

Ю.В. Кистенев ¹, Ю.Н. Пономарев ², К.М. Фирсов ², Д.А. Герасимов ³

Связь погрешности расчета пропускания неоднородной атмосферы методом k -распределения с лакунарностью спектра

¹ Сибирский государственный медицинский университет,² Институт оптики атмосферы СО РАН, г. Томск³ Томский государственный университет

Поступила в редакцию 30.12.2002 г.

Показано, что лакунарность, характеризующая спектр поглощения молекул как мультифрактал, дает возможность оценить погрешность метода k -функций для многокомпонентных неоднородных газовых сред, не проводя трудоемких line-by-line расчетов.

Специфика задач моделирования климата Земли накладывает достаточно жесткие требования точности и скорости на используемые радиационные блоки [1, 2]. Вследствие этого значительные усилия исследователей направлены на создание эффективных методов параметризации характеристик молекулярного и аэрозольного ослабления излучения, входящих в уравнение переноса, которые бы позволили найти компромисс между скоростью счета и точностью.

Молекулярные спектры поглощения атмосферных газов характеризуются высокой селективностью по сравнению со спектрами аэрозольного ослабления. Характерный масштаб изменения величины коэффициентов молекулярного поглощения составляет 10^{-1} см^{-1} . Кроме того, число спектральных линий, которые необходимо учитывать, велико. Так, например, в базе данных HITRAN-2000 общее число линий поглощения превышает 10^6 . Поэтому прямые методы расчета характеристик молекулярного поглощения требуют значительных ресурсов ЭВМ и неприемлемы при решении задач общей циркуляции атмосферы.

В настоящее время разработан эффективный метод параметризации характеристик молекулярного поглощения – метод k -распределения [1–5]. Первоначально метод k -распределения основывался на моделях полос, и его преимущество состояло в том, что он позволял представить функцию пропускания в виде ряда экспонент. По мере развития этот метод освободился от ограничений, связанных с модельными представлениями, и на сегодняшний день его можно рассматривать как модификацию прямого метода счета. Для получения ряда экспонент используется интегральное преобразование функции пропускания среды [4]:

$$T_{\Delta\nu} = \frac{1}{\Delta\nu} \int_{\Delta\nu} \exp\{-k(\nu)L\} d\nu = \int_0^1 \exp\{-k(g)L\} dg, \quad (1)$$

где $k(\nu)$ – коэффициент молекулярного поглощения; L – длина трассы; ν – волновое число, см^{-1} ; $k(g)$ можно интерпретировать как коэффициент поглощения в пространстве кумулятивных волновых чисел g [5]. В формуле (1) $k(\nu)$ – быстроосциллирующая функция, а $k(g)$ – монотонно возрастающая, кусочно-непрерывная функция. Применяя ко второму интегралу в формуле (1) квадратурные формулы численного интегрирования, легко получить короткий ряд экспонент.

Функция $k(g)$ может быть рассчитана на основе $k(\nu)$. Для этого необходимо найти функцию распределения значений коэффициента поглощения $g(k)$:

$$g(k) = \frac{1}{\nu_2 - \nu_1} \int_{\nu_1}^{\nu_2} U(\nu) d\nu, \quad (2)$$

где

$$U(\nu) = \begin{cases} 1, & k(\nu) < k \\ 0, & k(\nu) > k \end{cases}.$$

Из (2) следует, что $g(k)$ является монотонно возрастающей функцией, поэтому, обращая $g(k)$, можно вычислить $k(g)$:

$$k(g) = g^{-1}(k), \quad (3)$$

где $g^{-1}(k)$ – обратная функция.

Вследствие того что $k(g)$ связано с функцией распределения значений коэффициента поглощения, в западной литературе этот метод получил название *метод k -распределения*.

В нашей работе [5] показано, что метод k -распределения позволяет корректно учесть молекулярное поглощение при решении уравнения переноса в рассеивающей и поглощающей атмосфере через альбедо однократного рассеяния и оптическую толщину. Единственное приближение, которое должно выполняться, – это *корреляция k -распределения* [7], что позволяет естественным образом связать оптическую толщину и коэффициент поглощения в пространстве кумулятивных волновых чисел:

$$\tau(g, z_0, z) = \int_{z_0}^z k(g, h) dh, \quad (4)$$

где $k(g, h)$ имеет смысл коэффициента поглощения на высоте h и кумулятивной частоте g .

Соотношение (4) нарушается в неоднородной атмосфере. Это связано с тем, что функция распределения $g(k)$ меняется с высотой. В случае неоднородной атмосферы в формуле (2) вместо коэффициента поглощения должна фигурировать оптическая толщина, а функция распределения оптической толщины неоднородной атмосферы отличается от функции распределения коэффициента поглощения, и чем сильнее различия, тем больше погрешность расчета по формуле (4).

