«Оптика атмосферы», **1**, № 6 (1988) УДК 535.345.1:519.644.2

А.А. Курсков, Н.В. Кузьмина

НОВАЯ МЕТОДИКА ЧИСЛЕННОГО ИНТЕГРИРОВАНИЯ ФУНКЦИЙ ПРОПУСКАНИЯ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ГАЗОВ

Анализируются причины нетрадиционного поведения погрешности численного интегрирования при прямом расчете функций пропускания и излучения атмосферных газов в ИК–диапазоне. Описана методика численного интегрирования, позволяющая сформулировать надежный критерий окончания счета в подобных задачах.

Достигнутое в последние годы увеличение точности расчета параметров спектральных линий колебательно–вращательных полос многих молекул [1] позволило использовать прямое численное интегрирование при вычислении функций пропускания и излучения молекулярных газов. При этом большое значение приобретает выбор оптимальной методики и шага частотного интегрирования, обеспечивающего заданную точность. Допустимый уровень погрешности интегрирования спектральных функций связан с качеством исходной спектральной информации, т.е. с погрешностью расчета параметров спектральных линий и неточностью описания формы контура. Поэтому на практике при расчете функций пропускания не имеет смысла добиваться точности численного интегрирования существенно выше 1%. Однако, как отмечалось в ряде работ [2, 3], во многих практических случаях в этом диапазоне точности погрешность численного интегрирования имеет нетрадиционное поведение. Это приводит к неприменимости стандартных методов контроля точности, необходимости теоретического анализа погрешности численного интегрирования в подобных задачах, а также выработке новых критериев окончания счета.

Особенности численного интегрирования спектральных характеристик молекулярных газов в ИК диапазоне исследовались на примере функций пропускания

$$T = \frac{1}{\Delta\nu} \int\limits_{\nu_0 - \frac{\Delta\nu}{2}}^{\nu_0 + \frac{\Delta\nu}{2}} T(\nu)\, d\nu, \tag{1}$$

где ν_0 — центр спектрального интервала, см$^{-1}$: $\Delta\nu$ — ширина интервала, пропускание $T(\nu)$ определяется стандартным образом

$$T(\nu) = \exp\left(-u \sum_{i=1}^{M} s_i f_i(\nu)\right), \tag{2}$$

где S_i — интенсивность; f_i — контур i–й спектральной линии; M — число линий, которые необходимо учитывать в интервале $\Delta\nu$; u — поглощающая масса молекулярного газа. (Необходимые параметры спектральных линий были взяты из атласа [4]). Необычное поведение погрешности при численном интегрировании $T(\nu)$ обусловлено специфическим, быстроосциллирующим характером подынтегральной функции (см. рис. 1). При интегрировании подобных функций оказывается недостоверной общепринятая оценка погрешности по формуле Рунге [5]:

$$\varepsilon(h) = \frac{S(h) - S(2h)}{2^P - 1} + O(h^{P+1}), \tag{3}$$

где $S(h)$ — интегральная сумма с шагом h; P — степень аппроксимационного полинома (для формулы трапеций P равно 2, для формулы Симпсона — 4 и т.д.). Поэтому при исследовании характера погрешности лучше воспользоваться ее точным выражением.

Известно [6], что погрешность численного интегрирования $T(\nu)$ по формуле трапеций с шагом $h = (b - a)/N$ на отрезке интегрирования (a, b) описывается формулой Эйлера — Маклорена:

$$e(h) = \sum_{r=1}^{L} \frac{B_{2r} h^{2r}}{(2r)!} \left[T^{(2r-1)}(b) - T^{(2r-1)}(a)\right] + \sum_{m=0}^{N-1} \int\limits_{m}^{m+1} P_{2L+1}(\theta - m)\, T^{(2L+1)}(a + \theta h)\, d\theta, \tag{4}$$

где B_r, $P_r(x)$ — числа и полиномы Бернулли; $T^{(r)}(\nu)$ — r–я производная функции $T(\nu)$. Выражение (4) является точным, при любом L, поэтому число членов в сумме может быть выбрано произвольным. При $L \to \infty$ в пренебрежении интегральным членом формула (4) переходит в асимптотический ряд по степеням h^2; коэффициентами при h^{2r} являются значения производных $T^{(2r-1)}(\nu)$ на концах интервала интегрирования. В частности, член наименьшего порядка в (4) пропорционален h^2

$$e\,(h) \approx \frac{h^2}{12}\,[T'\,(b) - T'\,(a)]. \qquad (5)$$

В других схемах численного интегрирования часть младших членов ряда (4) отсутствует. Например, в интегральной сумме по формуле Симпсона, которую можно выразить через интегральные суммы по формуле трапеций $S_{\text{тр}}(h)$,

$$S_{\text{сим}}\,(h) = \frac{4}{3}\,S_{\text{тр}}\,(h) - \frac{1}{3}\,S_{\text{тр}}\,(2h) \qquad (6)$$

компенсируются члены, пропорциональные h^2, и разложение погрешности начинается с h^4. Данное обстоятельство лежит в основе общепринятой оценки (3).

