

Ю.В. Кистенев*, Ю.Н. Пономарев, К.М. Фирсов, Д.А. Герасимов*

Применение параметра лакуарности для анализа погрешностей расчета пропускания неоднородной атмосферы при использовании рядов экспонент

Институт оптики атмосферы СО РАН, г. Томск

*Томский государственный университет

Поступила в редакцию 8.09.2003 г.

С использованием параметра лакуарности проведен анализ погрешности расчета функций пропускания атмосферы, обусловленных молекулярным поглощением в спектральном интервале $\Delta\nu$, при использовании рядов экспонент. Показано, что данная погрешность определяется первыми двумя моментами распределения коэффициентов поглощения в рассматриваемом спектральном интервале, а ее величина практически во всем оптическом диапазоне не превышает 1%. Исключение составляет только узкий диапазон спектра в области 9,6-мкм полосы озона, где для трасс, проходящих через всю атмосферу, погрешность может достигать 4%.

Введение

В настоящее время при решении уравнения переноса широко используется разложение функции пропускания, обусловленной молекулярным поглощением, в ряд экспонент. Такой метод, получивший название k -распределение, позволяет разрешить целый ряд проблем, возникающих при численных расчетах: он описывает функцию пропускания с высокой точностью (отличие от прямого счета в среднем составляет ~1%), является малопараметрическим (число членов ряда не превышает 5–7), имеет экспоненциальную функциональную зависимость, что обеспечивает удобство ее применения в различных вычислительных схемах, когда существенно многократное рассеяние в газовой-аэрозольной атмосфере [1].

Метод k -распределения основывается на преобразовании интегрального по спектру пропускания однородной среды

$$T_\nu = \frac{1}{\Delta\nu} \int_{\Delta\nu} \exp\{-k(\nu)L\} d\nu \quad (1)$$

к виду

$$T_g = \int_0^1 \exp\{-k(g)L\} dg, \quad (2)$$

где $k(\nu)$ — коэффициент молекулярного поглощения, являющийся быстроосциллирующей функцией аргумента ν ; L — длина трассы; ν — волновое число; $k(g)$ — кусочно-непрерывная, монотонно возрастающая функция аргумента g , которую можно интерпретировать как коэффициент поглощения в пространстве кумулятивных волновых чисел g [1].

Для неоднородной трассы в литературе используется следующее формальное определение оптической толщи слоя среды в пространстве кумулятивных волновых чисел:

$$\tau(g, z_0, z) = \int_{z_0}^z k(g, h) dh, \quad (3)$$

где $k(g, h)$ имеет смысл коэффициента поглощения с кумулятивным волновым числом g на высоте h . Расчет $k(g, h)$ может быть проведен на основе $k(\nu, h)$. Выполнение соотношения (3) в случае одного поглощающего газа неоднократно проверялось (более детально об этом см. [5]), и было выявлено, что (3) справедливо, если выполняется приближение k -корреляции, которое означает подобие спектров поглощения на разных высотах.

Однако стандартные способы применения рядов экспонент сталкиваются с проблемой перекрытия полос поглощения. Перекрытие полос в задачах переноса излучения через атмосферу Земли понимается в более узком смысле, чем в спектроскопии, а именно только как перекрытие полос поглощения, принадлежащих разным газам. При моделировании пропускания смеси газов широко применяют так называемое правило произведения, когда функцию пропускания газовой смеси представляют в виде произведения функций пропускания, обусловленных поглощением отдельных газов.

В работах [2–4] было выявлено, что погрешность данного приближения мала при выполнении условий:

а) спектральный интервал достаточно широк и в нем должно находиться как минимум несколько линий каждого газа;

б) центры линий двух газов случайны и не связаны какой-либо функциональной зависимостью;

в) парциальное давление ушляющего газа много больше парциального давления поглощающих газов. При выполнении этих условий было установлено, что погрешность аппроксимации носит случайный характер, причем отклонения от точного расчета могут наблюдаться как в большую, так и в меньшую сторону [6]. Несмотря на то что правило произведения обеспечивает достаточно высокую точность расчета функций пропускания, при использовании k -распределения оно приводит к катастрофическому увеличению числа членов ряда, которое экспоненциально возрастет с увеличением количества поглощающих газов.

