

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 (10–3000 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 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).

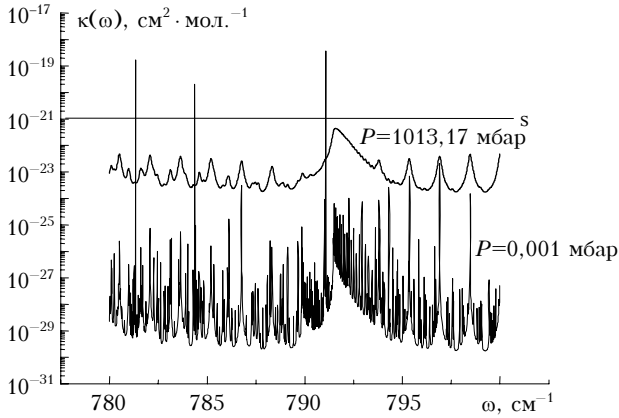


Рис. 1. Коэффициент поглощения CO₂. T = 296 К, лоренцевский контур до 10 см⁻¹, шаг = 0,001 см⁻¹; интервал 780–800 см⁻¹

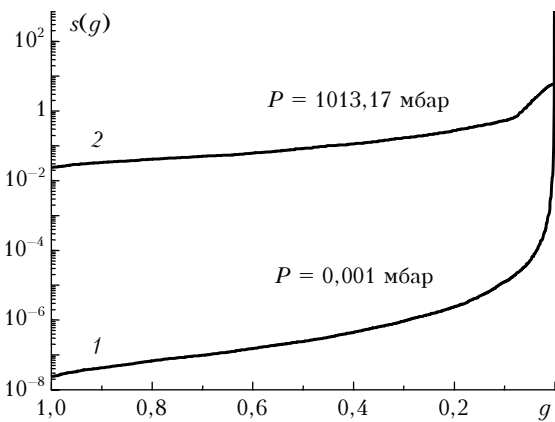


Рис. 2. Функция s(g) для CO₂. T = 296 К, лоренцевский контур до 10 см⁻¹, шаг = 0,001 см⁻¹; интервал 780–800 см⁻¹

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 лоренцевского, 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(ω) в интервале частот Δω = ω'' – ω' 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; κ(ω) – 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 κ(ω) для ω ∈ [Δω]; b_v, g_v – ординаты и абсциссы соответствующей квадратурной формулы. Построение функции g(s) иллюстрирует рис. 3.

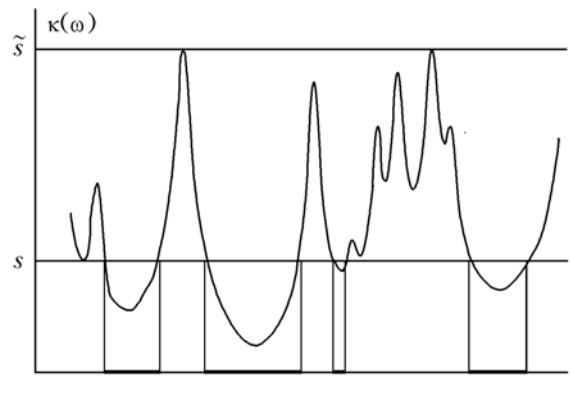


Рис. 3. Схема интегрирования для g(s). Для заданного s значение g представляет собой сумму интервалов, в которых κ(ω) < s

Соотношение (3) позволяет получить аналитические выражения для s(g) одной линии в случае наиболее употребительных контуров – лоренцевского, доплеровского и фойгтовского. Рассмотрим несколько способов получения s(g). Один из них – использование в соотношении (3) определения g как суммы интервалов частот, в которых κ(ω) < s.

