

Модель расчета переноса излучения на основе открытой базы данных HITRAN

Слынько Ю. В.

Аннотация: Создана программа расчета переноса излучения, использующая самую точную на сегодняшний день модель – «line-by-line». В качестве базы данных спектров использовалась известная открытая база данных HITRAN. Программа позволяет вычислять перенос излучения для произвольного состава газов, неоднородной трассы и температур от 100К до 3000К.

Модель переноса излучения в газах является важной проблемой современной

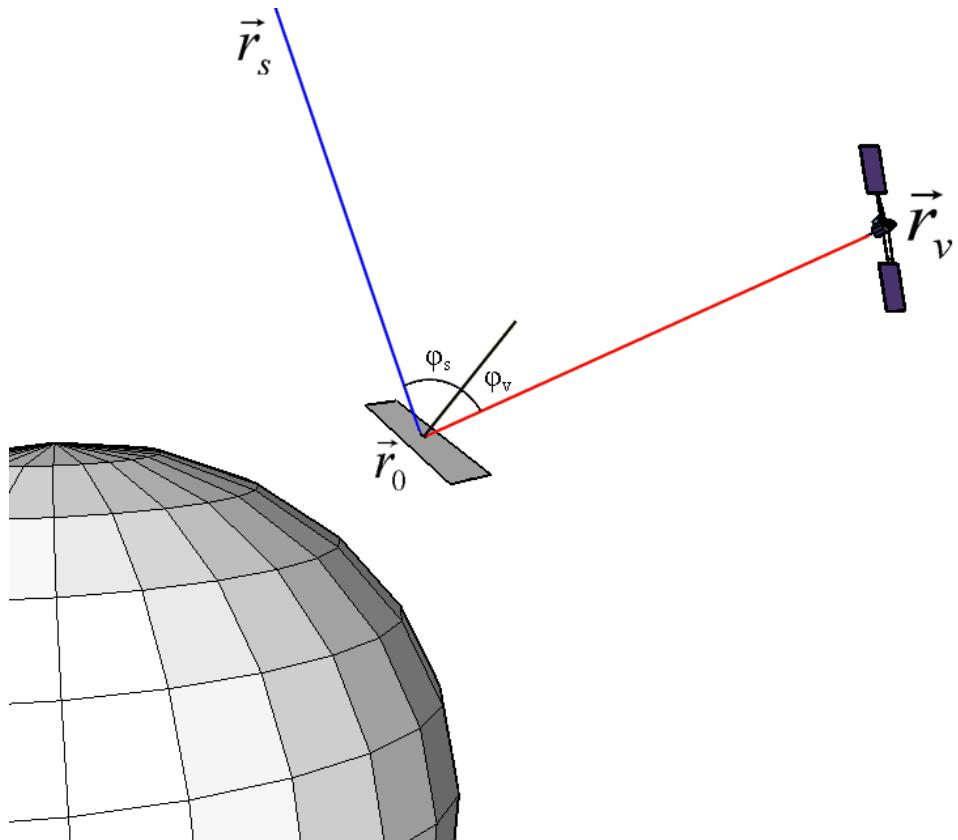


Рис. 1. Схема наблюдения.

физики атмосферы. Она входит составной частью в комплексную модели фона.

В данной работе рассмотрен метод вычисления поглощения ИК излучения в атмосфере. Предложенный метод учитывает поглощение каждой отдельной линией

большинства газов и их изотопических вариантов. Он также учитывает рассеяние излучения на аэрозолях, изменение температуры, плотности, давления и процентного соотношения газов и аэрозолей на трассе.

Модель поглощения газов в данной работе основана на базе данных HITRAN – самой полной на сегодняшний день базе данных линий поглощения газов.

Спектральная плотность энергетической яркости (СПЭЯ) излучения $B_\nu(\vec{r}, \vec{l})$ как функция координат \vec{r} и направления \vec{l} (частота $\nu = 1/\lambda$ - параметр, λ - длина волны) подчиняется уравнению переноса излучения

$$\vec{l} \nabla B_\nu(\vec{r}, \vec{l}) = -\alpha_\nu(\vec{r}) B_\nu(\vec{r}, \vec{l}) + E_\nu(\vec{r}, \vec{l}) \quad (1)$$

