

ПОГЛОЩЕНИЕ ОПТИЧЕСКИХ ВОЛН В ГАЗООБРАЗНЫХ СРЕДАХ

УДК 551.593.5.531.521.3

Б.А. Фомин, А.Н. Троценко, С.В. Романов

ЭФФЕКТИВНЫЕ МЕТОДЫ РАСЧЕТА ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ГАЗООБРАЗНЫХ СРЕД

Дан обзор способов повышения эффективности численных методов, используемых в задачах оптики атмосферы. Рассмотрены методы полинейного (LBL) расчета параметров селективного газового поглощения оптического излучения и его рассеяния на сферических частицах, а также LBL методы решения уравнения переноса длинноволновой и коротковолновой радиации в атмосфере. Представлены численные процедуры повышения эффективности этих методов и соответствующих вычислительных алгоритмов, приведены оценки их быстродействия.

Введение

Способы повышения эффективности полинейного (line-by-line) метода расчета селективного газового поглощения оптического излучения и алгоритмов вычисления параметров его рассеяния на аэрозольных (сферических) частицах, а также полинейных методов решения уравнений переноса длинноволновой и коротковолновой радиации в атмосфере, лежащие в основе пакета программ, разработаны авторами в последнее десятилетие для моделирования <ab initio> радиационных процессов в атмосфере. Эти программы с успехом применялись в климатических исследованиях, при решении задач космического зондирования атмосферы и в других проблемах, требующих повышенной точности и детального учета селективного газового поглощения. Их эффективность в ряде случаев превысила аналоги на несколько порядков. Так, расчет полей солнечного излучения в облачной плоскостратифицированной атмосфере потребовал у авторов 30 – 40 ч работы компьютера РС-486 [1] вместо 100 ч CYBER-205 [2]. Отдельные детали алгоритмов уже были опубликованы в серии статей, трудах конференций и препринтах. Однако их обзор представляется полезным как для специалистов по численному моделированию переноса оптического излучения, так и для специалистов в смежных областях.

Расчет поглощающих и рассеивающих свойств атмосферы

Вначале опишем полинейную технику вычисления коэффициента газового поглощения, позволяющую увеличить скорость расчетов на один-два порядка.

Монохроматический (объемный) коэффициент газового поглощения K_ν при волновом числе ν вычисляется по формуле

$$K_\nu = \sum_i f_i(\nu, \tilde{\nu}_i), \quad (1.1)$$

где $f_i(\nu, \tilde{\nu}_i)$ – профиль i -й спектральной линии с центром в точке $\tilde{\nu}_i$. Вклад далеких линий может быть учтен как <континуум> по методу, описанному еще в работе Дрэйсона [3]. Поэтому обычно в формуле (1.1) суммируются непосредственно не слишком удаленные линии, у которых $|\nu - \tilde{\nu}_i| < D \sim 10 \text{ см}^{-1}$. Вычисления K_ν , как правило, проводятся на однородной или неоднородной сетке волновых чисел, достаточно подробной для представления контура линии: т. е. с характерным шагом H , сравнимым с полушириной линии. Следовательно, при полинейных вычислениях в реальной атмосфере каждый контур вычисляется приблизительно $2 D/H \sim 10/0,001 = 10^4$ раз ($0,001 \text{ см}^{-1}$ – характерная ширина линии в верхней атмосфере), обуславливая большие затраты компьютерного времени. Использование неоднородной сетки, более частой у центров линии и разреженной в крыльях, позволяет несколько снизить число вычислений контура. Однако в сильных полосах, где линии расположены на расстояниях, сравнимых с их полуширинами, существенно снизить число точек вычисления контура с помощью одной сетки практически невозможно. Использование одной сетки, очевидно, всегда

приводит к большому перерасходу компьютерного времени, т.к. любой контур вычисляется на излишне подробных для него участках сетки вблизи центров других линий.