Пусть имеем лоренцевский контур (рис. 4), Q, α, ω₀ – интенсивность, столкновительная полуширина и центр спектральной линии; Δω = ω₂ – ω₁ – спектральный интервал, в котором рассматривается поглощение:

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

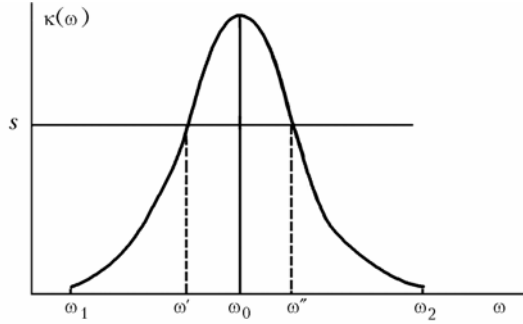


Рис. 4. К расчету $s(g)$ для лорентцевского контура

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

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

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

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

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].

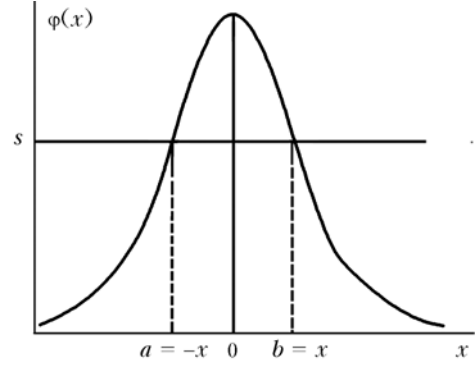


Рис. 5. К построению $s(g)$ для произвольной четной функции $\varphi(x)$

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

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

Здесь α и $\Delta\omega_D$ – столкновительная и доплеровская полуширины спектральной линии;

$$s(g) = \frac{Q}{\Delta\omega_D} (\ln 2)^{1/2} \left(\frac{a}{\pi}\right) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-y^2}}{a^2 + (\xi - y)^2} dy, \quad (11)$$

где

$$\xi = \frac{\omega - \omega_0}{\omega_0} \left(\frac{mc^2}{2\pi kT}\right)^{1/2} = \frac{\omega - \omega_0}{\Delta\omega_D} (\ln 2)^{1/2} = \frac{(1-g)\Delta\omega}{2\Delta\omega_D} (\ln 2)^{1/2}.$$

Значения $s(g)$, вычисленные по полученным здесь формулам и непосредственно с помощью соотношений (3) через коэффициент поглощения, совпадают полностью, когда рассматривается частотный интервал, в котором линия расположена симметричным образом в его центре.

2. Асимптотическая оценка для функции пропускания одной линии

Особенности поведения $s(g)$ при высоких и малых давлениях можно было увидеть на рис. 2. Для одной линии эти особенности, конечно, остаются, и значение пропускания при малых давлениях определяется небольшой областью около значения $g = 1$.

Формулы для $s(g)$, полученные в предыдущем разделе, позволяют детально проанализировать поведение $s(g)$ в окрестности точки $g = 1$.

Для рассмотренных в разд. 1 контуров при $g = 1$

$$s'(1) = 0, \quad s''(1) < 0. \quad (12)$$

Для лорентцевского контура (6) имеем

$$s(1) = \frac{Q}{\pi\alpha}, \quad s''(1) = -\frac{Q\Delta\omega^2}{2\pi\alpha^3}.$$

Для доплеровского контура (7)

$$s(1) = \frac{Q}{\sqrt{\pi}\Delta\omega_D}, \quad s''(1) = -\frac{Q\Delta\omega^2}{2\sqrt{\pi}\Delta\omega_D^3}.$$

В случае фойгтовского контура (10)

$$s(1) = \gamma_1 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-y^2}}{a^2 + y^2} dy;$$

$$s''(1) = 2\gamma_1^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{-e^{-y^2} [a^2 - 3y^2]}{(a^2 + y^2)^3} dy;$$

$$\gamma = \frac{\Delta\omega}{2\Delta\omega_D} (\ln 2)^{1/2}, \quad \gamma_1 = \frac{Q}{\Delta\omega_D} (\ln 2)^{1/2} \left(\frac{a}{\pi}\right).$$

Условия (12) позволяют использовать асимптотическую оценку функции пропускания в окрестно-

