Основы методов расчета переноса излучения в атмосфере

Факультет Космических Исследований, МГУ

Москва

Коэффициент поглащения газа

Сумарный газовый коэффициент поглощения

$$\kappa_\nu^g = \sum_k \kappa_k(\nu) = \sum_k \sum_i \kappa_{ik}(\nu),$$

где индекс суммирования k- соответствует разным газам, индекс i - отдельным линиям каждого газа. Коэффициент молекулярного поглащения в отдельной спектральной линии можно записать в форме:

$$\kappa_{ij} = S_{ij} f_{ij}(\nu - \nu_{ij})$$

Контур Фойгта

Контур линии определяется уширением за счет столкновений спектральных линий и уширением за счет эффекта Доплера. При некоторых условиях они действую одновременно и их необходимо учитывать $f_V(\nu - \nu_0) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} f_D(\nu' - \nu_0) f_L(\nu - \nu') d\nu'$:

$$f_{ij}(\nu - \nu_0) = \frac{y}{\pi^{3/2}\alpha_D} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{exp(-t^2)dt}{y^2 + (x-t)^2},$$

где $y = \frac{\alpha_L}{\alpha_D}$, $x\frac{\nu-\nu_0}{\alpha_D}$, Доплеровская ширина $\alpha_D = \frac{\nu_0}{c}\sqrt{\frac{2RT}{\mu}}$, где μ - молярная масса газа, R - универсальная газовая постоянная. Лоренцевская ширина α_L определяется выражением $\alpha_L = \alpha(p_0, T_0)\frac{p}{p_0}\left(\frac{T_0}{T}\right)$.

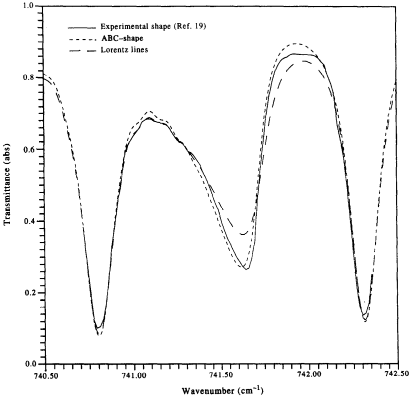
Интерференция спектральных линий

Суммирование линия, отвечающих за переходы молекулы из одного энергетического состояния в другое

$$k_j(\nu) = \sum_i k_{ij}(\nu)$$

является приближенным. Такое упрощение основано на том, что линии формируются независимо друг от друга или переход молекул между разными энергетическими состояниями происходит независимо. **Эффект аддидтивности явно нарушается, когда линии поглащения существенно перекрываются, что другими словами называется интерференцией спектральных линий.**

Line mixing



Experimental shape (Ref. 19)
ABC-shape
Lorentz lines
Transmittance (abs)
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
740.50
741.00
741.50
742.00
742.50
Wavenumber (cm^{-1})

Уравнение переноса 1

Для плоскопараллельной атмосферы уравнение переноса излучения имеет следующий вид:

$$\frac{u}{\sigma(z)}\frac{dI(z,u)}{dz} = -I(z,u) + (1-\omega(z))B(T(z),\nu) + S(z,u),$$

плотность источника рассеяного излучения w, u - косинусы зенитных углов до и после рассеяния, φ - разность между азимутальным углом до рассеяния и после рассеяния.

Уравнение переноса 2

При замене $\tau(z) = \int\limits_{z}^{z_max} \sigma(z)dz$, $d\tau = -\sigma(z)dz$

$$u\frac{dI(\tau,u)}{d\tau} = I(\tau,u) - (1-\omega(\tau))B(T(\tau),\nu) - S(\tau,u),$$

При разложении по полиномам Лежандра $P_k(u)$ имеем $I(\tau,u) \approx \sum\limits_{k=0}^{N} b_k(\tau)P_k(u)$, функция источников

$$S(\tau,u) \approx \omega(\tau)\sum_{k=0}^{N}\frac{1}{2k+1}a_k(\tau)b_k(\tau)P_k(u),$$

Уравнение переноса 3

возможно получить зависимость $S(\tau) \approx \hat{R}(\tau) I(\tau)$, так что можно провести дискретизацию уравнения

$$u_j \frac{dI(\tau, u_j)}{d\tau} = (1 - R_{jj}(\tau)) I(\tau, u_j) - \sum_{i=0}^{N} (1 - \delta_{ji}) R_{ji}(\tau) I(\tau, u_i) - \\ - (1 - \omega(\tau)) B(T(\tau), \nu), \quad (1)$$

Метод дискретных ординат(DISORT)

Метод дискретных ординат основан на замене в интегро-дифференциальном уравнении () интеграла по углам квадратурной формулы Гаусса,

$$u\frac{dI^m(\tau, u_i)}{d\tau_\lambda} = I^m(\tau, u_i) - \sum_{j=-N}^{N} D^m(\tau, u_i, u_j) I^m(\tau, u_j) - Q^m(\tau, u_i),$$

$$i = -N.. + N,$$

в результате исходное уравнение переходит в систему обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка с непостоянными коэффициентами.

