

СПЕКТРОСКОПИЯ АТМОСФЕРНЫХ ГАЗОВ

УДК 535.33:34

С.Д. Творогов

НЕКОТОРЫЕ АСПЕКТЫ ЗАДАЧИ О ПРЕДСТАВЛЕНИИ ФУНКЦИИ ПОГЛОЩЕНИЯ РЯДОМ ЭКСПОНЕНТ

Обсуждается проблема представления функции поглощения рядом экспонент, коэффициенты которого вычисляются непосредственно через характеристики спектральных линий.

О вычислении интегральных по спектру величин

При обсуждении многих радиационных задач возникает надобность найти величину $\tilde{G} = (1/\Delta\omega) \int_{\omega'}^{\omega''} d\omega G(k(\omega))$, когда спектральная (для частоты ω и интервал $\Delta\omega = \omega'' - \omega'$) оптическая плотность газа $\tau = \kappa l = k z$. Здесь $\kappa(\omega)$ – коэффициент молекулярного поглощения (см^{-1}); l – пройденное лучом расстояние; z – введенная должным образом безразмерная <длина>. Частным, но очень важным, примером \tilde{G} оказывается функция пропускания

$$P(z) = (1/\Delta\omega) \int_{\omega'}^{\omega''} d\omega \exp(-k(\omega) z). \tag{1}$$

Проблема вполне очевидна: <частокол> из очень большого числа спектральных линий делает прямое (line-by-line) вычисление \tilde{G} столь громоздким, что трудности перестают быть только техническими. (Особенно, если речь идет о <достаточно больших $\Delta\omega$ >, что характерно для геофизических приложений). Преодоление их посредством введения <k-представления> энергично обсуждается в [1–15], и сводку соответствующих формул приведем, чтобы иметь возможность конкретно на них ссылаться.

Функция (1) объявляется преобразованием Лапласа для $f(s)$:

$$P(z) = \int_0^\infty ds f(s) \exp(-zs), \quad f(s) = (1/2\pi i) \int_{a-i\infty}^{a+i\infty} dz P(z) \exp(sz) \tag{2}$$

с $a \geq 0$, и далее

$$g(s) = \int_0^s f(s') ds' = (1/2\pi i) \int_{a-i\infty}^{a+i\infty} dz (P(z)/z) \exp(sz) \tag{3}$$

с очевидными $g(0) = 0, g(\infty) = 1$. Теперь

$$\tilde{G} = (1/\Delta\omega) \int_{\omega'}^{\omega''} G(k(\omega)) d\omega = \int_0^1 G(g) dg \tag{4}$$

с $s = s(g)$ – функцией, обратной (3). Точное доказательство (4) – это, в сущности, вариация на тему теоремы Парсеваля.

Конечно, (4) радикально упростит проблему, если только $k(\omega)$ с ее многочисленными максимумами и минимумами перейдет в плавную $s(g)$. Надежда эта, подтвержденная, кстати, числовыми расчетами, основывалась на весьма прозрачной идее.

Величину $\exp(-sz)$ в (2) можно интерпретировать как <спектральную прозрачность с коэффициентом поглощения s >, а $f(s)$ – плотность вероятности того, что $k(\omega) = s$. Затем первый интеграл (2) трактуется как (1), в котором интервал $\Delta\omega$ предварительно разделен на участки с одинаковыми k . Величина (3) обретает смысл интеграла от плотности вероятности и должна быть монотонной функцией со всеми вытекающими отсюда последствиями для $s = s(g)$. (Термин < k -распределение> как раз и введен из подобных соображений). Собственно, первая проблема и сводится к точному доказательству монотонности (3) и $s = s(g)$.

Далее, формула (4) окажется полезной только при известной функции (3), но в определение последней уже входит (1). Авторы [1–15] предпочитают путь, когда привлекается какая-либо модель спектра, и для $P(z)$ появляется соответствующее выражение, которое и фигурирует явно в (2) и (3). Для оценки параметров модели (например, средней интенсивности линий, среднего расстояния между ними и т.п.) используется информация о характеристиках линий, применяется корректировка параметров по эмпирическим данным или расчетам line-by-line.

Довольно очевидны причины, по которым подобный подход к проблеме $g(s)$ должен быть объявлен приближенным. Во-первых, сам выбор модели существенно ограничен желанием иметь берущиеся интегралы (2) и (3) – в противном случае численный их расчет, по существу, вернул бы задачу к исходному (1). Во-вторых, возможность написать приемлемое выражение для $P(z)$ жестко регламентирована выбором контура линии; более того, обычно фигурирует описание, верное для резонансного поглощения, и существенная для $k(\omega)$ и $P(z)$ (см., например, [16]) проблема периферии контура фактически игнорируется. В-третьих, преобразования (2) и <обращение> (3) имеют неприятные особенности обратной задачи – они <раскачивают> ошибки $P(z)$. Кстати, последнее обстоятельство – серьезное препятствие тому, чтобы привлечь эмпирические аппроксимации функции пропускания.

