

## Расчет функций пропускания при малых давлениях

**С.Д. Творогов, О.Б. Родимова\***

*Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН  
634021, г. Томск, пл. Академика Зуева, 1*

Поступила в редакцию 5.08.2008 г.

Получены аналитические выражения для коэффициентов ряда экспонент  $s(g)$  в случае одной линии с лорентцевским, доплеровским и фойгтовским контурами. Предложен способ оценки функции поглощения при малых давлениях, основанный на асимптотической оценке представляющего ее интеграла, записанного с помощью ряда экспонент для одной линии и для произвольного числа линий. На численных примерах показано, что асимптотические оценки могут быть использованы в широкой области давлений и просты в применении. Приведены качественные оценки области их применимости. Показано наличие на кривой  $s(g)$  точек перегиба в точках, отвечающих максимумам линий, и отмечено их возможное влияние на точность расчета при малых давлениях.

*Ключевые слова:* ряды экспонент, малые давления, асимптотические оценки пропускания.

### Введение

Климатические модели предъявляют высокие требования к расчетам распространения излучения в атмосфере.

*Line-by-line*-расчеты поглощения атмосферными газами с правильным контуром спектральных линий являются подходящими по точности, однако совершенно неприемлемы в радиационных блоках климатических моделей, так как требуют необозримого количества времени.

Решение проблемы точного расчета оказалось возможным при использовании разложений радиационных величин в ряды экспонент. Этот прием, называемый также методом  $k$ -распределения, является сейчас наиболее распространенным при рассмотрении радиационных свойств атмосферы. Как правило, способы нахождения коэффициентов таких разложений сводятся к различным методам минимизации, т.е. к чисто вычислительной процедуре. Алгоритмы, использующие ряды экспонент в больших моделях, сталкиваются с некоторыми трудностями, когда необходимо производить расчеты при малых давлениях в высоких слоях атмосферы. Это связано с тем, что из-за специфического поведения упорядоченных коэффициентов поглощения при малых давлениях нужно учитывать большое число членов ряда экспонент для достижения необходимой точности.

Наиболее рельефно эта проблема очерчена в работе Chou et al. [1]. Так, при вычислении функции пропускания для водяного пара было

показано, что вклад в скорость выхолаживания при давлениях меньше 1 мбар происходит от очень малой доли ( $<0,005$ ) спектра вблизи центров полос поглощения, где коэффициенты поглощения меняются на 4 порядка величины. Это требует по крайней мере 100 членов в  $k$ -распределении, чтобы точно вычислить скорость выхолаживания.

В одной из наиболее разработанных моделей радиационного переноса [2] ИК-диапазон ( $10\text{--}3000\text{ см}^{-1}$ ) делится на 16 участков-полос. Каждая спектральная полоса разделена, в свою очередь, на 16 интервалов в  $g$  пространстве. Из них 7 интервалов помещены между  $g = 0,98$  и  $g = 1,0$ , что сделано для того, чтобы точно определить скорость выхолаживания в обстоятельствах, когда основной вклад вносят центры линий в полосе, иными словами, доля  $k$ -распределения, имеющая значения  $g$  около 1. Очевидным образом получается, что вычислительные усилия становятся тем больше, чем меньше коэффициент поглощения и, соответственно, меньше его вклад в функцию пропускания. Такое положение вызывает ощущение нерациональности происходящего, когда для расчета малых величин требуется больше времени, чем для больших.

Типичный вид коэффициента поглощения показан на рис. 1 для части спектра  $\text{CO}_2$  при больших и малых давлениях. При малых давлениях, очевидно, поглощение определяется узкими участками спектра вблизи сильных линий. Это отражается и в различии поведения  $s(g)$  (рис. 2) для того же участка спектра.

С уменьшением давления (см. рис. 1 и 2) кривые  $s(g)$  (оставаясь, естественно, монотонными) резко возрастают в окрестности  $g = 1$ , как и говорилось выше, и определяются «вершинами» наиболее сильных в рассматриваемом интервале линий.

\* [Станислав Дмитриевич Творогов; Ольга Борисовна Родимова (rod@iao.ru)].

