

А.Г. Ишов, Н.В. Крымова

### МУЛЬТИЛИНЕЙНОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ДЛЯ ИНТЕГРАЛЬНОГО ПОГЛОЩЕНИЯ ИЗЛУЧЕНИЯ В МОЛЕКУЛЯРНЫХ ПОЛОСАХ

Для эквивалентной ширины полосы, составленной из  $n$  спектральных линий, получено асимптотическое представление, где главным членом является эквивалентная ширина полосы в приближении неперекрывающихся линий. Получен также критерий выполнимости названного приближения с требуемой относительной погрешностью.

В настоящее время, когда получила распространение среди исследователей полная и точная информация о параметрах спектральных линий [1], полинейный метод стал эталонным для расчета интегрального поглощения излучения в колебательно-вращательных молекулярных полосах. При этом последние рассматриваются в общем случае состоящими из  $n$  перекрывающихся линий, каждая из которых характеризуется своей интенсивностью  $S_i$ , полушириной  $\gamma_i$ , частотой центра  $\nu^0$  и профилем  $\alpha(\nu_i^0 - \nu)$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ . Для эквивалентной ширины полосы  $W(n)$ , используемой при описании интегрального поглощения излучения в молекулярной полосе оптически однородной среды, имеет место представление

$$W(n) = \int d\nu \left\{ 1 - \exp \left[ - \sum_{i=1}^n \tau_i \alpha(\nu_i^0 - \nu) \right] \right\}, \quad (1)$$

где  $\tau_i$  — оптическая толщина в центре  $i$ -й линии. Видно, что полинейный метод предполагает численное интегрирование осциллирующей функции (в общем случае число осцилляций равно числу спектральных линий в полосе). При этом трудоемкость расчетов увеличивается по мере того, как увеличивается резкость всплесков коэффициента поглощения на частотах центров линий, что, в свою очередь, приводит к уменьшению перекрывания линий. В случае слабого перекрывания линий можно предложить новый подход к расчету интегрального поглощения излучения в полосе. В основу его можно положить следующее представление для  $W(n)$ :

$$\begin{aligned} W(n) = & \sum_{i=1}^n W_i - \sum_{i_1, i_2, i_1+i_2} \int d\nu \prod_{k=1}^2 \{1 - \exp[-\tau_{i_k} \alpha(\nu_{i_k}^0 - \nu)]\} + \dots \\ & \dots + (-1)^{l+1} \sum_{\substack{i_1, \dots, i_l \\ i_\alpha + i_\beta}} \int d\nu \prod_{k=1}^l \{1 - \exp[-\tau_{i_k} \alpha(\nu_{i_k}^0 - \nu)]\} + \dots \\ & \dots + (-1)^{n+1} \int d\nu \prod_{i=1}^n \{1 - \exp[-\tau_i \alpha(\nu_i^0 - \nu)]\}, \end{aligned} \quad (2)$$

где  $W_i$  — эквивалентная ширина  $i$ -й изолированной линии.

Первый член в правой части (2) представляет собой эквивалентную ширину полосы  $W_n(n)$  в приближении неперекрывающихся линий, когда каждой линии соответствует свой ансамбль фотонов и эти ансамбли не перемешиваются; второй член учитывает перекрывание двух линий, т. е. перемешивание фотонов из двух различных ансамблей, третий член — трех и т. д. Назовем новую формулу (2) мультилинейным представлением для эквивалентной ширины полосы. Она доказывается методом математической индукции по  $n$  и, несмотря на свой громоздкий вид, оказывается полезной на практике по следующим причинам.

Дело в том, что (2) является асимптотическим разложением для  $W(n)$ , где в качестве главного члена выступает эквивалентная ширина полосы  $W_n(n)$  в приближении неперекрывающихся линий, поскольку  $l$ -й член убывает при увеличении расстояния между центрами линий и уменьшении оптических толщин в центрах линий (т. е. по мере приближения к ситуации неперекрывающихся линий)

как  $\int dv \prod_{\kappa=1}^l \tau_{i_\kappa} \alpha(v_{i_\kappa}^0 - v)$ . Следовательно, учет только первых нескольких членов в (2) будет давать значения  $W(n)$  тем точнее, чем оправданнее приближение неперекрывающихся линий. Кроме того, поскольку последующие члены в (2) в этой ситуации будут малой добавкой к  $W_n(n)$ , их можно оценивать приближенно с привлечением физических представлений о свойствах поглощения излучения в газах.

