

А.А. Мицель<sup>1,3</sup>, И.В. Пташник<sup>2</sup>, А.В. Миляков<sup>1</sup>

## Оптимизация line-by-line алгоритма расчета молекулярного поглощения

<sup>1)</sup> Томский университет систем управления и радиоэлектроники,

<sup>2)</sup> Институт оптики атмосферы СО РАН,

<sup>3)</sup> Институт оптического мониторинга СО РАН, г. Томск

Поступила в редакцию 8.11.2000 г.

Представлены результаты сравнения четырех известных алгоритмов расчета фойгтовского контура [4–7] по времени счета и по точности. Показано, что лучшие результаты демонстрирует алгоритм [7]. Приводятся простые оценочные формулы, позволяющие оптимизировать правило межсеточного перехода в многосеточном алгоритме [2,3] в методе line-by-line расчета поглощения газовой среды.

### Введение

Известно, что полинейный метод расчета характеристик поглощения газовой среды, называемый также в англоязычной литературе как line-by-line метод [1], является эталонным и используется как для верификации различных приближенных моделей пропускания, так и для непосредственного моделирования переноса излучения в молекулярных поглощающих средах. В связи с этим развитие и создание новых высокоэффективных алгоритмов – это актуальная задача, которая представляет несомненный интерес для специалистов. В данной статье приводятся результаты сравнения нескольких известных алгоритмов расчета контура Фойгта, а также дается описание дальнейшего развития одного из наиболее эффективных алгоритмов ускорения метода line-by-line – так называемого многосеточного алгоритма [2, 3].

### Сравнение алгоритмов расчета фойгтовского контура

Основные временные затраты при расчете интегрального пропускания связаны с расчетом контуров линий. Выбором наиболее быстрого и вместе с тем достаточно точного алгоритма расчета фойгтовского контура можно добиться значительного увеличения скорости работы программы полинейного расчета. В данной статье рассматриваются 4 алгоритма: Wells-99 [4], Kuntz-99 [5], Humlicek-82 [6], Drayson-76 [7].

В таблице в относительных единицах приведены результаты сравнения этих алгоритмов по времени счета контура Фойгта. Результаты приведены как для крайних возможных значений  $x$  и  $y$ , так и для двух реальных условий расчета:

$$V(x, y) = \frac{y}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\exp(-t^2)}{(x-t)^2 + y^2} dt,$$

где  $x = \sqrt{\ln 2} (v - v_0)/\gamma_D$  и  $y = \sqrt{\ln 2} \gamma_L/\gamma_D$  – безразмерные параметры;  $v - v_0$  – отстройка от центра линии;  $\gamma_L$  и  $\gamma_D$  – соответственно лоренцевская и доплеровская полуширина линии на полувысоте. Результаты расчета для реальных условий были получены для вертикальных трасс 0–10 и 0–100 км, в спектральном интервале 1000–1005 см<sup>-1</sup>, для газов H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub>, O<sub>3</sub>.

Время счета, отн. ед., контура Фойгта различными алгоритмами

Условия расчета	Drayson-76	Humlicek-82	Kuntz-99	Wells-99
$x = 0; y = 0,001$	19,0	16,0	19,1	20,7
$x = 0; y = 50$	4,2	7,1	4,2	8,8
$x = 50; y = 0,001$	3,5	8,9	4,4	13,1
$x = 50; y = 50$	3,5	8,0	4,3	8,8
Реальные условия:				
(0–10 км)	6,2	8,6	7,0	9,3
(0–100 км)	89,0	154,0	115,0	195,0

Из таблицы видно, что имеет смысл совместить достоинства алгоритма Humlicek-82 в области малых  $x$ ,  $y$ , с преимуществом алгоритма Kuntz-99 или Drayson-76 в области больших  $x$  и  $y$ . При использовании существующих алгоритмов в реальных условиях наиболее быстрыми, как видно, являются алгоритмы Drayson-76 и Kuntz-99. Следует отметить, однако, что при использовании алгоритма Drayson потребуются, вероятно, его модификация для добавления расчета одновременно на массиве значений параметра  $x$ , поскольку исходный алгоритм [7] не содержит такой возможности.