В [1, 5] предлагается иной способ применения рядов экспонент: первоначально методом *line-by-line* рассчитываются коэффициенты молекулярного поглощения сразу для смеси газов, после чего рассчитываются параметры ряда. В этом случае нет необходимости использовать произведение функций пропускания. Однако в случае смеси газов в неоднородной атмосфере могут возникать погрешности параметризации. Это связано с тем, что точность модели (3) снижается с ростом изменчивости спектра поглощения среды вдоль трассы, в частности с ростом ее температурной неоднородности [7].

В работе [8] дано качественное обоснование критерия оценки точности расчета пропускания на основе (3) для неизотермической атмосферы, базирующегося на применении понятия лакуарности оптического спектра. Лакуарность функции $k(v)$ связана с ее первыми статистическими моментами следующим образом:

$$\Lambda = \frac{M_2\{k(v)\}}{M_1^2\{k(v)\}}. \quad (4)$$

Цель данной работы заключается в поиске количественного критерия оценки точности расчета пропускания при использовании соотношения (4) для неизотермической, неоднородной атмосферы, когда доминирующими поглощающими компонентами являются H_2O , CO_2 , O_3 .

Обоснование количественного критерия

Оценка погрешности δ расчета пропускания неоднородной атмосферы методом k -распределения может быть получена следующим образом:

$$\delta = |T_v(L) - T_g(L)|. \quad (5)$$

Для оценок будем использовать модель плоскостной атмосферы, считая, что слои такие тонкие, что оптическая толщина $\tau(v, L) \ll 1$. В этом случае функция пропускания всей неоднородной атмосферной трассы может быть представлена в виде

$$T_v(L) = \frac{1}{\Delta v} \int_{v_1}^{v_2} \exp \left[- \sum_{i=1}^N k(v, L_i) \Delta L_i \right] dv \approx$$

$$\approx 1 - \left\langle \sum_{i=1}^N k(v, L_i) \Delta L_i \right\rangle_v + \frac{1}{2} \left\langle \sum_{i=1}^N \sum_{m=1}^N k(v, L_i) \Delta L_i k(v, L_m) \Delta L_m \right\rangle_v, \quad (6)$$

где ΔL_m — геометрическая толщина m -го слоя, L_m — положение в пространстве m -го слоя.

Формально переход в пространство кумулятивных частот эквивалентен замене переменных интегрирования в (1): $v \rightarrow k$, где $k \equiv k(v)$ — коэффициент поглощения среды. Для неоднородной трассы такая замена возможна, если частотная зависимость коэффициентов поглощения отдельных слоев неоднородной трассы $k(v, L_i)$ подобна, т.е. выполняется условие

$$k(v, L_i) = c_i k(v, L_1), \quad (7)$$

где c_i — параметры, не зависящие от частоты. Введем обозначения для среднего значения коэффициента поглощения, его дисперсии и коэффициента корреляции соответственно:

$$\bar{k}_i = \frac{1}{\Delta v} \int_{v_1}^{v_2} k(v, L_i) dv;$$

$$\sigma_i^2 = \frac{1}{\Delta v} \int_{v_1}^{v_2} k^2(v, L_i) dv;$$

$$R_{ij} = \frac{1}{\sigma_i \sigma_j} \frac{1}{\Delta v} \int_{v_1}^{v_2} k(v, L_i) k(v, L_j) dv.$$

При выполнении условия (7) выражение (6) примет вид

$$T_g(L) \approx 1 - \sum_{i=1}^N \bar{k}_i \Delta L_i + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \sigma_i \sigma_j \Delta L_i \Delta L_j. \quad (8)$$

Очевидно, что погрешность расчетов пропускания неоднородной атмосферы методом k -распределения, базирующимся на соответствующем преобразовании (8) в пространство кумулятивных частот, определяется точностью выполнения условия (7).