Становится ясной вторая проблема – непосредственное вычисление $g(s)$ через характеристики спектральных линий, минуя этап модельного построения функции пропускания.

Наконец, третью проблему составляет выбор такой квадратурной формулы для интеграла (4), чтобы, например, в разложении (ряд Дирихле с числами α_n и λ_n)

$$P(z) = \sum_n a_n \exp(-\lambda_n z) \quad (5)$$

было минимальное число слагаемых. Здесь в качестве иллюстрации можно привести прием [17] решения уравнения переноса с неселективными характеристиками аэрозольного рассеяния света – эффективность его, в сущности, определяется числом членов ряда (5).

Конечно, все перечисленные проблемы – сугубо технические, и надобен только систематический и математически хорошо обоснованный прием, опирающийся на банки спектроскопической информации. Он из ложен в п. 2 и 3 и демонстрирует дополнительные его возможности при поиске приближенных вариантов решения обсуждаемой сейчас задачи.

2. Некоторые математические аспекты < k -представления>

Вопрос о связи $f(s)$ из (2) и $k(\omega)$ может показаться почти тривиальным: достаточно подставить выражение (1) во второе (2), переставить интегрирование по ω и z и, увидев после замены переменной $z = \alpha + i\xi$ представление δ -функции, написать

$$f(s) \Rightarrow (1/\Delta\omega) \int_{\omega'}^{\omega''} d\omega \delta(s - k(\omega)). \quad (6)$$

Знак \Leftrightarrow заменен на \Leftrightarrow , чтобы подчеркнуть, что перестановка $\int dz$ и $\int d\omega$ принята без доказательства.

Но интеграл (6) существует, если только $k'(\omega) \neq 0$ на $\Delta\omega$, и условие это совершенно не соответствует физическим обстоятельствам рассматриваемой задачи – «решетке» спектральных линий с многочисленными максимумами и минимумами. Математически это означает, что перестановка интегрирования (1) и второго (2) невозможна.

Однако такая операция допустима после подстановки (1) в (3), и итогом будет выражение

$$g(s) = (1/\Delta\omega) \int u(\omega) d\omega ; \quad (7)$$

$$k(\omega) \leq s, \quad \omega \in [\omega' \omega''] .$$

В (7) $u(\omega) = 1$ везде, кроме точки $k(\omega) = s$, где $u = 1/2$. Все связанные с (6) и (7) математические детали собраны в Приложении 1.

Из соотношения (7) и поясняющего его рис. 1 становится понятным рис. 2 и его следствие – рис. 3. Монотонность (4) и $s = s(g)$, принимаемые прежде как весьма правдоподобная гипотеза, оказываются здесь точно доказанным фактом.

По (7) функция $g(s)$ вычисляется непосредственно через характеристики спектральных линий, и, естественно, нужно использовать контур линии. Нет никаких проблем с перекрывающимися спектрами разных газов (с коэффициентами поглощения k_1, k_2 и т.д.) – достаточно в (7) заменить k на $k_1 + k_2 + \dots$. Столь же очевидно и обобщение для неоднородной среды: k заменяется на величину $\int k(\omega, l) dl$ – интеграл от коэф. фициента поглощения по трассе луча.

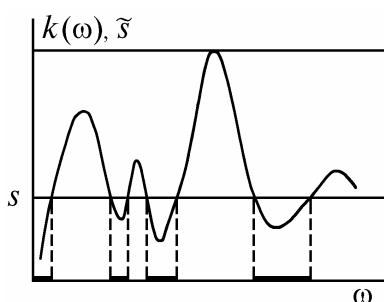


Рис. 1. Функция $g(s)$ – сумма интервалов, отмеченных на оси абсцисс

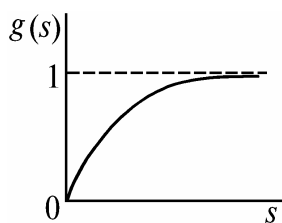


Рис. 2. «Плато» соответствует \tilde{s} с рис. 1

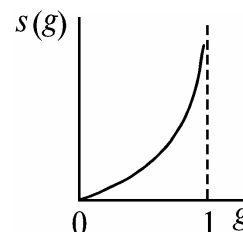


Рис. 3. Функция, обратная $g(s)$, – см. рис. 2

Первая и вторая задачи, о которых шла речь в п. 1, уже получили ответ, а решению третьей должно предшествовать небольшое предисловие.

