

УЧЕТ ПЕРЕКРЫВАНИЯ СПЕКТРОВ РАЗНЫХ ГАЗОВ ПРИ АППРОКСИМАЦИИ ФУНКЦИИ ПРОПУСКАНИЯ РЯДОМ ЭКСПОНЕНТ

Размоллов А.А.¹, Чеснокова Т.Ю.², Фирсов К.М.¹

¹Волгоградский государственный университет, г.Волгоград, Россия

²Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН, г. Томск, Россия

e-mail: alek.razmolov2010@yandex.ru, ches@iao.ru, fkf@volsu.ru

Предложен новый метод учета перекрывания полос различных газов при аппроксимации функция пропускания рядом экспонент, который обеспечивает аддитивный учет эффективных коэффициентов молекулярного поглощения разных газов. Показано, что этот метод позволяет получить короткие ряды экспонент (малое количество параметров), что обеспечивает высокую скорость расчетов переноса излучения в атмосфере Земли. Разработанный нами метод применим при расчетах переноса излучения как в длинноволновом, так и в коротковолновом диапазонах спектра, в том числе и с учетом многократного рассеяния на аэрозольных и облачных частицах.

Развитие спектроскопии высокого разрешения обеспечивает достаточно высокое качество решения задач переноса оптического излучения в атмосфере Земли. Созданы и постоянно обновляются базы данных параметров спектральных линий атмосферных и примесных газов атмосферы, и с их использованием разработаны прямые методы расчета спектров молекулярного поглощения *line-by-line*. Для решения широкого круга прикладных задач, таких как моделирование климата, предсказания погоды и, обработка спутниковых данных и др. на основе расчетов *line-by-line* разработаны многочисленные модификации методов параметризации характеристик молекулярного поглощения: ряды экспонент, ряды Дирихле, k-распределение, лебеговское осреднение и др. Несмотря на различные названия, суть этих методов сводится к аппроксимации функции пропускания неоднородной трассы коротким рядом экспонент. Однако, до настоящего времени не получила удовлетворительного решения проблема учета перекрывания полос поглощения различных газов. Все, что предлагается в литературе, фактически сводится к двум способам. Первый способ – суммарное пропускание рассматривается в виде произведения функций пропускания различных газов, например [1.]. Второй способ основывался на разбиении отдельного спектрального интервала на подинтервалы, например [2., 3.]. Для одного из газов параметризация осуществлялась для интервала в целом, а для другого газа для каждого из подинтервалов. Тем самым предпринималась попытка учесть корреляцию между спектрами поглощения разных газов. Однако, этот способ не всегда корректно учитывал перекрывание спектров поглощения, и для достижения успеха приходилось вводить дополнительные разбиения [2.]. С одной стороны, это усложняло расчет и значительно увеличивало число членов ряда экспонент. А с другой стороны,

не было понимания, когда эти процедуры учета перекрывания дают положительный результат. Ни один из методов, описанных в этих работах, не имел точной математической формулировки учета этих корреляционных связей, что и вызывало сложности при их практической реализации. Ранее, в нашей работе [5] был описан подход, который решал данную проблему и позволял формализовать процедуру учета перекрывания полос поглощения для двух разных газов. Однако, он также приводил к увеличению числа членов ряда. Целью данной работы являлась разработка метода параметризации характеристик молекулярного поглощения, входящих в уравнение переноса излучения, который позволит формализовать учет спектральных особенностей перекрывающихся полос разных газов и представить функцию пропускания в виде короткого ряда экспонент.

Пусть задана функция пропускания атмосферы в спектральном интервале $\nu_2 - \nu_1 = \Delta\nu$ неоднородной трассы $\vec{r}_1 - \vec{r}_2$ в виде:

$$T(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\nu_2 - \nu_1} \int_{\nu_1}^{\nu_2} \exp[-\tau(\nu, \vec{r}_1, \vec{r}_2)] d\nu, \quad (1)$$

где ν - частота,

$$\tau(\nu, \vec{r}_1, \vec{r}_2) = \int_{\vec{r}_1}^{\vec{r}_2} \sum_{i=1}^N k_i(\nu, l) \rho_i(l) dl = \sum_{i=1}^N \int_{\vec{r}_1}^{\vec{r}_2} k_i(\nu, l) \rho_i(l) dl \quad (2)$$

$\tau(\nu, \vec{r}_1, \vec{r}_2)$ - оптическая толщина, а $k_i(\nu, l)$ - массовый коэффициент молекулярного поглощения i -того газа с концентрацией $\rho_i(l)$, l — пространственная переменная.