При этом оценка погрешности расчета пропускания неоднородной атмосферы методом k -распределения может быть получена следующим образом:

$$\delta \approx \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \bar{k}_i \bar{k}_j \sqrt{\Lambda_i} \sqrt{\Lambda_j} \Delta L_i \Delta L_j |1 - R_{ij}|. \quad (9)$$

Приведенные выше формулы показывают, что приближение k -корреляции справедливо, если спектры на разных высотах коррелированы, т.е. $R_{ij} = 1$.

Атмосфера Земли не является оптически тонкой. В этом случае нет возможности получить в явном виде коэффициент корреляции, как в формулах (5) и (9). Тем не менее можно показать [9], что спектральная зависимость $k(g, L)$ полностью определяется функцией $g(k, L)$, которую можно

интерпретировать как функцию распределения коэффициента молекулярного поглощения $k(v, L)$

$$k(g) = g^{-1}(k), \quad (10)$$

где $g^{-1}(k)$ – функция, обратная к $g(k)$. Для неоднородной атмосферы следует анализировать уже функцию распределения оптической толщи $g(\tau)$. Если она не меняется с ростом высоты, то приближение k -корреляции справедливо.

Результаты моделирования

Были проведены расчеты пропускания в тех спектральных участках, где поглощают следующие газы: а) H_2O , б) CO_2 , в) CO_2+H_2O , г) O_3 , д) $CO_2+H_2O+O_3$. Их выбор был обусловлен следующими причинами: H_2O , CO_2 и O_3 являются основными поглотителями ИК-излучения, рассмотренные выше смеси описывают все возможные комбинации пространственной изменчивости оптически активных газов, так как водяной пар сконцентрирован у поверхности земли, углекислый газ относится к равномерно перемешанным газам, а концентрация озона растет с высотой, достигая максимума на высотах 25–30 км.

Некоторые результаты моделирования приведены на рис. 1–4. На рис. 1а и 2а приведены фрагменты спектров поглощения атмосферы в зависимости от высоты. Из сопоставления этих спектров видно, что в первом случае структура спектра на разных высотах подобна. Для смеси газов H_2O , CO_2 и O_3 наблюдаются два существенно разных высотных диапазона с различной структурой спектра. Кроме того, среднее значение коэффициентов поглощения CO_2 (рис. 16) быстро спадает с высотой, а для смеси наблюдаются два максимума у среднего значения коэффициента поглощения, у земли и на высотах 20–25 км (рис. 26).

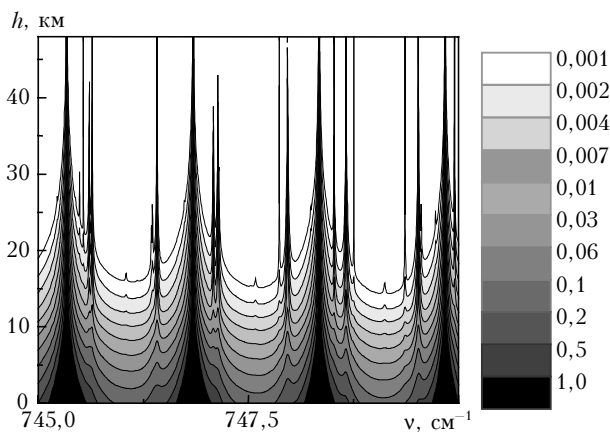


Рис. 1а. Высотная и спектральная зависимости коэффициентов молекулярного поглощения CO_2 , $км^{-1}$ (фрагмент спектра)

Наш анализ показал, что эти два фактора и определяют погрешность расчета функций пропускания при использовании рядов экспонент. Были проведены расчеты функций пропускания для

различных трасс прямым методом *line-by-line* и с использованием рядов экспонент. В случае углекислого газа максимальное значение погрешности не превышало 0,5% (рис. 1г), а в случае смеси газов максимальное значение погрешности достигало 4,3%. В случае поглощения углекислым газом трассы, начинающиеся на верхней границе атмосферы, приводили к большим погрешностям, нежели трассы, начинающиеся на нижней границе, а для смеси газов наблюдалась обратная ситуация.

