

А.А. Мицель, К.М. Фирсов

ЭФФЕКТИВНЫЙ МЕТОД ПРЯМОГО СЧЕТА МОЛЕКУЛЯРНОГО ПОГЛОЩЕНИЯ

Предлагается быстрый способ расчета характеристик молекулярного поглощения методом line-by-line, включающий достижения известных современных алгоритмов ускорения счета при использовании неравномерной сетки по длинам волн, и разработанный критерий селекции спектральных линий. Селекция осуществляется по величине оптической толщи и наиболее эффективна для неоднородной атмосферной трассы, так как с ростом высоты число линий сокращается.

Интерес специалистов к проблеме оптимизации расчетных схем метода прямого счета молекулярного поглощения связан с все более широким использованием его в задачах атмосферной оптики. Проведенный анализ известных на сегодня алгоритмов и пакетов программ [1 – 12] выявил ряд факторов, влияющих на скорость счета. В данной работе рассмотрена селекция спектральных линий, которая позволяет отбросить слабые линии, не вносящие заметный вклад в поглощение и процедуры численного интегрирования.

Количество спектральных линий в современных базах данных весьма значительно, однако реальный вклад в поглощение дают не все. В связи с этим весьма актуальным является создание эффективных алгоритмов для селекции спектральных линий. Наиболее простые основаны на том, что отбрасываются слабые линии, интенсивность которых меньше некоторой критической величины, которая эмпирически подбирается, другие основаны на оценках коэффициентов поглощения или оптической толщи. Наш анализ показал, что любой из этих критериев [4, 7, 12] недостаточно эффективен.

Погрешность пропускания за счет отброшенных линий можно оценить по формуле

$$\Delta T(\nu)/T(\nu) = \Delta\tau_\nu, \quad (1)$$

где $\Delta T(\nu)$ – абсолютная погрешность спектрального пропускания $T(\nu)$; $\Delta\tau_\nu$ – оптическая толщина отброшенных спектральных линий, которая определяет погрешность расчета $T(\nu)$, является величиной интегральной и зависит не только от интенсивности спектральных линий, но и от профиля концентрации газа. Известные на сегодня критерии селекции по τ основаны лишь на отбрасывании линий, оптическая толщина которых $\tau(z_1, z_2)$ меньше некоторой пороговой величины ε (где z_1, z_2 – нижняя и верхняя высотные границы соответственно). При таком критерии селекции исключаются только самые слабые линии. Однако среди оставшихся линий всегда есть такие, которые нет необходимости учитывать на всех высотах. Отличие нашего алгоритма состоит в том, что мы оцениваем оптическую толщину слоя $z - z_2$, где z – текущая высота. Для каждой i -й линии определяется высота z_{0i} , для которой выполняется условие

$$\tau(z_{0i}, z_2) \leq \varepsilon. \quad (2)$$

При расчете коэффициентов поглощения i -я линия учитывается только до высоты z_{0i} . Поэтому с ростом высоты количество спектральных линий уменьшается. Моделирование показало, что этот алгоритм наиболее эффективен для газов типа H_2O , концентрация которых быстро спадает в зависимости от высоты. Для газов, таких как CO_2 , концентрация которых спадает более медленно или даже растет с высотой, как у O_3 , линии учитываются до больших высот, но тем не менее наш алгоритм достаточно эффективен. В таблице приведена типичная ситуация для среднего ИК-диапазона, иллюстрирующая работу нашего критерия селекции линий. Из таблицы видно, что с ростом высоты число узлов m_0 по частоте при равномерной

частотной сетке растет, что обусловлено уменьшением полуширины линии с ростом высоты. Время расчета спектральной зависимости коэффициента поглощения на выделенной высоте пропорционально $m \cdot m_0$, поэтому даже для озона на высоте 40 км время счета уменьшилось более чем в 5 раз. Для водяного пара в данном случае учет линии поглощения при расчете пропускания в слое 0–50 км достаточно проводить только до высоты $z=10$ км. Таким образом, наш критерий позволяет не только проводить селекцию линий, но и в ряде случаев для наклонных атмосферных трасс автоматически определять верхнюю границу, до которой следует проводить расчеты функций пропускания.

При нахождении характеристик молекулярного поглощения с низким спектральным разрешением необходимо рассчитать спектр в этом интервале длин волн. Как правило, применяется равномерный шаг по частоте, однако имеется ряд алгоритмов [4, 7, 10, 13, 14], которые используют адаптивные процедуры численного интегрирования с неравномерным шагом для сокращения числа узлов интегрирования. Адаптивная процедура интегрирования по частоте, используемая в [7], позволяет получить высокую точность. Величина шага определяется относительной точностью спектрального пропускания. Это приводит к необоснованно малому шагу в области сильного поглощения, хотя эти спектральные диапазоны дают небольшой вклад в функцию пропускания. Этот недостаток позволяет исключить адаптивная процедура, используемая авторами [4]. Однако тестирование, проведенное нами, показало, что в этом алгоритме требуется задавать необоснованно высокую точность расчета, в противном случае возможен пропуск линий. Оригинальный способ разбиения частотного интервала предложен в [13, 14]. Частотный шаг определяется через эквивалентную ширину линий, что позволяет в области сильного поглощения использовать редкий шаг. Этот алгоритм высокоэффективен при расчете пропускания атмосферы для фиксированного диапазона высот $z_1 - z_2$. Изменение высотного диапазона приводит к изменению частотной сетки, что ведет к усложнению алгоритма расчета пропускания, а также к дублированию расчетов коэффициентов поглощения.