Вопрос о ряде Дирихле типа (5) – но теперь слева стоит достаточно произвольная $F(z)$ – исчерпывающе исследован в [18–20]. Числа λ_n должны быть простыми корнями некоторой подходящей целой функции $L(\lambda)$ комплексной переменной λ ; абсциссы a_n будут контурными интегралами от F и L . (Некоторые детали есть в Приложении 2). В последующих вычислениях фигурирует разложение экспоненты

$$\exp(-\lambda z) = \sum_n \frac{L(\lambda)}{\lambda - \lambda_n} \frac{1}{L'(\lambda_n)} \exp(-\lambda_n z) . \quad (8)$$

Выбор $L(\lambda)$ жестко регламентирован условием сходимости ряда Дирихле, сходимостью его к своей $F(z)$ и скоростью сходимости. Впрочем требования эти значительно проще, если $z > 0$; т.е. существование L несомненно. И окончательно проблему построения ряда Дирихле решают выражения

$$a_n = \int_0^1 \frac{L(s(g))}{s(g) - \lambda_n} dg \frac{1}{L(\lambda_n)} = \int_0^\infty \frac{L(s) f(s) ds}{(s - \lambda_n) L'(\lambda_n)}. \quad (9)$$

Формулы (9) – результат подстановки (8) в (1) (с $\lambda = k(\omega)$), последующего применения (4) и затем (3).

У (9) есть совершенно ясная математическая интерпретация: в качестве L должны фигурировать полиномы, ортогональные с весом $f(s)$, λ_n – корни этих полиномов, и (9) оказываются абсциссами квадратурных формул Гаусса. Выясняется и смысл самой оптимизации – ведь из всех квадратурных формул именно гауссовы предполагают вычисление подынтегральной функции в минимальном числе точек. Фактически проблема возвращается к функции (7), ибо $f(s) = g'(s)$ в силу (3).

Теперь надобно обсудить частную, но прагматически существенную проблему, связанную с конкретным построением $L(s)$ в (9). Хорошо известная (например, [21]) процедура предполагает здесь предварительное вычисление μ_n – «моментов функции $f(s)$ », и соотношения (1)–(3) дают цепочку

$$\mu_n = \int_0^\infty s^n f(s) ds = (\delta_{n0} + n \int_0^\infty (1 - g(s)) s^{n-1} ds) = (-1)^n P^{(n)}(0). \quad (10)$$

Очень часто при аппроксимации числовой информации о $P(z)$ (эмпирической, или после расчетов line-by-line) аргументом подбираемого выражения оказывается z в придробной степени. И это отнюдь не случайно – для дисперсного контура $z \gg 1$ величина (1) – функция от \sqrt{z} , а $1 - P \propto z$, если $z \ll 1$ (см. анализ в [22]); естественным выглядит поэтому стремление описать поведение, например $\ln P$, для всех z степенью этой величины между 1 и 1/2.

Однако для подобных функций цепочка (10) формально не существует, и математическая тому причина – она обусловлена появлением точек ветвления в комплексной плоскости z – обсуждается в Приложении 4. Подобную ситуацию надо, конечно же, истолковывать как свидетельство очень существенного «раскачивания ошибки» (здесь ее источник – приближенная аппроксимация $P(z)$) – момент, уже упоминавшийся в п. 1 во время предварительного обсуждения задачи. Становится понятным, что всю процедуру построения μ_n придется, даже имея некую аппроксимацию $P(z)$, исполнять численно по (2), (3) и соответствующему определению из (10) или же пытаться подобрать подходящую аппроксимацию для $f(s)$.

Обсуждаемый вопрос оказывается в известной степени принципиальным, ибо точки ветвления, а стало быть, и надобность вводить разрез плоскости, возникают для любого радикала и в том числе для тех, которые почти всегда появляются в моделях полос поглощения.

И здесь имеет смысл отметить новые прагматические преимущества процедуры (7) – она очень радикально, особенно в сочетании со вторым выражением из (10), должна уменьшить необходимую для построения L (в (9)) вычислительную работу.

3. Приближенное построение ряда экспонент для функции (1)

Общие свойства рядов Дирихле предоставляют возможность найти довольно простое (но, разумеется, приближенное) решение проблемы (5), если соединить их с некоторыми особенностями (1).

Молекулярный коэффициент поглощения $\kappa(\omega) = \sum_j S_j \kappa_j(\omega, \omega_j)$ – сумма по спектральным линиям с центрами ω_j , интенсивностями S_j и контуром κ_j ; будем полагать, что \sum_j включает линии всех газов, участвующие в поглощении частоты ω .

Уже упоминавшиеся модели спектров были популярны в атмосферной оптике долазерной и докомпьютерной эпохи – см., например, обзор в [22], но, как оказалось, компьютеры сняли проблему прямым line-by-line. Правда, появились свои трудности – гигантское число линий в \sum_j , и главное, проблема периферии контура.