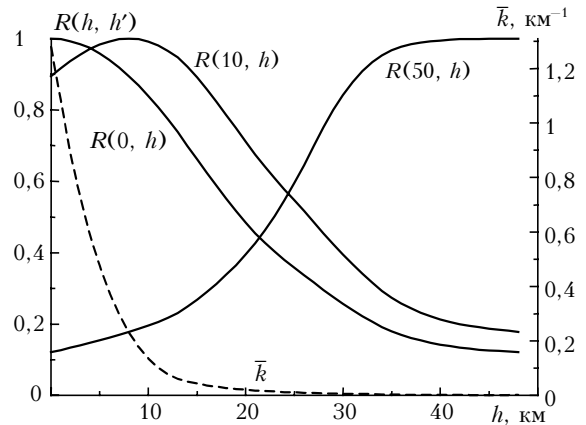


Рис. 16. Коэффициенты корреляции между коэффициентами поглощения на различных высотах

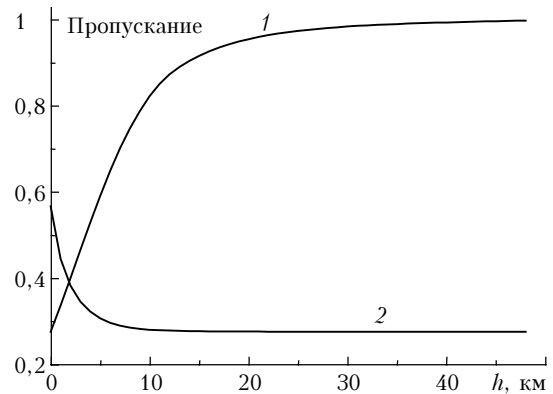


Рис. 1в. Расчет пропускания атмосферы методом *line-by-line*. Трассы вертикальные: 1 – фиксирована верхняя граница $h_b = 50$ км, нижняя меняется; 2 – фиксирована нижняя граница $h_n = 0$ км, верхняя меняется. Спектральный диапазон $740-760$ $см^{-1}$

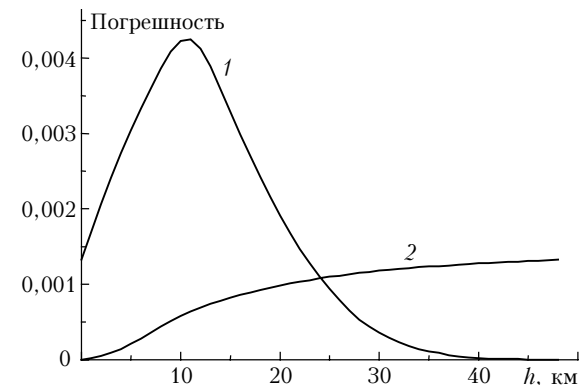


Рис. 1г. Погрешность расчета пропускания методом k -распределения. Обозначения те же, что на рис. 1в

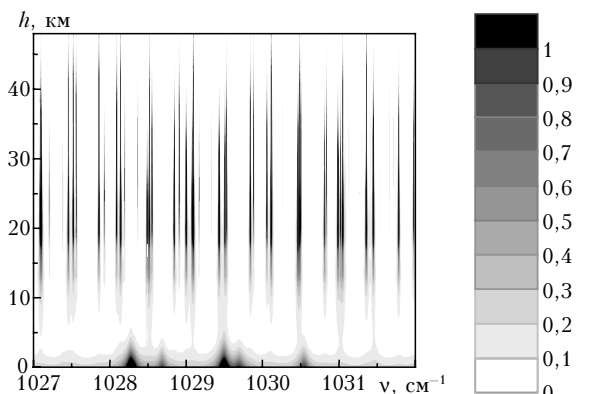


Рис. 2а. Высотная и спектральная зависимости коэффициентов молекулярного поглощения смеси газов H_2O , CO_2 и O_3 , км^{-1}

