

А.А. Мицель, И.В. Пташник, К.М. Фирсов, Б.А. Фомин

ЭФФЕКТИВНЫЙ МЕТОД ПОЛИНЕЙНОГО СЧЕТА ПРОПУСКАНИЯ ПОГЛОЩАЮЩЕЙ АТМОСФЕРЫ

Разработан новый алгоритм расчета пропускания, включающий последние достижения в развитии метода полинейного счета. Быстродействие метода достигается за счет предварительной селекции линий поглощения, оптимизации частотной сетки и редукции неоднородной трассы к эквивалентной однородной.

Введение

Известно, что полинейный метод расчета характеристик поглощения газовой среды 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 являются задачей актуальной и представляют несомненный интерес для специалистов. В данной статье приводится краткое описание нового алгоритма, включающего последние достижения в развитии метода полинейного счета пропускания [1].

Основными направлениями исследований, ведущихся различными научными группами в плане сокращения времени вычисления пропускания методом полинейного счета, являются [2]: 1) селекция линий поглощения, 2) оптимизация частотной сетки, 3) редукция неоднородной трассы к однородной, 4) обрывание контура линии поглощения, 5) разделение вычислительной схемы расчета селективного и континуального поглощения, 6) разделение частотной и высотной зависимостей оптической толщи в крыльях линии неоднородной трассы, 7) оптимизация алгоритма расчета фойгтовского контура. В данной статье мы остановимся на первых трех направлениях.

1. Селекция линий поглощения

В заданном спектральном диапазоне $\Delta\nu$ могут быть расположены линии поглощения данного газа различных полос с различными интенсивностями. Диапазон изменения интенсивностей линий весьма широк, а количество линий может оказаться очень большим. Это приводит к существенному увеличению затрат машинного времени счета. С другой стороны, среди линий, попадающих в интервал $\Delta\nu$, есть такие, вклад в поглощение которых пренебрежимо мал. В случае перекрытия полос разных газов число линий может достигать нескольких сотен тысяч (например, в интервале частот 500—1300 см^{-1} число линий первых шести газов в атласе HITRAN-91 [3] составляет порядка 120 тыс). Однако реальный вклад в поглощение с учетом различного содержания этих газов в атмосфере дают лишь несколько тысяч линий, поэтому вполне естественно в расчетах пропускания учитывать лишь эти линии, а остальные исключить из расчетной схемы. Для этой цели необходимы эффективные критерии селекции линий.

Известные критерии [4] основаны на отбрасывании линий, интенсивность которых (либо коэффициент поглощения) меньше заданной пороговой величины. Другие критерии основаны на оценках оптической толщи [2, 5]. В нашем алгоритме расчета пропускания мы также используем критерий отбрасывания линий на основе оценки оптической толщи [6]. Критерий включает две селекции – общую и высотную. Для общей селекции по приближенным формулам оценивается оптическая толщина в центре линии и в крыле в зависимости от расположения линии в выбранном интервале длин волн (рис. 1).

Правило удаления линий из расчетной схемы для общей селекции имеет вид [7]

$$S_{0ij} < \varepsilon/W_{cj}; \quad \nu_{ij} \in [\nu_1 - \Delta\nu_c, \nu_2 + \Delta\nu_c]; \quad (1)$$

$$\frac{S_{0ij} \gamma_{0ij}}{(v_{1,2} - v_{ij})^2} < \varepsilon \delta / W_{wj}, \quad v_{ij} \in [v_1^*, v_1^* + \Delta v_w] \cup [v_2^* - \Delta v_w, v_2^*], \quad (2)$$

где ε, δ – заданные пороговые величины; Δv (на рис. 1) – ширина интервала усреднения рассчитываемой в точке v_0 функции пропускания; Δv_c – ширина интервала за пределами Δv , в котором еще проводится селекция по центрам линий; Δv_w – ширина интервала, в котором производится селекция по крыльям линий.

$$W_{cj} = 0,47 \int_{z_1}^{z_2} \varphi_1(z) \frac{\rho_j(z)}{\gamma_v(z)} dz, \quad W_{wj} = \int_{z_1}^{z_2} \varphi_2(z) \rho_j(z) dz$$

– поглощающие массы j -го газа для центра линии (W_{cj}) и для крыла (W_{wj}) линии; $S_{0ij}, \gamma_{0ij}, v_{ij}$ – интенсивность, лоренцевская полуширина и частота центра i -й линии j -го газа соответственно; $\gamma_v(z)$ – фойгтовская полуширина, рассчитываемая по аппроксимации Матвеева [8]; $\varphi_1(z), \varphi_2(z)$ – известные функции давления и температуры; ρ_j – концентрация j -го газа.