Принципиальная особенность описываемого здесь алгоритма есть набор сеток с удваивающимися шагами h_l :

$$h_0 = H, h_1 = H \cdot 2, h_2 = h_1 \cdot 2, \dots, h_l = H \cdot 2^l, \dots, l = 0, 1, \dots, L, v_j^{(l)} = v_{\text{start}} + h_l j, j = 0, 1, \dots, \quad (1.2)$$

где $v_j^{(0)} = v_j$ – наиболее подробная сетка; v_{start} – начальное волновое число; L – номер наиболее грубой сетки. Требуется только десяток сеток ($L = 10$) для расширения шага с 0,001 до 1 см⁻¹. Теперь контур каждой линии вычисляется независимо от наличия других линий всего примерно в 50 точках из этого набора сеток, как показано на рис. 1. Иначе говоря, для каждой линии формируется оптимальный набор интерполяционных узлов. Следует подчеркнуть, что суммирование (1.1) должно выполняться отдельно на каждой сетке $v_j^{(l)}$ для соответствующего сегмента контура:

$$\tilde{\varphi}_j^{(l)} = \tilde{\varphi}_j^{(l)} + f_i(v_j^{(l)}, \tilde{v}_i), \quad \varphi_{j+1}^{(l)} = \varphi_{j+1}^{(l)} + f_i(v_{j+1}^{(l)}, \tilde{v}_i), \quad \tilde{\varphi}_{j+2}^{(l)} = \tilde{\varphi}_{j+2}^{(l)} + f_i(v_{j+2}^{(l)}, \tilde{v}_i), \quad j = 0, 2, \dots, \quad (1.3)$$

где $\tilde{\varphi}_j^{(l)}$, $\varphi_j^{(l)}$, $\tilde{\tilde{\varphi}}_j^{(l)}$ – накопленные вклады других линий.

В каждой второй точке приходится рассматривать отдельно $\tilde{\varphi}_j^{(l)}$ и $\tilde{\tilde{\varphi}}_j^{(l)}$ из-за <разрывов> контура, показанных на рис. 1. После рассмотрения всех линий выполняется рекуррентная процедура, основанная на простых квадратичных интерполяциях, позволяющая в итоге получить искомый коэффициент газового поглощения в узлах самой подробной однородной сетки:

$$\begin{aligned} \tilde{\tilde{\varphi}}_m^{(l-1)} &= \tilde{\tilde{\varphi}}_m^{(l-1)} + \tilde{\tilde{\varphi}}_{m/2}^{(l)}; \quad \tilde{\varphi}_m^{(l-1)} = \tilde{\varphi}_m^{(l-1)} + \tilde{\varphi}_{m/2}^{(l)}, \\ \varphi_{m+1}^{(l-1)} &= \varphi_{m+1}^{(l-1)} + 0,375 \tilde{\varphi}_{m/2}^{(l)} + 0,75 \varphi_{(m/2)+1}^{(l)} - 0,125 \tilde{\tilde{\varphi}}_{(m/2)+2}^{(l)}, \\ \tilde{\varphi}_{m+2}^{(l-1)} &= \tilde{\varphi}_{m+2}^{(l-1)} + \varphi_{(m/2)+1}^{(l)}, \quad \tilde{\tilde{\varphi}}_{m+2}^{(l-1)} = \tilde{\tilde{\varphi}}_{m+2}^{(l-1)} + \varphi_{(m/2)+1}^{(l)}, \end{aligned} \quad (1.4)$$

$$\varphi_{m+3}^{(l-1)} = \varphi_{m+3}^{(l-1)} - 0,125 \tilde{\varphi}_{m/2}^{(l)} + 0,75 \varphi_{(m/2)+1}^{(l)} + 0,375 \tilde{\tilde{\varphi}}_{(m/2)+2}^{(l)},$$

$$\tilde{\varphi}_{m+4}^{(l-1)} = \tilde{\varphi}_{m+4}^{(l-1)} + \varphi_{(m/2)+2}^{(l)}, \quad \tilde{\tilde{\varphi}}_{m+4}^{(l-1)} = \tilde{\tilde{\varphi}}_{m+4}^{(l-1)} + \tilde{\varphi}_{(m/2)+2}^{(l)},$$

где $m = 0, 4, 8, \dots, l = L, L - 1, \dots, 1$.