Можно, однако, обойти эти сложности, если воспользоваться довольно ясным приемом [23]. При данном ω разделим линии на две группы (см. рис. 4), образующие κ' и $\tilde{\kappa}$ в κ . Первую

составляют непосредственно примыкающие к ω линии (из интервала $\delta \omega$, не обязательно совпадающего с $\Delta\omega$) с характерным для малых смещенных частот $|\omega - \omega_j|$ дисперсионным контуром (α_j – полуширина линии, и сдвиг центра включен в ω_j) $\kappa_j^{(\omega)} = (\alpha_j/\pi)((\omega - \omega_j)^2 + \alpha_j^2)^{-2}$.

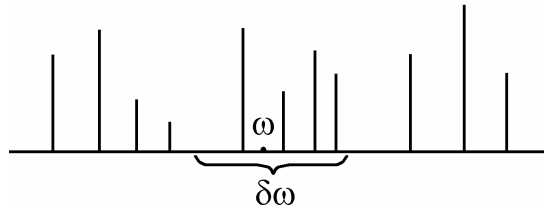


Рис. 4. Линии из $\delta \omega$ образуют κ' , остальные – $\tilde{\kappa}$

Другая группа – удаленные линии, участвующие в поглощении ω своими крыльями, и здесь существенны два момента. Во-первых, возможно параметрическое описание сразу всей совокупности подобных линий, что, по существу, устраняет надобность суммировать большое их число. Во-вторых, $\tilde{\kappa}$ оказывается весьма медленной функцией ω , и после подстановки $\kappa = \kappa' + \tilde{\kappa}$ в (1) за знак $\int d\omega(\dots)$ можно вынести $\exp(-\tilde{\kappa}l)$, включив затем $\tilde{\kappa}$ в λ_n из (5).

Как выясняется, реализация этой идеи гарантирует экспериментальную точность расчета (см. примеры для атмосферных газов в [16, 23]). Прагматическая выгода тоже очевидна: (1) становится задачей о функции пропускания с несколькими линиями с дисперсионным контуром. Именно такая функция (1) (с $\kappa \Rightarrow \kappa'$; ее обозначение – P_m с m – числом линий в сумме κ') рассматривалась в [22, 24] (см. еще [25], где идея используемого здесь приема восходит к давней статье [26]), и далее прокомментированы конечные выражения.

Пусть

$$A = \int_{\omega'}^{\omega''} \left(1 - \exp \left(- \frac{l S \alpha}{\pi} \frac{1}{(\omega - \omega_0)^2 + \alpha^2} \right) \right) d\omega \quad (11)$$

– функция поглощения одной линии с интенсивностью S , полушириной α , и центром ω_0 .

Тогда

$$P = 1 - A, \quad S = (\beta_2 - \beta_1) \sum_{j=1}^m S_j \Gamma_j,$$

$$\Gamma_j = \arctg((\omega' - \omega_j) / \alpha_j) + \arctg((\omega'' - \omega_j) / \alpha_j),$$

$$\beta_1 = \arctg((\omega' - \omega_0) / \alpha), \quad \beta_2 = \arctg((\omega'' - \omega_0) / \alpha). \quad (12)$$

В сумме (12), как и в выражении (7), линии поглощения могут принадлежать разным газам, а (11) легко обобщить на случай с доплеровским уширением. Отметим также, что (11) и (12) гарантируют правильную асимптотику <достаточно слабое поглощение> для A .

Величины α и ω_0 должны быть объявлены параметрами, подобранными так, чтобы исполнялась асимптотика <достаточно сильное поглощение>. Хорошо известно [22], что в этом варианте величину (11) определяет участок интегрирования $(\omega - \omega_j)^2 \gg \alpha^2$, и это же правило сохраняется для функции поглощения с несколькими линиями. Возникает поэтому весьма очевидное требование: для ω достаточно далеких от ω_j ,

$$S \alpha / (\omega - \omega_0)^{-2} \cong \sum_j S_j \alpha_j / (\omega - \omega_j)^{-2}. \quad (13)$$

Очевидно также, что (12) и (13) дадут правильный результат в предельном случае $m = 1$.

То обстоятельство, что $\Delta\omega$ и $\delta\omega$ (рис. 4) не обязательно совпадающие, предоставляет очевидную прагматическую возможность улучшить приближение.

Разделим интервал $\Delta\omega$ на участки $\Delta\omega_j$ так, чтобы внутри $\Delta\omega_j$ находилась лишь одна линия с центром ω_j ; через $P_m\{\Delta\omega_j\}$ обозначим функцию пропускания для m линий и произвольного $\Delta\omega$. Очевидно, что

$$P_m\{\Delta\omega\} = \sum_{j=1}^m P_m\{\Delta\omega_j\} (\Delta\omega_j/\Delta\omega) \quad (14)$$

и для $P_m\{\Delta\omega_j\}$ применим ведущий к (11), (12) прием. Теперь Γ_j из (12) надо заменить на $\Gamma_{jj'}$, когда индекс j' нумерует линии, а j – интервалы в (14). И, конечно же, теперь в (13) нет никаких проблем с выбором ω .

