

Ю.В. Кистенев, Ю.Н. Пономарев, А.В. Шаповалов

ФРАКТАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА СПЕКТРОВ ПОГЛОЩЕНИЯ ГАЗОВЫХ КОМПОНЕНТОВ АТМОСФЕРЫ*Институт оптики атмосферы СО РАН, г. Томск*

Поступила в редакцию 1.07.99 г.

Дана интерпретация спектров колебательно-вращательных полос основных поглощающих молекул атмосферы: H_2O , CO_2 , O_3 – в терминах фрактального анализа. Результаты работы показывают, что эти спектры обладают нетривиальными и достаточно индивидуальными мультифрактальными характеристиками. В частности, показано, что спектр фрактальных размерностей чувствителен к молекулярному и изотопическому составу газа и типу колебательно-вращательной полосы поглощения.

Введение

Оптические спектры несут в себе информацию о строении и внутреннем движении квантовой системы, при этом каждая линия спектра характеризует определенную совокупность условий этого движения. Исследования отдельных спектральных линий и характеристических серий служат основой методов спектрального анализа.

Наряду с этим существует подход к изучению спектральных свойств квантовых систем «в целом», основанный на применении методов статистического анализа [1, 2] (см. также обзоры [3–5], книгу [6] и списки литературы к ним). Предпосылкой к данному подходу является представление о сложном, псевдослучайном характере спектра квантовой хаотической системы (КХС). Статистический подход трактует спектральные проявления квантового хаоса как свойства группы состояний системы, или, иначе говоря, как коллективное поведение групп элементов квантового ансамбля. Статистические критерии квантового хаоса представляются в терминах особенностей распределения межуровневых интервалов. Для регулярных квантовых систем межуровневые интервалы имеют пуассоновское распределение, в то время как для КХС имеет место вигнеровское распределение. Это приводит, в частности, к малой вероятности найти в спектре КХС близкие уровни (явление отталкивания уровней).

Особенности структуры сложных систем часто могут быть выражены в терминах фрактальной геометрии. В простейшем случае геометрия распределения элементов исследуемого множества характеризуется размерностью Хаусдорфа–Безиковича [7, 8], которую можно трактовать как показатель сингулярности α : плотность распределения элементов множества внутри некоторого подмножества диаметром δ пропорциональна δ^α . Очевидно, чем более нерегулярно распределение элементов множества, тем меньше α .

Естественным развитием идеи изучения фрактальных свойств со сложной структурой является применение методов мультифрактального анализа. По сравнению с элементарным фракталом мультифрактал является более сложным объектом [8, 9]. Он представляет собой совокупность элементарных фракталов, организованных в мультифрактал распределением особенностей некоторой меры, порождаемой заданной физической величиной. Как отмечено в [10], мультифрактальный анализ может давать нетривиальные результаты в применении не только к самоподобным объектам и даже не обязательно к фракталам.

В случае мультифрактала обобщением размерности Хаусдорфа–Безиковича является размерность Реньи D_q , связанная с распределением «плотности» определенной физической величины $\rho(x)$, как меры на геометрическом носителе. Отметим, что выбор данной физической величины является определяющим, поскольку от этого зависит выбор меры множества и, соответственно, его фрактальные свойства.

Пример изучения фрактальных свойств спектра квантовой системы дает работа [11], где установлены фрактальные свойства геометрической структуры расположения спектральных серий атома водорода. Используемый подход основан на подборе тестовой функции, множество Леви которой (множество точек самоподобия) имеет такое же распределение, как и описываемая физическая характеристика. Однако такой подход ограничен областью достаточно простых спектров, и, кроме того, множество Леви несет информацию только о геометрических свойствах носителя функции распределения спектральных линий.

Представляет интерес фрактальный анализ совокупных характеристик набора линий спектра молекулы, в некотором смысле близких по своим свойствам друг другу. Таковыми можно считать отдельные электронно-колебательные, колебательно-вращательные полосы. Целью данной работы является попытка мультифрактального анализа колебательно-вращательных спектров поглощения основных поглощающих молекул атмосферы: H_2O , CO_2 , O_3 и их изотопических модификаций.

Формулировка общего подхода к анализу спектров

Совокупность спектральных линий очевидным образом приводит к распределению меры, необходимому для применения мультифрактального анализа. Например, в качестве «плотности меры» $\rho(x)$ можно взять число линий поглощения определенной интенсивности на единицу частотного интервала. Однако, на наш взгляд, наиболее естественно выбрать в качестве «плотности меры» величину «плотности поглощения» – суммарное поглощение на единицу частоты, нормированную на суммарное поглощение по всем диапазонам частот.