сти $g = 1$ при малых давлениях. Чтобы соблюсти условия применения метода перевала, рассмотрим выражение A , связанное известным образом с искомой функцией пропускания:

$$A = \int_0^1 dg e^{\varphi(g)}, \quad \varphi(g) = \ln(1 - e^{-us(g)}). \quad (13)$$

Эта замена ориентирована на физику задачи, на малые давления в верхних слоях атмосферы, т.е. предполагает малость u . Далее соответствующая методу перевала стандартная процедура [6] и следующее из (13) соотношение $P = 1 - A$ дают

$$P_{as} = 1 - \sqrt{\frac{\pi}{2}} (1 - e^{-us(1)})^{3/2} e^{\frac{1}{2}us(1)} / \sqrt{u|s''(1)|}. \quad (14)$$

При $u \rightarrow 0$ формула (14) приводит к $P_{as} = 1$.

Приведем пример расчета функции поглощения с помощью асимптотической оценки (14) (рис. 6).

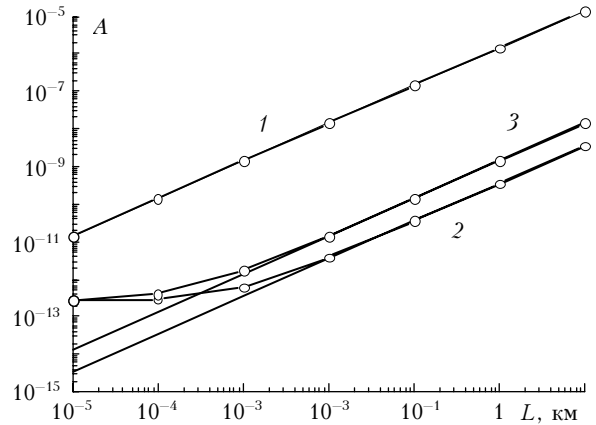


Рис. 6. Функция поглощения $A = 1 - P$ для одной линии, вычисленная с помощью асимптотической оценки (13) (кривые) и методом *lbl* (точки): 1 – полное давление $p = 0,1$ мбар, $T = 230$ К; 2 – $p = 0,001$ мбар, $T = 190$ К; 3 – $p = 0,0001$ мбар, $T = 230$ К; доля $\text{CO}_2 \cdot 10^4$

Выбранные условия расчета относятся к стандартной атмосфере лета средних широт. Видно, что асимптотическая оценка, которая не зависит от точности расчета коэффициента поглощения, совпадает с расчетом *line-by-line* при средних давлениях и начинает отклоняться от него при малых давлениях и расстояниях. Отметим, что в асимптотическом расчете использовалась доплеровская форма контура.

При малых давлениях именно область быстрого изменения $s(g)$ дает преобладающий вклад в величину интеграла P . Эта область – «зона влияния» Δg (в терминах асимптотического анализа), оценивается стандартным образом [7]:

$$\Delta g = O\left(\sqrt{\frac{2}{\varphi''(1)}}\right), \quad \varphi''(1) = \frac{e^{-us(1)}}{1 - e^{-us(1)}} u |s''(1)|. \quad (15)$$

Величина $\sqrt{2/\varphi''(1)}$ для рассмотренного на рис. 6 случая равна $0,01 \text{ см}^{-1}$.

Отсюда также следует ограничение для u , определяющее в некоторой степени границы применимости (14):

$$\sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{e^{\frac{1}{2}us(1)}}{\sqrt{u|s''(1)|}} < 1. \quad (16)$$

Введем обозначения

$$f_1 = e^{\frac{1}{2}us(g)}, \quad f_2 = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sqrt{u|s''(g)|}.$$

Условием применимости асимптотики будет $f_1 > f_2$. Как видно из рис. 7 для спектрального интервала 780,567–780,7, область применимости асимптотики распространяется примерно от $L^* \kappa = 10^{-5}$ в сторону меньших $L^* \kappa$.