где $\alpha_\nu(\vec{r}) = \beta_\nu(\vec{r}) + \sigma_\nu(\vec{r})$ - спектральный показатель ослабления (на единицу длины), $\beta_\nu(\vec{r})$ - спектральный показатель поглощения с учетом индуцированного излучения, $\sigma_\nu(\vec{r})$ - спектральный показатель рассеяния,

$$E_\nu(\vec{r}, \vec{l}) = \frac{\sigma_\nu(\vec{r})}{4\pi} \int_{4\pi} B_\nu(\vec{r}, \vec{l}') \chi_\nu(\vec{r}, \vec{l}, \vec{l}') d\vec{l}' + E_{\nu in}(\vec{r}) \quad (2)$$

– функция источника, состоящая из компонент, описывающих рассеяние (первое слагаемое) и истинное излучение $E_{\nu in}(\vec{r})$,

$\chi_\nu(\vec{r}, \vec{l}, \vec{l}')$ - спектральная индикатриса рассеяния, нормированная так, что

$$\frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} \chi_\nu(\vec{r}, \vec{l}, \vec{l}') d\vec{l}' = 1 \quad (3)$$

В данной работе рассматривается случай отражения солнечного света от подстилающей поверхности. При этом используется приближение однократного рассеяния. В таком приближении свет рассеивается (отражается) только один раз, будь то рассеяние на аэрозолях или отражение от подстилающей поверхности.

В таком приближении интегрирование уравнений (1) и (2) дает следующее выражение:

$$B_v = \left(B_0 + \sigma_0 \chi_0 B_s(\vec{r}_0) \right) \exp\left(- \int_{\vec{r}_0}^{\vec{r}_v} \alpha d\vec{r} \right) + \int_{\vec{r}_0}^{\vec{r}_v} B_s(\vec{r}_2) (\overline{\sigma \chi}) \exp\left(- \int_{\vec{r}_2}^{\vec{r}_v} \alpha d\vec{r} \right) d\vec{r}_2 \quad (4)$$

Здесь:

\vec{r}_0 - радиус-вектор точки отражения света от подстилающей поверхности,

\vec{r}_s - радиус-вектор солнца,

\vec{r}_v - радиус-вектор наблюдателя,

$B_v = B_v(v)$ - искомое излучение на приемнике (в точке \vec{r}_v),

$B_0 = B_0(v)$ - собственное излучение подстилающей поверхности в направлении наблюдателя,

$\sigma_0 = \sigma_0(v)$ - коэффициент отражения подстилающей поверхности,

$\chi_0 = \chi_0(v, \varphi_s, \varphi_v, \psi)$ - индикаториса отражения подстилающей поверхности, зависящая от углов падения φ_s , рассеяния φ_v б азимутального угла между плоскостями падения и рассеяния ψ ,

$B_s = B_s(\vec{r}, v)$ - солнечное излучение в точке \vec{r} , вычисляемое по формуле:

$$B_s(\vec{r}) = B_s(\vec{r}_s) \exp\left(- \int_{\vec{r}_s}^{\vec{r}} \alpha d\vec{r} \right) \quad (5)$$

$\alpha = \alpha(v, T(\vec{r}), p(\vec{r}), \Sigma)$ - спектр поглощения, зависящий от частоты v , температуры T , давления p , и состава атмосферы Σ ,

$\sigma = \sigma(v)$ - спектральный показатель рассеяния для аэрозолей,

$\chi = \chi(v, \varphi_s, \varphi_v, \psi)$ - индикаториса рассеяния на аэрозоли (надчеркивание соответствует усреднению по размерам).

