

А.А. Мицель, В.П. Руденко, К.М. Фирсов

ПРИБЛИЖЕННЫЕ МЕТОДЫ РАСЧЕТА ФУНКЦИЙ ПОГЛОЩЕНИЯ ПЕРЕКРЫВАЮЩИХСЯ ЛИНИЙ

Исследуется возможность представления спектров поглощения с помощью модели изолированной линии для расчета функций пропускания атмосферы. Проводится сравнение предлагаемого метода с другими известными методами и показывается, что его использование позволяет осуществлять быстрые расчеты пропускания без ограничений на спектральное разрешение.

Введение. Для интерпретации спутниковых данных по уходящему излучению Земли, для изучения радиационного режима необходима информация об ослаблении интенсивности радиации атмосферными газами. Развитые к настоящему времени методы расчета атмосферного поглощения можно разделить на три основные группы [1–5]: 1) метод прямого расчета, 2) комбинированные методы, 3) эмпирические методы. Вторая и третья группы методов расчета функций пропускания были развиты в «долазерную эпоху» и использовались для расчета поглощения излучения тепловых источников, имеющих широкий спектр. Комбинированные методы, основанные на моделировании полос поглощения, и эмпирические методы являются параметрическими (одно-, двух-, трех- и четырехпараметрическими). Параметры таких моделей определяются либо подгонкой к лабораторным данным, либо к данным, полученным методом прямого расчета. Такой способ определения параметров предопределяет общее ограничение приближенных методов, применимость их лишь для фиксированного спектрального разрешения, при котором были получены подгоночные параметры.

Метод прямого расчета функций поглощения свободен от указанного ограничения, однако он является чрезвычайно трудоемким даже при использовании современных ЭВМ.

В связи с этим исследователи вновь обращаются к аналитическим методам, которые являются параметрическими, при этом параметры моделей полос поглощения перекрывающихся линий подбирают не путем подгонки к экспериментальным данным, а рассчитывают непосредственно по спектрам поглощения.

Расчетный способ определения параметров моделей полос становится возможным, благодаря, с одной стороны, успехам спектроскопии высокого и сверхвысокого разрешения, с другой стороны, развитым средствам записи, хранения и считывания спектроскопической информации.

В работе [6] обобщены результаты по разработке 5 см^{-1} модели поглощения на основе статистической модели Пласса, параметры которой рассчитываются с помощью атласа линий поглощения. В настоящей работе рассматривается метод расчета атмосферного поглощения с помощью модели изолированной линии и проводится обобщение на другие модели; параметры моделей рассчитываются на ЭВМ. Такой способ определения параметров моделей полос позволяет проводить быстрые (по сравнению с прямым методом) расчеты пропускания без ограничения на спектральное разрешение.

Основные предпосылки и метод расчета параметров модели. Пусть в спектральном интервале $\Delta\nu$ расположено N перекрывающихся линий какого-либо газа. Для простоты изложения метода трас-су будем считать однородной. Функция поглощения для линий с лоренцевским контуром имеет вид

$$A_N = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \left[1 - \exp \left\{ -2\Sigma \frac{x_i \beta_i^2}{(t - y_i)^2 + \beta_i^2} \right\} \right] dt, \quad (1)$$

где $x_i = S_i w / 2\pi\gamma_i$; $\beta_i = 2\pi\gamma_i / \Delta\nu$; $y_i = 2\pi(v_{0i} - v_0) / \nu$; S_i , γ_i , v_{0i} — интенсивность, полуширина и центр i -й спектральной линии поглощения; w — содержание поглощающего газа на трассе длиной L .

Представим функцию поглощения отдельной линии в виде

$$A_{SL} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \left[1 - \exp \left\{ -\frac{x\beta^2}{t^2 + \beta^2} \right\} \right] dt. \quad (2)$$

Суть метода состоит в замене функции поглощения перекрывающихся линий A_N функцией поглощения изолированной линии A_{SL} , возникающие при этом 2 неизвестных параметра x и β будем определять с помощью асимптотических выражений слабого и сильного поглощения неперекрывающихся линий. Из сравнения (1) и (2) можно получить

$$x = \frac{\left(\sum_{i=1}^N x_i \beta_i z_i\right)^2}{\left(\sum_{i=1}^N \sqrt{x_i \beta_i}\right)^2}; \quad \beta = \frac{\left(\sum_{i=1}^N \sqrt{x_i \beta_i}\right)^2}{\sum_{i=1}^N x_i \beta_i z_i} \quad (3)$$

