

Л.И. Несмелова, О.Б. Родимова, С.Д. Творогов

РАСЧЕТ ФУНКЦИЙ ПРОПУСКАНИЯ В БЛИЖНЕЙ ИК-ОБЛАСТИ СПЕКТРА С ПОМОЩЬЮ РЯДОВ ЭКСПОНЕНТ

Полученные ранее авторами строгие математические выражения для разложения функций пропускания в ряды экспонент применяются для расчета функций пропускания водяного пара в ближней инфракрасной области спектра (2800–14200 см⁻¹), необходимых для оценок доли солнечного излучения, прошедшего через атмосферу Земли. Результаты расчетов иллюстрируются путем сравнения с данными, полученными с помощью других методик.

1. При исследовании изменений климата с помощью климатических моделей значительная доля вычислительной работы приходится на описание поглощения атмосферными газами. Для уменьшения объема вычислений широко применяются различные способы аппроксимации функций пропускания рядами экспонент. Математически вопрос состоит в том, чтобы функцию пропускания

$$P(x) = \frac{1}{\Delta\omega} \int_{\omega_1}^{\omega_2} e^{-\kappa(\omega)x} d\omega, \quad (1)$$

где $\kappa(\omega)$ – коэффициент поглощения света частоты ω ; x – оптическая толщина; $\Delta\omega = |\omega_1 - \omega_2|$, представить в виде ряда

$$P(x) = \sum_k c_k e^{-\lambda_k x} \quad (2)$$

(c_k и λ_k – коэффициенты разложения) с минимально возможным числом слагаемых, совместимым с требуемой точностью расчета. Изучению проблем, связанных с переходом от (1) к (2), посвящено довольно много работ (см., например, [1, 2] и ссылки в них).

Различные способы вычисления c_k и λ_k можно условно разделить на две большие группы, использующие следующие представления функции пропускания с переходом к квадратурным формулам вида (2):

$$P(x) = \frac{1}{\Delta\omega} \int_{\omega_1}^{\omega_2} e^{-\kappa(\omega)x} d\omega = \int_0^{\infty} f(s) e^{-ks} ds = \sum_v b_v e^{-x s_v} = \quad (3a)$$

$$= \int_0^1 e^{-s(g)x} dg = \sum_v a_v e^{-x s(g_v)}. \quad (3б)$$

В случае (3a) (см., например, [1,2]) $f(s)$ вычисляется как преобразование Лапласа от $P(x)$ и поэтому зависит от термодинамических параметров среды. Величины b_v , следовательно, также включают в себя эту зависимость. Иными словами, нахождение оптимальных значений b_v требует вычисления полиномов, ортогональных в интервале $[0, \infty)$ с весом $f(s)$, что является трудоемкой задачей и фактически никогда не производится. Это приводит, в частности, к сложностям при расчете интегралов по неоднородным трассам, заставляя прибегать к предположениям, подобным гипотезе о коррелированности спектров для различных термодинамических условий. Появившиеся модификации метода, такие как разбиение линий поглощающего газа на группы, как бы принадлежащие некоторым фиктивным газам [3], выделение в коэффициенте поглощения множителей, зависящих от термодинамических характеристик [4], либо разделение поглощения в центре линии и ее крыле [5], пытаются преодолеть эти трудности. Трудно

сказать, могут ли они быть на этом пути адекватно устранены, если учесть, что при выводе (3а) обычно допускаются не обоснованные строго математические действия (см. их анализ в [6, 7]).

Развиваемый авторами подход [6–9] реализует программу (3б), обладающую по сравнению с (3а) рядом преимуществ. Так, для функции $g(s)$ получено точное выражение, так что применение традиционных квадратурных формул (например, Гаусса или Чебышева) приводит в (3б) к коэффициентам a_v , не зависящим от термодинамических условий, которые к тому же являются оптимальными, будучи связанными с ортогональными полиномами в интервале $[0,1]$. Это обстоятельство снимает проблемы с интегрированием по неоднородным трассам, а также позволяет применить эту технику к вычислению интегралов с функцией источника.