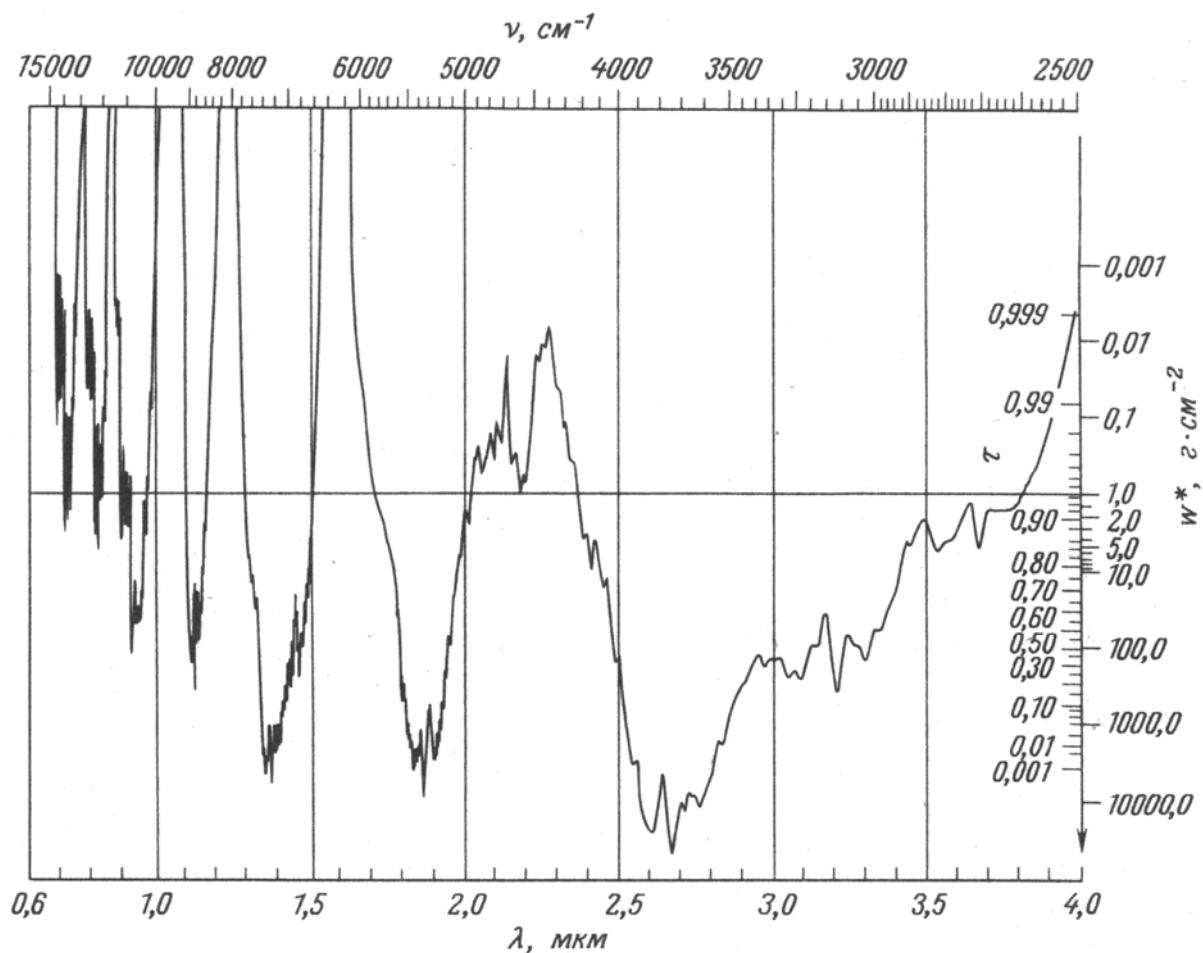


Рис. 2. Спектр поглощения паров воды, рассчитанный по модели LOWTRAN. График взят из [1].

Первое слагаемое в (4) означает поглощение собственного излучения подстилающей поверхности и отраженного от нее падающего солнечного света на пути зрения, а второе слагаемое представляет собой рассеянное на аэрозоле солнечное излучение, проинтегрированное по всему лучу зрения.

Спектр поглощения является наиболее сложной частью задачи, т.к. достаточно полное описание спектров атмосферных газов был экспериментально измерено сравнительно недавно.

Ранее для вычисления спектров поглощения использовались различные приближенные модели, например известная модель LOWTRAN (Рис. 2).

В данной работе предлагается использовать базу данных HITRAN [2] как наиболее полное описание молекулярных спектров в инфракрасном диапазоне.