В настоящее время отсутствуют объективные критерии применимости аппроксимации (4), поэтому в исследуемых спектральных интервалах для ее проверки приходится проводить большой объем вычислений функций пропускания для вариаций вертикальных профилей температуры и концентрации газовых компонентов.

В работе [6] дано качественное обоснование критерия оценки точности расчета пропускания с использованием приближения (4) для неизоотермической атмосферы, базирующегося на применении понятия лакуарности оптического спектра (оценки лакуарности оптических спектров см. в [8]).

В данной статье исследуется количественная связь между погрешностью расчета пропускания неоднородной атмосферы методом k -распределения и лакуарностью спектра. Для выбора количественного критерия применимости метода k -распределения в неодно-

родной атмосфере используется модель двухслойной неизотермической среды с температурой слоя T_i и толщиной L_i ($i = 1, 2$) [6]. На рис. 1 показан пример трансформации спектра поглощения слоев среды в пространстве волновых и кумулятивных волновых чисел.

Точное $T_{\Delta v}$ и приближенное (в приближении k -корреляции) T_g значения функции пропускания рассчитывались по формулам:

$$T_{\Delta v} = \int_0^1 \exp\{-\tau(g)\} dg,$$

$$T_g = \int_0^1 \exp[-k(g, T_1)L_1 - k(g, T_2)L_2] dg.$$

Коэффициенты $k(g, T_1)$ и $k(g, T_2)$ находились для каждого слоя по формулам (2)–(3), а для вычисления $\tau(g)$ использовалось выражение

$$g(\tau) = \frac{1}{v_2 - v_1} \int_{v_1}^{v_2} U(v) dv,$$

где

$$U(v) = \begin{cases} 1, & k(v, T_1)L_1 + k(v, T_2)L_2 < \tau \\ 0, & k(v, T_1)L_1 + k(v, T_2)L_2 > \tau \end{cases}.$$

Погрешность расчета определялась как

$$\varepsilon = \text{Sup}_{L_1, L_2} |T_{\Delta v} - T_g|.$$

Расчеты коэффициентов поглощения для атмосферного CO_2 проводились в спектральном диапазоне $3450\text{--}3770 \text{ см}^{-1}$, контур линии полагался фойтговским, интенсивности спектральных линий для заданных температур (диапазон $300\text{--}1000 \text{ К}$) брались из базы данных CDSD [9] (Carbon Dioxide Spectroscopic Databank), любезно предоставленной нам В.И. Перваловым. Спектральное разрешение варьировалось от 10 до 100 см^{-1} .

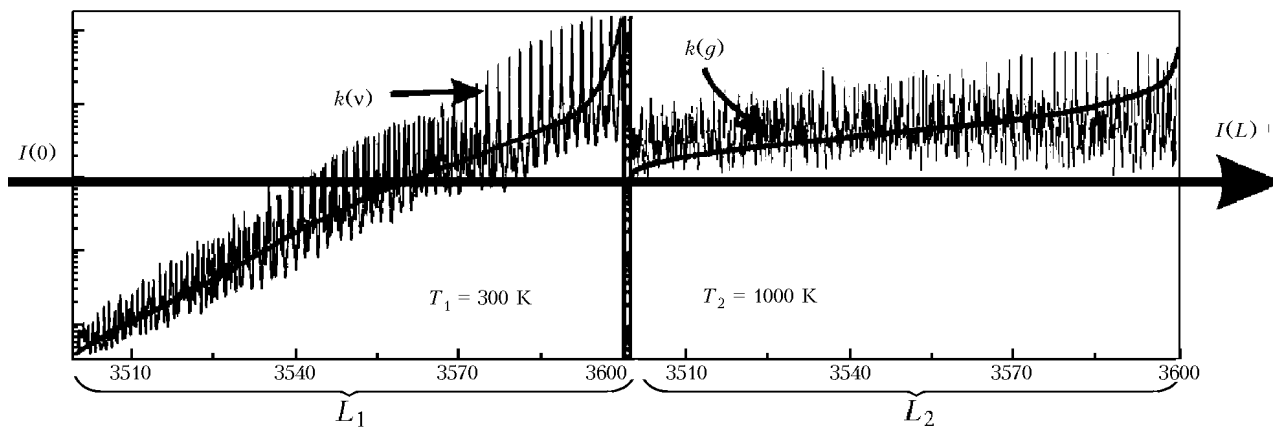


Рис. 1. Прохождение излучения через двухслойную среду

На рис. 2 представлена типичная зависимость погрешности расчета функции пропускания методом k -корреляции от разности между температурами 1-го и 2-го слоев.