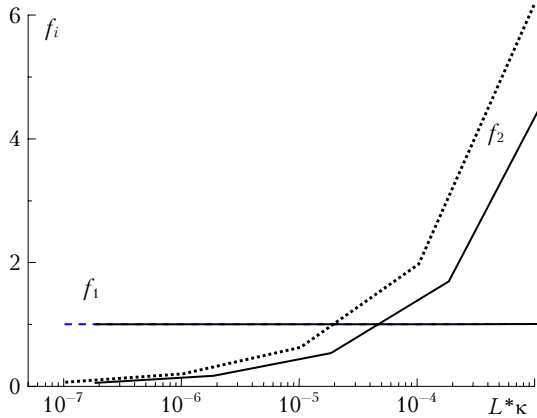


Рис. 7. Ограничения на поглощающие массы, вытекающие из (16). Пунктирные линии f_1 , f_2 отвечают полному давлению 10 мбар, давлению CO_2 $3 \cdot 10^{-3}$ мбар, $T = 238$; сплошные кривые f_1 , f_2 отвечают полному давлению 1 мбар, давлению CO_2 $3 \cdot 10^{-4}$ мбар, $T = 275 \text{ К}$. Кривые f_1 , f_2 при более низких давлениях практически не отличаются от таковых при 1 мбар

3. Асимптотическая оценка для функции пропускания при произвольном числе линий в рассматриваемом интервале

При малом давлении буферного газа линии не слишком перекрываются из-за небольшой их полуширины. Поэтому, чтобы отметить некоторые характерные для подобной ситуации детали, можно говорить о предельном случае неперекрывающихся линий (рис. 8). Здесь j – индекс линии.

В этом случае [прямое следствие (1)]:

$$P = \sum_j \frac{\Delta\omega_j}{\Delta\omega} P_j(z) = \sum_v b_v \sum_j \frac{\Delta\omega_j}{\Delta\omega} \exp[-zs_j(g_v)], \quad (17)$$

где $g(s)$ строится для каждой линии и переход к ряду экспонент осуществляется для P_j -функции пропускания отдельной линии.

Рис. 8. Схематический спектр для ситуации малых давлений

Понятно, что (17) увеличивает число членов ряда. Далее, следствием (2) и (3) будет (для спектра на рис. 8)

$$g(s) = \sum_j g_j(s). \quad (18)$$

Но, конечно же,

$$s(g) \neq \sum_j s_j(g). \quad (19)$$

Здесь $g(s)$ и $s(g)$ построены для полного спектра. В этих же обозначениях применение квадратурных формул дает

$$\sum_v b_v \sum_j \frac{\Delta\omega_j}{\Delta\omega} e^{-zs_j(g_v)} = \sum_v b_v e^{-zs(g_v)}. \quad (20)$$

Но (20) не снимает неравенство (19). Иными словами, даже асимптотическое (см. рис. 8) предположение об изолированных линиях не устраняет процедуру построения $s(g)$ сведением ее к $s_j(g)$.

Итак, $s(g)$ для интервала, содержащего отдельные линии, не выражается через s_j для отдельных линий. Хотя и можно строить разложения для отдельных линий во всем интервале $\Delta\omega$ и использовать их в (20), но при этом сильно возрастает число членов разложения (пропорционально числу линий). Однако, как видно из рис. 1 и 8, пропускание при малых давлениях определяется суммой наиболее сильных линий:

$$P = \sum_j \frac{\Delta\omega_j}{\Delta\omega} P_j,$$

и в случае асимптотической оценки имеем

$$P_{as} = \sum_j \frac{\Delta\omega_j}{\Delta\omega} P_{jas}. \quad (21)$$

Пример расчета функции поглощения по формуле (21) с последовательным учетом наиболее сильных линий в интервале $780\text{--}790 \text{ см}^{-1}$ приведен на рис. 9 для нескольких наборов условий, соответствующих атмосфере лета средних широт.

Расчет lbl и асимптотическая оценка совпадают для промежуточных расстояний и давлений.