Методы разложения, использующие априорно фиксированные коэффициенты b_v [10,11], в большой мере решают проблемы, связанные с неоднородными трассами, и фактически являются идейно близкими к методу [6–9].

2. Расчеты line-by-line коэффициентов поглощения, необходимых для построения функции $g(s)$ согласно (3б), выполнялись на основе банка спектроскопических данных [12] с шагом $0,01 \text{ см}^{-1}$ с лорентцевским контуром, продленным на $20\text{--}25 \text{ см}^{-1}$ от центра линии. Функция $g(s)$, отвечающая коэффициенту поглощения в заданном спектральном интервале при фиксированных температуре и давлении, вычислялась по формуле

$$g(s) = \frac{1}{\Delta\omega} \int_{\kappa(\omega) \leq s, \omega \in [\omega_1, \omega_2]} d\omega, \quad (4)$$

полученной из (1) без каких-либо приближений [6]. Функция $s(g)$ в интеграле (3б) находилась как обратная $g(s)$, и упомянутый интеграл представлялся в виде суммы экспонент согласно нескольким вариантам квадратурных формул Гаусса и Чебышева, а именно с 5, 6, 7 и 6, 7, 9 узлами соответственно. При этом, как уже говорилось выше, веса a_v были стандартными для квадратурных формул, т.е., естественно, не зависели от температуры, давления, а равно и от поглощающей массы, в то время как $s(g_v)$ представляли собой значения функции $s(g)$ в точках, соответствующих стандартным узлам квадратурных формул. Функции пропускания $P(x)$ при произвольных поглощающих массах считались согласно (3б), т.е. какой-либо специальной оптимизации коэффициентов разложения для широкого диапазона значений поглощающих масс не производилось.

3. Общий вид спектра H_2O в ближней ИК-области представлен на рис. 1, где приведены интенсивности, просуммированные в интервалах по 10 см^{-1} . Функции пропускания и коэффициенты разложения в ряды экспонент, их представляющие, были вычислены для широких спектральных интервалов, включающих полосы поглощения H_2O 0,72; 0,82; 0,94; 1,14; 1,38; 1,87; 2,7; 3,2 мкм. Для нескольких полос интегральные функции пропускания приведены на рис. 2. Наши данные, показанные на рисунке для случая минимального числа членов ряда экспонент, равного пяти, хорошо согласуются с расчетами line-by-line, а также с результатами [10], использующими непосредственную подгонку функций пропускания при различных оптических толщах суммами экспонент с заданными весами. Относительные ошибки расчета иллюстрируются на примере полосы 1,38 мкм на рис. 3.

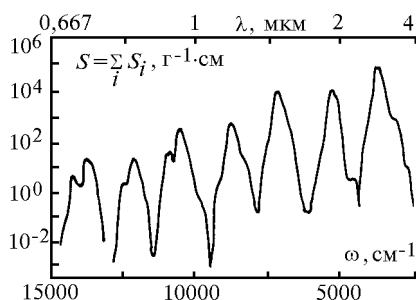


Рис. 1. Суммы интенсивностей спектральных линий H_2O , полученные в интервалах 10 см^{-1} в видимой и ближней ИК-областях спектра

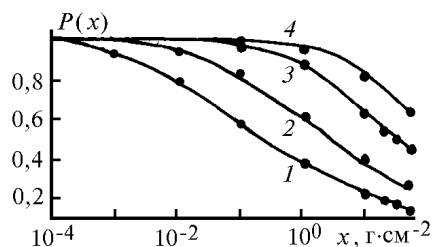


Рис. 2. Интегральные функции пропускания для нескольких полос водяного пара в ближней ИК-области. Кривые 1, 2, 3, 4 относятся к полосам 2,7; 1,38; 0,94; 0,72 мкм соответственно и вычислены методом line-by-line, расчеты [10] совпадают с этими кривыми; результаты настоящих расчетов обозначены точками. $T = 260 \text{ К}$, $P = 500 \text{ мбар}$