Практически проанализировать фрактальные свойства распределения «плотности поглощения» на множестве N частотных интервалов можно с помощью метода одинаковых бинов [12]. Разобьем носитель множества на равные частотные интервалы (бины) величины δ , нормированной так, что $\delta N = 1$. Определим моменты

$$G_q(\delta) = \sum_{i=1}^N \rho_i^q,$$

где ρ_i – «плотность поглощения» в i -м бине, а суммирование ведется по всем непустым бином. Тогда для не очень малых δ можно ввести функцию

$$\tau(q) = \log G_q(\delta) / \log \delta,$$

которая связана с обобщенной размерностью Реньи D_q :

$$\tau(q) = D_q(q - 1).$$

Спектр сингулярностей мультифрактала $f(\alpha)$ связан с функцией $\tau(q)$ следующим образом:

$$f(\alpha) = q \frac{d\tau(q)}{dq} - \tau(q),$$

где

$$\alpha = \frac{d\tau(q)}{dq}.$$

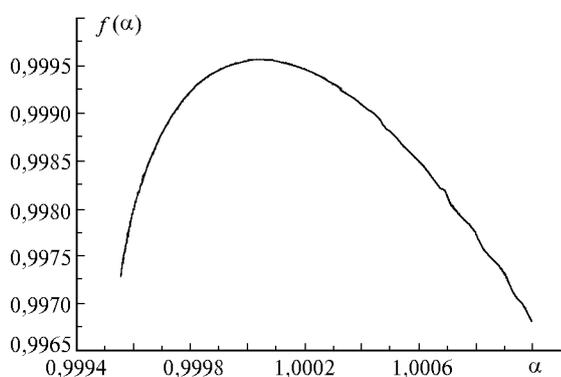


Рис. 1

Проиллюстрируем данную методику на примере тестового случая, допускающего прямую интерпретацию. На рис. 1 представлен спектр сингулярностей для эквидистантно расположенных 500 линий поглощения одинаковой интенсивности. Поскольку в этом случае $\rho_i(\delta) \propto \delta$, то спектр сингулярностей должен представлять собой δ -функцию единичной амплитуды в точке $\alpha = 1$.

Фрактальный анализ оптических спектров

Рассмотрим особенности спектра сингулярностей основных поглощающих молекул атмосферы: H_2O , CO_2 , O_3 . Такой выбор обусловлен важной ролью, которую играют эти газы в динамике атмосферных процессов. Так, атмосферный водяной пар имеет наиболее богатый спектр поглощения в видимой и ИК-областях, углекислый газ является одним из факторов, обуславливающих парниковый эффект, а слой озона защищает от воздействия ультрафиолетового излучения.

На рис. 2 приведены спектры сингулярностей различных колебательных полос H_2O . Видно, что спектральные функции этих полос существенно различаются между собой. Представляет интерес анализ влияния изотопического состава газа на спектр сингулярностей. На рис. 3 представлены спектры сингулярностей молекулы HDO. Видно, что спектры идентичных полос поглощения, но разных изотопов также существенно различаются.

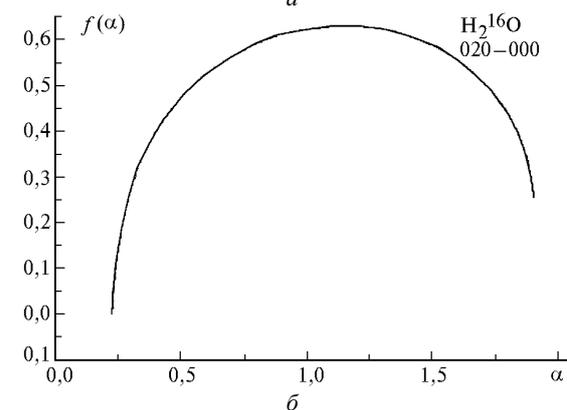
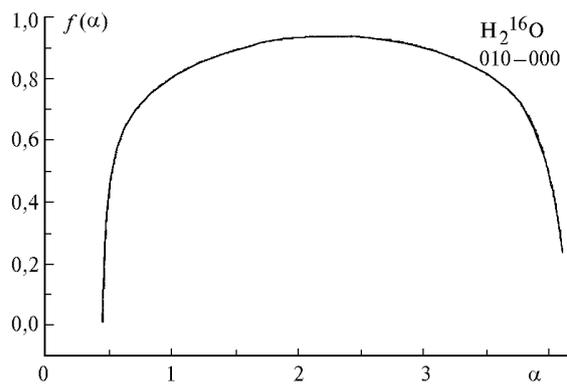


Рис. 2. Спектр сингулярностей для плотности поглощения в полосе 010–000 (а) и 020–000 (б) основного изотопа водяного пара