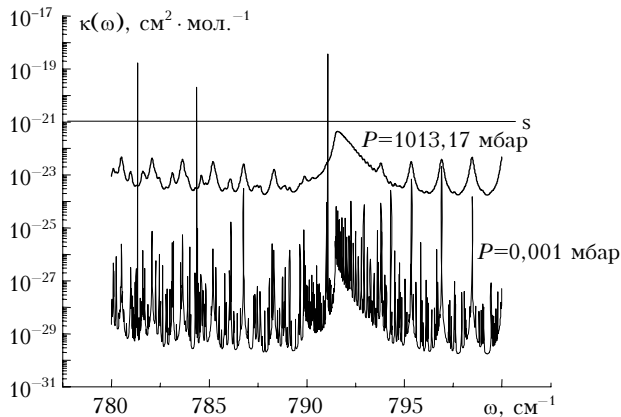


Рис. 1. Коэффициент поглощения CO₂.  $T = 296$  К, лорентцевский контур до  $10 \text{ см}^{-1}$ , шаг =  $0,001 \text{ см}^{-1}$ ; интервал  $780\text{--}800 \text{ см}^{-1}$

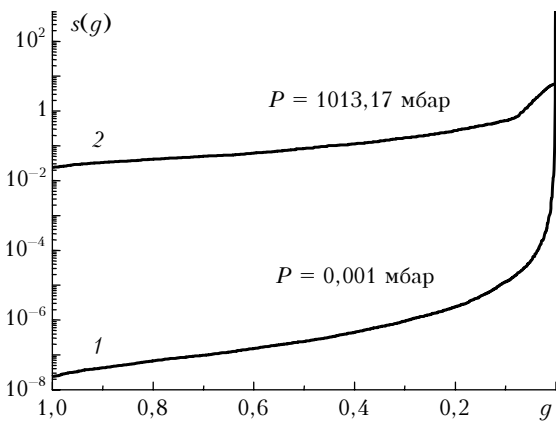


Рис. 2. Функция  $s(g)$  для CO₂.  $T = 296$  К, лорентцевский контур до  $10 \text{ см}^{-1}$ , шаг =  $0,001 \text{ см}^{-1}$ ; интервал  $780\text{--}800 \text{ см}^{-1}$

Здесь следует отметить, что в отличие от обычно применяемой для нахождения  $s(g)$  минимизации существуют точные формулы для коэффициентов разложения радиационных величин в ряды экспонент [3], выражающие их через коэффициенты поглощения, которые позволяют значительно упростить необходимые вычисления. Более того, развиваемый авторами [3] подход позволяет по-новому рассмотреть и проблемы, связанные с ситуацией малых давлений в средней и верхней атмосфере.

В разд. 1 получены аналитические выражения для  $s(g)$  для лорентцевского, доплеровского и фойгтовского контуров в случае одной линии. В разд. 2 представлена асимптотическая оценка для функции пропускания одной линии с использованием  $s(g)$ , полученных в разд. 1. В разд. 3 предлагаемый асимптотический прием обобщен на случай наличия в рассматриваемом интервале произвольного числа линий.

## 1. Значения $s(g)$ для изолированной линии

Приведем общие формулы для коэффициентов разложения радиационных величин в ряды экспонент, выражающие их через коэффициенты поглощения (см., например, [3–5]).

Функция пропускания  $P(\omega)$  в интервале частот  $\Delta\omega = \omega'' - \omega'$  имеет вид

$$P(z) = \frac{1}{\Delta\omega} \int_{\omega'}^{\omega''} e^{-z\kappa(\omega)} d\omega = \int_0^1 ds f(s) e^{-sz} = \int_0^1 dg e^{-zs(g)} = \sum_v b_v e^{-zs(g_v)}; \quad (1)$$

$$f(s) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} dz P(z) e^{sz}; \quad (2)$$

$$g(s) = \int_0^s f(s) ds = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \frac{P(z)}{z} e^{sz} dz = \frac{1}{\Delta\omega} \int_{\kappa(\omega) < s; \omega \in [\omega', \omega'']} d\omega = 1 - \frac{1}{\Delta\omega} \int_{\kappa(\omega) > s; \omega \in [\omega', \omega'']} d\omega, \quad (3)$$

где  $z$  — оптическая толщина;  $\kappa(\omega)$  — спектральный коэффициент поглощения;  $f(s)$  — преобразование Лапласа  $P(z)$ ;  $g(s)$  — преобразование Лапласа функции  $P(z)/z$ ;  $s(g)$  — функция, обратная  $g(s)$ ;  $s(g)$  есть упорядоченные по величине значения  $\kappa(\omega)$  для  $\omega \in [\omega']$ ;  $b_v, g_v$  — ординаты и абсциссы соответствующей квадратурной формулы. Построение функции  $g(s)$  иллюстрирует рис. 3.