Результаты сравнения алгоритмов по точности приведены на рис. 1–4. Сравнение проводилось с результатами точного численного расчета фойгтовского контура  $f_V$ . Следует заметить, что максимальная погрешность алгоритма Drayson-76 в наших расчетах получилась приблизительно в 2 раза меньше, чем алгоритма Schreier [8]. Реально видно, что максимальные погрешности для всех четырех алгоритмов в области  $x, y < 20$  отличаются

незначительно (не более чем на 30%) и достаточно малы для использования этих алгоритмов в задачах полинейного счета. Только в области  $x, y < 5$  алгоритм Wells имеет заметное преимущество в

точности расчета, уступая, однако, при этом во времени счета.

Следует отметить также, что отличие алгоритмов Kuntz-99 и Humlicek-82 незначительно по погрешности.

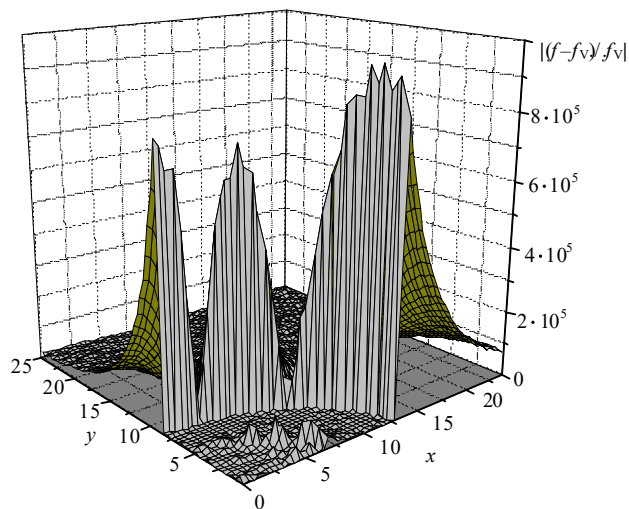


Рис. 1. Относительная погрешность алгоритма Wells-99 [4]

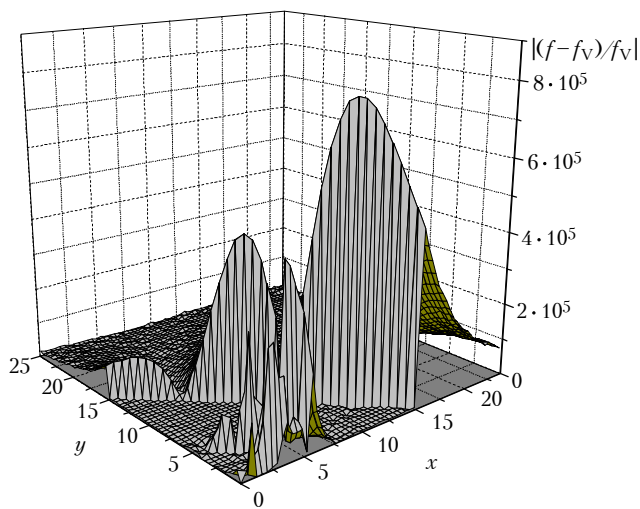


Рис. 2. Относительная погрешность алгоритма Kuntz-99 [5]

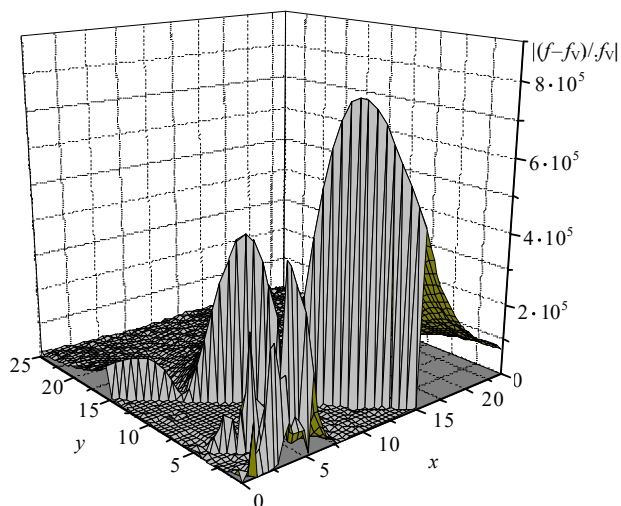


Рис. 3. Относительная погрешность алгоритма Humlicek-82 [6]