Параметр z_i , входящий в (3), представляет собой не что иное, как параметр «обрезания» контура линии поглощения

$$z_i = \frac{1}{\pi} \left[\operatorname{arctg} \frac{\nu_2 - \nu_{0i}}{\gamma_i} + \operatorname{arctg} \frac{\nu_{0i} - \nu_1}{\gamma_i} \right], \quad (4)$$

где ν_1, ν_2 — границы частотного интервала $\Delta\nu$. Чем ближе положение линий к границам интервала, тем меньший вклад этих линий в поглощение. Величина z_i для линий внутри интервала изменяется от 1 до 0,5. В общем случае параметр z_i позволяет учитывать линии, расположенные и вне интервала, величина z_i для этих линий меняется от 0,5 до 0.

Для проверки работоспособности предлагаемого метода были проведены расчеты пропускания $T = 1 - A$ CO_2 и H_2O с разрешением 20 см^{-1} и 8 см^{-1} в области спектра $2,7 \text{ мкм}$. Расчеты выполнены для горизонтальной трассы длиной $L = 10 \text{ км}$, расположенной на высоте 10 км ; метеомодель — лето средних широт [7]. В качестве точных значений пропускания использовались данные, полученные методом прямого расчета с помощью автоматизированной системы [8]; архивом спектральной информации является атлас Макклатчи (версия 1980 года) [9].

На рис. 1,а, 1,б представлены рассчитанные величины пропускания с разрешением 20 см^{-1} , полученные методом прямого счета (кривые 4) и с помощью модели отдельной линии (кривые 1).

На рис. 1,б приведено спектральное пропускание CO_2 с разрешением 8 см^{-1} . Из рисунков видно удовлетворительное согласие между точными значениями пропускания и приближенными, полученными предлагаемым методом. При этом время счета удается уменьшить на несколько порядков. Так, на частоте 3725 см^{-1} при расчете пропускания CO_2 с разрешением 20 см^{-1} время счета на ЭВМ ЕС 1055 составило менее 1 с, в то время как прямым методом — 9 мин 47 с (число линий поглощения было $N = 232$).

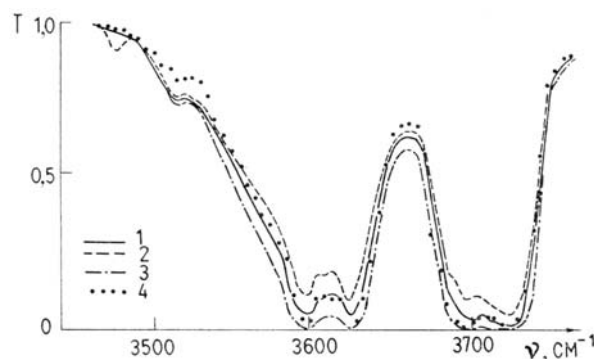


Рис. 1,а. Спектральная зависимость пропускания CO_2 с разрешением $\Delta\nu = 20 \text{ см}^{-1}$ на горизонтальной трассе длиной 10 км на высоте $H = 10 \text{ км}$. Модель атмосферы — лето средних широт [7]. 1 — модель отдельной линии; 2 — статистическая модель; 3 — модель Эльзассера; 4 — точный расчет

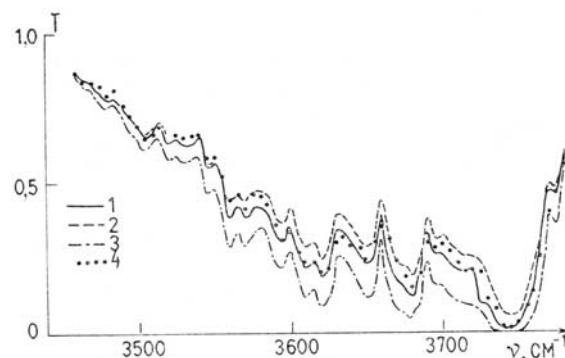


Рис. 1,б. Спектральная зависимость пропускания H_2O с разрешением $\Delta\nu = 20 \text{ см}^{-1}$ на горизонтальной трассе длиной 10 км на высоте $H = 10 \text{ км}$. Модель атмосферы — лето средних широт [7]. 1 — модель отдельной линии; 2 — статистическая модель; 3 — модель Эльзассера; 4 — точный расчет