Метод дискретных ординат(newDISORT)

При дискретизации получаем уравнение для нисходящего $(u_j < 0)$

$$I(\tau_k, u_j) = I(\tau_{k-1}, u_j)\exp(\mu_{jk-1} - \mu_{jk}) + \int\limits_{\mu_{jk-1}}^{\mu_{jk}} G_j(\tau(\mu_j))\exp(\mu_j - \mu_{jk})d\mu_j,$$

и восходящего $u_j > 0$ излучения

$$I(\tau_{k-1}, u_j) = I(\tau_k, u_j)\exp(\mu_{jk-1} - \mu_{jk}) + \int\limits_{\mu_{jk-1}}^{\mu_{jk}} G_j(\tau(\mu_j))\exp(\mu_{jk-1} - \mu_j)d\mu_j.$$

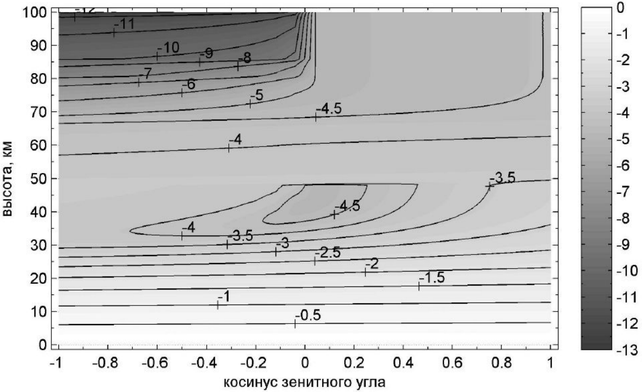
Метод дискретных ординат(newDISORT)

Указанную дискретную систему можно свести к блочной трехдиагональной матричной системе:

$$
\begin{aligned}
\hat{C}_0 I_0 - \hat{B}_0 I_1 &= F_0, \\
-A_k I_{k-1} + \hat{C}_k I_k - \hat{B}_k I_{k+1} &= F_k, \quad k = 1, .., M-1, \\
-A_M I_{M-1} + \hat{C}_M I_M &= F_M.
\end{aligned}
$$

котрую можно решить методом матричной прогонки. В силу диагонального преобладания можно гарантировать устойчивость матричной прогонки.

newDISORT иллюстрация



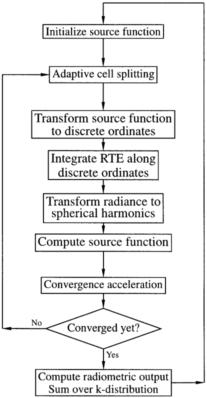
Метод сферических гармоник и дискретных ординат (SHDOM)

Представляет собой комбинированный метод сферических гармоник и дискретных ородинат. Углавая часть функции источника представлена в виде сферических гармоник $J(\mu, \varphi) = Y_{lm}(\mu, \varphi) J_{lm}$.

Достоинства метода:

1. функция источника представима малым числом сферических гармоник;
2. интеграл рассеяния вычисляется более эфективно, чем в дискртеных ординтах;

SHDOM алгоритм



Метод сферических гармоник и дискретных ординат (SHDOM)

1. функция источника трансформируетя к дискретным ординатам в каждом узле пространственной сетки: $J_{jk} = \sum\limits_{m=-M}^{M} u(m\varphi_k) \sum\limits_{l=|m|}^{L} P_{lm}(\mu_j) J_{lm}$, ($P_{lm}(\mu_j)$ - нормированный присоединенные функции Лежандра)
2. для расчета интенсивности в каждом узле сетки используется интегральная формула переноса излучения
3. интенсивность излучения трансформируется обратно в набор сферических гармоник

$$I_{lm} = \sum_{j=1}^{N} w_j P_{lm}(\mu_j) \sum \bar{w}_{jk} u(m\varphi_k) I_{jk}$$