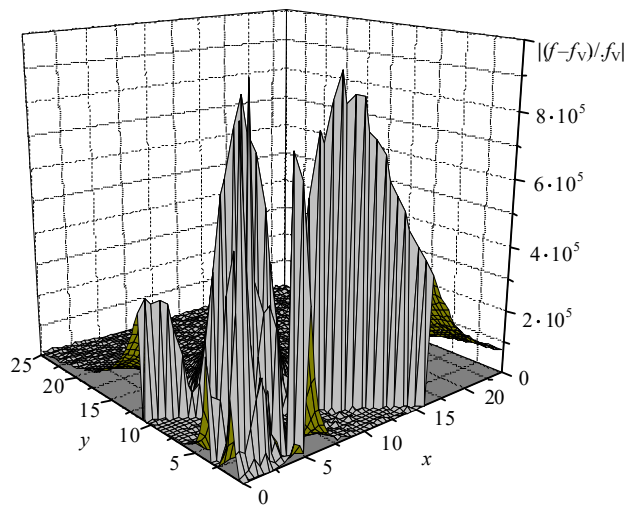


Рис. 4. Относительная погрешность алгоритма Drayson-76 [7]

### Оптимизация частотной сетки

При расчете интегрального пропускания необходимо вычислять спектральное пропускание  $T_v$  на некоторой сетке частот. Простейшая сетка – равномерная, позволяет вычислять интегральное пропускание с высокой точностью, однако затраты времени счета обратно пропорциональны шагу сетки.

Как было отмечено выше, вычисления контура линии занимают основную часть работы компьютера. Поэтому можно повысить эффективность алгоритмов полинейного счета, если оптимизировать (т.е. уменьшить без потери точности) число точек, в которых требуется вычислять контур каждой линии. Это в принципе возможно благодаря тому, что контур линии становится более плавным на дальних расстояниях от центра линии.

В данной статье рассматривается весьма эффективный, удобный и наглядный многосеточный метод, пред-

ложенный Б.А. Фоминым [2, 3] и использованный также в [5, 11]. Суть этого метода состоит в том, что вместо неравномерной по частоте сетки используется набор равномерных сеток с удваивающимися шагами  $h_l$ :

$$h_l = h_0 2^l, \quad l = 0, \dots, L;$$

$$v_j^{(l)} = v_{\text{нач}} + h_l j, \quad j = 0, 1, \dots,$$

где  $h_0$  – шаг самой мелкой сетки (который выбирается исходя из средней полуширины линии при данных условиях и требуемой точности);  $l$  – номер сетки;  $L$  – номер наиболее грубой сетки;  $v_{\text{нач}}$  – начальная частота расчетного интервала. Видно, что достаточно одиннадцати сеток для увеличения шага с  $0,001 \text{ см}^{-1}$  (характерная ширина линии в верхней атмосфере) до  $1 \text{ см}^{-1}$ , т.е. на три порядка. Коэффициенты поглощения рассчитываются в узлах сеток, при этом по мере удаления от центра линии

увеличивается номер сетки, на которой считается вклад от данной линии. При таком подходе контур каждой линии вычисляется независимо от наличия других линий. На рис. 5 приведена заимствованная из [2] схематическая иллюстрация разложения контура линии по нескольким сеткам.

Таким образом, суммирование вклада от любой линии выполняется отдельно на своей сетке для каждой части контура.