Используя преобразование Лапласа [4], можно получить:

$$g(\tau) = \frac{1}{\nu_2 - \nu_1} \int_{\nu_1}^{\nu_2} W(\nu) d\nu, \quad W(\nu) = \begin{cases} 1, & \nu < 1 \\ 0, & \nu > 1 \end{cases} \quad (3)$$

где $g(\tau)$ - функция распределения τ . Ее также можно интерпретировать как меру Лебега [3.]. Преобразование (3) позволяет осуществить переход из пространства частот, где $\tau(\nu, \vec{r}_1, \vec{r}_2)$ - быстро-осциллирующая функция частоты, в пространство кумулятивных частот g . В пространстве кумулятивных частот $\tau(g, \vec{r}_1, \vec{r}_2)$ - монотонно-возрастающая функция, и применяя те, или иные квадратурные формулы, можно получить короткий ряд экспонент.

$$T(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\nu_2 - \nu_1} \int_0^1 \exp[-\tau(g, \vec{r}_1, \vec{r}_2)] dg = \sum_{i=1}^n \exp[-\tau(g_i, \vec{r}_1, \vec{r}_2)]. \quad (4)$$

Как правило, $n=10$ достаточно, чтобы получить погрешность расчета пропускания, не превышающую 1%. Описанная выше процедура позволяет получить короткий ряд экспонент. Для эффективной параметризации необходимо связать $\tau(g, \vec{r}_1, \vec{r}_2)$ с массовым коэффициентом поглощения $k_i(\nu, l)$. Для отдельного газа хорошо выполняется условие k – корреляции:

$$\tau_i(g, \vec{r}_1, \vec{r}_2) = \int_{\vec{r}_1}^{\vec{r}_2} k_i(g, l) \rho_i(l) dl, \quad (5)$$

а массовый коэффициент в пространстве кумулятивных частот $k_i(g, l)$, также как и $k_i(v, l)$ является функцией температуры и давления, что дает возможность получить относительные простые параметрические зависимости для $k_i(g, l)$. Термин «к – корреляция» означает, что спектры поглощения отдельного газа коррелируют на разных высотах. Однако в случае разных газов такое приближение не выполняется, причем зачастую коэффициент корреляции близок к нулю. Следствием этого является то, что в пространстве кумулятивных частот суммарная оптическая толща разных газов уже не является аддитивной функцией и нельзя переставить местами суммирование и интегрирование как в формуле (2) в пространстве частот.

Для решения вышеуказанной проблемы воспользуемся подходом, описанным в нашей работе [5], когда для одного газа переход от $k_i(v, l)$ к $k_i(g, l)$ осуществлялся стандартным образом, и получалась зависимость k от g , аналогичная кривой 1 на рис.1, а для другого газа первоначально осуществлялось аналогичное преобразование, а затем фиксировалось g_0 (положение минимума функции - $k(g)$), а сама функция $k(g)$ перестраивалась из $k(g)$ таким образом, что мера Лебега $g(k)$ для этих двух функций была одинаковой. На рис.1 показан алгоритм построения такой функции. Отличие данной модели от той, что была описана в нашей работе [5], состоит в том, что $k(g)$ остается достаточно гладкой (кривая 2 на рис.1), что делает этот подход более технологичным при выборе квадратурных формул.

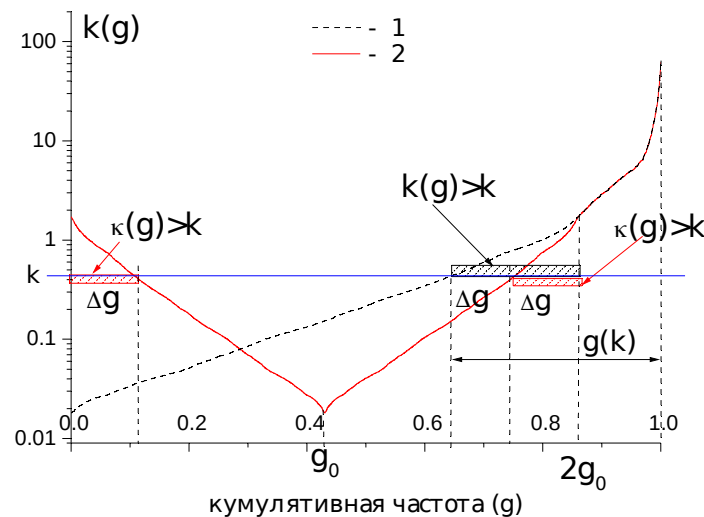


Рисунок 1. Методика построения функции $k(g)$.

