и абсциссы соответствующей квадратурной формулы) давно стало популярным приемом в задачах атмосферной спектроскопии [1–3]. Функция $s(g)$ в (2) – обратная для

$$g(s) = \frac{1}{\Delta\omega}\int d\omega, \quad \kappa(\omega) \le s;\ \omega \in [\omega', \omega''] \tag{3}$$

и точная в (3) следует из соотношений

$$\begin{aligned} g(s) &= \frac{1}{2\pi\, i}\int\limits_{c-i\infty}^{c+i\infty} \frac{dx}{x}\, P(x)\, \mathrm{e}^{sx} = \int\limits_0^s f(s)\, ds; \\ f(s) &= \frac{1}{2\pi\, i}\int\limits_{c-i\infty}^{c+i\infty} dx\, \mathrm{e}^{sx}\, P(x);\ c > 0. \end{aligned} \tag{4}$$

Формулы (4) – очевидные последствия изначальных определений f и g:

$$P(x) = \int\limits_0^\infty f(s)\, \mathrm{e}^{-sx} ds, \quad \frac{P(x)}{x} = \int\limits_0^\infty g(s)\, \mathrm{e}^{-sx} ds. \tag{5}$$

Разумеется, (3) принципиально решает проблему построения ряда (2), но расчет $\kappa(\omega)$ сопряжен с многочисленными спектроскопическими приближениями, сопровождаемыми к тому же очень большим числом эмпирических параметров. В сущности, для (1), как интегральной по спектру величины, многие спектральные тонкости $\kappa(\omega)$ попросту несущественны, и появляется поэтому желание строить $g(s)$ непосредственно по информации о $P(x)$. Это могут быть эмпирические сведения, аппроксимации их, либо прямые или апеллирующие к моделям полос поглощения.

Однако воспользоваться формулой (4) как вычислительным средством нельзя – ведь численное построение аналитического продолжения эмпирической функции выглядит делом нереалистичным. Аппроксимации же содержат, как правило, $\sqrt{x}$ (к тому есть свои физические резоны [4]), что при аналогичном продолжении повлечет за собой точку ветвления с неясными математическими последствиями.

Конечно, (5) можно трактовать как интегральные уравнения относительно f и g, но из-за эмпирического происхождения (1) появится непростая проблема обратной некорректной задачи. Далее, $P(x)$ зависит от термодинамических характеристик среды, и каждый раз, при их вариации, (5) придется решать заново. К тому же возникнут существенные трудности при обобщении (2) на случай неоднородной среды, перекрывания полос, вычисления функций источника [3].

Желательным поэтому является поиск такого варианта, когда

$$g(s) = \int\limits_0^\infty P(x)\, \Phi(x; s)\, dx \tag{6}$$

с Φ, удовлетворяющей некоторое, не зависящее от P, уравнение. Доказательство существования (6) составляет содержание статьи.

2. Аналитические свойства $P(z)$ с комплексными $z = x + iy$

Из определения (1) следует, что $P(z)$ – целая функция со свойствами

$$\lim_{|z|\to\infty} |P(z)| = 0;\ x \ge 0;\ \lim_{|z|\to\infty} |P(z)| = \infty,\ x < 0\,.$$

На мнимой оси

$$P(iy) = U(y) + iV(y);$$

$$\begin{Bmatrix} U \\ V \end{Bmatrix} = \frac{1}{\Delta\omega} \int\limits_{\omega'}^{\omega''} d\omega \begin{Bmatrix} \cos[y\kappa(\omega)] \\ \sin[y\kappa(\omega)] \end{Bmatrix} \tag{7}$$

с четной $U(y)$ и нечетной $V(y)$.

Перечисленные свойства $P(z)$ представляют собой очевидную возможность сдвинуть в (4) интегрирование на мнимую ось ($c \to 0$). Из них стандартным приемом выводятся дисперсионные соотношения

$$U(y) = \frac{1}{\pi} P \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \frac{V(y')\, dy'}{y - y'}, \quad V(y) = -\frac{1}{\pi} P \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \frac{U(y')\, dy'}{y - y'}. \tag{8}$$

3. Переход к формуле (6)

Подставляя (7) в (4), где $c = 0$, исключая затем V по (8) и используя свойства симметрии U и V, получим

$$g(s) = \frac{2}{\pi} \int\limits_0^{\infty} dy\, U(y) \frac{\sin sy}{y}. \tag{9}$$

Естественно, что после подстановки (7) в (9) вновь вернемся к (3).