Расположим линии в полосе в порядке убывания оптических толщин  $\tau_i$  ( $\tau_1 \geq \tau_2 \geq \dots \geq \tau_n$ ) и воспользуемся приближенным соотношением

$$\int dv \prod_{i=1}^l \{1 - \exp[-\tau_i \alpha(v_i^0 - v)]\} \approx W_1 \prod_{i=2}^l \{1 - \exp[-\tau_i \alpha(v_i^0 - v_i^0)]\}. \quad (3)$$

Тогда, используя метод математической индукции по  $n$ , вместо (2) будем иметь

$$W(n) = \sum_{i=1}^n W_i + \Delta, \quad \Delta \approx \sum_{i=1}^{n-1} W_i \left\{ 1 - \exp \left[ - \sum_{\kappa=i+1}^n \tau_\kappa \alpha(v_i^0 - v_\kappa^0) \right] \right\}. \quad (4)$$

Приближенное соотношение (3) получено на том основании, что в случае слабого перекрытия линий в полосе перенос излучения осуществляется в небольшом спектральном интервале вблизи центра линии с максимальным  $\tau_1$  на фоне крыльев остальных линий, фигурирующих в интегралах (3) и для которых  $\tau_i \leq \tau_1$ . По-видимому, возможны и другие приближенные представления для  $\Delta$  в (4), однако приведенное отличается тем преимуществом, что оно помимо элементарных функций содержит только функции  $W_i$ , описывающие поглощение изолированными линиями, значения которых уже вычислены на стадии определения главного члена в мультилинейном представлении (2).

Мультилинейное представление (2) является точным. Оно характерно для любой полосы, любой комбинации полос, в том числе и в случае оптически неоднородных сред, если, конечно, сделать замену

$$\tau_i \alpha(v_i^0 - v) \rightarrow \int_0^l dz S_i(z) \alpha(v_i^0 - v; z) N(z), \quad (5)$$

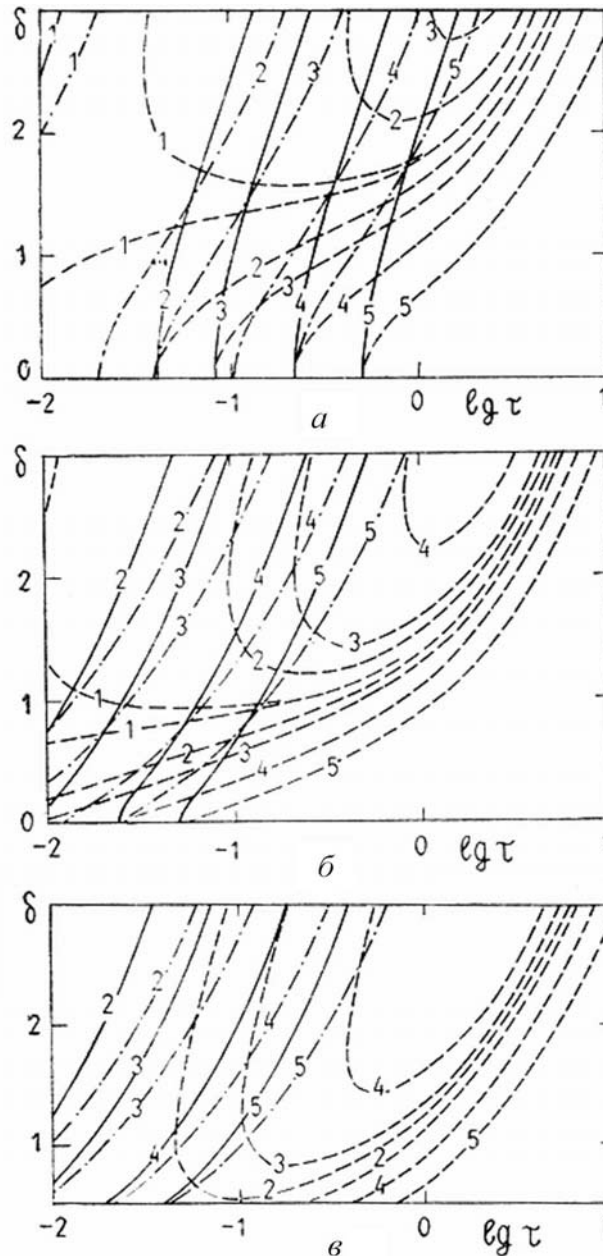
где  $l$  — геометрическая длина пути прохождения излучения;  $N(z)$  — концентрация поглощающих молекул в точке  $z$ .