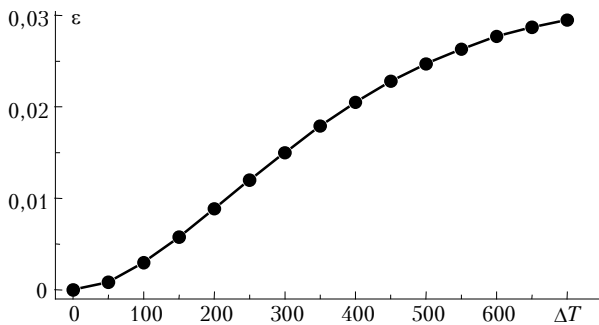


Рис. 2. Зависимость погрешности расчета пропускания для двухслойной среды по методу k -распределения в зависимости от разности температуры слоев (температура первого слоя – 300 К). Спектральный диапазон 3500–3600 см^{-1}

Из рис. 2 видно, что погрешность растет с ростом разности температуры слоев. Отметим, что температура не является универсальным критерием вследствие того, что данная погрешность в первую очередь обусловлена изменением функции распределения коэффициента поглощения. Для оценки изменчивости функции распределения наиболее адекватными являются статистические критерии. В [6] было показано, что таковым критерием может быть лакуарность спектра, которая выражается через первые два момента распределения коэффициента поглощения и характеризует не только статистические свойства распределений, но и их симметрию (масштабную и трансляционную).

В данной статье приведены расчеты высших лакуарностей:

$$\Lambda_n(k) = \frac{M_{n+1}\{k(v, T)\}}{[M_1\{k(v, T)\}]^{n+1}}, \quad n = 1, 2, 3.$$

На рис. 3 приведены результаты расчета лакуарностей для $n = 1, 2, 3$ и спектрального диапазона 3500–3600 см^{-1} .

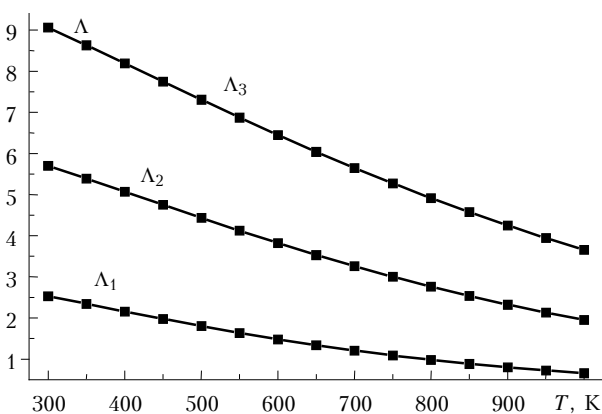


Рис. 3. Температурная зависимость параметров лакуарности $\Lambda_n(k)$, рассчитанных для спектра поглощения CO_2 в диапазоне 3500–3600 см^{-1}

Из рис. 3 видно, что температурная зависимость первых трех моментов лакуарности идентична. Ана-

логичная картина наблюдалась и для моментов лакуарности, рассчитанных на основе функции распределения интенсивности спектральных линий. Для CO_2 в спектральном диапазоне 3450–3770 см^{-1} для интервалов усреднения, варьирующихся от 10 до 100 см^{-1} , наблюдались закономерности, подобные приведенным на рис. 3. По этой причине в качестве основной характеристики температурной изменчивости функции распределения коэффициента поглощения либо функции распределения интенсивности спектральных линий можно использовать лакуарность низшего порядка $\Lambda_1(k)$.

Моделирование, проведенное нами, показало, что погрешность расчета пропускания среды функционально связано с параметром лакуарности, характеризующим газовую смесь в целом (рис. 4).