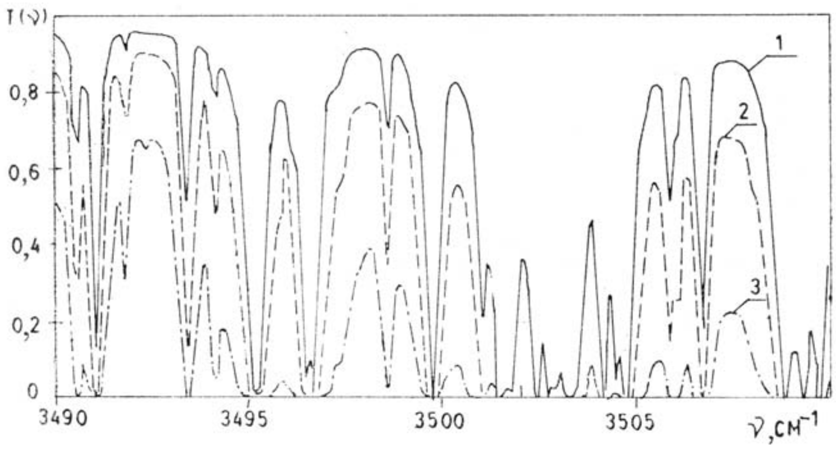

Рис. 1. Спектральное пропускание $T(\nu)$ атмосферного водяного пара для поглощающих масс 50 (*1*), 150 (*2*) и 600 (*3*) атм · см

Однако при оценке погрешности численного интегрирования быст-роосциллирующей функции $T(\nu)$ недостаточно учитывать младшие члены асимптотического ряда (4), так как основной вклад в $e(h)$ дает интегральный член формулы (4). В этом случае для оценки $e(h)$ можно разложить спектральное пропускание на интервале $\Delta\nu$ в ряд Фурье и вычислить интегральную сумму по формуле трапеций для каждого члена ряда. В результате получим представление погрешности интегрирования в следующем виде:

$$e\,(h) = 2\sum_{\kappa=1}^{\infty}\int_a^b T\,(\nu)\cos\frac{2\pi\kappa}{h}\,(\nu - a)\,d\nu. \qquad (7)$$

Выражение (7) является аналогом известной формулы Пуассона [7]. Формула Эйлера—Маклорена (4) получается из (7) путем последовательного интегрирования по частям и суммирования по k.

Формулу (7) нетрудно преобразовать в удобный для оценки погрешности численного интегрирования вид:

$$e\,(h) = 2\sum_{\kappa=1}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} T\,(\nu)\cos\frac{2\pi\kappa}{h}\,(\nu - a)\,d\nu - 2\sum_{\kappa=1}^{\infty}\int_0^{\infty}[T\,(\nu + b) - T\,(a - \nu)]\cos\frac{2\pi\kappa}{h}\,\nu d\nu. \qquad (8)$$

Слагаемые в (8) имеют различные асимптотики при $h \to 0$. Согласно теореме об асимптотическом поведении интеграла Фурье от гладких функций [8], второй член в (8) разлагается в асимптотический ряд по степеням h^2, совпадающий с асимптотическим разложением ряда в (4). Данная часть погрешности соответствует общепринятым оценкам (3), (5) и ее предлагаем называть «граничной» — $e_{\text{гр}}(h)$. Следовательно, первую сумму в (8) можно рассматривать как оценку интегрального члена в (4) и называть ее «внутренней» частью погрешности, так как она характеризует степень осцилляции $T(\nu)$ на отрезке интегрирования (a, b). Чтобы проанализировать асимптотическое поведение $e_{вн}(h)$, представим $T(\nu)$ в виде суперпозиции элементарных спектральных компонент:

$$T(\nu) = \sum_q T_q(\nu - \nu_q), \tag{9}$$

где ν_q — положение центра q–й компоненты; Γ_q — ее характерная ширина (аналог полуширины лоренцовского контура). В случае малых поглощающих масс в (2) такое представление очевидно: $T(\nu) \approx 1 - \sum_{i=1}^{M}(1 - \exp(-us_i f_i))$, но в общем случае точное выражение для T_q будет иметь сложный математический вид. Как видно из рис. 1, возможность точного представления (9) следует из общего характера $T(\nu)$ и не представляет сомнений. Таким образом, из формул (8) и (9) следует, что

$$e_{вн}(h) = \sum_{\kappa=1}^{\infty} C_\kappa, \tag{10}$$

где

$$C_\kappa = 2\,\mathrm{Re} \sum_q T_{q\kappa} \exp\left[i \frac{2\pi\kappa}{h}(\nu_q - a) \right], \tag{11}$$

где

$$T_{q\kappa} = \int_{-\infty}^{\infty} T_q(\nu) \exp\left[i \frac{2\pi\kappa}{h} \nu \right] d\nu \tag{12}$$

Здесь

— интеграл Фурье от функции $T_q(\nu)$. Согласно [8] при $h \to 0$ интегралы T_{qk}, а следовательно, и $e_{вн}(h)$ экспоненциально малы и $e_{вн}(h) \ll e(h)$. Однако на данном шаге h экспоненциальная малость T_{qk} по параметру $\Gamma_q\, k/h$ будет иметь место лишь для относительно «широких» компонент, у которых $\Gamma_q > h/k$. Следовательно, можно ожидать, что пренебрежение $e_{вн}(h)$ при оценке погрешности численного интегрирования оправдано лишь в том случае, когда величина шага h гораздо меньше ширины всех спектральных компонент; при этом справедлива общепринятая оценка погрешности (3). Однако во многих типичных случаях разумная с практической точки зрения точность интегрирования $e(h) \approx 1\%$ достигается при гораздо больших шагах, когда вклад $e_{вн}(h)$ в погрешность является доминирующим.

Если для всех спектральных компонент выполняется условие $\Gamma_q \gg h$, то интегралы Фурье T_{qk} экспоненциально быстро уменьшаются с ростом k. Если условие $\Gamma_q \gg h$ выполняется не для всех спектральных компонент, то с ростом k число компонент, для которых $\Gamma_q < h/k$, будет уменьшаться, поэтому следует ожидать тенденции к уменьшению коэффициентов C_k в (10), (11) с увеличением k. Следовательно, (10)—(12) можно считать разложением «внутренней» части погрешности $e(h)$.

Ниже показано, что при $e(h) \approx 1\%$ нетрадиционное поведение погрешности соответствует ситуации, когда $e(h)$ определяется $e_{вн}(h)$.

Малая эффективность квадратурных формул высших порядков обусловлена быстрым ростом $e_{вн}(h)$ при увеличении шага h. Например, в интегральной сумме по формуле Симпсона (6) фактически используются две сетки: с шагом h и $2h$. Поскольку компенсация $e_{вн}(h)$ и $e_{вн}(2h)$ в (6) отсутствует и, как правило, $|e_{вн}(2h)| \gg |e_{вн}(h)|$, формула Симпсона может иметь худшую точность, чем формула трапеций. Аналогичная ситуация имеет место при использовании квадратурных формул высших порядков.

Осциллирующий характер зависимости $e(h)$ определяется фазовыми множителями в формуле (11). Переходя к безразмерной частоте $\nu_q = a + (b - a)t_q$, где $0 \le t_q \le 1$, можно представить (11) в виде

$$C_\kappa = 2\,\mathrm{Re} \sum_q T_{q\kappa} \exp(i2\pi\kappa N t_q). \tag{13}$$

Как следует из (13), незначительное изменение числа узлов в сетке интегрирования N должно приводить к существенному изменению весовых множителей, с которыми суммируются T_{qk} в (13), и, следовательно, к заметному изменению погрешности интегрирования.

Периодичность погрешности при сдвиге границ отрезка интегрирования (см. рис. 2) также обусловлена наличием фазовых множителей. Как следует из формул (10)—(12), при сдвиге отрезка интегрирования на долю шага $gh(a, b) \to (a + gh, b + gh)$; фаза ($g < 1$) коэффициента C_k увеличивается на $2\pi kg$. Следовательно, $e_{вн}(h)$ является непрерывной периодической (с периодом h) функцией от величины сдвига границ отрезка интегрирования. При достаточно малых шагах, когда коэффициенты C_k быстро убывают, эта периодическая функция близка к синусоиде, что можно использовать для оценки $e_{вн}(h)$.