Формула (14), кстати, описывает еще одну правильную асимптотику – ситуацию, когда можно пренебречь перекрытием линий. Здесь $\Gamma_{jj'} = \delta_{jj'}$, и (11)–(14) превратятся в асимптотическую сумму из функций пропускания изолированных линий.

Другое важное следствие состоявшегося анализа – совершенно естественное определение той безразмерной <длины> z , которая была введена еще в (1). Из (11) следует, что имеет смысл положить

$$z = (1/2 (\beta_2 - \beta_1)) \alpha \pi \sum_{j=1}^m S_j \Gamma_j \quad (15)$$

с обозначениями из (12). Конечно, после разбиения (14) в $P_m\{\Delta\omega_j\}$ стоит соответствующая величина (15).

При разложении (11) в ряд Дирихле в качестве $L(\lambda)$ должны фигурировать полиномы Чебышева (см. Приложения 2 и 3). Непосредственные вычисления показывают, что число членов ряда (5) не превосходит пяти даже для <предельно больших z >. Конечно, величины (15) свои для каждого слагаемого (14), и общее число слагаемых оказывается значительным. Однако проблема эта разрешается очень просто.

Действительно, пусть z_j – значение (15) для j -го интервала в (14), и $P_m\{\Delta\omega_j\} = \sum_{n=1}^N \alpha_n^{(j)} \exp(-\lambda_n z_j)$ с известными $\alpha_n^{(j)}$, λ_n и целым N . (Последнее регламентируется желаемой точностью расчета).

К $\lambda_n z_j$ добавим $k^{(j)} z_j$, соответствующее \tilde{k} – см. обсуждение рис. 4, введем (15) для всего интервала, и затем – величины $b_j = z_j/z$. Применив к $\exp(-z\lambda_r^{(j)})$ с $\lambda_r^{(j)} = b_j(\lambda_n + \lambda^{(j)})$ разложение (8), получим, что

$$P = \sum_{n=1}^N D_n \exp(-\lambda_n z); D_n = \sum_j \sum_{n=1}^N (\Delta\omega_j/\Delta\omega) \alpha_r^{(j)} \frac{L(\lambda_n)}{(\lambda_r^{(j)} - \lambda_n) L'(\lambda_n)}. \quad (16)$$

Возможность сохранить в (16) прежнее N следует просто из числовых оценок.

Числовой анализ задачи о разложении функции (11) выполнен Л.И. Несмеловой, и тонкости построения L в (9) стали понятными после расчетов О.Б. Родимовой, за что автор выражает им свою искреннюю признательность.

Работа поддержана Министерством энергетики США (DOE) через Grant No DE-FG02-91ER61128 ARM Program.

Приложение 1

Из (6) следует, что достаточно знать поведение подынтегральной функции в окрестности $\tilde{\omega}$ – некоего корня уравнения $k(\omega) = s$, т.е. можно писать

$$k(\omega) = s + k'(\tilde{\omega})(\omega - \tilde{\omega}) + (1/2) k''(\tilde{\omega})(\omega - \tilde{\omega})^2 + \dots$$

Подставляя это разложение в алгебраическое представление δ -функции $\delta(x) = \frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0} \eta (x^2 + \eta^2)^{-1}$ и

ограничиваясь при $k(\tilde{\omega}) \neq 0$ только первыми двумя членами разложения, получим $(\eta k(\omega) \Rightarrow \varepsilon)$

$$\delta(x - k(\omega)) = \frac{1}{\pi} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{|k(\tilde{\omega})|} \frac{e}{(\omega - \tilde{\omega})^2 + \varepsilon^2} = \frac{1}{|k(\tilde{\omega})|} \delta(\omega - \tilde{\omega}).$$

Вкладом этих точек в (7) будет $(\Delta\omega)^{-1} |k(\tilde{\omega})|^{-1}$.

Если же $k'(\omega)=0$ (а такая ситуация возникает немедленно, как только линия $s = \text{const}$ на рис. 1 касается максимума или минимума), в разложении $k(\omega)$ придется использовать слагаемое $(1/2) k''(\tilde{\omega})(\omega - \tilde{\omega})^2$, и вычисления по предыдущему сценарию η не устраняют – оно оказывается в знаменателе, и интеграл (6) обращается в ∞ .