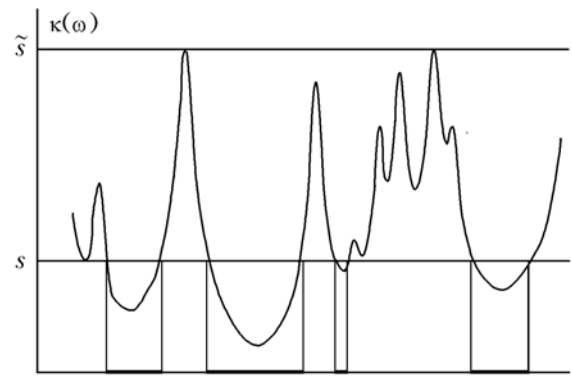


Рис. 3. Схема интегрирования для  $g(s)$ . Для заданного  $s$  значение  $g$  представляет собой сумму интервалов, в которых  $\kappa(\omega) < s$

Соотношение (3) позволяет получить аналитические выражения для  $s(g)$  одной линии в случае наиболее употребительных контуров — лорентцевского, доплеровского и фойгтовского. Рассмотрим несколько способов получения  $s(g)$ . Один из них — использование в соотношении (3) определения  $g$  как суммы интервалов частот, в которых  $\kappa(\omega) < s$ .

Пусть имеем лорентцевский контур (рис. 4),  $Q, \alpha, \omega_0$  — интенсивность, столкновительная полуширина и центр спектральной линии;  $\Delta\omega = \omega_2 - \omega_1$  — спектральный интервал, в котором рассматривается поглощение:

$$\kappa(\omega) = \frac{Q\alpha}{\pi} \frac{1}{(\omega - \omega_0)^2 + \alpha^2}. \quad (4)$$

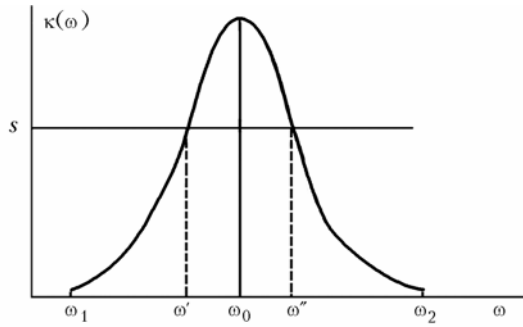


Рис. 4. К расчету  $s(g)$  для лорентцевского контура

Для некоторого значения  $s$  коэффициента поглощения

$$s = \frac{Q\alpha}{\pi} \frac{1}{(\omega - \omega_0)^2 + \alpha^2},$$

откуда

$$(\omega - \omega_0) = \pm \sqrt{\frac{Q\alpha}{\pi s} - \alpha^2} \quad \text{и} \quad \omega' - \omega'' = 2\alpha \sqrt{\frac{Q}{\pi s\alpha} - 1}.$$

Доля интервала, в которой  $k > s$ :

$$g(s) = \frac{\omega' - \omega''}{\Delta\omega} = \frac{2\alpha}{\Delta\omega} \sqrt{\frac{Q}{\pi s\alpha} - 1}. \quad (5)$$

Отсюда точная формула для  $s(g)$  в случае одной линии с лорентцевским контуром

$$s(g) = \frac{Q}{\pi\alpha} \frac{1}{1 + \left(\frac{\Delta\omega}{2\alpha}\right)^2 (1-g)^2}. \quad (6)$$

Для доплеровской линии с полушириной  $\Delta\omega_D$

$$I(\omega) = \frac{1}{\sqrt{\pi}\Delta\omega_D} \exp\left[-\left(\frac{\omega - \omega_0}{\Delta\omega_D}\right)^2\right] \quad (7)$$