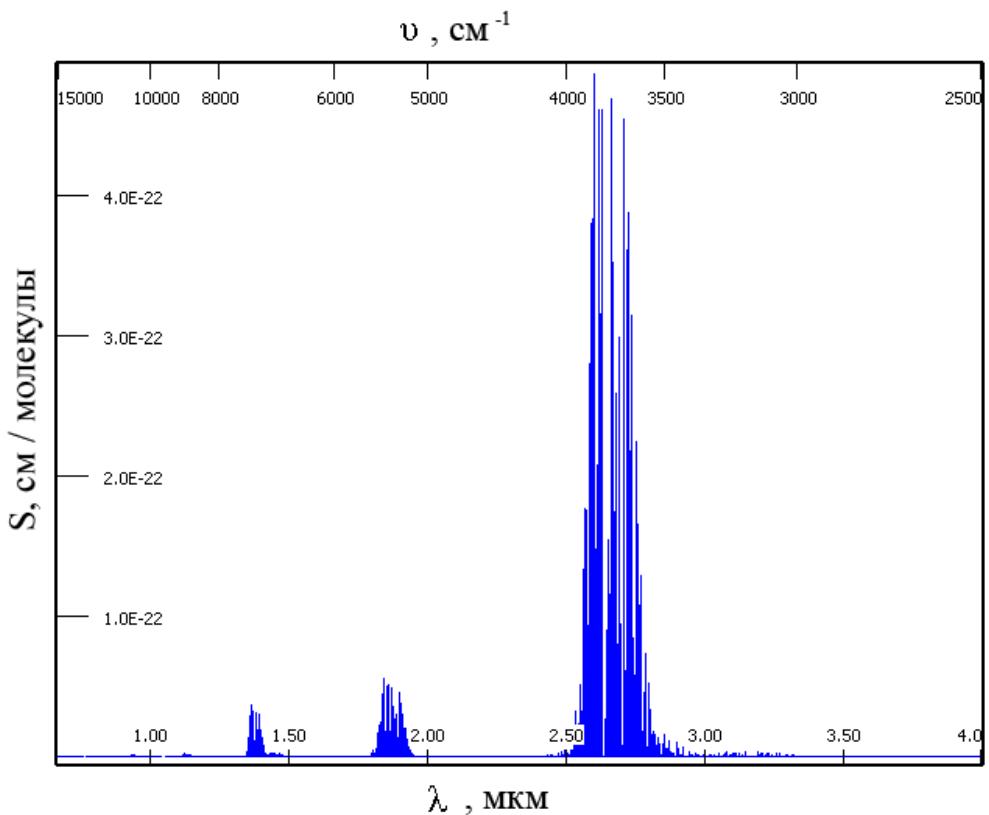


Рис. 3. Линии поглощения воды из базы данных HITRAN.

База данных HITRAN содержит в себе описание всех существенных линий различных изотопов для 38 различных молекул. В базе данных для нормальных условий T_0 и p_0 , помимо прочего, содержится волновое число каждой линии ν_0 , ее полуширина α_0 , температурный фактор для ширины линии n_α , интенсивность линии S_0 (см. Рис. 3) и энергия нижнего уровня E' . Этих данных достаточно для точного вычисления спектра поглощения:

$$\alpha(\nu, T, p, \Sigma) = N_A \sum_k \rho_k \sum_i \frac{\gamma_{ki}}{\mu_{ki}} \sum_l \beta_{kil}(T, p, \nu) + n_a \bar{\sigma} \quad (6)$$

Здесь:

N_A - постоянная Авогадро,

$\rho_k = \rho_k(\vec{r})$ - парциальная плотность газа k в смеси,

γ_{ki} - относительное содержание изотопа i газа k ,

μ_{ki} - молярная масса изотопа,

$\beta_{kil}(T, p, v)$ - коэффициент поглощения линии l ,

$n_a = n_a(\vec{r})$ - концентрация частиц аэрозоля.