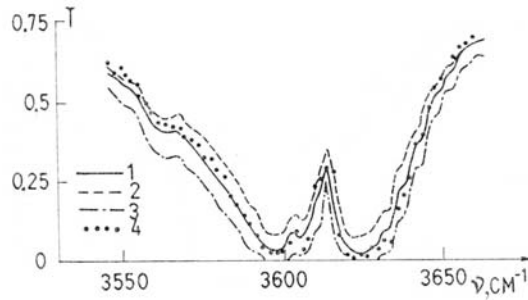


Рис. 1, б. Спектральная зависимость пропускания CO_2 с разрешением $\Delta\nu = 8 \text{ см}^{-1}$ на горизонтальной трассе длиной 10 км на высоте $H = 10 \text{ км}$. Модель атмосферы — лето средних широт [7]. 1 — модель отдельной линии; 2 — статистическая модель; 3 — модель Эльзассера; 4 — точный расчет

Зависимость пропускания CO_2 от величины x на длине волны $\lambda = 10,6 \text{ мкм}$ при $\Delta\nu = 8 \text{ см}^{-1}$ дана на рис. 2. Видно, что и здесь модель, отдельной линии является наилучшей.

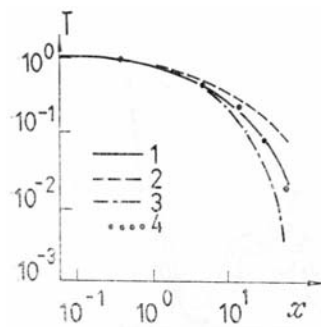


Рис. 2. Зависимость пропускания CO_2 от параметра $x = S\omega/2\pi\gamma$ на уровне земли. Модель — лето средних широт [7]. 1 — модель отдельной линии; 2 — статистическая модель; 3 — модель Эльзассера; 4 — точный расчет

Для оценки эффективности приближенного метода расчета пропускания вычислялись среднеквадратические отклонения по формуле

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (T_T - T_{\text{пр}})^2} \quad (5)$$

где T_T — точное значение пропускания, полученное методом прямого счета; $T_{\text{пр}}$ — приближенное значение пропускания; n — число спектральных точек, в которых рассчитывалось пропускание ($n = 64$).

Значения σ_{SL} для CO_2 и H_2O (вторая и третья колонки) приведены в таблице, для двух разрешений $\Delta\nu$: 20 см^{-1} и 8 см^{-1} . Из таблицы видно, что величина σ_{SL} от разрешения практически не зависит.

Обобщение метода расчета параметров на другие модели.

В практических расчетах атмосферного поглощения широкое применение нашли также такие модели полос, как регулярная модель (модель Эльзассера) и статистические модели с равными интенсивностями линий (модель Пласса) и экспоненциальным распределением интенсивностей линий (модель Гуди) [1–3]. Идея метода определения параметров для этих моделей та же самая — привлечение асимптотических выражений слабого и сильного поглощения перекрывающихся линий. Асимптотики слабого поглощения для всех моделей совпадают. Асимптотики сильного поглощения для моделей Эльзассера и Пласса совпадают с соответствующей асимптотикой модели отдельной линии, а для модели Гуди отличаются на постоянный множитель. Параметры x и β для моделей Эльзассера и Пласса совпадают с аналогичными параметрами модели отдельной линии. Параметры модели Гуди x_0 , β_0 отличаются от параметров x и β на множитель

$$x_0 = \frac{\pi}{4} x; \quad \beta_0 = \frac{4}{\pi} \beta. \quad (6)$$

Основные расчетные формулы для этих моделей имеют вид

$$A_{EL} = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \left[1 - \exp \left\{ \frac{\beta x \operatorname{sh} \beta}{\operatorname{ch} \beta - \cos t} \right\} \right] dt; \quad (7)$$

$$A_{PL} = 1 - \exp[-A_{SL}(x, \beta)]; \quad (8)$$

$$A_G = 1 - \exp\left[-\frac{\beta_0 x_0}{\sqrt{1+2x_0}}\right]. \quad (9)$$

Выражение (8) получено для бесконечного числа линий поглощения. В работе [6] используется модель Пласса с конечным числом линий

$$A_{PL} = 1 - [1 - A_{SL}(x, \beta)/N]^N, \quad (10)$$

где $N = \Delta\nu \cdot \beta/\pi\gamma$ — эффективное число линий в интервале $\Delta\nu$. Полуширину линии γ можно определить следующим образом:

$$\gamma_i = \frac{\sum_{i=1}^N \gamma_i S_i}{\sum_{i=1}^N S_i} \quad (11)$$

На рис. 1,а, 1,б, 1,в, 2 приведены кривые пропускания, рассчитанные по модели Эльзассера (кривые 3) и модели Пласса (кривые 2) с разрешением $\Delta\nu = 20 \text{ см}^{-1}$ (рис. 1,а, 1,б) и $\Delta\nu = 8 \text{ см}^{-1}$ (рис. 1,в, 2). Из рисунков следует, что из трех моделей наилучшей является модель отдельной линии. В таблице даны среднеквадратические отклонения σ_{EL} и σ_{PL} (4, 5) и 6, 7 колонки).