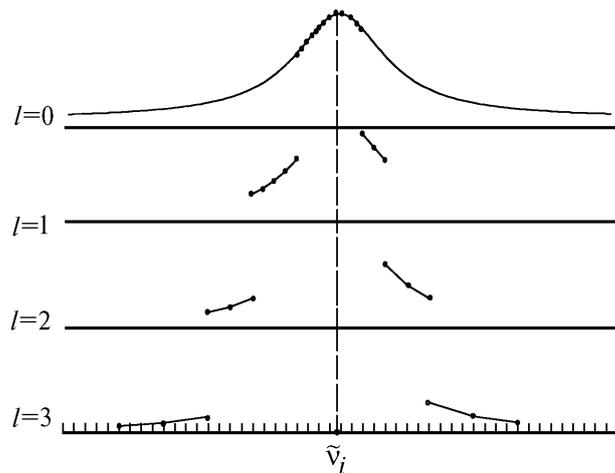


Рис. 1. Иллюстрация техники расчета K_v с помощью набора сеток

Прерывая эту процедуру в тех участках спектра, где на более мелких сетках накопленные вклады равны нулю (между редкими линиями), можно также получить неравномерную сетку, более эффективную для последующего использования при решении задач переноса. Интерполяционная процедура (1.3) проводится однократно и, как правило, за время, пренебрежимое по сравнению со временем всего расчета. Анализ интерполяционных погрешностей метода нетрудно осуществить, пользуясь примерной пропорциональностью контура функции $|v - \tilde{v}_i|^{-2}$, начиная с расстояний нескольких полуширин от центра. Можно показать, что эти погрешности (рис. 2) носят знакопеременный характер (что приводит их к частичной компенсации) и не превышают 7,8% (в крыльях). При этом погрешности относительно амплитуды контура и возникающие при вычислении площади контура составляют менее 1%. Такая точность достаточна для большинства практических вычислений. Она может быть легко увеличена введением дополнительной центральной точки на каждой сетке в (1.2) и переходом от (1.4) к процедуре, построенной на интерполяциях 4-го порядка. В этом случае погрешность снизится с 7,8 до 0,4%. В итоге описанная техника увеличивает скорость вычислений до $10^4/50 \sim 100$ раз, хотя и требует в 2,5 раза большей памяти компьютера [4].

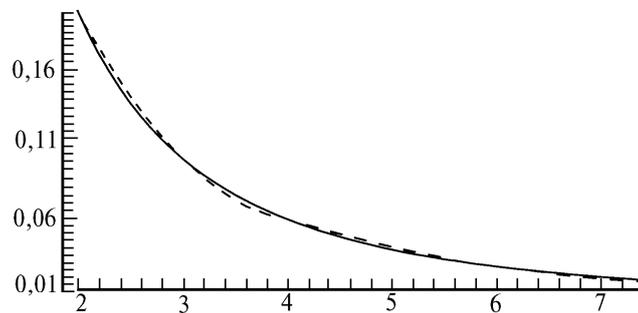


Рис. 2. Лоренцевский контур (нормированный на единицу), рассчитанный непосредственно (сплошная линия) и с помощью данной техники (штриховая линия) на расстояниях в единицах полуширины

Для полноты описания алгоритмов расчета взаимодействия оптического излучения и атмосферы полезно кратко рассмотреть рассеяние на аэрозольных частицах или облачных каплях. Здесь авторами применяются более традиционные подходы. Расчет осуществляется с помощью алгоритмов Дейрменджана [5] на основе рядов Ми, позволяющих получить точные параметры рассеяния на сферических однородных частицах. Однако для «больших частиц» (радиус частиц на один-два порядка и более превышает длину падающей волны) используется оптическое приближение. Такой подход, рекомендованный еще в работе Шифрина [6], позволяет не только на несколько порядков поднять скорость вычислений, но и сравнительно просто разрешить известные вычислительные трудности, связанные с необходимостью учета дифракционного пика в индикатрисе рассеяния.

2. Решение уравнений переноса радиации в атмосфере

В этом разделе дается краткое описание особенностей решения уравнений переноса радиации в атмосфере на основе линейных интерполяций по вертикали монохроматического коэффициента поглощения $K_\nu(Z)$ и других величин. Этот подход развивался авторами в последние годы и показал существенно лучшую эффективность, чем традиционный, связанный с разбиением атмосферы на однородные слои. Расчет начинается с вычисления объемного коэффициента поглощения на уровнях Z_j (обычно через километр). Между уровнями коэффициент представляется в виде

$$K_\nu(Z) = \alpha_\nu^j + \beta_\nu^j Z, \quad 1 \leq j \leq N, \quad (2.1)$$

где $Z_j \leq Z \leq Z_{j+1}$, а N — число уровней.