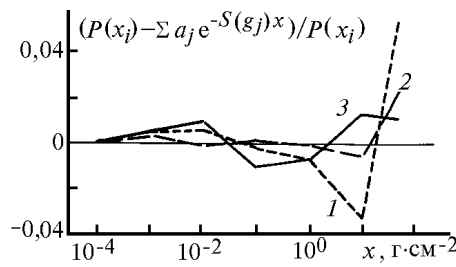


Рис. 3. Относительная ошибка аппроксимации функции пропускания, рассчитанной методом line-by-line с аппроксимацией рядом экспонент для полосы 1,38 мкм H₂O в зависимости от оптической толщи. Кривые 1, 2, 3 получены при использовании квадратурных формул Гаусса с 5 и 7 узлами и Чебышева с 7 узлами соответственно

Результаты кюветных измерений интегральных и спектральных функций пропускания водяного пара в ближней ИК-области спектра имеются в [13]. На рис. 4 полученные нами интегральные функции пропускания даны в сравнении с экспериментальными данными [13] и с рассчитанными в [10]. Здесь же приведены значения, вычисленные по эмпирическим формулам Москаленко [14]. Отметим, что применение эмпирических формул при расчете функций пропускания дает в общем неплохие результаты. В качестве иллюстрации на рис. 5 приведены спектр поглощения для полосы 1,14 мкм, экспериментальный [13] и спектры, рассчитанные в настоящей работе и по формулам [14].

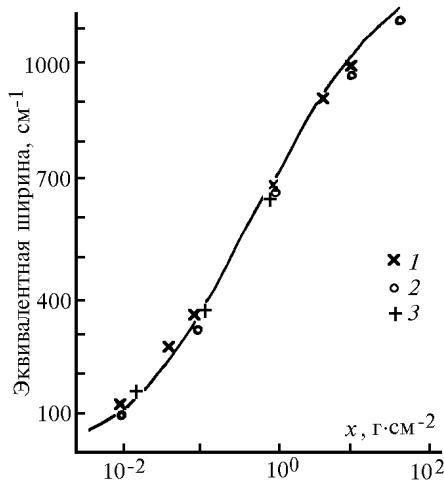


Рис. 4. Эквивалентные ширины полос водяного пара в ближней ИК-области спектра в зависимости от поглощающей толщи, $T = 296 \text{ K}$, $P = 1 \text{ атм}$. Кривая – эксперимент [13]; 1 – расчет [10]; 2 – наш расчет; 3 – расчет по формулам [14]

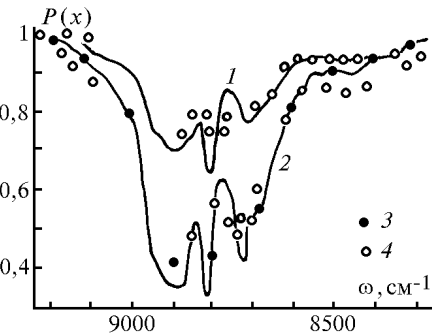


Рис. 5. Спектр поглощения водяного пара в пределах полосы 1,14 мкм. Кривые – эксперимент [13]: 1 – $P = 0,13 \text{ атм}$; $x = 0,862 \text{ г} \cdot \text{см}^{-2}$; 2 – $P = 1 \text{ атм}$; $x = 0,853 \text{ г} \cdot \text{см}^{-2}$; 3 – настоящий расчет; 4 – расчет по эмпирическим формулам [14]

Обычно для сокращения вычислительной работы пропускание считается точно для некоторых средних атмосферных условий, и далее зависимость от температуры и давления учитывается приближенным образом. Так, в [10, 11] для этой цели используется однопараметрическое приближение

$$\exp(-\kappa_v(P, T)x) \cong \exp(-\kappa_v(P_{ref}, T_{ref})X); \quad X = f(P, T)x = \frac{P}{P_{ref}}x \quad (5)$$

с $P_{ref} = 500 \text{ мбар}$, $T_{ref} = 260 \text{ K}$. На рис. 6 показана степень применимости этого приближения. Расчет с его использованием хорошо согласуется с расчетом line-by-line при нормальных температуре и давлении и несколько отличается от него при низких температурах и давлениях. Расчет с помощью рядов экспонент совпадает с расчетом line-by-line в масштабах рис. 6.

