

Ю.В. Кистенев, Ю.Н. Пономарев, К.М. Фирсов

Анализ температурной зависимости кумулятивных спектров колебательно-вращательных полос поглощения атмосферных газов

Институт оптики атмосферы СО РАН, г. Томск

Поступила в редакцию 1.07.2002 г.

Показано, что параметр лакуарности, характеризующий фрактальные свойства оптических спектров, зависит от температуры среды и может использоваться как критерий применимости рядов экспонент при решении уравнения переноса в неоднородной, неизотермической атмосфере.

Аппроксимация функции пропускания рядами экспонент (метод k -распределения) позволяет эффективно рассчитывать интегральные по спектру радиационные характеристики и получила широкое применение при решении задач общей циркуляции атмосферы [1, 2]. Метод k -распределения основывается на том, что осуществляется интегральное преобразование

$$T = \frac{1}{\Delta\nu} \int_{\Delta\nu} \exp[-k(\nu)L] d\nu = \int_0^1 \exp[-k(g)L] dg, \quad (1)$$

где $k(\nu)$ – коэффициент молекулярного поглощения; L – длина трассы; ν – волновое число; $k(g)$ можно интерпретировать как коэффициент поглощения в пространстве кумулятивных волновых чисел [3]. Данное преобразование позволяет осуществить переход от быстроосциллирующей функции $k(\nu)$ к гладкой $k(g)$ (рис. 1). После этого можно представить функцию пропускания в виде короткого ряда экспонент при сохранении высокой точности расчетов (на уровне метода line-by-line).

Особенностью метода k -распределения является то, что он точен для однородной изотермической атмосферы, а для неоднородной трассы без дополнительных предположений построить модель, описывающую зависимость оптической толщи от локальных характеристик, не представляется возможным. По аналогии с прямым методом line-by-line наиболее естественно следующее формальное определение оптической толщи τ в пространстве кумулятивных волновых чисел g :

$$\tau(g, z_0, z) = \int_{z_0}^z k(g, h) \rho(h) dh, \quad (2)$$

где $\rho(h)$ – концентрация поглощающего газа на высоте h , а $k(g, h)$ имеет смысл «спектрального» коэффициента поглощения на высоте h . Расчет $k(g, h)$ может быть проведен на основе $k(\nu, h)$.

Соотношение (2) – эвристическое и носит приближенный характер. Оценки [4, 5] показали, что для

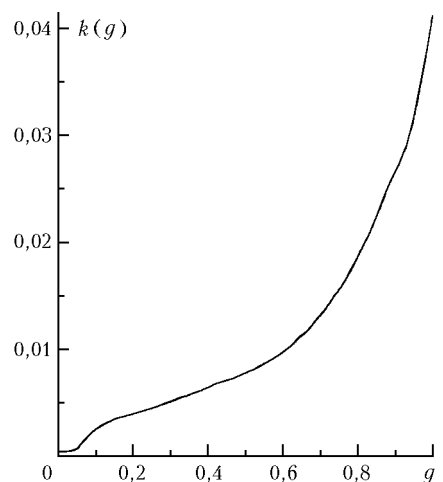
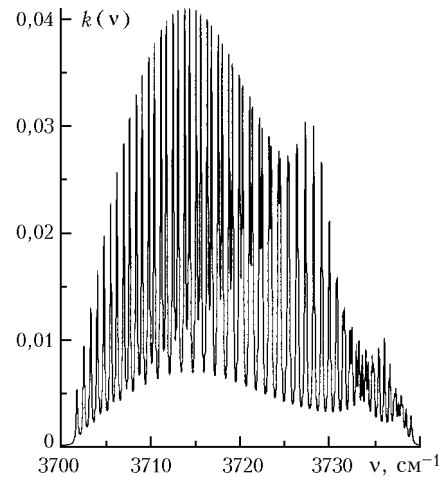


Рис. 1. Спектр поглощения R-ветви полосы 11112–01101 CO₂

полос H₂O, CO₂, O₃, лежащих в длинноволновом диапазоне спектра, и для типичных атмосферных условий соотношение (2) дает погрешность на уровне 1%. Было также показано [5], что (2) применимо для изотермической атмосферы.