Количество линий m , учитываемых при расчетах коэффициента поглощения на разных высотах, и количество узлов по частоте m_0 , в которых вычисляется спектральное пропускание

z , км	m_0	m		
		H ₂ O	CO ₂	O ₃
0	30	19	157	205
5	59	4	95	194
10	117	1	66	181
20	465	0	35	113
30	929	0	17	86
40	929	0	12	35

По нашему мнению, наиболее эффективные методы разбиения частотного интервала предложены в [1, 10], в которых вместо неравномерной сетки по частотам авторы предлагают серию сеток с равномерным шагом: мелкий шаг для центра линии и крупный – для крыла. Следует подчеркнуть, что для реализации такого алгоритма авторам [1] пришлось использовать аппроксимацию для контура линии поглощения типа [17], которая в ряде случаев может давать заметные погрешности, тогда как методика [10] допускает любую форму контура.

В настоящее время мы пока реализовали алгоритм, использующий равномерное разбиение частотного интервала. Причем шаг по частоте пропорционален фойгтовской полуширине спектральной линии. С ростом высоты в ИК-диапазоне спектра полуширина линии уменьшается, что приводит к уменьшению шага по частоте и увеличению их числа. Таким образом, коэффициент поглощения на малых высотах, где фойгтовская полуширина большая, рассчитывается для небольшого количества точек, а с ростом высоты количество точек возрастает. В нашем алгоритме величина шага может меняться только дискретно делением первоначального шага по частоте пополам. Это позволяет использовать достаточно простую схему интерполяции Лагранжа с заранее вычисленными коэффициентами для пересчета коэффициентов поглощения или оптической толщи на новую сетку. Из вышесказанного следует, что наибольшую проблему для расчета представляют большие высоты, на которых спектральные линии очень узкие и требуются специальные алгоритмы для сокращения объема вычислений.

В дальнейшем мы предполагаем модифицировать наш алгоритм расчета, включив в него методику разбиения частотного интервала, описанную в [10], что позволит получить парадоксальный, на первый взгляд, результат – с ростом высоты скорость вычислений будет возрастать.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (Код проекта 94–01–01328–В).

1. Smith H.J.P., Dube D.J., Gardner M.E., Glough S.A., Kneizys F.X., and Rothman L.S. AFGL–TR–78–0081, 1978.
2. Clough S.A., Kneizys F.X., Rothman L.S., and Gallery W.O. // Proc. of SPIE. 1981. V. 227.
3. Edwards D.P. // SPIE. 1988. V. 928. P. 94 – 116.
4. Афонин С.В., Гендрин А.Г. // Информационно-программное обеспечение задач атмосферной оптики. Под ред. Г.М. Крекова. Новосибирск: Наука, 1988. С. 38 – 65.
5. Гендрин А.Г., Новикова Н.В., Поспелова Е.И. Информационно-диалоговая система атмосферной коррекции данных дистанционного зондирования параметров подстилающей поверхности. Томск, 1989. 74 с. (Препринт / ТФ СО АН СССР. N 22).
6. Зуев В.Е., Макушкин Ю.С., Мицель А.А. и др. // ДАН СССР, 1985. Т. 283. N 2. С. 345 – 348.
7. Мицель А.А., Руденко В.П. Пакет прикладных программ для расчета энергетических потерь оптического излучения в атмосфере. Томск: ТФ СО РАН, 1988. 56 с. (Препринт / Изд-е ТФ СО АН СССР, N 57).
8. Rebache P., Rebour B. // Infrared Phys. 1982. V. 22. N 1. P. 1 – 7.
9. Scot N.A., Shaden A.A. // J. of Appl. Meteor. 1981. V. 20. P. 802 – 812.
10. Fomin B.A. Effective line-by-line technique to compute radiation absorption in gases. / Preprint IAE–5658/1. Moscow, Russian Research Centre <Kurchatov Institute>, 1993. 13 с.
11. Edwards D.P. // IAMAP 89, Fifth Scientific Assembly of the International Association of Meteorology and Atmospheric Physics. Brief review papers and abstract, 1989. P. TR-8 – TR-12.
12. Report on the ITRA. International Radiation Commission. Working Group on Remote Sensing. Edited by A. Chedin., H. Fisher., K. Kunzi., D. Spankuch., N.A. Scot. University of Maryland, 1988. 165 с.
13. Oinas Valdar // J. Quant. Spectr. and Radiat. Transf. 1981. V. 26. N 4. P. 381 – 384.
14. Oinas Valdar // J. Quant. Spectr. and Radiat. Transf. 1983. V. 29. N 5. P. 407 – 411.
15. Афонин С.В., Гапонов В.А., Гендрин А.Г. // Ж.П.С. 1984. Т. 39. N 2. С. 196 – 201.
16. Draisson S.R. // J. Quant. Spectr. and Radiat. Transf. 1976. V. 16. N 7. P. 611 – 614.
17. Матвеев В.С. // ЖПС. Т. 16. Вып. 2. 1972. С. 228.

Институт оптики атмосферы
СО РАН, Томск

Поступила в редакцию
12 июля 1994 г.

A.A. Mitsel, K.M. Firsov. **Efficient Technique for Direct Computation of Molecular Absorption.**

A quick procedure for molecular absorption computation by line-by-line technique is proposed, which includes the known up-to-date algorithms of reducing the computation time due to use of a nonuniform over wavelengths network as well as a developed criterion of the spectral lines selection. The selection is performed by the magnitude of the optical thickness being the most efficient in the case of inhomogeneous path due to reduction of lines quantity with the height.