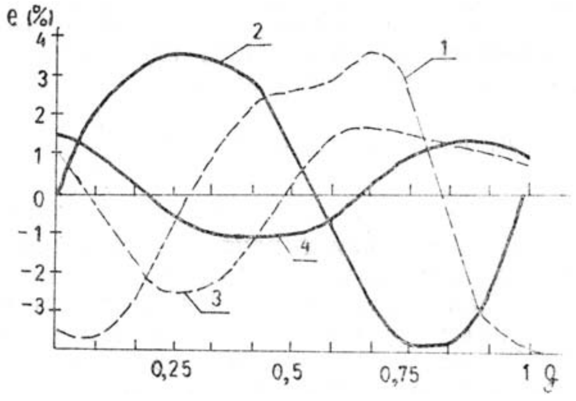

Рис. 2. Зависимость относительной погрешности интегрирования e по формуле трапеций от сдвига границ отрезка интегрирования на долю шага g для шага 0,5 см$^{-1}$: u = 1 атм · см (*1*), u = 10 атм · см (*2*); для шага 0,4 см$^{-1}$: u = 1 атм · см (*3*), u=10 атм · см (*4*)

Нетрадиционный характер поведения погрешности в практически важной области $e \approx 1\%$ приводит к необходимости соответствующей модификации методов контроля точности численного интегрирования. К сожалению, в случаях, когда погрешность определяется $e_{вн}(h)$ невозможно получить простые оценки $e(h)$ в виде, подобном формуле (6). Согласно формулам (8, 10), $e_{вн}\left(\frac{h}{2}\right) = C_2 + C_4 + \ldots$, а $S(h) - S\left(\frac{h}{2}\right) C_1 + C_3 + C_5 + \ldots$. Таким образом, с учетом тенденции к убыванию коэффициентов C_k с ростом k разность $S(h) - S\left(\frac{h}{2}\right)$ можно использовать в качестве оценки погрешности интегрирования $e(h)$ с „грубым" шагом. Однако, используя $S(h) - S\left(\frac{h}{2}\right)$ невозможно определить погрешность интегрирования с текущим „мелким" шагом $\left(\frac{h}{2}\right) - e\left(\frac{h}{2}\right)$ поскольку члены разложения (11) не связаны друг с другом простыми соотношениями. Кроме того, следует отметить, что, несмотря на убывание интегралов $T_{q\kappa}$ (12) с ростом κ, наличие фазовых множителей в (11) приводит к отклонениям от монотонности убывания коэффициентов C_κ. В этом случае из малости разности .$S(h) - S\left(\frac{h}{2}\right)$ не следует соответствующей малости погрешности $e\left(\frac{h}{2}\right)$.

Таким образом, для выработки более надежного критерия окончания счета желательно получить оценку сверху для величины $e(h)$. С этой целью можно использовать отмеченное выше периодическое изменение $e_{вн}(h)$ при небольшом сдвиге пределов интегрирования $(a, b) \to (a + gh, b + gh)$, $g < 1$. Вычислив интегральные суммы $S(h, g)$ для нескольких значений сдвига g, можно оценить амплитуду изменения $S(h, g)$, которая является оценкой сверху для $e_{вн}(h)$. Однако подобная оценка весьма трудоемка: объем вычислений пропорционален количеству интегральных сумм $S(h, g)$. Простейшую оценку амплитуды погрешности можно получить, аппроксимируя вклад $e_{вн}(h)$ в зависимость $S(h, g)$ от g единственной синусоидой [т.е. ограничиваясь первым членом разложения $e_{вн}(h)$ в (10)] и учитывая вклад $e_{гр}(h)$ с помощью младшего члена (5). Тогда для $S(h, g)$ получим следующее приближенное выражение:

$$S(h,\ g) \approx I(a + gh;\ b + gh) + \frac{h^2}{12}[T'(b + gh) - T'(a + gh)] + |C_1|\cos(\Phi + 2\pi g). \quad (14)$$