Данную методику применили для расчета пропускания атмосферы на неоднородной трассе, обусловленного поглощением двух газов H_2O и CO_2 в спектральном интервале $2104-2110 \text{ см}^{-1}$.

Расчеты были проведены прямым методом line-by-line и по аппроксимационной формуле:

$$T = \sum_{i=1}^n C_i \exp \left[\int_{\vec{r}_1}^{\vec{r}_2} (k_{H_2O}(g_i, l) \rho_{H_2O}(l) + \kappa_{CO_2}(g_i, l) \rho_{CO_2}(l)) dl \right]. \quad (6)$$

На рис.2а) приведена зависимость абсолютной погрешности расчета пропускания ϵ при различных значениях T и g_0 . Рис. 2б) демонстрирует, что при оптимальном значении $g_0=0.84$ погрешность ϵ минимальна и не превышает 0.01.

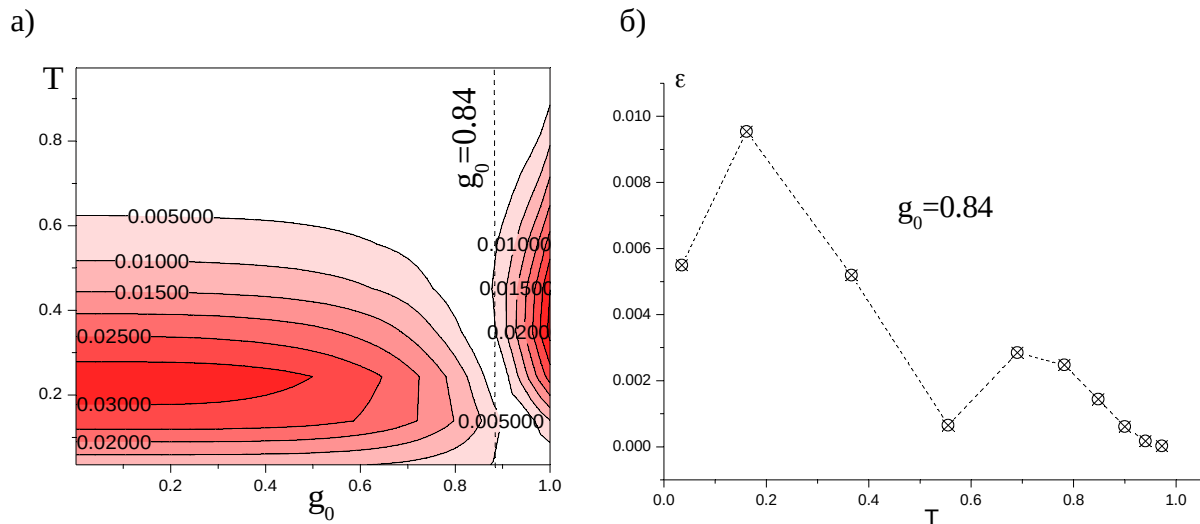


Рисунок. 2. Погрешность расчета пропускания атмосферы по формуле (6).

Результаты моделирования показали, что, как и ожидалось, в случае перекрытия полос поглощения H_2O и O_3 погрешности были существенно меньшими. Причина этого состоит в том формула (6) асимптотически точна, когда поглощает лишь один газ.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИОА СО РАН.

Литература

1. 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// Journ. Geoph. Research. 1991. V.96. No.D5. P. 9027-9063.
2. Yang S., Ricchiazzi P., Gautier C. Modified correlated k -distribution methods for remote sensing applications// Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer. 2000. V. 64, N. 6. P. 585-608. [https://doi.org/10.1016/S0022-4073\(99\)00140-5](https://doi.org/10.1016/S0022-4073(99)00140-5)
3. Шильков А.В., Герцев М.Н. Верификация метода лебеговского осреднения // Математическое моделирование. 2015. Т.27, № 8. С. 13-31.
4. Творогов С. Д. Применение рядов Дирихле в атмосферной спектроскопии. // Оптика атмосферы и океана. 1997. Т. 10. № 04-05. С. 403-412.
5. Фирсов К. М., Чеснокова Т. Ю. Новый метод учета перекрытия полос поглощения атмосферных газов при параметризации уравнения переноса. // Оптика атмосферы и океана. 1998. Т. 11. № 04. С. 410-415.