Числа α_ν^j и β_ν^j легко находятся из решения системы двух линейных уравнений, получаемых рассмотрением (2.1) на уровнях Z_j и Z_{j+1} . Выражение (2.1) позволяет избежать численного интег-

рирования по Z при вычислении оптических толщин. Так, интегрируя аналитически (2.1), получим алгебраическую формулу для оптической толщины слоя между уровнями Z_j и Z_{j+1}

$$\tau_v(Z_j, Z_{j+1}) = \alpha_v^j (Z_{j+1} - Z_j) + \beta_v^j 0,5 (Z_{j+1}^2 - Z_j^2). \quad (2.2)$$

Обобщение (2.2) для расчета оптических толщин любых слоев, оптических глубин, оптических путей фотонов и т. п. представляется совершенно очевидным и дает довольно быстрые реализации на компьютере.

При расчете интегральных характеристик переноса (потоков, интенсивностей, притоков) длинноволновой радиации используются интегралы (по частоте и пространству) Шварцшильда [7], представляющие запись решения соответствующего уравнения переноса в пренебрежении процессами рассеяния. При их численном интегрировании возникают трудности, связанные с большим разбросом длин пробегов фотонов в атмосфере из-за селективного газового поглощения. Так, длина пробега фотона с частотой, приходящейся на центр сильной линии, может сокращаться до нескольких сантиметров, в связи с этим для интегрирования требуются нереализуемые на практике пространственные сетки. Эта задача решается с помощью тождества

$$\int_H^{\dots} dz B_{\Delta\nu} [T(Z)] \varphi(Z) \equiv B_{\Delta\nu} [T(H)] \int_H^{\dots} \varphi(Z) dZ + \int_H^{\dots} \{B_{\Delta\nu} [T(Z)] - B_{\Delta\nu} [T(H)]\} \varphi(Z) dZ, \quad (2.3)$$

где $B_{\Delta\nu}(T)$ – практически не зависящая от частоты на небольших интервалах $\Delta\nu$ ($\Delta\nu = 1 - 10 \text{ см}^{-1}$) функция Планка; T – температура, зависящая от высоты Z ; H – высота точки вычисления; $\varphi(Z)$ – результат интегрирования по частоте на интервале $\Delta\nu$ соответствующих функций от K_ν , τ_ν , входящих в интеграл Шварцшильда. Функция φ отлична от нуля лишь в области нескольких длин пробегов фотонов вокруг точки вычисления.

Первый интеграл в правой части (2.3) берется аналитически, а второй – численно на пространственных сетках с шагом 10 – 100 м, определяемых характерным масштабом, связанным с температурной стратификацией атмосферы. В случае сильного поглощения, когда пробег фотона становится менее 1 – 10 м, второй интеграл вообще можно не учитывать, т. к. произведение сомножителей в подынтегральной функции близко к нулю. Более подробно эта методика рассмотрена в [8].

Рассмотрим теперь универсальную методику, основанную на комбинации полинейной техники с методом Монте-Карло, что дает возможность <строгого> учета селективного газового поглощения в сложных рассеивающих средах типа облачной и запыленной атмосфер. Учет селективности резко усложняет задачу, вынуждая проводить вычисления со спектральным разрешением $0,001 \text{ см}^{-1}$ (см. предыдущий раздел), часто во всем коротковолновом диапазоне порядка 10^4 см^{-1} (см. пример [2], упоминавшийся во введении), что требует рассмотрения $10^4/10^{-3} = 10^7$ монохроматических уравнений переноса. Исходным является выражение для оптического пути $u_\nu(M^*)$ разыгрываемого фотона в произвольной точке M^* его траектории, представляющей ломаную с вершинами в точках рассеяния на высотах H_1, H_2, H_3, \dots и косинусами $\cos \alpha_1, \cos \alpha_2, \cos \alpha_3, \dots$ зенитных углов отрезков ломаной

$$u_\nu(M^*) = (\tau_\nu(H_2) - \tau_\nu(H_1)) / \cos \alpha_1 + (\tau_\nu(H_3) - \tau_\nu(H_2)) / \cos \alpha_2 + \dots, \quad (2.4)$$