4. после из интенсивности излучения рассчитывается новая функция источника $J_{lm} = \frac{\omega \xi_l}{2l+1} I_{lm}$

Метод сферических гармоник и дискретных ординат (SHDOM)

Для уравнения переноса можно организовать итерационный процесс

$$u\frac{dI}{d\tau} = \sigma(S - I),$$

с функцией источника

$$S = (1-\epsilon)\int I(u,\varphi)dud\varphi + \epsilon B,$$

рассмотрим итерационный процсс с начальным приближением $S^0 = \epsilon B$, $S^{n+1} = \epsilon B + (1-\epsilon J^n)$, где J^n средняя интенсивность полученная для функций источников B^n.

Различные способы ускорения сходимости:

$$S = (1-\alpha_1-\alpha_2)S^n + \alpha_1 S^{n-1} + \alpha_2 S^{n-2},$$

или

$$S^{n+1} = (1-\epsilon)\Lambda[S^n] + \epsilon B,$$

или

Интегральное уравнение для функции источника

$$u\frac{I(\tau,u,\varphi)}{d\tau} = -I(\tau,u,\varphi) + \frac{\Lambda}{4\pi}\int\limits_0^{2\pi} d\varphi' \int\limits_{-1}^{1} x(\tau,\omega) I(\tau,u',\varphi')u',$$

при добавлении граничного источника Солнца $I_1 = \pi S\delta(\eta - \eta_0)\delta(\varphi - 0)$ возможно в силу линейности перенести данное условие в правую часть, так что в правой части появится дополнительный член:

$$\frac{\Lambda(\tau)}{4} Sx(\tau,\omega_0)\exp(-\tau/\eta_0),$$

так что можно положить

$$\tilde{B}(\tau,u,u_0,\varphi) = \frac{\Lambda(\tau)}{4} Sx(\tau,\omega_0)\exp(-\tau/u_0) + \\ + \frac{\Lambda}{4\pi}\int\limits_0^{2\pi} d\varphi' \int\limits_{-1}^{1} x(\tau,\omega) I(\tau,u',\varphi')du'. \quad (2)$$

Интегральное уравнение для функция источника

Уравнение переноса с функцией источника имеет вид

$$u\frac{I(\tau,u,\varphi)}{d\tau} = -I(\tau,u,\varphi) + \tilde{B}(\tau,u,u_0,\varphi),$$

решение данного уравнения представимо в виде

$$\eta\frac{I(\tau,u,\varphi)}{d\tau} = \frac{S}{4u}\int\limits_0^{\tau}\tilde{B}(\tau,u,\eta_0,\varphi)\exp\left(-\frac{\tau-\tau'}{u}\right)d\tau',\ u>0,$$

$$\eta\frac{I(\tau,u,\varphi)}{d\tau} = -\frac{S}{4u}\int\limits_{\tau}^{\tau_0}\tilde{B}(\tau,u,\eta_0,\varphi)\exp\left(-\frac{\tau-\tau'}{u}\right)d\tau',\ u<0.$$

Однократное и многократное рассеяние

Альбедо однократного рассеяния

$$\Lambda(\tau) = \frac{\sigma(\tau)}{\sigma(\tau) + k(\tau)},$$

в случае когда функция источника содержит внеинтегральный член, решение уравнения переносам можно записать в явном виде

$$\eta \frac{I(\tau, u\varphi)}{d\tau} = \frac{S}{4u} \int_0^{\tau} \tilde{\Lambda}(\tau')x(\tau', \omega_0) \exp\left(-\frac{\tau'}{u_0} - \frac{\tau - \tau'}{u}\right) d\tau',\ u > 0,$$

$$\eta \frac{I(\tau, u, \varphi)}{d\tau} = -\frac{S}{4u} \int_{\tau}^{\tau_0} \tilde{\Lambda}(\tau')x(\tau', \omega_0) \exp\left(-\frac{\tau'}{u_0} - \frac{\tau - \tau'}{u}\right) d\tau',\ u < 0.$$

Метод Монте-Карло

Основная идея метода - представление излучения в атмосфере в виде случайного процесса и моделирование этого процесса. В оснвании метода - генерация случайных чисел. Процесс моделирование состоит из трех частей:

1. свободный пробег фотонов;
2. взаимодействие фотонов с атмосферой (поглощение/рассеяние);
3. взаимодействие с атмосферой (поглощение/рассеяние);