Отклонения наблюдаются при больших давлениях и расстояниях (кривая 1) и, напротив, — для малых давлений и расстояний (кривые 2, 3). Асимптотические оценки по своему смыслу справедливы для малых давлений и предпочтительнее в этих условиях, чем *lbl*-результаты. Вряд ли можно указать точные численные критерии их применимости. Во всяком случае они могут быть применены, если линии можно считать доплеровскими и, как показывает рис. 9, их совпадение с *lbl*-расчетом позволяет утверждать их справедливость и для не слишком малых давлений. Расчет же с помощью асимптотических оценок может быть проведен, как видно из приведенных выше формул, просто и быстро.

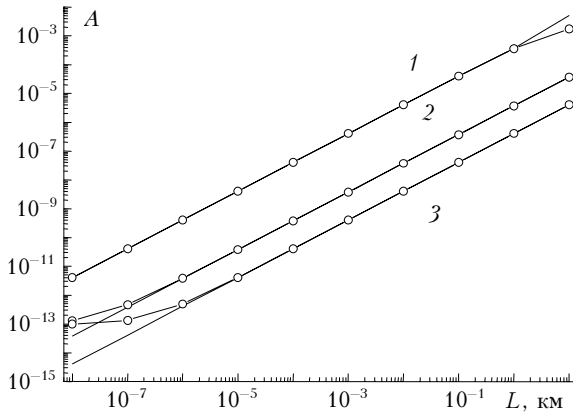


Рис. 9. Функция поглощения $A = 1 - P$ для интервала $780\text{--}790\text{ см}^{-1}$, вычисленная с помощью асимптотической оценки (13) (кривые) и методом *lbl* (точки): 1 — полное давление $p = 0,1$ мбар, $T = 230$ К; 2 — $p = 0,01$ мбар, $T = 170$ К; 3 — $p = 0,0001$ мбар, $T = 230$ К; доля CO_2 $3 \cdot 10^{-4}$

Отметим особенности поведения $s(g)$, которые могут быть существенны для малых давлений. Для j -й линии

$$g_j(s) = 1 - f_j(s).$$

Для нескольких линий

$$g(s) = N - \sum_j f_j(s).$$

Найдем производную от $s(g)$ как производную от обратной функции:

$$\frac{\partial s}{\partial g} = \frac{1}{\partial g / \partial s} = - \frac{1}{\left(\sum_j f_j'(s) \right)}.$$

Точке $s = s_{j\max}$ для j -й линии отвечает $g = 1$. В этой точке $g'_s = \infty$ и соответствующий член в сумме обращается в нуль, т.е. $s'_g = 0$. Вторая производная в этой точке $\frac{\partial^2 s}{\partial g^2} = - \frac{\partial^2 g / \partial s^2}{(\partial g / \partial s)^2}$ также обращается в нуль. Рис. 10 поясняет ситуацию.

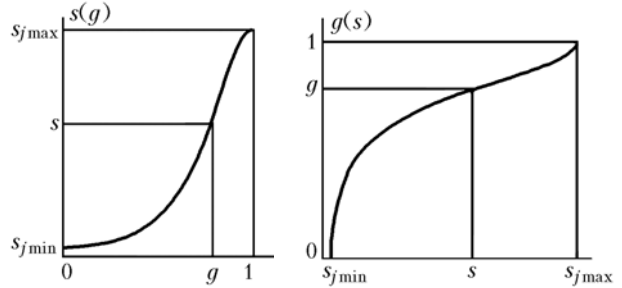


Рис. 10. К построению обратной функции для $s(g)$

Изложенное означает, что на функции $s(g)$ будут возникать точки перегиба. Случай двух линий на частотах $780,633483$ и $780,756586\text{ см}^{-1}$ в интервале $780,6\text{--}780,8\text{ см}^{-1}$ приведен на рис. 11.