Еще одна попытка устранить (в духе обобщенного интегрирования) расходимость в (6) – асимптотическая оценка интегралов

$$(1/2 \pi i) \int_{a-i\infty}^{a+i\infty} dz (1/\Delta\omega) \int_{\omega'}^{\omega''} d\omega \exp(-k(\omega)z + sz).$$

Здесь перестановка интегралов необходима ради того, чтобы понять роль точек $\tilde{\omega}$.

Теперь подстановка разложения $k(\omega)$ вернет, при выполнении $k'(\tilde{\omega}) \neq 0$, к уже рассмотренному: после стандартного асимптотического интегрирования по ω появится $2 |k'(\tilde{\omega})| z$, и возникающий далее $\int dz$ равен $1/2$. Если же $k'(\tilde{\omega}) = 0$, то в асимптотической оценке должен участвовать член $\propto (\omega - \tilde{\omega})^2$, что приведет к множителю $\sim 1/\sqrt{z}$, и теперь $\int dz$ окажется расходящимся.

В математическом анализе хорошо известно (см., например, [27]), что равенство (для некоторой $\varphi(\omega, z)$)

$$\int_{\omega'}^{\omega''} d\omega \int_{a-i\infty}^{a+i\infty} dz \varphi(\omega, z) = \int_{a-i\infty}^{a+i\infty} dz \int_{\omega'}^{\omega''} d\omega \varphi(\omega, z)$$

существует только при равномерной сходимости относительно ω интеграла с бесконечными пределами, т.е. когда

$$\left| \int_B^{B'} dz \varphi(\omega, z) \right| < \varepsilon.$$

Последнее условие сопровождается стандартным комментарием: для любого $\varepsilon > 0$ найдется такое B_0 , что выписанное неравенство будет выполняться для всех ω , если $B > B' > B_0$.

Подстановка (1) во второе (2) или в (3) обретает прагматический смысл, когда возможно перейти к $\int d\omega \int dz$ – ведь только тогда $\int dz$ вычисляется явно. В варианте с (1) и (2) функция $\varphi(\omega, z) = \exp z(s - k(\omega))$, и интеграл в критерии равномерной сходимости пропорционален $(2(s - k(\omega)))^{-1} \sin[(s - k(\omega))(B - B')]$. Понятно, что можно $(B - B')$ заменить на ∞ , и тогда последнее выражение превратится в $\delta(s - k(\omega))$, уже прежде исследованное и гласящее, по существу, об отсутствии равномерной сходимости.

В случае (3) функция $\varphi(\omega, z) = (1/z) \exp z(s - k(\omega))$, и при достаточно больших B и B' в оценке равномерной сходимости фигурирует

$$(B(s - k(\omega)))^{-1} \sin[(s - k(\omega))(B - B')].$$

Если $s \neq k(\omega)$, то последнее выражение окажется нулем при $B \Rightarrow \infty$; когда $s = k(\omega)$, появляется не зависящее от ω число $(B - B')/B$. Собственно, это и означает равномерную сходимость $\int dz$.

Добавим еще, что после подстановки (1) в (3) и смены порядка интегрирования возникает хорошо известный (например, [28]) интеграл

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{a-i\infty}^{a+i\infty} \frac{dz}{z} \exp z (s - k(\omega)) = \begin{cases} 1, & s > k(\omega) \\ (1/2), & s = k(\omega), \\ 0, & s < k(\omega) \end{cases}$$

что приводит к (7).

Приложение 2

Один из результатов теории рядов Дирихле гласит: если $z > 0$, то

$$\frac{1}{2\pi i r!} \int_{a-i\infty}^{a+i\infty} dz \frac{F(z)}{z} \exp(s z) \sum_{n=1}^{n'} (s - \lambda_n)^r a_n, \quad a > 0$$

для целых r и $\lambda_{n'} < s < \lambda_{n'+1}$. После подстановки (1) вместо F вычисление интеграла в последнем выражении буквально повторяет вывод (7),

$$\frac{1}{\Delta\omega} \int_{k(\omega) \leq s} u(\omega) (s - k(\omega))^r d\omega = \sum_{n=1}^{n'} (s - \lambda_n)^r a_n, \quad s \in [\omega', \omega''].$$

Математическая интерпретация подобных соотношений достаточно очевидна – для тех $g(s)$, свойства которых фиксирует рис. 2, функция $L(\lambda)$ должна иметь нули, всюду плотно заполняющие конечный интервал, и из них выбирается последовательность корней тех полиномов, которые ортогональны с весом $f(s)$.

Применим эти результаты к $F(z) = I_n(z)$ – модифицированной функции Бесселя; они возникают в выражении (11). (См., например, [22]).