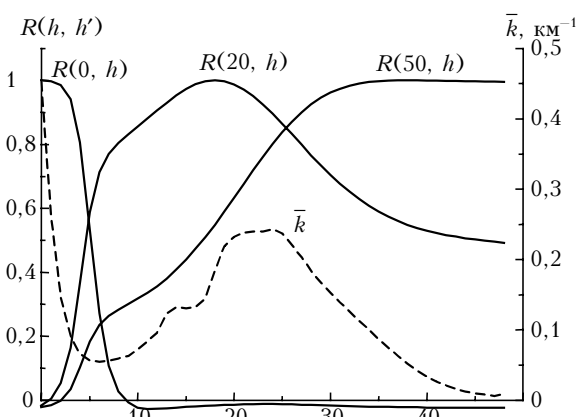


Рис. 2б. Коэффициенты корреляции между коэффициентами поглощения на различных высотах

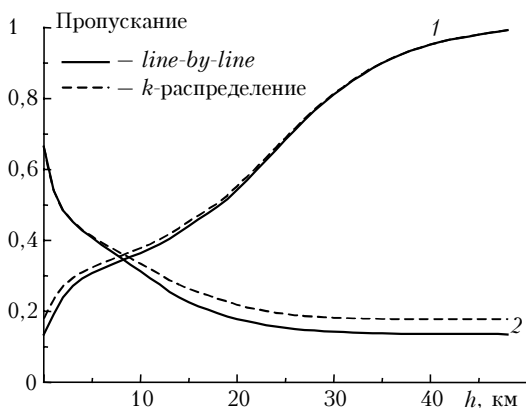


Рис. 2в. Расчет пропускания методом *line-by-line* (сплошная линия) и методом *k*-распределения (штриховая линия). Трассы те же, что на рис. 1в. Спектральный диапазон 1027–1032 см^{-1}

Для того чтобы получить качественные оценки, мы проводили расчеты лакуарности и коэффициентов корреляции R_{ij} между объемными коэффициентами поглощения $k(h)$ (в размерности км^{-1}) на разных высотах h_i, h_j . Из рис. 3 видно, что высотная зависимость параметра лакуарности для разных газов схожа. Более того, моделирование показало, что в двух рассматриваемых диапазонах, показанных на рис. 1а и 2а, высотная зависимость параметра лакуарности, рассчитанная для спек-

тров CO_2 , оказалась близкой. Поэтому, чтобы не перегружать рисунок для случая поглощения CO_2 , мы привели только одну кривую.

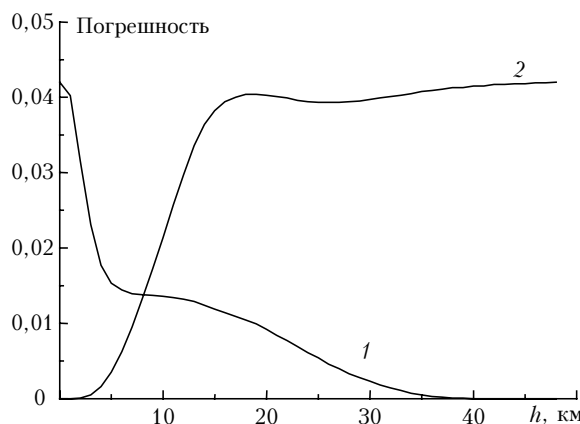


Рис. 2г. Погрешность расчета пропускания методом *k*-распределения. Обозначения те же, что на рис. 1в