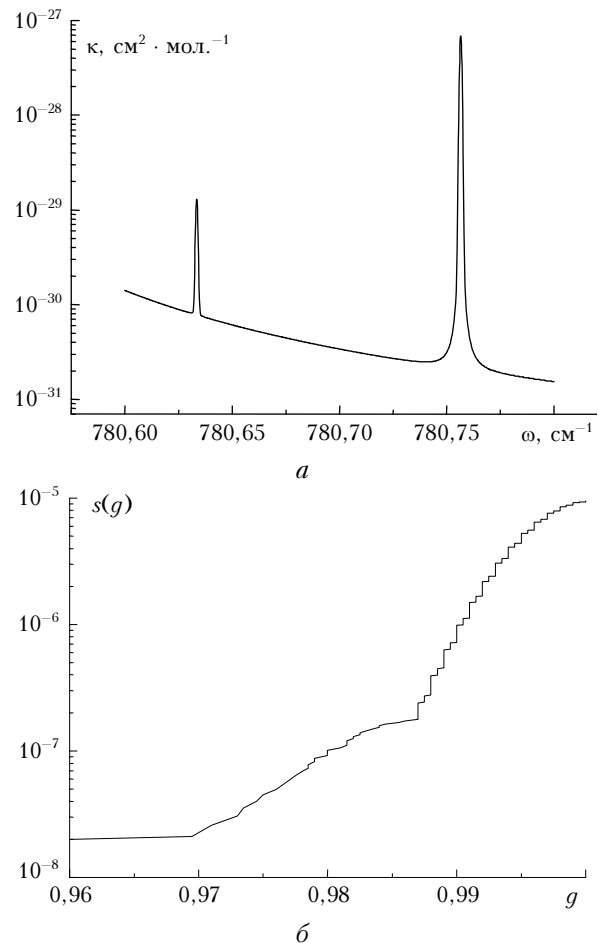


Рис. 11. Спектральные линии в интервале $780,6\text{--}780,8\text{ см}^{-1}$ (а) и соответствующая функция $s(g)$, имеющая точку перегиба (б)

Наличие таких точек перегиба на кривой $s(g)$ можно видеть вблизи ее максимума при любых давлениях (рис. 12).

Для больших давлений существование точек перегиба не имеет большого значения в вычислительном отношении, так как вклад больших g относительно невелик. В случае же малых давлений они могут иметь значение, так как пропускание определяется именно областью g вблизи максимума.

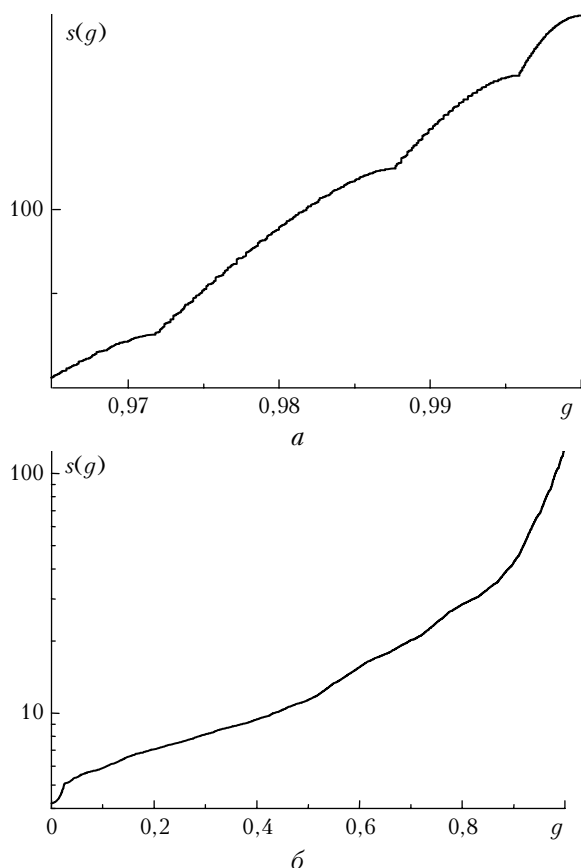


Рис. 12. Функция пропускания CO_2 в интервале $780\text{--}880\text{ см}^{-1}$, полное давление $p = 1000,0$ мбар, шаг 10^{-3} см^{-1} ; a – интервал g вблизи максимума; b – интервал $g [0, 1]$

Заключение

Ранее авторами был разработан оригинальный подход к получению разложений радиационных величин в ряды экспонент на основе теории рядов Дирихле (см., например, [3–5] и ссылки в них). С его помощью были получены аналитические выражения для коэффициентов разложения функций пропускания в ряды экспонент через коэффициенты поглощения для однородных [см. (3)] и неоднородных сред, для интегралов с функцией источника, а также непосредственно для радиационных потоков. Помимо чисто расчетных преимуществ по сравнению с получением $s(g)$ путем минимизации, аналитические выражения типа (3) позволили провести более глубокий анализ свойств коэффициентов k -распределения.