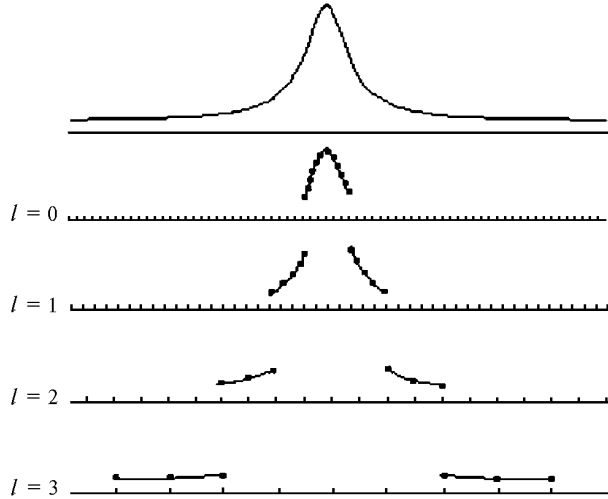


Рис. 5. Иллюстрация многосеточного алгоритма расчета пропускания [2]

После рассмотрения всех линий выполняется рекуррентная процедура пересчета вкладов с более крупных сеток на более мелкие, основанная на простой квадратичной (или линейной) интерполяции и позволяющая в итоге получить искомый коэффициент поглощения в узлах самой подробной сетки. Эта процедура проводится однократно и, как правило, за время, пренебрежимо малое по сравнению со временем всего расчета.

Реализация описанного многосеточного метода позволяет максимально сократить время расчета спектрального пропускания при сохранении требуемой точности. Выигрыш во времени, который дает такой многосеточный алгоритм, может составлять более порядка величины [2, 3].

Дальнейшее развитие этого метода заключается в оптимизации правила перехода с более грубой сетки на более точную. В [2] переход на более мелкую сетку осуществляется, когда от текущей точки до центра линии остается менее трех шагов текущей сетки. Это правило дает погрешность не более 1% при квадратичной интерполяции и шаге минимальной сетки  $h_0 = \gamma_v/4$ , где  $\gamma_v$  – фойгтовская полуширина линии. Недостатки такого подхода – фиксированная точность и независимость координат переходов от полуширины конкретной линии. Другое правило перехода было предложено в работах [5, 10]. Оно основано на точном численном определении максимальной погрешности квадратичной интерполяции контура по трем точкам. В данной статье предлагается алгоритм, основанный на приближенной, но вместе с тем простой оценке максимального шага сетки на данном расстоянии от центра линии, который обеспечивает нужную относительную погрешность квадратичной интерполяции фойгтовского контура линии поглощения. Переход на более грубую сетку осуществляется в случае, когда по мере удаления от центра линии величина шага, требуемая для достижения нужной

точности, становится больше или равна шагу сетки. Это позволяет избежать расчета в «лишних» точках.

В данной статье будем использовать аппроксимацию коэффициента поглощения для линии с фойгтовским контуром, предложенную в работе [12] и описанную также в [8]:

$$K(\tilde{x}, \tilde{y}, y) = \frac{S}{\gamma_D} \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} V(0, y) \{ [1 - \tilde{y}] G(\tilde{x}) + \tilde{y} L(\tilde{x}) \}, \quad (1)$$

где  $G(\tilde{x}) = \exp(-\ln 2 \tilde{x}^2)$ ;  $L(\tilde{x}) = 1/(1 + \tilde{x}^2)$ ;  $\tilde{x} = (v - v_0)/\gamma_v$ ;  $\tilde{y} = \gamma_L/\gamma_v$ ;  $S$  – интенсивность линии.

Рассмотрим случай квадратичной интерполяции отдельной линии на сетке с шагом  $\tilde{h} = \Delta v/\gamma_v$ . Относительная погрешность  $\delta$  квадратичной интерполяции функции  $K(\tilde{x})$  в некоторой точке  $\tilde{x}$  дается формулой [9]:

$$\delta = \frac{\tilde{h}^3}{6 K(\tilde{x})} q(q-1)(q-2) \mu_3, \quad (2)$$

где

$$\mu_3 = |K'''(\tilde{x})| = \left| 12K(0, y) \left\{ \ln^2 2 \cdot \tilde{x} \cdot \exp(-\ln 2 \tilde{x}^2) (1 - \tilde{y}) \times \right. \right. \\ \left. \left. \times \left( 1 - 2/3 \ln 2 \tilde{x}^2 \right) + 2\tilde{y} \frac{1 - \tilde{x}^2}{(1 + \tilde{x}^2)^4} \right\} \right| \quad (3)$$