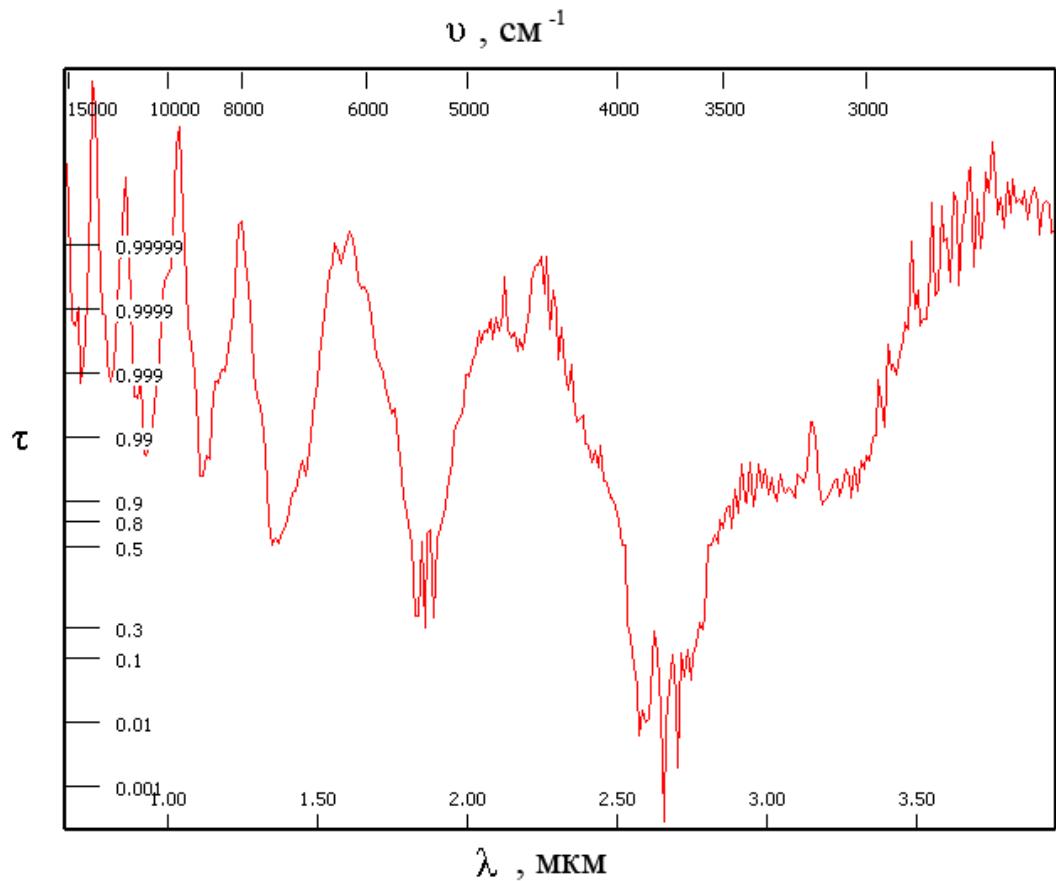


Рис. 4. Результаты расчета спектра поглощения водяных паров.

Коэффициент поглощения линии в свою очередь, согласно [3], вычисляется по формуле:

$$\beta_{kil}(T, p, v) = \frac{S}{\pi} \frac{\alpha}{(\nu - \nu_0)^2 + \alpha^2} \quad (7)$$

$$\alpha = \alpha_0 \left(\frac{p}{p_0} \right) \left(\frac{T_0}{T} \right)^{n_\alpha} \quad (8)$$

$$S = \frac{S_0 Q_r(T_0) Q_v(T_0)}{Q_r(T) Q_v(T)} \exp \left(\frac{1.439 E'(T - T_0)}{T T_0} \right) \quad (9)$$

Здесь $Q_r(T)$ и $Q_v(T)$ - вращательная и колебательная частная сумма для газа.

Процедура вычисления данных сумм наиболее подробно описана в [4]. Однако большое

количество ссылок на частную переписку и закрытые документы сильно затрудняют пользование этим документом.

Согласно [5] колебательная частная сумма вычисляется как произведение по всем степеням свободы k

$$Q_v(T) = \prod_k \left(1 - e^{-\omega_i hc / kT}\right)^{-d_i} \quad (10)$$

где ω_i - собственная частота колебаний, а d_i - вырожденность уровня.

Колебательные частные суммы вычисляются различными методами, в зависимости от типа молекулы: линейного [6], сферического [7], симметричного [8] или асимметричного [9].

Результат расчета по данной модели поглощения в слое водяных паров без учета аэрозоля представлен на Рис. 4.

Литература

1. Справочник по инфракрасной технике, том 1. Под ред. У.Волф, Г.Цисис. Пер. с анг. М:Мир, 1995
2. The HITRAN 2004 molecular spectroscopic database. L.S. Rothman et al., Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer 96, 2005.
3. AFCRL Atmospheric Absorption Line Parameters Compilation, R.A. McClatchey et al. AFCRL.TR-73-0096, 1973
4. Total Internal Partition Sums for Molecular Species on the 2000 Edition of the HITRAN Database, J. Fischera. University of Massachusetts Lowell Department of Environmental, Earth, and Atmospheric Sciences Scientific Report No. 060301.
5. Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул. Г.Герцберг. Пер. с анг. 1957.
6. Rotational partition functions for linear molecules. Robin S. McDowell. J. Chem. Phys., Vol. 88, No. 1, 1 January 1988.

7. Rotational partition function for spherical-top molecules. Robin S. McDowell. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* Vol. 38, No. 5, 1987.
8. Rotational partition functions for symmetric-top molecules. Robin S. McDowell. *J. Chem. Phys.* 93(4), 15 August 1990.
9. The asymptotic asymmetric-top rotational partition function. James K. G. Watson. *Molecular Physics*, 1988, VOL. 65, No. 6