Среднеквадратическое отклонение пропускания, рассчитанного по модели отдельной линии σ_{SL} модели Эльзассера σ_{EL} и статистической модели Пласса σ_{PL}

Разрешение $\Delta\nu, \text{ см}^{-1}$	σ_{SL}		σ_{EL}		σ_{PL}	
	CO ₂	H ₂ O	CO ₂	H ₂ O	CO ₂	H ₂ O
20	0,058	0,032	0,081	0,11	0,077	0,043
8	0,032	—	0,088	—	0,054	

Заключение. Предложенный метод расчета поглощения с помощью модели отдельной линии является безусловно приближенным и не может гарантировать высокую точность оценок прозрачности атмосферы. Для достижения высокой точности оценок прозрачности необходимо использовать метод прямого счета. Однако в тех случаях, когда для потребителя достаточно иметь оценки пропускания с точностью до 5÷10% в широком диапазоне спектра для любого разрешения $\Delta\nu$ предлагаемый метод может успешно применяться. Заметим, что ранее модель отдельной линии в практических расчетах не использовалась, а рассматривалась лишь как теоретическая модель. Как показали наши вычисления пропускания CO₂ и H₂O, для участков спектра 2,7 мкм и 10 мкм эта модель оказалась наилучшей среди других моделей. На всех рисунках значения пропускания T_{SL} расположены между значениями пропускания T_{EL} и T_{PL} .

Авторы считают своим приятным долгом выразить благодарность профессору С.Д. Творогову за полезное обсуждение и поддержку работы.

1. Гуди Р. Атмосферная радиация. — М.: Мир, 1966. — 147 с.
2. Зуев В.Е. Распространение видимых и инфракрасных волн в атмосфере. — М.: Сов. радио, 1970. — 496 с.
3. Wolfe W.L., Zissis K.J. The Infrared Handbook Chapter-5. — Washington, 1978, pp. 5-1—5-132.
4. Киселева М.С., Непорент Б.С., Федорова Е.О. Поглощение инфракрасной радиации при неразрешенной структуре спектра для наклонных путей в атмосфере (действие H₂O и CO₂) — Изв. АН СССР, ФАО. 1967, т. 3, № 6, с. 640—649.
5. Филиппов В.Л. Спектральное пропускание инфракрасной радиации атмосферными газами по данным лабораторных и натурных исследований. — ЖПС, 1983, Деп. в ВИНТИ, рег. № 1045-83.
6. Robertson D.C., Bernstein L.S., Heimes R. et al. 5 cm⁻¹ band model option to LOFTRAN-5. — Appl. Opt, 1981, v. 20, № 1b, pp. 3218—3226.
7. Ипполитов И.И., Комаров В.С., Мицель А.А. Оптико-метеорологическая модель атмосферы для моделирования лидарных измерений и расчета распространения радиации. — В сб.: Спектроскопические методы зондирования атмосферы. — Новосибирск: Наука, 1985, с. 4—44.
8. Макушкин Ю.С., Мицель А.А., Несмелова Л.И. и др. Автоматизированная система для расчета характеристик поглощения атмосферы. (LARA). Ч. 1, 2. — Изв. вузов, Физика. — Томск, 1984, деп. в ВИНТИ, рег. № 3685-84, с. 38, № 3686-84, с. 55.

9. Rothman L. S. AFGL atmospheric absorption line parameters compilation: 1980 version. — Appl. Opt, 1981, v. 20, pp. 791–795.

Институт оптики атмосферы
СО АН СССР, Томск

Поступила в редакцию
28 октября 1987 г.

A. A. Mitsel', V.P. Rudenko, K.M. Firsov. The Approximated Methods for Calculating the Absorption Functions of the Overlapped Lines.

The possibility of representing absorption spectra with the use of an isolated line model for calculating the atmospheric transmittance functions is investigated. The comparison of the method suggested with the other available methods has been made and it is shown that this method allows one to rapidly calculate the transmittance without limitation of spectral resolution.