– значение третьей производной функции  $K(\tilde{x})$  в некоторой промежуточной точке в интервале  $[\tilde{x}_i; \tilde{x}_i + 2\tilde{h}]$ ,  $q = (\tilde{x} - \tilde{x}_i)/\tilde{h}$ . Здесь  $\tilde{x}_i$  и  $\tilde{x}$  ( $\tilde{x} - \tilde{x}_i \leq 2\tilde{h}$ ) – частота  $i$ -й узловой точки и точки интерполяции соответственно. Считая, что третья производная и сама функция мало меняются в интервале  $[\tilde{x}_i; \tilde{x}_i + 2\tilde{h}]$ , примем за максимальную величину третьей производной ее значение в точке  $\tilde{x}_i$  (т.е.  $K'''(\tilde{x}_i)$ ), что, очевидно, верно для большей части контура. Такое приближение может только несколько завысить значение максимальной в интервале  $[\tilde{x}_i; \tilde{x}_i + 2\tilde{h}]$  погрешности. Найдем далее величину максимума произведения  $q(q-1)(q-2)$ . Дифференцируя по  $dq$ , найдем  $\max[q(q-1)(q-2)] = 2/(3\sqrt{3})$  при  $q_{\max} = 1 - \sqrt{1/3}$ .

Исходя из этого и подставляя (3) в (2), получим выражение для оптимального (максимального) шага сетки  $\tilde{h}_\delta$ , обеспечивающего относительную погрешность  $\delta$  на заданном расстоянии  $\tilde{x}$  от центра линии:

$$\tilde{h}_\delta = \frac{\sqrt{3}}{2} \times \\ \times \left| \frac{2\delta [(1 - \tilde{y}) \exp(-\ln 2 \tilde{x}^2) + \tilde{y}/(1 + \tilde{x}^2)]}{\ln^2 2 \tilde{x} \exp(-\ln 2 \tilde{x}^2) (1 - \tilde{y}) \left( 1 - \frac{2}{3} \ln 2 \tilde{x}^2 \right) + 2\tilde{y} \tilde{x} (1 - \tilde{x}^2)/(1 + \tilde{x}^2)^4} \right|^{1/3}. \quad (4)$$

Решая (4) относительно  $\tilde{x}$  для заданных  $\tilde{y}$  и  $\delta$ , можно найти координаты переходов  $\tilde{x}_i$  с более

мелких сеток на более грубые для данного набора сеток  $\tilde{h}_i$ .

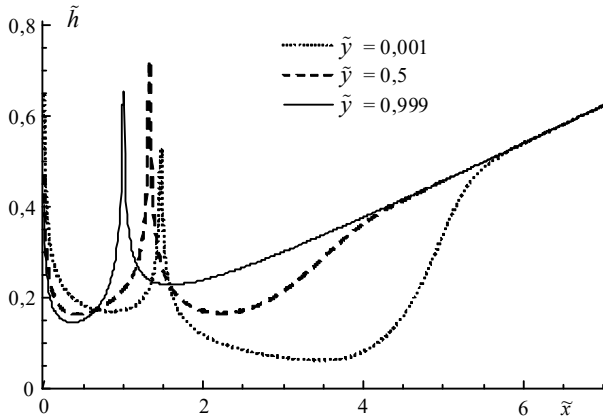


Рис. 6. Зависимость оптимального шага сетки, обеспечивающего относительную погрешность квадратичной интерполяции  $\delta = 0,001$ , от расстояния до центра линии для фойгтовского контура при разных значениях  $\tilde{y} = \gamma_L/\gamma_V$

На рис. 6 приведен график зависимости выраженного в полуширинах шага сетки, обеспечивающего относительную погрешность интерполяции  $\delta = 0,001$ , от расстояния до центра линии. Случай  $\tilde{y} \ll 1$  соответствует преобладанию доплеровского уширения линии поглощения,  $\tilde{y} \sim 1$  – лоренцевскому уширению. Видно, что при  $\tilde{y} < 0,5$  минимальный оптимальный шаг сетки, обеспечивающий заданную точность интерполяции, может находиться довольно далеко от центра линии – на расстоянии более 3 полуширин. По мере приближения к случаю чисто лоренцевского уширения положение минимума оптимального шага сетки приближается к расстоянию  $\sim 0,36\gamma_V \approx 0,36\gamma_L$  от центра линии.