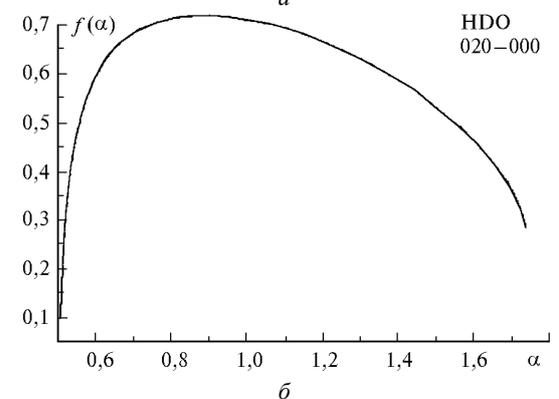
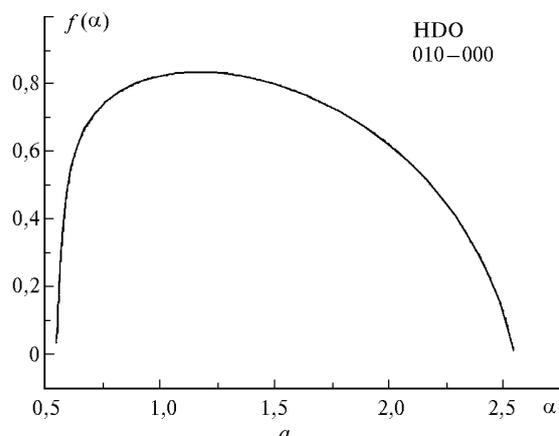


Рис. 3. Спектр сингулярностей для плотности поглощения в полосе 010–000 (а) и 020–000 (б) изотопа водяного пара HDO

Рассмотрим особенности фрактальных спектров основной полосы поглощения двух изотопов CO_2 (рис. 4). Здесь также заметны различия в спектрах сингулярностей.

Оптический спектр основной полосы озона характерен тем, что он содержит намного больше вращательных линий (более 7000) по сравнению с рассмотренными молекулами.

Фрактальный спектр озона представлен на рис. 5. Вызывает интерес анализ самоподобия оптического спектра. На рис. 6 показаны фрактальные спектры основной полосы O_3 , разбитой на четыре части. Видно, что наиболее изменчив спектр сингулярностей в области больших α , однако при этом фрактальные спектры двух пар практически совпадают.

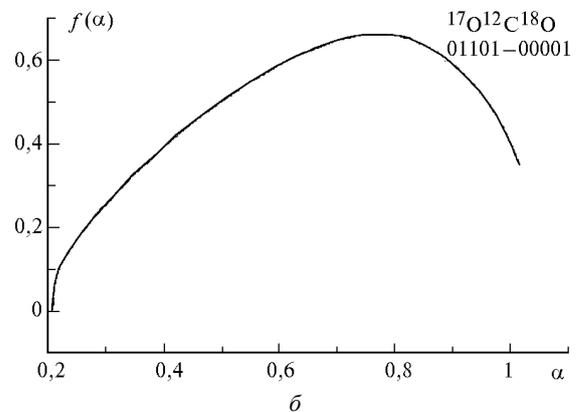
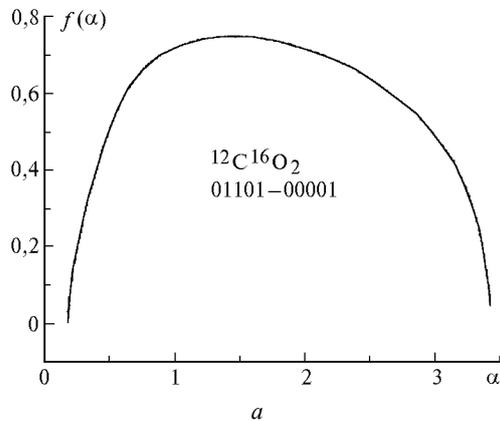


Рис. 4. Спектр сингулярностей для плотности поглощения в полосе 01101–00001 изотопов $^{12}\text{C}^{16}\text{O}_2$ (а) и $^{17}\text{O}^{12}\text{C}^{18}\text{O}$ (б)