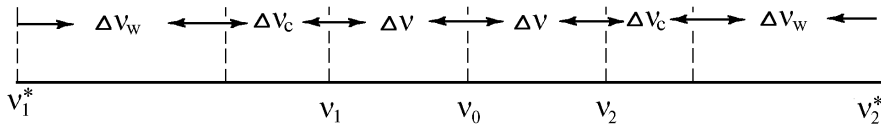


Рис. 1. Схема общей селекции линий: Δv – ширина интервала усреднения рассчитываемой в точке v_0 функции пропускания; Δv_c – ширина интервала за пределами Δv , в котором еще проводится селекция по центрам линий; Δv_w – ширина интервала, в котором производится селекция по крыльям линий

Оставшиеся после первой селекции линии подвергаются второй селекции, суть которой состоит в следующем. Для каждой линии оценивается высота z_{0i} , выше которой (для трассы снизу-вверх) или ниже которой (для трассы сверху-вниз) вклад в оптическую толщину пренебрежимо мал. Правило удаления линий в этой селекции имеет вид

$$\tau(z_{0i}, z_2) \leq \varepsilon. \quad (3)$$

Высотная селекция приводит к уменьшению числа учитываемых линий с увеличением толщины слоя.

В табл. 1, 2 приведены примеры селекции линий поглощения. Видно, что число линий после первой селекции может уменьшаться более чем на порядок. Высотная селекция (см. табл. 2) для слоя 0–40 км наиболее эффективна для водяного пара, так как 90% влагосодержания атмосферы сосредоточено в нижнем 5-километровом слое.

Т а б л и ц а 1

Общая селекция линий поглощения

Интервал, см^{-1}	Общее количество линий HITRAN-91	Газы	Количество линий после селекции
4723–4764	1324	все	703
4000–4050	1956	все	124
500–1300	118913	первые 6 газов	11819

Т а б л и ц а 2

Высотная селекция линий поглощения. Слой 0–40 км

Высота, км	Количество линий		
	H_2O (10095–10105 см^{-1})	CO_2 (721,5–722,5 см^{-1})	O_3 (1039,5–1040 см^{-1})
0	19	157	205
5	4	95	194
10	1	66	181
20	0	35	113
30	0	17	86
40	0	12	35

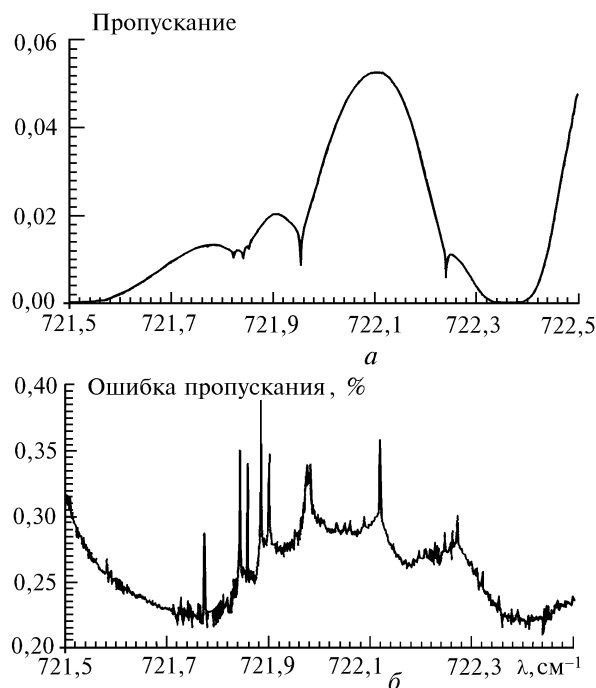


Рис. 2. Спектр пропускания CO_2 в слое 0–50 км – а, относительная погрешность пропускания, возникающая вследствие отбрасывания линии поглощения по критериям (1)–(3) – б

На рис. 2 приведен спектр пропускания CO_2 слоя 0–50 км (а) и относительная погрешность пропускания (б), возникающая вследствие отбрасывания линии поглощения по критериям (1)–(3). Погрешность не превосходит 0,4%.