имеем аналогичным образом

$$s = \frac{Q}{\sqrt{\pi}\Delta\omega_D} \exp\left[-\left(\frac{\omega - \omega_0}{\Delta\omega_D}\right)^2\right],$$

$$g = 1 - 2 \frac{\Delta\omega_D}{\Delta\omega} \sqrt{\ln\left(\frac{Q}{s\sqrt{\pi}\Delta\omega_D}\right)},$$

$$s(g) = \frac{Q}{\sqrt{\pi}\Delta\omega_D} \exp\left[-\left(\frac{(1-g)^2 \Delta\omega_D^2}{4\Delta\omega_D^2}\right)\right]. \quad (8)$$

Выражение (6) может быть также получено непосредственно из формулы (3) с помощью определения  $g$  как интеграла от  $P(z)/z$  путем замены переменных

$$\omega - \omega_0 = \alpha \operatorname{tg} \varphi, \quad d\omega = \frac{\alpha}{\cos^2 \varphi} d\varphi$$

и оценки затем получившегося контурного интеграла. Однако имеется еще более простой способ записи  $s(g)$ , применимый для любого симметричного контура.

Пусть  $s = \varphi(x)$  — четная функция безразмерной переменной  $x$  (рис. 5). Очевидно, величина промежутка  $[a, b] = 2x$  [ $x = \varphi^{-1}(s)$  по определению обратной функции].

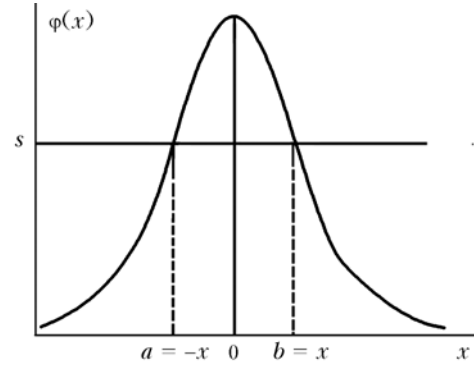


Рис. 5. К построению  $s(g)$  для произвольной четной функции  $\varphi(x)$

С другой стороны,  $[a, b] = 1 - g$  [по определению (3)], откуда

$$\frac{1-g}{2} = \varphi^{-1}(s) \quad \text{или} \quad s = \varphi\left(\frac{1-g}{2}\right).$$

Если теперь рассмотреть контур линии  $f(\omega - \omega_0)$  и перейти в нем к переменной  $x$ :

$$\omega - \omega_0 = ax, \quad \text{то} \quad f(\omega - \omega_0) = f(ax) \equiv \varphi(x).$$

Можно записать  $\frac{1-g}{2} = \frac{\Delta\omega}{a}$ , где  $\Delta\omega$  — интервал рассматриваемых частот. Тогда

$$f(\omega - \omega_0) = f\left(\frac{(1-g)\Delta\omega}{2}\right), \quad s(g) = f\left(\frac{(1-g)\Delta\omega}{2}\right), \quad (9)$$

т.е. функция  $s(g)$  получается при замене в выражении для контура разности  $\omega - \omega_0$  на  $\frac{(1-g)\Delta\omega}{2}$ .

Как видно, выражения для лорентцевского и доплеровского контуров подтверждают это правило. Теперь может быть непосредственно записано выражение для  $s(g)$  в случае фойгтовского контура.

Контур Фойгта имеет вид

$$\begin{aligned} \kappa(\omega - \omega_0) &= \frac{Q}{\omega_i} \left(\frac{mc^2}{2\pi kT}\right)^{1/2} \left(\frac{a}{\pi}\right) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-y^2}}{a^2 + (\xi - y)^2} dy = \\ &= \frac{Q}{\beta} (\ln 2)^{1/2} \left(\frac{a}{\pi}\right) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-y^2}}{a^2 + (\xi - y)^2} dy; \end{aligned} \quad (10)$$

$$a = \frac{\alpha}{\omega_0} \left(\frac{mc^2}{2\pi kT}\right)^{1/2} = \frac{\alpha}{\Delta\omega_D} (\ln 2)^{1/2}.$$