Рассмотрим интеграл

$$I = \frac{1}{2\pi i} \int\limits_C \frac{P(z)\, dz}{z - x} = P(x)$$

по контуру C, изображенному на рис. 1. Свойства $P(z)$ из п. 2 приводят к соотношению

$$P(x) = \frac{2x}{\pi} \int\limits_0^{\infty} \frac{U(y)\, dy}{y^2 + x^2}. \tag{10}$$

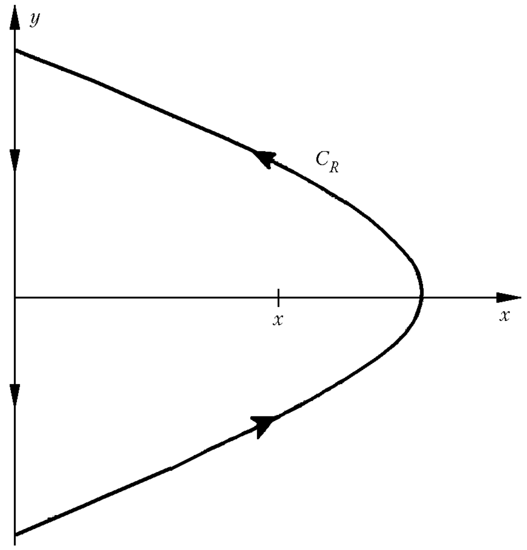

Рис. 1. Контур интервала при выводе (10); C_R – полуокружность радиуса $R \to \infty$

Можно, конечно, трактовать (10) как уравнение относительно $U(y)$ и затем $g(s)$ вычислять по (9). Но можно, однако убедиться, что математически версия эта сводится к уже обсуждавшемуся уравнению (5).

Далее, казалось бы, стоит попытаться выразить $P(iy)$ через $P(x)$, используя идею интеграла Шварца для полуплоскости [5]. Здесь надо рассмотреть интеграл (с комплексной переменной $\xi = t + i\tau$)

$$I_1 = \frac{1}{\pi} \int\limits_C \frac{P(\xi)\, d\xi}{(x - \xi)^2 + y^2} = P(z)$$

по контуру C (рис. 2). Просто выписывая интегралы по осям t и τ, получим выражение

$$P(x + iy) = \frac{1}{\pi} \int\limits_0^{\infty} \frac{y\, P(t)\, dt}{(x - t)^2 + y^2} - \frac{1}{\pi} \int\limits_0^{\infty} \frac{iyP(i\tau) d\tau}{(x - i\tau)^2 + y^2}. \tag{11}$$

Первое слагаемое – гармоническая функция, принимающая на вещественной оси ($y \to 0$) значение $P(x)$. Другой интеграл – отличие от желаемой функции. (Хотя он и нуль при $y \to 0$).

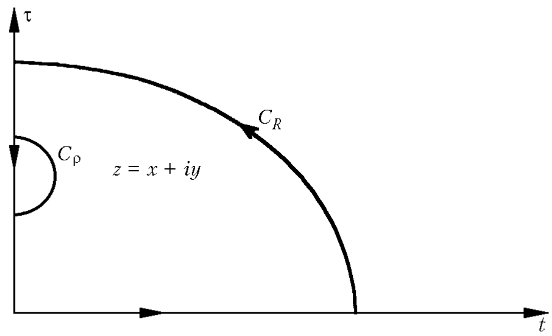

Рис. 2. Контур интегрирования при выводе (11): C_ρ – полуокружность радиуса $\rho \to 0$

В рассматриваемом варианте при $x \to 0$ контур на рис. 2 надо деформировать, обходя по полуокружности радиуса $\rho \to 0$ точку $\tau = y$. Тогда появится интегральное (Фредгольма первого рода) уравнение

$$P(iy) = \frac{2}{\pi} \int\limits_0^{\infty} \frac{P(t)\, y\, dt}{t^2 + y^2} - \frac{2i}{\pi} \int\limits_0^{\infty} P \frac{y\, P(i\tau)\, d\tau}{y^2 - \tau^2}$$

относительно $P(iy)$ со «свободным» слагаемым, выраженным через (1). И снова непосредственная проверка убеждает, что решением последнего уравнения будет (7) – опять возвращаемся к уже обсуждавшимся в п. 1 проблемам.