При некоторых условиях моделирования погрешность спектрального пропускания за счет селекции линий поглощения может достигать нескольких процентов (например, для пропускания озона в слое 0–50 км в интервале 1039,5–1040 cm^{-1} она достигает 3%). Однако эта погрешность не оказывает существенного влияния на точность расчета интегрального пропускания (погрешность интегрального пропускания во всех рассматриваемых примерах не превосходит 0,5%). Кроме того, при необходимости она может быть уменьшена за счет соответствующего выбора пороговых величин ε и δ в формулах (1)–(3). Выигрыш во времени счета, который дает селекция, может составлять при определенных условиях до порядка величины и более.

2. Оптимизация частотной сетки

При расчете интегрального пропускания необходимо вычислять спектральное пропускание (подынтегральную функцию) на некоторой сетке частот. Как правило, используется равномерная сетка, с помощью которой можно обеспечить высокую точность расчета интегрального пропускания, при этом затраты времени счета обратно пропорциональны шагу сетки.

В последние годы широко используются алгоритмы на основе сеток с неравномерным адаптивным шагом, учитывающих осциллирующее поведение подынтегральной функции [4, 5, 9–12]. Мы используем здесь более эффективный многосеточный метод, предложенный одним из авторов [9, 10]. Суть этого метода состоит в том, что вместо неравномерной по частоте сетки используется серия равномерных сеток, шаг которых уменьшается по правилу $h_l = h_0 2^l$, где h_0 – шаг самой мелкой сетки; l – номер сетки. В качестве h_0 мы обычно используем $\gamma_v/4$, где γ_v – фойгтовская полуширина линии.

Коэффициенты поглощения рассчитываются только в узлах сеток, при этом по мере удаления от центра линии увеличивается номер сетки. Для расчета коэффициентов поглощения на промежуточных частотах применяется линейная либо квадратичная интерполяция. Многосеточный метод позволяет максимально сократить время счета спектрального пропускания в заданном диапазоне спектра $\Delta\nu$ при сохранении требуемой точности.

Заметим, что этот метод оптимизации частотной сетки близок к методу, используемому в [13]. Аналогом сеток с различным шагом h_l в [13] являются функции $Q_l(\nu)$, на которые раскладывается исходный контур линий поглощения $f(\nu)$, при этом шаг изменяется кратно четырем.

Выигрыш во времени, который дает такой многосеточный алгоритм, также может составлять более порядка величины [9, 10].

3. Редукция к однородной трассе

Наибольшие затраты времени счета требуются при вычислении интегрального пропускания неоднородной трассы. В этом случае для каждого узла частотной сетки необходимо вычислять интеграл по высоте. При минимальном шаге $h_0 = \gamma_d/4$ в области длин волн 10 мкм и использовании 11 сеток число узлов составляет приблизительно 90 в интервале $\Delta\nu = 1 \text{ см}^{-1}$. Самый крупный шаг при этом составляет около $0,25 \text{ см}^{-1}$. При увеличении интервала частот $\Delta\nu$ до 10 потребуется еще около 40 узлов. Количество интегралов по высоте в этом случае составит приблизительно $130 N$, где N – число линий поглощения.

Для уменьшения времени счета можно воспользоваться идеей Куртиса—Годсона [14] замены неоднородной трассы эквивалентной однородной. Известно, что при этом возникают два параметра: первый имеет смысл поглощающей массы U_{ij} , второй – средневзвешенного давления, или средневзвешенной полуширины $\overline{\gamma}_{ij}$, равной

$$U_{ij} = \int_{z_1}^{z_2} S_{ij} \rho_j dz; \quad \overline{\gamma}_{ij} = \int_{z_1}^{z_2} S_{ij} \gamma_{ij} \rho_j dz / \int_{z_1}^{z_2} S_{ij} \rho_j dz, \quad (4)$$

где S_{ij} , $\overline{\gamma}_{ij}$ – интенсивность и полуширина i -й линии j -го газа. Результаты моделирования показали, что при таком определении параметра $\overline{\gamma}_{ij}$ удастся правильно описать лишь крыло редуцированной оптической толщи, занижая ее в центре линии. Мы используем другое определение параметра $\overline{\gamma}_{ij}$, рассчитываемого на основе двух асимптотических приближений – по крылу и центру линии. Возникающие при этом параметры U_{ij} и $\overline{\gamma}_{ij}$ в случае лоренцевского контура имеют вид

$$U_{ij} = \int_{z_1}^{z_2} S_{ij} \gamma_{ij} \rho_j dz; \quad \overline{\gamma}_{ij}^2 = U_{ij} / \left[\int_{z_1}^{z_2} (S_{ij} \rho_j / \gamma_{ij}) dz \right]. \quad (5)$$

Нетрудно определить параметры U_{ij} , $\overline{\gamma}_{ij}$ и для фойгтовского контура.