где $|C_1|$ – искомая амплитуда изменения $e_{вн}(h)$; Φ – неизвестная фаза первого члена разложения (10) при $g = 0$, т.е. для исходного отрезка интегрирования (a, b). В формулу (14) входят значения интеграла I и краевые значения производных для сдвинутого отрезка интегрирования. Однако периодическая зависимость $e_{вн}(h)$ от g, которая аппроксимируется последним членом формулы (14), обусловлена не собственно сдвигом пределов интегрирования, а изменением взаимного положения узлов сетки интегрирования и центров внутренних спектральных компонент на отрезке $\Delta\nu$. Поэтому $e_{вн}(h)$ не изменится, если сдвинуть на gh лишь внутренние узлы сетки при неизменных пределах интегрирования (a, b). При этом на краях отрезка (a, b) однородность сетки нарушается и $S(h, g)$ принимает следующий вид:

$$S(h,\ g) = h\left[\frac{g}{2}T(a) + \frac{g+1}{2}T(a+gh) + T(a+gh+h) + \ldots\right.$$

$$\left. + \frac{2-g}{2}T(b-h+gh) + \frac{1-g}{2}T(b)\right], \quad \text{для } 0 > g; \tag{15}$$

$$S(h,\ g) = h\left[\frac{1-g}{2}T(a) + \frac{2-g}{2}T(a+h+gh) + T(a+gh+2h) + \ldots\right.$$

$$\left. + \frac{g+1}{2}T(b+gh) + \frac{g}{2}T(b)\right], \text{ для } g < 0.$$

С точностью до членов высшего порядка по h в формуле (14) полагаем

$$I(a+gh,\ b+gh) = I(a,\ b;\ T'(a+gh) + T'(a);\ T'(b+gh) = T'(b).$$

Таким образом, формула (14) содержит три неизвестных параметра: $[I(a, b) + h^2/12\,(T'(b) - T'(a)]$, C_1 и Φ, для нахождения которых необходимо решить систему трех уравнений (14) для трех значений g. Следовательно, для нахождения $|C_1|$ необходимо выполнить объем вычислений, достаточный для расчета интегральной суммы $S(h/3)$ с шагом $h/3$. В связи с этим для решения системы уравнений (14) целесообразно выбрать $g = 0$ и $g = \pm 1/3$, что позволяет одновременно с расчетом $|C_1|$ вычислить $S(h/3)$. В этом случае

$$|C_1|^2 = \frac{1}{9}\left[2S(h,\ 0) - S\left(h,\ -\frac{1}{3}\right) - S\left(h,\ \frac{1}{3}\right)\right]^2 + \frac{1}{3}\left[S\left(h,\ -\frac{1}{3}\right) - S\left(h,\ \frac{1}{3}\right)\right]^2; \tag{16}$$

$$S\left(\frac{h}{3}\right) = \frac{1}{3}\left[S(h,\ 0) + S\left(h,\ -\frac{1}{3}\right) + S\left(h,\ \frac{1}{3}\right)\right] + \frac{h}{3}\frac{1}{\Delta\nu}\left[-\frac{1}{2}T(a) - \right.$$

$$\left. - \frac{1}{2}T(b) + \frac{1}{3}T\left(a+\frac{h}{3}\right) + \frac{1}{6}T\left(a+\frac{2h}{3}\right) + \frac{1}{6}T\left(b-\frac{2h}{3}\right) + \frac{1}{3}T\left(b-\frac{h}{3}\right)\right]. \tag{17}$$

Предложенный способ оценки погрешности интегрирования по формуле трапеций позволяет сформулировать новую методику численного интегрирования спектральных функций в ИК–диапазоне. Интегрирование выполняется в следующей последовательности:

1. Делим шаг интегрирования h пополам до тех пор, пока не выполнится условие

$$\max\{|C_1|,\ \varepsilon\} < \delta, \tag{18}$$

где $|C_1|$ определяется выражением (16) и соответствует амплитуде $e_{\text{вн}}(h)$; ε — общепринятая оценка погрешности по формуле (3); δ — наперед заданная допустимая погрешность интегрирования. Формула (18) обобщает стандартный критерий окончания счета на случай, когда погрешность интегрирования определяется $e_{\text{вн}}(h)$.

2. Предполагаем, что из условия (18) следует справедливость $|e(h/3)| < \delta$, и за точное значение интеграла принимаем сумму $S(0, h/3)$ (17).

Нетрудно показать, что убывание $|C_1|$ с шагом интегрирования h также не является монотонным, поэтому из $|C_1| < \delta$ не следует строгого выполнения $|e(h/3)| < \delta$. Таким образом, предлагаемый критерий окончания счета носит вероятностный характер, однако является гораздо более надежным, чем общепринятый критерий (3).