где H_1 – высота верхнего уровня атмосферы; $\tau_\nu(H_1) = 0$; $\tau_\nu(H_2), \tau_\nu(H_3), \tau_\nu(H_4), \dots$ – оптические глубины точек рассеяния, полученные с помощью <быстрых> соотношений типа (2.2). Селективное газовое поглощение учитывается с помощью <веса> фотона

$$Q_\nu(M^*) = \exp(-u_\nu(M^*)). \quad (2.5)$$

Дальнейшие действия для вычисления по методу Монте-Карло являются стандартными и зависящими от вида задачи (см. монографию [9]). Отметим лишь эффективность сочетания розыгрыша фотонов в пространстве с одновременным розыгрышем фотонов по частоте (на эту возможность было указано авторам А.Н. Рублевым), что позволяет получать интегральные характеристики в широких спектральных диапазонах [10]. С помощью вышеописанной тех-

ники удастся без существенных затрат вычислительных ресурсов ввести учет селективного газового поглощения в метод Монте-Карло, т.к. в силу высокой эффективности полинейных вычислений общее время расчета существенно не увеличивается.

Заключение

Характерное время полного расчета поля радиации в атмосфере или моделирования эксперимента по ее зондированию (в том числе из космоса) во всем длинноволновом или коротковолновом диапазоне с точностью, обусловленной неопределенностью современных атмосферных оптических моделей, составляет всего несколько десятков часов на РС-486. Методика применялась в климатических проблемах для исследований радиационного форсинга и получения <эталонных> (benchmark) расчетов потоков солнечной и тепловой радиации, служащих для тестирования радиационных блоков климатических моделей. Методика также перспективна для разработки программ обработки космических экспериментов. Она уже применяется для орбитального ИК-спектрометра Исток-1 (проект <Природа>, запуск на орбитальной станции <Мир> в 1995 г.), в космических исследованиях радиационного бюджета Земли и др. [11].

1. Фомин В.А., Рублев А.Н., Троценко А.Н. // Изв. АН СССР. Сер. ФАО. 1994. Т. 30. №3. С. 301 – 308.
2. Ramaswamy V., Freidenreich S.M. // J. Geophys. Res. 1991. V. 96. P. 9133–9157.
3. Grayson S.R. // Appl. Opt. 1966. V. 5. P. 385.
4. Fomin V.A. // Proc. Atmos. Spectr. Applic. "Reims 93". 1993. P. 294 –297.
5. Дейрменджан Д. Рассеяние электромагнитного излучения сферическими полидисперсными частицами. М.: Мир, 1975. С. 165.
6. Шифрин К.С. Основные результаты исследования рассеяния света на отдельных частицах // Труды Всесоюзного научного метеорологического совещания. Л.: Гидрометеиздат, 1963. С. 21–28.
7. Гуди Р. Атмосферная радиация. М.: Мир, 1966. С. 519.
8. Feigelson E.M., Fomin V.A., Gorchakova I.A., Rozanov E.V., Timofeev Yu.M., Trotsenko A.N., Schwarzkopf M.D. // Geophys. Res. 1991. V. 96. P. 8985 – 9001.
9. Марчук Г.И., Михайлов Г.А., Назаралиев М.А., Дарбинян Р.А., Каргин В.А., Елепов Б.С. Метод Монте-Карло в атмосферной оптике. Новосибирск: Наука, 1976. С. 283.
10. Fomin V.A., Romanov S.V., Rublev A.N., Trotsenko A.N. // Preprint "Kurchatov inst." M. 1992. IAE-5525/1. С. 26.
11. Trotsenko A.N., Romanov S.V., Fomin V.A. // Preprint "Kurchatov inst." M. 1993. IAE-5633/1. С. 22.

РНЦ <Курчатовский институт>,
Москва

Поступила в редакцию
15 июля 1994 г.

V.A. Fomin, A.N. Trotsenko, S.V. Romanov. **Efficient Methods for Computation of Optical Properties of Gaseous Media.**

The report presents an overview of technique for construction of advanced numerical methods that are used in the atmosphere optics problems. These methods provide for: a) line-by-line calculations of atmosphere radiance parameters of selective gas absorption and scattering by aerosol (spherical) particles; b) line-by-line methods for solution of transfer equation for both longwave and shortwave atmosphere radiance. Procedures providing essential increase of these methods efficiency are presented together with assessments of efficiency of corresponding computer codes.