Неоднородная атмосфера, как правило, не является изотермической, и, следовательно, использование

соотношения (2) для расчета радиационных потоков требует оценки применимости данного метода. Отметим, что для существенно неизотермической атмосферы подобные расчеты могут приводить к неверным результатам. В качестве примера рассмотрим среду, состоящую из двух слоев (рис. 2), отличающихся друг от друга только температурой Θ_1 и Θ_2 ($\Theta_1 > \Theta_2$).

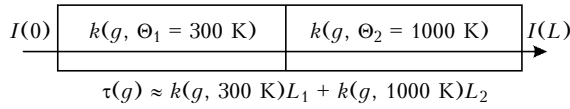


Рис. 2. Двухслойная модель газовой среды

Пусть в интересующем спектральном диапазоне $[\nu_1, \nu_2]$ расположены две линии, с центрами ν_1 и ν_2 , одна из которых образована переходом из основного состояния, а другая из высоковозбужденного. Пусть соотношение между интенсивностями S линий таково, что $S_1(\Theta_1) = S_2(\Theta_2) = S$, $S_1(\Theta_1) \gg S_2(\Theta_1)$ и $S_1(\Theta_2) \ll S_2(\Theta_2)$. Будем полагать, что спектр поглощения в каждом слое образован одной единственной линией, поглощающая масса W ($W = \rho L$, где L – длина трассы) для обоих слоев одинакова, форма контура линий лоренцевская, полуширины линий одинаковы и не зависят от температуры. Тогда коэффициент поглощения в i -м слое имеет вид

$$k_i(\nu) = \frac{S}{\pi} \frac{\gamma}{(\nu - \nu_i)^2 + \gamma^2}. \quad (3)$$

Переходя в пространство кумулятивных волновых чисел, можно получить

$$k_i(g) = \frac{1}{(\Delta\nu)^2} \frac{S}{\pi} \frac{\gamma}{g^2 + (\gamma/\Delta\nu)^2}, \quad (4)$$

где $0 \leq g \leq 1$, $\Delta\nu = (\nu_1 - \nu_2)$.

Суммарная оптическая толщина $\tau = \tau_1 + \tau_2$ (здесь τ_i – оптическая толщина i -го слоя), а так как коэффициенты $k_i(g)$ одинаковы, то

$$\tau = \frac{1}{(\Delta\nu)^2} \frac{2SW}{\pi} \frac{\gamma}{g^2 + (\gamma/\Delta\nu)^2}. \quad (5)$$

Формулы (5) и (4) отличаются только постоянным множителем $2W$. Следовательно, спектр поглощения в пространстве кумулятивных волновых чисел получается таким, если бы линии поглощения в пространстве волновых чисел имели одинаковый центр, что неверно.

Приведенный пример описывает ситуацию, нетипичную для земной атмосферы, однако он показывает, что соотношение (2) является аппроксимацией, которая не всегда приводит к удовлетворительному результату, особенно на трассах с большими температурными градиентами.

В настоящее время не существует критериев применимости метода k -распределения. Основной причиной погрешностей данного метода является изменение структуры совокупного спектра полосы с изменением

температуры. Совокупный спектр имеет сложную квазислучайную структуру и его температурные изменения могут быть описаны с использованием статистического подхода. Покажем, что функцию пропускания можно выразить через моменты распределения по частоте коэффициентов поглощения.

Функцию пропускания можно представить в виде (см., например, [6]):

$$T(L) = \int_0^{\infty} f(k) \exp(-kL) dk. \quad (6)$$

Функция $f(k)$ имеет точки разрыва первого рода, поэтому ее объявим весовой функцией, а экспоненту под знаком интеграла аппроксимируем полиномом Лежандра:

$$\exp(-kL) = \sum_{m=1}^N \frac{\omega_N(k)}{(k - k_m) \omega'_N(k_m)} \exp(-k_m L), \quad (7)$$

где

$$\omega_N(k) = (k - k_1)(k - k_2) \dots (k - k_N), \quad (8)$$

т.е. экспонента аппроксимируется полиномом степени N :

$$\exp(-kL) = \sum_{m=1}^N a_m k^m \exp(-k_m L). \quad (9)$$

Подставляя (9) в (6), получаем ряд экспонент:

$$T(L) = \sum_{m=1}^N a_m \int_0^{\infty} f(k) k^m dk \exp(-k_m L) = \sum_{m=1}^N C_m \exp(-k_m L). \quad (10)$$

Можно показать, что

$$\int_0^{\infty} f(k) k^m dk = \frac{1}{\Delta\nu} \int_{\Delta\nu} [k(\nu)]^m d\nu = M_m [k(\nu)]. \quad (11)$$

Из формулы (11) следует, что параметры разложения могут быть рассчитаны через моменты распределения коэффициента поглощения. Первые моменты имеют известный достаточно прозрачный смысл (среднего и среднеквадратического отклонения). Изменение формы распределения при изменении температуры скажется на значениях его первых моментов.