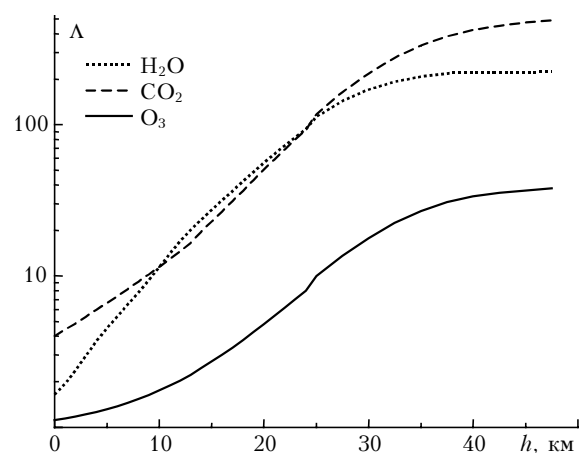


Рис. 3. Зависимость параметра лакуарности от высоты для различных поглощающих газов в спектральном диапазоне 1027–1032 см^{-1}

Параметр лакуарности, характеризующий степень модуляции спектра поглощения, оказался сильно зависящим от давления воздуха и менялся с высотой обратно пропорционально полуширине линии поглощения. Из метода моделей полос поглощения известно [10], что функция пропускания определяется двумя параметрами, один из которых связан со средней интенсивностью линий поглощения (первый момент распределения коэффициентов поглощения), а второй параметр связан со средними значениями полуширины и интенсивности, который можно связать с параметром лакуарности. Это согласуется с результатами нашей предыдущей работы [7], где было показано, что параметры разложения функции пропускания в ряд экспонент могут быть связаны с моментами распределения коэффициента поглощения.

При выявлении количественного критерия оценки погрешности применения рядов экспонент для неоднородной атмосферы мы проанализировали высотный ход коэффициентов поглощения $k(h)$, параметров лакуарности $\Lambda(h)$ и коэффициентов

корреляции R_{ij} . Коэффициент поглощения H_2O наиболее быстро уменьшается с высотой по сравнению с коэффициентом поглощения других газов. В случае поглощения CO_2 объемный коэффициент поглощения также уменьшается с высотой и оптическая толщина определяется сравнительно небольшим нижним слоем атмосферы, в пределах которого коэффициент корреляции близок к единице. Для озона и смеси трех газов вертикальный профиль коэффициента поглощения существенно иной и вклад в оптическую толщину дают разные слои атмосферы.

Выше отмечалось, что характер высотной зависимости параметра лакуарности для разных газов подобен. Поэтому различия в высотном ходе величин $\bar{k}(h)\sqrt{\Lambda(h)}$, входящих в формулу (9), определяются главным образом различием вертикальных профилей коэффициентов поглощения. На рис. 4 приведена высотная зависимость произведения величин $\bar{k}(h)\sqrt{\Lambda(h)}$, а на рис. 16 и 26 — коэффициенты корреляции для различных газов.

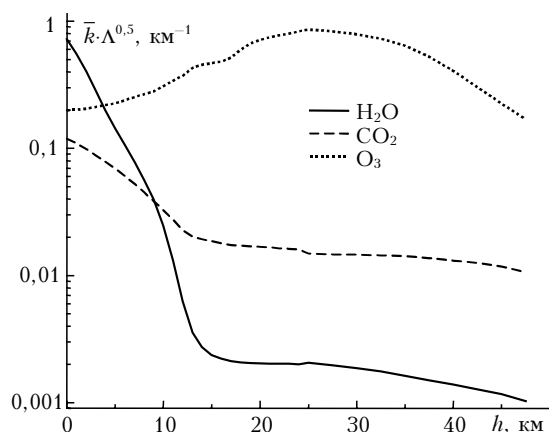


Рис. 4. Зависимость произведения среднего значения коэффициента поглощения и параметра лакуарности от высоты для различных поглощающих газов в спектральном диапазоне $1027-1032 \text{ см}^{-1}$

Моделирование показало, что наибольшие значения коэффициентов корреляции R_{ij} наблюдались при поглощении одним газом, а наименьшее значение — смесью газов H_2O , CO_2 , O_3 . Таким образом, слабая зависимость $\bar{k}(h)\sqrt{\Lambda(h)}$ от высоты, с одной стороны, и быстрая изменчивость коэффициентов корреляции R_{ij} — с другой, приводят к заметным погрешностям расчета функций пропускания с использованием рядов экспонент.