Пики на рис. 6 (и симметричные им в области отрицательных  $\tilde{x}$ , не изображенные на этом рисунке) соответствуют нулю третьей производной контура Фойгта по частоте, т.е. точке перегиба контура, и обусловлены использованием нами приближением. Ясно, что эти пики можно игнорировать.

Кoeffициент поглощения  $K(\nu)$  не всегда является конечной искомым величиной, а часто используется для вычисления оптической толщины  $T(\nu) = \exp\{-K(\nu)L\}$  ( $L$  – длина пути), относительная погрешность которой  $\delta T$  пропорциональна абсолютной погрешности коэффициента поглощения ( $dT/dK = TL \Rightarrow \Delta T/T \equiv \delta T = \Delta K L$ ). Исходя из этого, имеет смысл воспользоваться выражением для шага, обеспечивающего заданную абсолютную погрешность  $\Delta$ :

Кoeffициент поглощения  $K(\nu)$  не всегда является конечной искомым величиной, а часто используется для вычисления оптической толщины  $T(\nu) = \exp\{-K(\nu)L\}$  ( $L$  – длина пути), относительная погрешность которой  $\delta T$  пропорциональна абсолютной погрешности коэффициента поглощения ( $dT/dK = TL \Rightarrow \Delta T/T \equiv \delta T = \Delta K L$ ). Исходя из этого, имеет смысл воспользоваться выражением для шага, обеспечивающего заданную абсолютную погрешность  $\Delta$ :

$$\Delta = \frac{\tilde{h}^3}{6} q(q-1)(q-2) \mu_3,$$

откуда можно получить следующее выражение:

$$\tilde{h}_\Delta = \frac{\sqrt{3}}{2} \left| \frac{2\Delta}{K_0 \left[ \ln^2 2\tilde{x} \exp\{-\ln 2\tilde{x}^2\} (1-\tilde{y}) \left(1 - \frac{2}{3} \ln 2\tilde{x}^2\right) + 2\tilde{y}\tilde{x}(1-\tilde{x}^2) / (1+\tilde{x}^2)^4 \right]} \right|^{1/3} \quad (5)$$

где  $K_0$  – коэффициент поглощения в центре линии, равный  $S\sqrt{\ln 2/\pi} K(0, y) / \gamma_D$  для фойгтовского контура. Графики  $\tilde{h}_\Delta(\tilde{x}, \tilde{y})$  для  $\Delta/K_0 = 0,0001$  приведены на рис. 7, из которого видно, что минимум оптимального шага находится в области отстрок от центра линии  $(0,4+0,7) \gamma_V$  при изменении  $\tilde{y}$  в широких пределах (от 0,001 до 0,999).

### Выводы

В данной статье проведено сравнение нескольких известных алгоритмов расчета фойгтовского контура. Лучшие результаты по совокупности двух показателей – скорости и точности расчета – продемонстрировал алгоритм Драyson.

Кроме того, были получены оценочные формулы, позволяющие оптимизировать правило межсеточного перехода в многосеточном алгоритме. Достоинство этих формул заключается в их простоте, хотя они не совсем точны.

Следует отметить, что решение уравнения типа (4) (т.е. для фиксированной относительной погрешности интерполяции) достаточно проводить только один раз для всех спектральных линий данного газа ввиду слабой зависимости (4) от  $\sqrt{\ln 2} \gamma_L / \gamma_D$ .