Для описания совокупных свойств различных распределений применяется параметр, называемый лакуарностью. Одно из возможных определений лакуарности Λ для некоторой квазислучайной функции $s(R)$ имеет следующий вид:

$$\Lambda = \langle s^2 \rangle_s / \langle s \rangle_s^2, \quad (12)$$

где усреднение проводится по всем возможным значениям функции. Лакуарность характеризует степень отклонения значений функции от среднего, причем $\Lambda = 1$ означает, что функция трансляционно-инвариантна.

Практически расчет лакуарности связан с усреднением исходной функции по некоторому интервалу размера δ . Параметр лакуарности используется для произвольных распределений, однако отметим, что для фрактальных и мультифрактальных объектов зависимость $\Lambda(\delta)$ линейна в двойном логарифмическом масштабе [7, 8].

Для описания колебательно-вращательных спектров в качестве функции $s(R)$ целесообразно использовать спектральную зависимость коэффициента поглощения. В этом случае

$$\Lambda = M_2 \{k(\nu)\} / [M_1 \{k(\nu)\}]^2. \quad (13)$$

Поскольку лакуарность определяется через первый и второй моменты распределения коэффициента поглощения, то связь между параметрами разложения функции пропускания в ряд экспонент и данной характеристикой спектра очевидна. Отметим, что наряду с (12) используются и высшие лакуарности, связанные с моментами более высокого порядка.

Результаты расчета

Были проведены модельные расчеты функции пропускания для двухслойной газовой среды и параметра лакуарности. Модель среды и способ расчета оптической толщи представлены на рис. 2. Для проведения расчетов спектров поглощения при различных температурах использовалась база данных CDSD параметров линий CO₂ [9].

На рис. 3 приведена зависимость пропускания от длины трассы для отдельных слоев, а на рис. 4 –

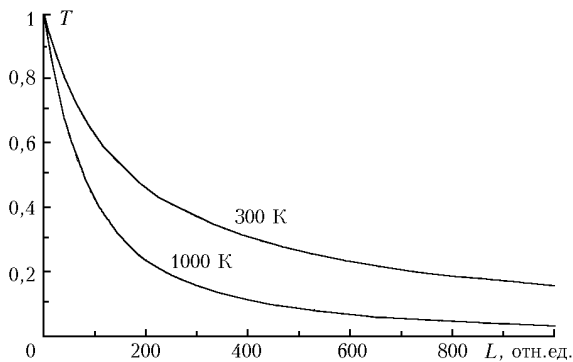


Рис. 3. Зависимость пропускания от длины трассы при различных температурах CO₂

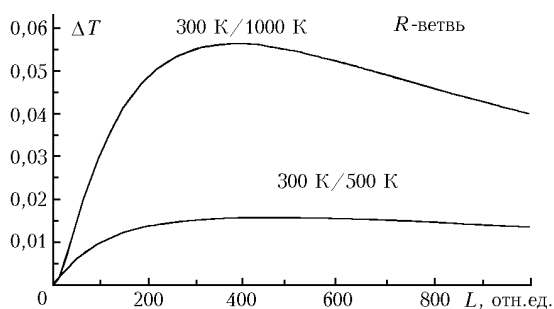


Рис. 4. Погрешность вычисления функции пропускания при использовании ряда экспонент

погрешности расчета функций пропускания для двухслойной среды, обусловленные применением (2). Видно, что погрешность расчета функций пропускания для двухслойной среды увеличивается, когда температура одного из слоев растет. Подобно этому увеличивается лакуарность с ростом температуры (рис. 5). Рост лакуарности связан с усилением неоднородности частотного распределения коэффициентов поглощения. Таким образом, лакуарность может выступать как критерий применимости метода k -распределения.