Вариант (6), исключающий перечисленные прежде вычислительные сложности, получается после несложного формального преобразования. Положим, что существует $\Phi(x; s)$ как решение интегрального (Фредгольма первого рода) уравнения

$$\int\limits_0^{\infty} \frac{x\, \Phi(x; s)\, dx}{y^2 + x^2} = \frac{\sin sy}{y}. \tag{12}$$

Тогда, умножая (10) на Φ, интегрируя по x и применяя (9), сразу же увидим (6).

Отметим здесь, что переход от (9), (10) и (12) к (6) естественно предполагает перестановочность интегралов в выражении

$$\int_0^\infty dx\, x\,\Phi(x;\, s) \int_0^\infty \frac{U(y)\, dy}{y^2 + x^2}\,.$$

Вопрос этот (как и во всех остальных случаях) решается совершенно стандартными средствами [6].

Понятно, что (12) не зависит от термодинамических параметров и возможных вариаций (1) – все соответствующие характеристики $g(s)$ появятся уже после подстановки в (6) «своих» P. (Неоднородная среда, перекрывание полос, функция источника [3]).

После умножения (12) на $\cos \xi y$ и операции $\int_0^\infty dy(\ldots)$ увидим, что

$$\int_0^\infty \Phi(x;\, \xi)\, e^{-\xi x}\, dx = \begin{cases} 1 & \xi < s \\ \frac{1}{2} & \xi = s \\ 0 & \xi > 0 \end{cases} = \tag{13}$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \frac{d\rho}{\rho}\, e^{\xi\rho}\left(1 - e^{-s\rho}\right).$$

Далее, если полагать Φ решением уравнения (13), то формулы (6) и (1) приведут к точному (3).

4. Математические вопросы для (6), (12) и (13)

Интегральные уравнения типа Фредгольма первого рода имеют определенные математические тонкости (см., например, [7]). Центральным оказывается вопрос о единственности решения из (12) или (13). Но исходным пунктом является уравнение (10), а его единственным решением, что сразу же проверяется непосредственно, будет (7). Остальные преобразования, сопровождаемые выяснением возможности переставлять интегрирования, являются тождественными. Разумеется, здесь надобна дополнительная фраза о том, что P имеет математическую структуру (1).

Последующее решение (12) или (13), по-видимому, должно быть только численным, и это предполагает привлечение соответствующих, и отнюдь не тривиальных [8], приемов (кстати, если ориентироваться на V вместо U, то в (6) $\Phi \to \psi$, а последняя удовлетворяет уравнению

$$\int_0^\infty \frac{\psi(x;\, s)\, dx}{y^2 + x^2} = \frac{1}{y^2}\,(1 - \cos sy)$$

с всегда положительной правой частью. При этом $\partial\psi / \partial s = x\Phi$).

Может показаться, что есть возможность написать аналитическое уравнение для (12). В самом деле, допустим, что Φ регулярна в правой полуплоскости z. Тогда, преобразуя (6) интегрированием по контуру, такому же, как на рис. 2, выразим $g(s)$ через интеграл по мнимой оси. Затем, написав (9) в эквивалентной форме

$$g(s) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} dy\, \frac{\sin sy}{y}\, U(y) - \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} dy\, \frac{1 - \cos sy}{y}\, V(y)\,,$$

найдем явный вид Φ на мнимой оси, и остается только аналитически продолжить ее на положительную вещественную ось. Однако сценарий этот невозможен, что фактически стало ясным еще при обсуждении (11) – ведь формально это эквивалентно преобразованию верхней полуплоскости в правую, но соответствующей интегралу Шварца для полуплоскости гармонической функции в нашем случае нет. Иными словами, исходное предположение относительно Φ не исполняется.