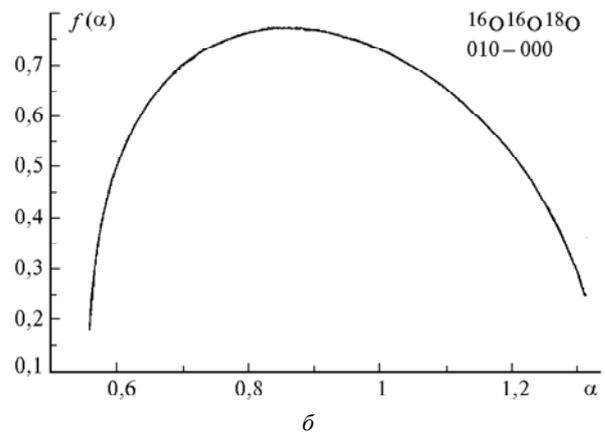
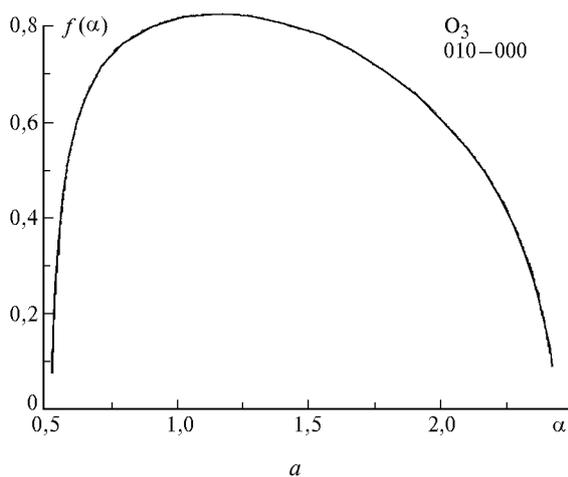


Рис. 5. Спектр сингулярностей для плотности поглощения в полосе 010–000 изотопов O_3 (а) и $^{18}\text{O}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ (б)

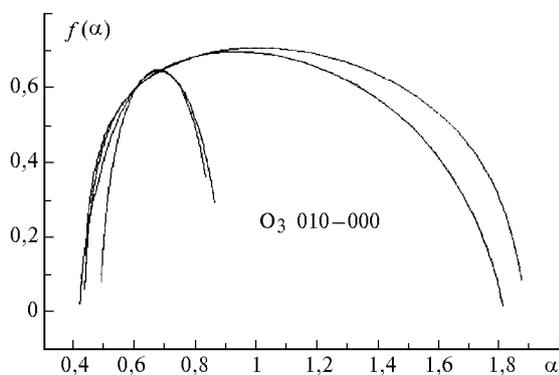


Рис. 6. Спектр сингулярностей для плотности поглощения в полосе 010–000 O_3 , разбитой на четыре равных интервала по частоте

Заключение

В работе в качестве основы для мультифрактального анализа оптических спектров газовых молекул использована «плотность поглощения» – суммарное поглощение на единицу частоты, нормированное на суммарное поглощение по всем диапазоне частот. В терминах фрактального анализа «плотность поглощения» описывается спектром сингулярностей, характеризующим совокупные свойства ее распределения на оси частот.

Результаты работы показывают, что абсорбционные спектры колебательно-вращательных полос газовых молекул обладают нетривиальными и достаточно индивидуальными мультифрактальными характеристиками. В частности, показано, что спектр сингулярностей чувствителен к молекулярному и изотопическому составу газа и типу колебательно-вращательной полосы поглощения.

1. Заславский Г.М., Филоненко Н.Н. // ЖЭТФ. 1973. Т. 65. С. 643.
2. Persival I.C.J. // Phys. Ser. B. 1973. V. 6. P. L229.
3. Заславский Г.М. // УФН. 1979. Т. 129. С. 129.
4. Brody T.A., Flores J., French J.B. et. al. // Rev. Mod. Phys. 1981. V. 53. P. 385.
5. Елютин П.В. // УФН. 1988. Т. 155. Вып. 3. С. 397–442.
6. Reichl L.E. The transition to chaos: in conservative classical systems: quantum manifestations. New York; Berlin; Heidelberg; London: Springer-Verlag, 1992.
7. Mandelbrot B.B. The fractal geometry of nature. 1982. Freeman, San Fransisco.
8. Falconer K. Fractal geometry: mathematical foundations and applications. Chichester; New York; Brisbane; Toronto; Singapore: John Wiley & Sons, 1990.
9. Федер Е. Фракталы. М.: Мир, 1991.
10. Зосимов В.В., Лямиев Л.Я. // УФН. 1995. Т. 165. № 4. С. 361–402.
11. DeVito C.L., Little W.A. // Phys. Rev. 1988. V. 38. N 12. P. 6362–6364.
12. Батунин А.В. // УФН. 1995. Т. 165. № 6. С. 645–660.

Yu.V. Kistenev, Yu.N. Ponomarev, A.V. Shapovalov. Fractal Properties of Absorption Spectra of Atmospheric Gaseous Constituents.

An interpretation of absorption spectra of vibrational-rotational bands of main atmospheric absorbing molecules (H₂O, CO₂, and O₃) in terms of fractal analysis is presented in the paper. The obtained results show these spectra to have nontrivial and rather specific multifractal characteristics. It is found, in particular, that the spectrum of fractal dimensionalities is sensitive to molecular and isotopic composition of a gas and a type of vibrational-rotational absorption band.