Подробные расчеты функций пропускания, использующие методику их аппроксимации рядами экспонент, аналогичную [10] в интервале длин волн 1,125–1,135 мкм, проведены в [11] для модели атмосферы из [15] для лета средних широт. Характеристики модели даны в табл. 1.

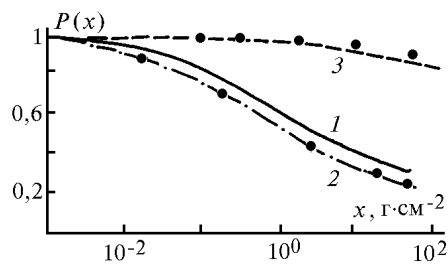


Рис. 6. Функции пропускания для полосы 1,38 мкм. Кривые представляют расчет line-by-line: 1 – $T = 260$ К, $P = 0,5$ атм, 2 – $T = 292$ К, $P = 0,9934$ атм, 3 – $T = 220$ К, $P = 10^{-4}$ атм, точки – расчет с помощью приближения (1)

Таблица 1

Характеристики климатической модели

Номер слоя	Верхний уровень слоя, км	Нижний уровень слоя, км	T , К	P , атм	x , г/см ²
1	90	10	220	0,0003	$6,400 \cdot 10^{-5}$
2	10	9,5	238	0,2890	$4,000 \cdot 10^{-3}$
3	9,5	7	245	0,3558	$4,800 \cdot 10^{-2}$
4	7	5	261	0,4794	$1,217 \cdot 10^{-1}$
5	5	3	270	0,6190	$3,633 \cdot 10^{-1}$
6	3	2	282	0,7447	$4,412 \cdot 10^{-1}$
7	2	1	287,5	0,8394	$7,407 \cdot 10^{-1}$
8	1	0	292	0,9434	$1,141 \cdot 10^0$

На рис. 7 показано поведение функции пропускания для трех отдельных атмосферных слоев в зависимости от поглощающей массы H_2O .

Рис. 8 иллюстрирует расчеты для неоднородных трасс в том же спектральном интервале. Кривые характеризуют поглощение от верхней границы атмосферы до определенного слоя, другие обозначения те же, что на рис. 7. Табл. 2 содержит пример расчета пропускания для неоднородной трассы $P(l) = \sum_n a_n \exp \left[- \left(\sum_j s(g_n, l_j) \Delta l_j \right) m_r \right]$ от верхней границы атмосферы до слоя l_j , со значением поглощающей массы, выбранной как в [11], т.е. $m_r = x(r/4)$, $r = 1, \dots, 35$.

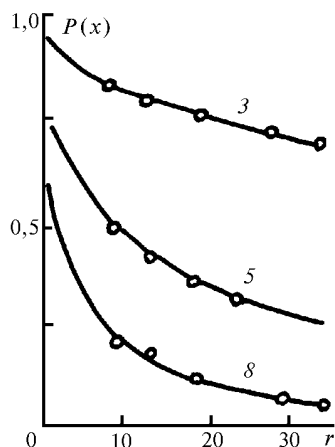


Рис. 7. Функции пропускания для отдельных атмосферных слоев в спектральном интервале 1125–1135 см⁻¹; кривые – расчет line-by-line и расчет [11] с улучшенным вариантом экспоненциальной подгонки, точки – наш расчет; номера у кривых являются номерами слоев

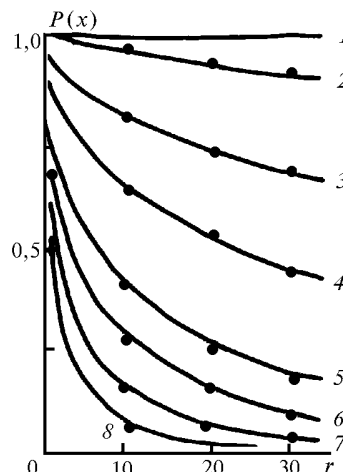


Рис. 8. Функции пропускания, относящиеся к пропусканию от верхней границы атмосферы до определенного слоя; обозначения те же, что на рис. 7