Далее, при решении (13), казалось бы, надо воспользоваться обратным преобразованием Лапласа, но это возможно лишь тогда, когда правая часть уравнения – регулярная в правой полуплоскости функция [9]; но в (13) этого нет из-за разрывности производной. Это, конечно же, не означает, что у (13) нет решения – просто его нельзя найти обратным преобразованием Лапласа.

Возможно еще упрощение (6) и (13). Положим в (12) $\Phi(x;\, s) = s\varphi(x;\, s)$, $x = y\eta$, $sy = a$, тогда

$$\int_0^\infty \frac{\eta\varphi(y\eta;\, s)\, d\eta}{1 + \eta^2} = \frac{\sin a}{a}\,.$$

Теперь вполне достоверным выглядит утверждение, что φ зависит от произведения $y\eta s = a\eta$. Если еще положить $a\eta = q$, то получается уравнение

$$\int_0^\infty \frac{q\, \varphi(q)\, dq}{a^2 + q^2} = \frac{\sin a}{a}\,.$$

Последующие преобразования такие же, как при переходе от (12) и (13), и итогом окажется уравнение

$$\int_0^\infty \varphi(x)\, e^{-\xi x} dx = \begin{cases} 1 & \xi < 1, \\ \frac{1}{2} & \xi = 1, \\ 0 & \xi > 1. \end{cases} \tag{14}$$

Формула (6), после перечисленных замен, обретет вид

$$g(s) = \int_0^\infty P\left(\frac{x}{s}\right)\varphi(x)\, dx \tag{15}$$

с решением уравнения (14).

Из (15) следует соответствующее (3) правильное $\lim\limits_{s\to\infty} g(s) = 1$. Действительно, $\lim\limits_{s\to\infty} P(x/s) = P(0) = 1$ в силу (1), а $\int_0^\infty \varphi(x)\, dx = 1$. Далее, $\lim\limits_{s\to 0} P(x/s) = P(\infty) = 0$, и, по (15), $\lim\limits_{s\to 0} g(s) = 0$, как и необходимо для (3). Соответственно, сама формула (3) – следствие (15), (1) и (14).

Работа поддержана РФФИ, грант № 00-05-65209.

1. *Lacis A.A., Oinas V.* A description of the correlated k-distribution method for modeling nongray gaseous absorption, thermal emission, and multiple scattering in vertically inhomogeneous atmospheres // J. Geophys. Res. D. 1991. V. 96. P. 9027–9063.
2. *Goody R., West R., Chen L., Grisp D.* The correlated-k method for radiation calculations in nonhomogeneous atmospheres // J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer. 1989. V. 42. P. 539–550.
3. *Tvorogov S.D., Nesmelova L.I., Rodimova O.B.* k-distribution of transmission function and theory of Dirichlet series // J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer. 2000. V. 66. P. 243–262.
4. *Зуев В.Е.* Распространение видимых и инфракрасных волн в атмосфере. М.: Сов. радио, 1970. 496 с.
5. *Лаврентьев М.А., Шабат Б.В.* Методы теории функций комплексного переменного. М.: ГИФИЛ, 1958. 678 с.
6. *Фихтенгольц Г.М.* Курс дифференциального и интегрального исчисления. М.: Физматгиз, 1959. Т. 2. 807 с.
7. *Трикоми Ф.* Интегральные уравнения. М.: ИИЛ, 1960. 299 с.
8. *Верлань А.Ф., Сизиков В.С.* Интегральные уравнения: методы, алгоритмы, программы. Киев: Наукова думка, 1986. 543 с.
9. *Смирнов В.И.* Курс высшей математики. М.: ГИТТЛ, 1957. Т. IV. 812 с.

S.D. Tvorogov. **On construction of the series of exponents using the information on the transmission function.**

The possibility of representation of the transmission function P by a series of exponents using immediately empirical (or some other) information on the spectrally integrated value of P is discussed. This approach does not require complicated calculation of the spectral molecular absorption coefficient connected with numerous approximations, empirical constants, and computational problems.