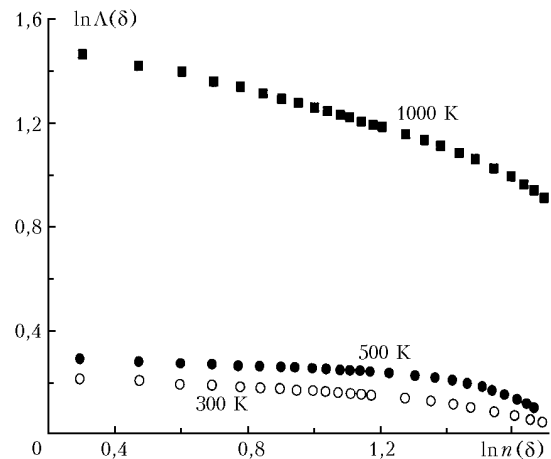


Рис. 5. Лакуарность оптического спектра R -ветви полосы 11112–01101 CO₂, где $n(\delta) = \Delta\nu\delta$

Из представленных результатов видно, что с ростом температуры зависимость $\Lambda(\delta)$ приближается к линейной (в двойном логарифмическом масштабе). Это свидетельствует о том, что вышеупомянутое распределение начинает проявлять свойства масштабной инвариантности, характерные для фрактальных и мультифрактальных распределений.

Авторы статьи выражают свою признательность д.ф.-м.н. В.И. Первалову и к.ф.-м.н. С.А. Ташкуну за предоставленные данные по высокотемпературным спектрам CO₂.

Данная работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант № 01-05-65152а.

1. Ellingson R.G. The state of the ARM-IRF Accomplishments trough 1997 // Proc. of the Eighth Atmospheric Radiation Measurement (ARM) Science Team Meeting. Tuscon, Arisona, 1998. P. 245–248.
2. Мицель А.А., Фирсов К.М. Развитие моделей молекулярного поглощения в задачах переноса излучения в атмосфере Земли // Оптика атмосфер. и океана. 2000. Т. 13. № 2. С.179–197.
3. Фирсов К.М., Чеснокова Т.Ю., Белов В.В., Серебренников А.Б., Пономарев Ю.Н. Применение метода k -распределения при решении уравнения переноса коротковолнового излучения в пространственно-неоднородной атмосфере // Оптика атмосфер. и океана. 2001. Т. 14. № 9. С. 776–781.
4. Lacis A.A., Oinas V. A description of the K -distribution methods for modelling nongray gaseous absorption, thermal emission, and multiple scattering in vertically inhomogeneous atmospheres // J. Geophys. Res. D. 1991. V. 96. N 5. P. 9027–9063.

5. *Goody R., West R., Chen L., Crisp D.* The correlated-k method for radiation calculations in nonhomogeneous atmospheres // *J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer.* 1989. V. 42. N 6. P. 539–550.
6. *Творозов С.Д.* Некоторые аспекты задачи о представлении функции пропускания в ряд экспонент // *Оптика атмосф. и океана.* 1994. Т. 7. № 3. С. 315–326.
7. *Allain C., Cloitre M.* Characterizing the lacunarity of random and deterministic fractal sets // *Phys. Rev. A.* 1991. V. 44. N 6. P. 3552–3558.
8. *Plotnick R.E., Gardner R.H., Hargrove W.W., Prestegard K., Perlmutter M.* Lacunarity analysis: A general technique for analysis of spatial patterns // *Phys. Rev. E.* 1996. V. 53. N 5. P. 5461–5468.
9. *Tashkun S.A., Perevalov V.I., Bykov A.D., Lavrentieva N.N., Teffo J.-L.* High-precision spectroscopic databank of line parameters of CO₂ molecule: version for high-temperature applications // *Abstr. of seventeenth colloquium of high resolution molecular spectroscopy.* Nijmegen, 2001. P. 324.

Yu.V. Kistenev, Yu.N. Ponomarev, K.M. Firsov . **Analysis of temperature dependence of cumulative spectra of vibrational-rotational absorption bands of atmospheric gases.**

The lacunarity parameter characterizing fractal properties of the optical spectra is shown to depend on the temperature of a medium. It can be used as a criterion of applicability of the exponential series when solving the transfer equation in the inhomogeneous nonisothermal atmosphere.