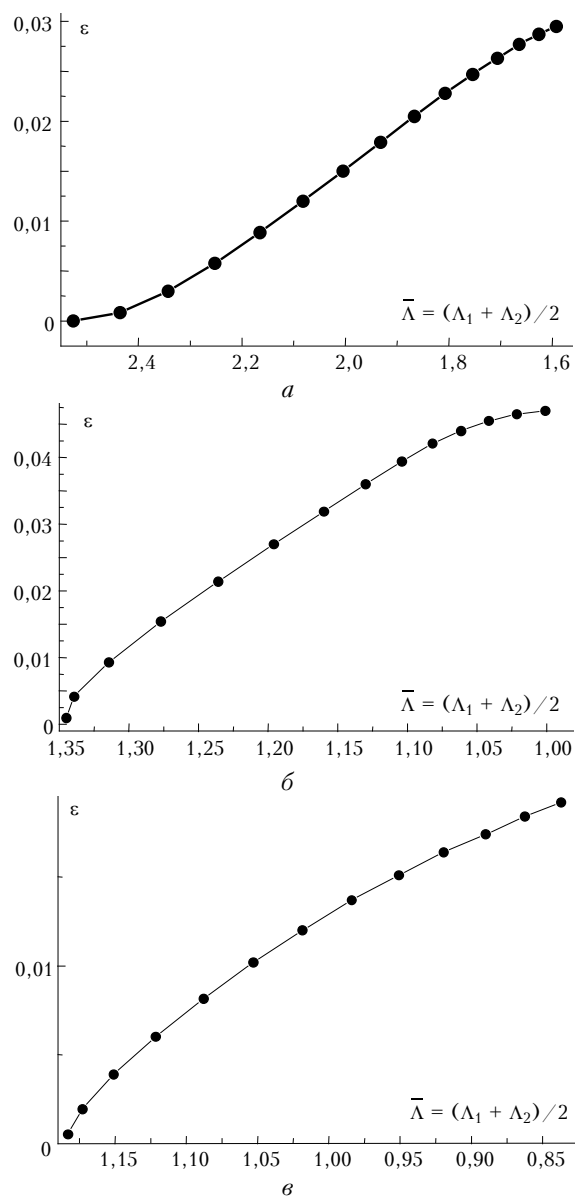


Рис. 4. Зависимость погрешности расчета функции пропускания от параметров лакуарности: а – диапазон 3500–3600 см^{-1} ; б – диапазон 3600–3620 см^{-1} ; в – диапазон 3700–3710 см^{-1}

Следует отметить, что полученные зависимости для всех случаев хорошо описывались при помощи линейной регрессии (коэффициент корреляции R составлял 0,99), что удобно для практических приложений.

Таким образом, параметр лакуарности, зависящий от температуры и характеризующий спектр как мультифрактал, дает возможность оценить погрешность метода k -функций для многокомпонентных неоднородных газовых сред, не проводя трудоемких line-by-line расчетов.

Данная работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант № 01-05-65152а.

1. *Stephens G.L.* The Parametrization of Radiation for Numerical Weather Prediction and Climate Models // *Mon. Weather Rev.* 1984. V. 112. P. 826–867.
2. *Fouquart Y.* Radiative transfer in climate models. Physically-based Modelling and Simulation of Climate and Climatic Change / Ed. M.E. Shlesinger // Kluwer Academic Publishers. Part 1. 1988. P. 223–283.
3. *Ленюбль Ж.* Перенос радиации в рассеивающих и поглощающих атмосферах. Стандартные методы расчета. Л.: Гидрометеоздат, 1990. 263 с.

4. *Творогов С.Д.* Некоторые аспекты задачи о представлении функции пропускания в ряд экспонент // *Оптика атмосф. и океана.* 1994. Т. 7. № 3. С. 315–326.
5. *Фирсов К.М., Чеснокова Т.Ю., Белов В.В., Серебряников А.Б., Пономарев Ю.Н.* Ряды экспонент в расчетах переноса излучения методом Монте-Карло в пространственно неоднородных аэрозольно-газовых средах // *Вычисл. технол.* 2002. Т. 7. № 5. С. 77–87.
6. *Кистенев Ю.В., Пономарев Ю.Н., Фирсов К.М.* Анализ температурной зависимости кумулятивных спектров колебательно-вращательных полос поглощения атмосферных газов // *Оптика атмосф. и океана.* 2002. Т. 15. № 9. С. 762–764.
7. *Мицель А.А., Фирсов К.М., Фолин Б.А.* Перенос оптического излучения в молекулярной атмосфере. Томск: СТУ, 2001. 444 с.
8. *Кистенев Ю.В.* Оценка лакуарности оптических спектров // *Оптика атмосф. и океана.* 2001. Т. 14. № 9. С. 833–836.
9. *Tashkun S.A., Perevalov V.I., Bykov A.D., Lavrentieva N.N., Teffo J.-L.* High-precision spectroscopic data-bank of line parameters of CO₂ molecule: version for high-temperature applications // *Abstr. of Seventeenth colloquium of high resolution molecular spectroscopy.* Nijmegen, 2001. P. 324.

Yu.V. Kistenev, Yu.N. Ponomarev, K.M. Firsov, D.A. Gerasimov. **Relationship between the error in calculation of transmittance of the inhomogeneous atmosphere by the k -distribution method and spectrum lacunarity.**

It is shown that lacunarity characterizing a molecular absorption spectrum as a multifractal allows estimation of the error in the method of k -functions for multicomponent inhomogeneous gas media without cumbersome line-by-line calculations.