Так, исходя из определения (3) величины g как суммы интервалов частот, в которых $\kappa(\omega) < s$,

удалось получить формулы для коэффициентов ряда экспонент $s(g)$ в случае одной линии с лорентцевским, доплеровским и фойгтовским контурами. Анализ производной функции $s(g)$ выявил более детальную структуру этой кривой. Оказалось, что она, при общем возрастающем характере, имеет точки перегиба в местах, соответствующих максимумам линий, что может сказаться на точности расчета при малых давлениях.

Структура функции $s(g)$ при малых давлениях позволила записать асимптотическую оценку для интеграла, представляющего функцию пропускания для одной и для произвольного числа линий. Проведенные для поглощения CO_2 в области 15 мкм расчеты показали, что асимптотические оценки могут быть использованы в широкой области давлений, где их результаты совпадают с *line-by-line* расчетами, имея преимущество в простоте формул и в скорости расчета.

В целом полученные результаты убеждают в том, что сугубо математические подходы скорее могут в ряде случаев приводить к интересным результатам и к пониманию, чем прямое численное моделирование.

Работа частично поддержана Российским фондом фундаментальных исследований, грант № 08-05-00317.

1. Chou M.-D., Ridgway W.L., Yan M.M.-H. Parameterizations for water vapor IR radiative transfer in both the middle and lower atmospheres // J. Atmos. Sci. 1995. V. 52. N 8. P. 1159–1167.
2. Mlawer E.J., Taubman S.J., Brown P.D., Iacono M.J., Clough S.A. Radiative transfer for inhomogeneous atmospheres: RRTM, a validated correlated-k model for the longwave // J. Geophys. Res. D. 1997. V. 102. N 14. P. 16663–16682.
3. Tvorogov S.D., Nesmelova L.I., Rodimova O.B. k -distribution of transmission function and theory of Dirichlet series // J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer. 2000. V. 66. N 3. P. 243–262.
4. Творогов С.Д. Некоторые аспекты задачи о представлении функции поглощения рядом экспонент // Оптика атмосф. и океана. 1994. Т. 7. № 3. С. 315–326.
5. Tvorogov S.D., Zhuravleva T.B., Rodimova O.B., Firsov K.M. Theory of series of exponents and its application for analysis of radiation processes // A.P. Cracknell, V.F. Krapivin, and C.A. Varotsos (eds). Problems of Global Climatology and Ecodynamics: Anthropogenic Effects on the State of Planet Earth. Ch. 9. Springer/Praxis, Chichester, UK, 2008.
6. Де Брейн Н.Г. Асимптотические методы в анализе. М.: Изд-во иностр. лит-ры, 1961. 247 с.
7. Мьшикис А.Д. Математика для вузов. Специальные курсы. М.: Наука, 1971. 632 с.

S.D. Tvorogov, O.B. Rodimova. Calculation of transmission functions for small pressures.

Analytical expressions for the expansion coefficients of a series of exponents $s(g)$ are derived for the case of an individual line with Lorentzian, Dopler and Voigt line contours. The way of estimation of the absorption function at small pressures is suggested for an individual line and for an arbitrary number of lines, based on asymptotic value of the corresponding integral written with the use of a series of exponents. It is shown numerically that asymptotic estimations may be used in a wide range of pressures and are simple in applications. Qualitative evaluations of their areas of applicability are given. Availability of bending points on the $s(g)$ curve in places associated with the line maxima and their possible influence on the calculation accuracy at small pressures is noted.