4. В заключение отметим, что метод разложения функций пропускания в ряды экспонент, основанный на математически точных выражениях для их коэффициентов [6–9], обеспечивает достаточную точность расчета даже при отсутствии специальных приемов, улучшающих результаты, а также позволяет обобщить эту технику на случай расчета более сложных интегралов, содержащих функцию пропускания, с сохранением математической строгости и простоты численной реализации. Так, расчет для неоднородных трасс сводится лишь к незначительному числу суммирований. Таким образом, предлагаемая методика расчета функций пропускания хорошо приспособлена для решения климатических задач.

Таблица 2

Пример расчета пропускания для неоднородной трассы, $n = 5, r = 10$

	v					P (l ₁ → l _j)
	1	2	3	4	5	
	a _v					
	0,1185	0,2393	0,2844	0,2392	0,1185	
Номер слоя	a _v exp [- (∑ _j s (g _n , l _j) Δl _j) m _r]					
1	0,1185	0,2393	0,2844	0,2393	0,1185	1,0
2	0,11845	0,2389	0,2834	0,2346	0,09453	0,970
3	0,1178	0,2340	0,2696	0,1780	0,0050	0,804
4	0,1157	0,2193	0,2311	0,0780	0,00001	0,415
5	0,1083	0,1737	0,1332	0,001	0,00001	0,288
6	0,09843	0,1262	0,0633	0,00001	0	0,169
7	0,0822	0,07029	0,0165	0	0	0,078
8	0,06071	0,02642	0,0017	0	0	0,034

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований, грант N 97–05–65985.

1. Goody R., West R., Chen L., Grisp D. // JQSRT. 1989. V. 42. P. 539.
2. Lacy A.A., Oinas V. // J. Geophys. Res. 1991. V. 96D. P. 9027.
3. Riviere Ph., Soufani A., Taine J. // JQSRT. 1992. V. 48. P. 187.
4. Chou V.D., Arking A. // J. Atm. Sci. 1981. V. 38. P. 798.
5. Hollweg H.-D. // J. Geophys. Res. 1993. V. 98D. P. 2747.
6. Творогов С. Д. // Оптика атмосферы и океана. 1994. Т. 7. N 3. С. 315.
7. Творогов С. Д. // Оптика атмосферы и океана. 1997. Т. 10. N 4–5. С. 403.
8. Творогов С. Д., Несмелова Л. И., Родимова О. Б. // Оптика атмосферы и океана. 1996. Т. 9. N 3. С. 373.
9. Несмелова Л. И., Творогов С. Д. // Оптика атмосферы и океана. 1996. Т. 9. N 8. С. 1141.
10. Asano S., Uchiyama A. // JQSRT. 1987. V. 38. P. 147.
11. Armbruster W., Fischer J. // Appl. Opt. 1996. V. 35. P. 1931.
12. Rothman L.S., Gamache R.R., Tipping R.H. et al. // JQSRT. 1992. V. 48. P. 469.
13. Yamanouchi T., Tanaka M. // JQSRT. 1985. V. 34. P. 463.
14. Москаленко Н. И. // Известия АН СССР. Сер. ФАО. 1969. Т. 5. С. 1179.
15. McClatchey R.A., Fenn W., Selby J.E.A., Volz F.E., Garing J.S. «Optical properties of the atmosphere». AFCRL-TR-73-0096 (U.S. Air Force Cambridge Research Laboratory, Cambridge, Mass., 1973).

Институт оптики атмосферы СО РАН,
Томск

Поступила в редакцию
21 июля 1997 г.

L. I. Nesmelova, O. B. Rodimova, S. D. Tvorogov. Calculation of the Transmission Functions in near Infrared Region using Series of Exponents.

Rigorous mathematical expressions for expanding the transmission functions into the series of exponents derived by the authors earlier are applied in the present paper to the calculation of the water vapor transmission functions, which are necessary to evaluate the part of the solar radiation going through the Earth's atmosphere in the near infrared region of spectrum (2800–14200 cm⁻¹). The results are compared with the data obtained making use the other methods.