Физические свойства поглощения и излучения молекулярной средой использовались только на стадии приближенной оценки  $\Delta$ . Причем их характер таков, что соотношения (3) при прочих равных условиях выполняются хуже всего в случае, когда все  $\tau_i = \tau_1$ . Так как крылья линий описываются лоренцевским контуром [2], то при тестировании приближенного соотношения (3) можно ограничиться случаем лоренцевского профиля. Отметим также, что в реальных колебательно-вращательных полосах полуширины  $\gamma_i$  и расстояния между соседними линиями  $|v_{i+1}^0 - v_i^0|$  меняются незначительно по сравнению с изменением интенсивностей  $S_i(\tau_i)$ . Поэтому представляется целесообразным проиллюстрировать полученные результаты не на единичных примерах конкретных полос, а на модельной наиболее критической ситуации в случае полосы из  $n$  идентичных равноотстоящих лоренцевских линий.

Численное интегрирование проводилось с использованием адаптивной квадратурной подпрограммы QVANC8 [5] с требованием знать конечный результат с относительной ошибкой RELERR =  $1 \cdot 10^{-7}$ . Эквивалентные ширины  $W_i$  для лоренцевских линий рассчитывались по алгоритмам, описанным в [6].

На рисунке представлены изолинии  $\sigma_1 = |1 - W(n)(1) / W_n(n)|$ ,  $\sigma_2 = |1 - W(n)(4) / W_n(n)|$  и  $\sigma_3 = |\Delta(4) / W_n(n)|$ . Видно, что в масштабе рисунка выполняется строгое неравенство  $\sigma_3 > \sigma_2$ , т. е. представление (4) дает также и критерий для строгой оценки ошибки, в пределах которой (4) выполняется. Кривые рисунка получены с помощью процедуры CONDEK [7], ось  $\delta = |v_1^0 - v_2^0| / \gamma_1$  разбивалась на 60 одинаковых интервалов, а ось  $\lg \tau$  — на 30.

В связи с этим отметим следующее. Для расчета интегрального поглощения излучения в молекулярных полосах в приближении неперекрывающихся линий разработан эффективный метод (например, [4]), основанный на введении и использовании универсальных функций для каждого типа молекул. Однако его практическое применение сдерживается отсутствием аналитических критериев оправданности названного приближения. Такой критерий можно получить, выражая по известной схеме [4] входящие в (4) суммы через соответствующие универсальные функции.



Изолинии относительных погрешностей для различных приближений при расчете эквивалентной ширины полосы, составленной из  $n = 2$  (а),  $n = 10$  (б),  $n = \infty$  (в) (эльзассеровская модель [3]): 1—0,1%; 2—1%; 3—2%; 4—5%; 5—10%. Сплошные линии соответствуют  $\sigma_1$ , штриховые —  $\sigma_2$ , штрихпунктирные —  $\sigma_3$

В заключение отметим, что предложенный подход может быть реализован и для других функций, используемых при описании переноса излучения в молекулярных полосах, например для функций пропускания.

1. McClatchey R.A., Benedict W.S., Clough S.A. et al. AFCRL Atmospheric Absorption Line Parameters Compilation. AFCRL-TR-73-0096. Envir. Research Papers. № 434. Bedford, 1973. 80 p.
2. Вайнштейн Л.А., Собельман И.И., Юков А.Е. Возбуждение атомов и уширение спектральных линий. М.: Наука, 1979.
3. Гуди Р.М. Атмосферная радиация. Ч. 1. Основы теории. М.: Мир, 1966.
4. Ishov A.G., Shved G.M. // J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer. 1988. V. 39. № 5. P. 399—407.
5. Форсайт Дж., Малькольм М., Моулер Е. Машинные методы математических вычислений. М.: Мир, 1980.
6. Ишов А.Г., Крымова Н.В. О математических свойствах функций, используемых при описании переноса излучения в линии с лоренцевским контуром // Труды ИЭМ. 1989. Вып. 20 (140).
7. Банковский Ю.М., Галактионов В.А., Михайлов Т.Н. Графор. Графическое расширение Фортрана. М.: Наука, 1985. 288 с.

Научно-производственное объединение «Тайфун»,  
г. Обнинск

Поступила в редакцию  
6 марта 1989 г.

**A. G. I shov, N. V. Krymova. Multilines Representation of the Total Absorption of Radiation in Molecular Bands.**

An asymptotic representation for the equivalent width of a band involving  $n$  spectral lines is obtained in the paper. The main term of the representation in the nonoverlapping lines approach is the equivalent bandwidth. The criterion for this representation validity within a required accuracy limit is also derived in the paper.