Вероятность невыполнения условия $|e(h/3)| \le |C_1|$ можно определить на примере распределения величин $d = |C_1| \,/\, |e(h/3)|$ для спектрального интервала ($\nu_0 = 3650$ см$^{-1}$, $\Delta\nu = 20$ см$^{-1}$). Результаты вычислений отношений d для 100 значений шага интегрирования $h = \dfrac{\Delta\nu}{N}$, $N = \overline{20,119}$ приведены в виде гистограмм на рис. 3. Данное распределение можно сравнить с распределением отношения $\left|\dfrac{S(h/2) - S(h)}{e(h/2)}\right|$, вычисленного для тех же функций и шагов и используемого в общепринятой оценке погрешности для формулы трапеций. Последнее изображено на рис. 3 пунктиром. Как следует из рис. 3, предлагаемый критерий окончания счета является более надежным, чем общепринятый, и обеспечивает заданную точность интегрирования $|e(h/3)| < \delta$ в 99 % случаев.

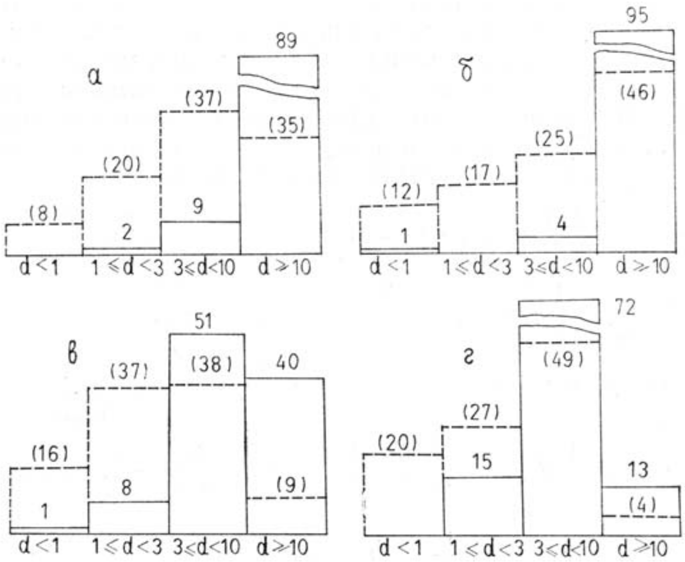

Рис. 3. Распределение отношений d для 100 последовательных значений числа узлов в сетке интегрирования: (*а*) u = 1 атм · см; (*б*) u = 10 атм · см; (*в*) u = 30 атм · см; (*г*) u = 40 атм · см

1. Зуев В.Е., Макушкин Ю.С., Пономарев Ю.Н. Спектроскопия атмосферы. — Л.: Гидрометеоиздат, 1987. — 248 с.
2. Фомин Б.А., Кузьмин И.И. и др. Быстрый полинейный метод расчета поглощения ИК–излучения в газах. — М., 1984. — 6 с. (Препринт/Ин–т атомной энергии, № 4070/1).
3. Блаховская Т.В., Галин В.Я., Мицель А.А. Программа вычисления характеристик прозрачности, обусловленных потерями на поглощение атмосферными газами. — Изв. вузов. Физика, 1981, № 6. Рукопись деп. в ВИНИТИ,, рег. № 2137–81.
4. McClatchey R.A., Benedict W.S., Clongh S.A. AFCRL Atmospheric Absorption Line Parameters Compilation. — Air Force Cambridge Research Laboratories Report AFCRL–TR–73–0096, 1973, ERP N 434.
5. Калиткин Н.Н. Численные методы. — М.: Наука, 1978. — 512 с.
6. Джеффрис Г., Свирлс Б. Методы математической физики. Вып. 2. — М.: Мир, 1970. — 352 с.
7. Евграфов М.А. Асимптотические оценки и целые функции. — М.: Наука, 1979. — 320 с.
8. Олвер Ф. Введение в асимптотические методы и специальные функции. — М.: Наука, 1978. — 376 с.

Институт физики
АН БССР, Минск

Поступила в редакцию
13 апреля 1988 г.

A.A. Kurskov, N.V. Kuzmina. **A New Procedure for Numerical Integration of Molecular Gas Transrnittance and Emission Functions.**

The reasons for non-trivial behaviour of numerical integration error in the line–by–line computation of atmospheric gas average transmittance and emission in the IR are examined. An adaptive numerical integration technique is reported that allows a reliable computation termination criterion to be formulated.