Выводы

Моделирование показало, что приближение k -корреляции хорошо выполняется практически во

всем оптическом диапазоне спектра, погрешность расчета функций пропускания методом k -распределения не превышает 1%. Исключение составляет только узкий спектральный диапазон спектра в области 9,6-мкм полосы озона, где водяной пар и углекислый газ поглощают наряду с озоном. В этом случае для некоторых трасс, проходящих через всю атмосферу, погрешность применения рядов экспонент может достигать 4%. Величина данной погрешности определяется тем, что существенно разные высоты дают вклад в поглощение, форма спектра поглощения трансформируется с высотой, причем коэффициент корреляции между коэффициентами поглощения быстро падает с высотой.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант № 01-05-65152а, и программы Отделения физических наук РАН № 2.10 «Оптическая спектроскопия и стандарты частоты».

1. Фирсов К.М., Чеснокова Т.Ю., Белов В.В., Серебренников А.Б., Пономарев Ю.Н. Ряды экспонент в расчетах переноса излучения методом Монте-Карло в пространственно неоднородных аэрозольно-газовых средах // Вычисл. технол. 2002. Т. 7. № 5. С. 77–87.
2. Burch D.E., Howard J.N., and Williams D. Infrared transmission in synthetic atmospheres: Absorptions laws for overlapping bands // J. Opt. Soc. Amer. 1956. V. 46. P. 452–455.
3. Hoover G.M., Hathaway C.E., and Williams D. Infrared Absorption of overlapping bands of atmospheric gases // Appl. Opt. 1967. V. 6. P. 481–487.
4. Tubbs L.D., Hathaway C.E., and Williams D. Further studies of overlapping bands of atmospheric gases // Appl. Opt. 1967. V. 6. P. 1422–1423.
5. Мицель А.А., Фирсов К.М., Фомин Б.А. Перенос оптического излучения в молекулярной атмосфере. Томск: STT, 2001. 444 с.
6. Kneizys F.X., Robertson D.S., Abreu L.W., Acharya P., Anderson G.P., Rothman L.S., Chetwynd J.H., Selby J.E.A., Shettle E.P., Gallery W.O., Berk A., Clough S.A., Bernstein L.S. The MODTRAN 2/3 report and LOWTRAN 7 model. Phillips Laboratory, Geophysics Directorate/ Hanscom AFB, MA 01731-3010. 1996. P. 260.
7. Кистенев Ю.В., Пономарев Ю.Н., Фирсов К.М. Анализ температурной зависимости кумулятивных спектров колебательно-вращательных полос поглощения атмосферных газов // Оптика атмосф. и океана. 2002. Т. 15. № 9. С. 762–765.
8. Кистенев Ю.В., Пономарев Ю.Н., Фирсов К.М., Герасимов Д.А. Связь погрешности расчета пропускания неоднородной атмосферы методом k -распределения с лакуарностью спектра // Оптика атмосф. и океана. 2003. Т. 16. № 3. С. 272–275.
9. Творогов С.Д. Некоторые аспекты задачи о представлении функции пропускания в ряд экспонент // Оптика атмосф. и океана. 1994. Т. 7. № 3. С. 315–326.
10. Гуди Р. Атмосферная радиация. М.: Мир, 1966. 417 с.

Yu. V. Kistenev, Yu. N. Ponomarev, K. M. Firsov, D. A. Gerasimov. Application of lacunarity parameter for analysis of errors in calculation of atmospheric transmittance inhomogeneities using exponential series.

Errors in calculation of atmospheric transmission functions using exponential series are analyzed invoking the lacunarity parameter. It is shown that this error is determined by the first two moments of distribution of the absorption coefficients in the spectral range considered, and its value in the almost entire optical range does not exceed 1%. The only exception is a narrow spectral interval near the 9.6 μm ozone band, where the error may reach 4% for some atmospheric paths.