Редуцированная оптическая толщина для лоренцевского контура имеет вид

$$\tau_{ij} = U_{ij} / \{ \pi[(\nu - \nu_{ij})^2 + \overline{\gamma}_{ij}^2] \}. \quad (6)$$

Из (5) и (6) видно, что для редуцированной оптической толщи требуется вычислять всего два интеграла по высоте для каждой линии поглощения (для фойгтовского контура – три интеграла для каждой линии), что позволяет существенно снизить затраты времени счета.

Выполненные расчеты пропускания в разных участках спектра показали, что погрешность редукции не превосходит 0,5%, давая при этом выигрыш во времени в 4–5 раз.

Заключение

В результате объединения в одной вычислительной схеме таких мощных способов ускорения полинейного счета, какими являются селекция линий поглощения, многосеточный алгоритм и редукция неоднородной трассы к однородной, создан новый алгоритм расчета пропускания, являющийся на сегодняшний день одним из самых быстрых из известных в литературе.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований в рамках пректа 94-01-01328.

1. Мицель А.А., Пташник И.В., Фирсов К.М., Фомин Б.А. Эффективный метод полинейного счета пропускания и радиации поглощающей среды / Тез. докл. 2-го межреспубликанского симпозиума по оптике атмосферы и океана. Томск. 1995. С. 31–32.
2. Report on the ITRA, International Radiation Commission Working Group on Remote Sensing / Edited by A. Chedin, H. Fisher, K. Kunzi, D. Spaukuch, N.A. Scott. University of Maryland. 1988. 220 с.
3. Rothman L.S., Gamache R.R., Tipping R.H., Rinsland C.P., Smith M.A., Benner D.C., Devi V.M., Flaud J.M., Camy-Peyret C., Perrin A., Goldman A., Massie S.T., Brown L.R., and Toth R.A. The HITRAN Molecular database: editions of 1991 and 1992 // J.Q.S.R.T. 1992. V. 48. P. 469–507.
4. Мицель А.А., Руденко В.П. Пакет прикладных программ для расчета энергетических потерь оптического излучения в атмосфере – Препринт – Томск, 1988. – 56 с. (ТФ СО АН СССР, N 57).
5. Афонин С.В., Гендрин А.Г. Информационно-программное обеспечение задач атмосферной оптики / Под ред. Г.М. Крекова. Новосибирск: Наука, 1988. С. 38–65.
6. Мицель А.А., Фирсов К.М. Эффективный метод прямого счета молекулярного поглощения // Оптика атмосферы и океана. 1994. Т. 7. N 10. С. 1437–1440.
7. Mitsel A.A., Firsov K.M. A Fast *Line-by-line* Method // J.Q.S.R.T. 1995 (in press).
8. Матвеев В.С. // Журн. прикл. спектроскопии. 1972. Т. 16. Вып. 2. С. 228.
9. 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.
10. Фомин Б.А., Троценко А.Н., Романов С.В. Эффективные методы расчета оптических свойств газообразных сред // Оптика атмосферы и океана. 1994. Т. 7. N 9. С. 1457–1462.
11. Oinas Valdar // J.Q.S.R.T. 1981. V. 26. N 4. P. 381–384.
12. Oinas Valdar // J.Q.S.R.T. 1983. V. 29. N 5. P. 407–411.
13. Smith H.J.P., Dube D.J., Gardner M.E., Clough S.A., Kneizys F.X., and Rothman L.S. FASCOD – Fast Atmospheric Signature Code (Spectrum Transmittance and Radiance). AFGL-TR-78-0081 (1978). 140 с.
14. Гуди Р. Атмосферная радиация. М.: Мир, 1966. 522 с.

Институт оптики атмосферы СО РАН,
Томск

Поступила в редакцию
17 июля 1995 г.

A.A. Mitsel, I.V. Ptashnik, K.M. Firsov, B.A. Fomin. **Efficient Procedure for *Line-by-line* Computation of the Absorbing Atmosphere Transmittance.**

A new procedure for computation of transmittance is developed, which includes the recent advances in the *line-by-line* method. The procedure speedup is gained due to the absorption lines preselection, frequency spectrum optimization, and an inhomogeneous path reduction to the equivalent homogeneous one.