Для вычисления возникающего интеграла используем контур с рис. 5 (с возможностью, при надобности, обойти $z = 0$ по полуокружности с радиусом ρ); ясно, что для нашей подынтегральной функции интеграл по такому контуру равен нулю. При достаточно большом T на участках (I–II) и (III–IV) функцию I_n заменим ее асимптотическим выражением $\sim (\xi \pm i\infty) \exp(\pm(\xi + iT))$, и после оценки по модулю

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T^{1/2}} \int_0^{a/T} \frac{dy}{(y^2 + 1)^{3/4}} = 0.$$

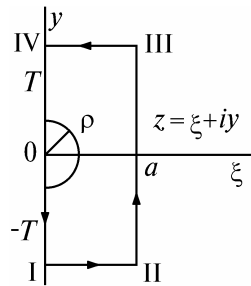


Рис. 5. $T \Rightarrow \infty$, и $\rho \Rightarrow 0$

Исследуемый интеграл обретает вид ($z = iy$, $I_n(iy) = i^n J_n(y)$, J_n – обычная функция Бесселя.

$$\frac{i^{n-1}}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{y} J_n(y) (\cos sy + i \sin sy) = \begin{cases} 0, & s \geq 1, \\ (-1)^n (1/\pi n) \sin(n \arcsin s), & s \leq 1, \quad n - \text{четное}, \\ (-1)^{(n+1)/2} (1/\pi n) \cos(n \arcsin s), & s \leq 1, \quad n - \text{нечетное}. \end{cases}$$

Надобность в полуокружности появляется только при $n = 0$ и с \cos ; впрочем, на конечный результат это не влияет.

Последняя формула прекрасно иллюстрирует прежний общий вывод – ведь s меняется непрерывно, и $n \rightarrow \infty$ в (5) означает переход к интегралу. Все проблемы ряда Дирихле сводятся к существованию интеграла в смысле Римана, и положительный ответ для рассматриваемого сейчас случая почти очевиден.

Действительно, разделим интервал $[0, 1]$ на малые участки $\Delta\lambda$ (с индексом q), и, полагая все $\lambda_n = \lambda_q$ на каждом из них, получим выражение $\sum_q \exp(-\lambda_q z) \sum_{n \in q} \alpha_n$; понятно, что

$\sum_{n \in q} \alpha_n = H(\lambda_{q+1}) - H(\lambda_q) \stackrel{\partial H}{\partial s} \Delta\lambda$ с H – значением последнего интеграла. Видно, как сумма по n переходит в интеграл, давая соответствующее интегральное представление для I_n .

Единственное условие относительно $L(\lambda)$ – иметь должным образом расположенные корни. Последнее выражение, в сущности, гласит, что в качестве L должны фигурировать полиномы Чебышева – см. перечень их свойств, например, в [29]. Это решает вопрос о выборе L , когда для (1) используется приближение <изолированная линия>.

Приложение 3

После несложных замен переменных (11) приводится к виду

$$W \equiv \Delta \omega A = \int_{-\pi}^{\pi} (1 - \exp[-z(1 + \cos \psi)]) \frac{d\psi}{1 + \cos \psi},$$

если, считая интервал $\Delta\omega$ достаточно большим, положим в (12) и (15) $\beta_{1,2} = \mp(\pi/2)$. Разумеется, последний интеграл хорошо известен: $K = 2\pi(I_0(z) + I_1(z))$ с модифицированными функциями Бесселя.

Выбирая в качестве $L(\lambda)$ полиномы Чебышева, сможем написать, что

$$K = \frac{2\pi}{N} \sum_{n=1}^N \frac{1 - \exp(-z(1 + \cos \psi_n))}{1 + \cos \psi}$$

с $\psi_n = (2n - 1)/2N$. Следовательно, при построении (16) $\lambda_n = 1/\alpha_n = 1 + \cos \psi_n$.

Приложение 4

Напомним очень кратко процедуру доказательства (10) в теории преобразования Лапласа.

После подстановки (2) в определение μ_n из (10), замены переменной $z = a + iy$ и предела $a \Rightarrow 0$ получим $\mu_n = \int_{-\infty}^{\infty} ds s^n \int_{-\infty}^{\infty} dy P(iy) \exp(iys)$.

Уже использовано то обстоятельство, что обратное преобразование Лапласа дает $f(s) = 0$ при $s < 0$ (поэтому интегрирование по s формально выполняется от $-\infty$). Но главное здесь то, что $a \Rightarrow 0$ возможно только для регулярной в точке $z = 0$ функции $P(z)$ – исходное (1) это гарантирует. Перестановка интегрирований в последнем выражении очевидна, $\int ds(\dots)$ даст $i^{-n} \delta^{(n)}(y)$, и свойства δ -функции приведут к последнему выражению цепочки (10).