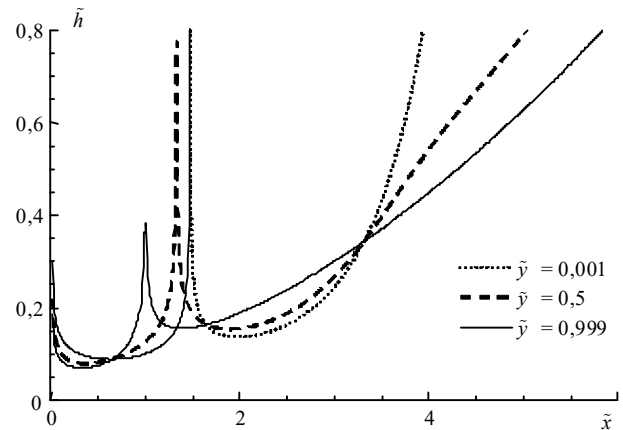


Рис. 7. Зависимость оптимального шага сетки, обеспечивающего абсолютную погрешность квадратичной интерполяции  $\Delta = 10^{-4} K_0$ , от расстояния до центра линии для фойгтовского контура при разных значениях  $\tilde{y} = \gamma_L/\gamma_V$

В случае фиксации абсолютной погрешности интерполяции уравнение типа (5) необходимо решать индивидуально для каждой линии (либо для набора линий с близкими значениями  $K_0$ ). По этой же причине шаг самой мелкой сетки (определяемый минимальным значе-

нием оптимального шага) в случае (4) практически одинаков для всех линий, тогда как в случае (5) для его расчета следует использовать параметры линии, имеющей максимальное значение  $K_0$ .

Статья выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований в рамках проекта № 00-07-90175.

1. *Smith H.J.P., Dube D.J., Gardner M.E., Clough S.A., Kneizys F.X., Rothman L.S.* FASCOD – Fast Atmospheric Signature Code (Spectral Transmittance and Radiance), Rep. AFGL-TR-78-0081. Air Force Geophys. Lab.: Hanscom. Mass, USA, 1978.
2. *Fomin B.A.* Effective line-by-line technique to compute radiation absorption in gases: Preprint IAE-5658/1, Moscow, Russian Research Center «Kurchatov Institute». 1993. 13 p.
3. *Fomin B.A.* Effective interpolation technique for line-by-line calculations of radiation absorption on gases // JQSRT. 1995. V. 53. P. 663-9.
4. *Wells R.J.* Rapid approximation to the Voigt/Faddeeva function and its derivatives // JQSRT. 1999. V. 62. P. 29-48.
5. *Kuntz M., Hopfner M.* Efficient line-by-line calculation of absorption coefficient // JQSRT. 1999. V. 63. P. 97-114.
6. *Humlicek J.* // JQSRT. 1982. V. 27. P. 437.
7. *Draison S.R.* Rapid computation of the Voigt profile // JQSRT. 1976. V. 16. N 7. P. 611-614.
8. *Schreier F.* The Voigt and complex error function: a comparison of computational methods // JQSRT. 1992. V. 48. N 5/6. P. 743-762.
9. *Hamming R.W.* Numerical methods for scientist and engineering: MC Graw-Hill Book Company, Inc. New York; San Francisco; Toronto; London, 1962.
10. *Sparks L.* Accelerated line-by-line calculation of spectral absorption coefficients with high numerical accuracy // Optical Remote Sensing of the Atmosphere. V. 2. OSA Technical Digest Series. Optical Society of America. Washington. DC. 1995. P. 68-70.
11. *Mitsel' A.A., Ptashnik I.V., Firsov K.M., Fomin B.A.* Efficient technique for line-by-line calculation the transmittance of the absorbing atmosphere // Atmospheric and Ocean Optics. 1995. V. 8. N 10. C. 847-850.
12. *Whiting E.E.* // JQSRT. 1968. V. 8. P. 1379.

*A.A. Mitsel', I.V. Ptashnik, A.V. Milyakov.* **Optimization of the line-by-line algorithm for calculating the molecular absorption.**

The results of comparison of time and accuracy characteristics of four well-known algorithms for the Voigt profile calculation (R.J. Wells [4], M. Kuntz [5], J. Humlicek [6], and S.R. Dryason [7]) are presented. The algorithm by S.R. Dryason is shown to demonstrate the best results. Simple estimating formulae are given, which allow optimization of the intergrid transition rule in the multigrid algorithm [2, 3] for the line-by-line method.