Однако при эмпирической аппроксимации $P(z)$ функциями с дробными степенями z она перестает быть регулярной в нуле – эту точку ветвления придется устранить разрезом вдоль отрицательной части вещественной оси, и предыдущие упрощения μ_n станут невозможными. Понятно, что разрез плоскости, где бы он ни начинался, регламентирует, и существенно, аналитические свойства $P(z)$ и $f(s)$ и, следовательно, взаимоотношения между ними.

Теперь – о возможности использовать в (10) аппроксимации $f(s)$. Те $f(s)$, которые соответствуют (3) и рис. 2, можно аппроксимировать, например, выражениями вида

$$f(s) = (1/\Gamma((v+1)/\gamma)) s^v \exp(-hs^\gamma)$$

с параметрами h , v и γ . (Гамма-функция фигурирует как <множитель нормировки> – см. (10) для $n=0$). Далее надо написать (2) с $f(s)$ и найти параметры, используя для $P(z)$ подходящее эмпирическое или модельное выражение.

1. Jamamoto G., Tanaka M., Asano S. //J. Atmos. Sci. 1970. V. 27. P. 282.
2. Lacis A. A., Hansen J. E. //J. Atmos. Sci. 1974. V. 31. P. 118.
3. Liou K. N., Sasamori T. //J. Atmos. Sci. 1975. V. 32. P. 2166.
4. Arking A., Grossman K. //J. Atmos. Sci. 1972. V. 29. P. 937.
5. Ming-Dah Chou, Arking A. //J. Atmos. Sci. 1981. V. 38. P. 798.
6. Wei-Chyung Wang, Guang-Yu Shi //JQSRT. 1988. V. 39. N 5. P. 387.
7. Xun Zhu //JQSRT. 1992. V. 47. N 3. P. 159.
8. Si-Chee Tsay, Stamnes K., Jayweera K. //JQSRT. 1990. V. 43. N 2. P. 133.
9. Goody R., West R., Chen L., Crisp D. //JQSRT. 1989. V. 42. N 6. P. 539.
10. Xun Zhu //J. Atmos. Sci. 1989. V. 46. N 4. P. 511.
11. Phillips W. J. //JQSRT. 1990. V. 43. N 1. P. 13.
12. Xun Zhu //JQSRT. 1991. V. 45. N 1. P. 33.
13. Riviere Ph., Soufiani A., Taine J. //JQSRT. 1992. V. 48. N 2. P. 187.
14. Lacis A. A., Oinas V. //J. Geophys. Res. 1991. V. 96(D). P. 9027.
15. Malkmus G. W. //LQRST. 1988. V. 40. N 3. P. 201.
16. Несмелова Л. И., Родимова О. Б., Творогов С. Д. Контур спектральной линии и межмолекулярное взаимодействие. Новосибирск: Наука, 1986. 215 с.
17. Van de Hulst H. C., Irvin W. M. //Meteor. Soc. Roy. Sci. Liege. 1963. Ser. 5, 7. N 1. P. 78.
18. Леонтьев А. Ф. Ряды экспонент. М.: Наука, 1976. 534 с.
19. Леонтьев А. Ф. Последовательность полиномов из экспонент. М.: Наука, 1980. 384 с.
20. Леонтьев А. Ф. Целые функции. Ряды экспонент. М.: Наука, 1980. 172 с.
21. Березин И. С., Жидков Н. П. Методы вычислений. Т. 1. М.: Наука, 1959. 421 с.
22. Зуев В. Е. Прозрачность атмосферы для видимых и инфракрасных лучей. М.: Сов. радио, 1966. 318 с.
23. Несмелова Л. И., Родимова О. Б., Творогов С. Д. //Изв. РАН, Сер. ФАО. 1988. Т. 24. N 2. С. 212.
24. Зуев В. Е., Творогов С. Д. //Изв. вузов <Физика>. 1985. N 2. С. 170.
25. Мицель А. А., Руденко В. П., Фирсов К. М. //Оптика атмосферы. 1988. Т. 1. N 2. С. 45.
26. Matossi P., Mayer R., Rausher E. // Phys. Rev. 1949. V. 76. N 6. P. 1049.
27. Фихтенгольц Г. М. Курс дифференциального и интегрального исчисления. Т. II. М.: ГИФМЛ, 1959. 807 с.
28. Лаврентьев М. А., Шабат Б. В. Методы теории функций комплексного переменного. М.: ГИФМЛ, 1968. 677 с.
29. Бейтмен Г., Эрдейи А. Высшие трансцендентные функции. Т. 1. М.: Наука, 1974. 295 с.

Институт оптики
атмосферы СО РАН, Томск

Поступила в редакцию
26 ноября 1993 г.

S. D. Tvorogov. Some Aspects of a Problem of Representation of the Absorption Function as a Series of Exponents.

The problem of representation of the absorption function as a series of exponents with the coefficients expressed directly in terms of characteristics of spectral lines is discussed.