Метод Монте-Карло

Доля пролетевших фотонов через атмосферу
$N(\tau_0) = N \exp(-\tau_0/\eta_0)$.
Пусть фотон находится на высоте τ_1, возьмем случайное число $a = \alpha$, тогда новое положение можно определить по формуле

$$\tau_2 = \tau_1 - \eta \ln a.$$

1. если $\tau_2 < 0$, то фотон вылетел из атмосферы, переходим к следующему;
2. если $\tau_2 > \tau_0$, то фотон достиг поверхности и надо моделировать взаимодействие с ней;
3. в другом случае $0 < \tau_2 < \tau_0$, то надо моделировать его поглощение и рассеяние в ней;

Метод Монте-Карло

Моделирование отражения от поверхности - сравнение с альбедо A. После отражения фотон приобретает направления $\eta_2 = -cos(\frac{\pi}{2}\alpha)$, $\varphi_2 = 2\pi\alpha$.
При отражении в атмосфере необходимо учитывать альбедо $\Lambda(\tau_1)$. Индикатрисса $x(\gamma)$ - плотность вероятность рассеяния на угол γ. Уравнение для определения косинуса угла рассеяния *eta* при его случайном моделировании

$$\int_{-1}^{\eta} x(\tau_1, \omega) d\omega = 2\alpha.$$

Равновестное и неравновесное излучение

Свечение в видимой и ближней ИК области принято относить к свечениям атмосфер, а излучение средней и далекой ИК области - к неравновесмтному ИК излучению.
Свечение атмосферы чаще всего обусловленно процессами возбуждения электронных состояний молекул и атомов за счет поглащения высокоэнергетического излучения Солнца в УФ и видимой области и энергии потоков различных частиц.
Неравновестное ИК излучение возникает из-за нарушения локального термодинамического равновесия (ЛТР) в верхних словях атмосферы. В этом случае причинами возникновения неравновестного излучения являются относительно малой количество соударений молекул, неизотермичность атмосферы и потери энергии за счет уходящего в космос излучения атмосферы.

Перенос теплового излучения

Формула для восходящего теплового излучения:

$$I^{\uparrow}(z,\theta) = I_{\nu,0} exp\left(-sec\theta \int_0^z k_\nu(z')dz'\right) + \\ + \sec\theta \int_0^z k_\nu(z')B_\nu[T(z')] \exp\left(\int_{z'}^z k_\nu(z'')dz''\right) \quad (3)$$

$I_{\nu,0}$ - излучение подстилающей поверхности, формула для нисходящего теплового излучения:

$$I^{\downarrow}(z,\theta) = I_{\nu,\infty} exp\left(-sec\theta \int_0^z k_\nu(z')dz'\right) + \\ + \sec\theta \int_z^\infty k_\nu(z')B_\nu[T(z')] \exp\left(\int_z^{z'} k_\nu(z'')dz''\right) \quad (4)$$

Граничные условия

$$I_{\nu,0} = \varepsilon_\nu B_\nu(T_0) + (1-\varepsilon_\nu) I_\nu^{\downarrow}(0,\theta).$$

k-Метод

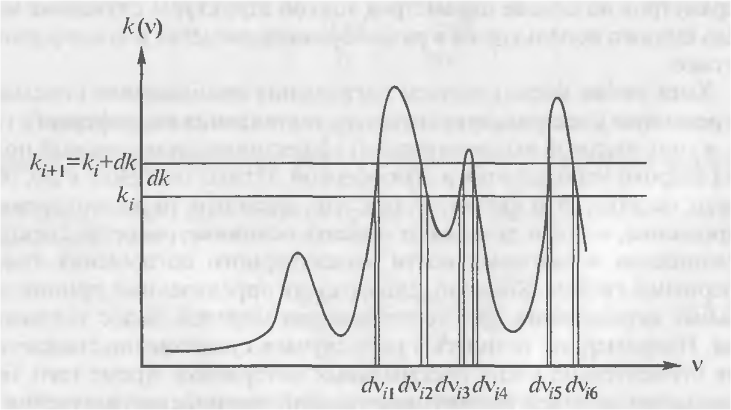
Суть метода в замене интегрирования по частоте на интегрирование по коэффициенту поглащения.

$$P_{\triangle\nu} = \frac{1}{\triangle\nu}\int\limits_{\triangle\nu} \exp[-k(\nu)u]d\nu$$

Определим плотносить вероятности $\int\limits_0^\infty f(k)dk$ и интегральную функцию распределения $g(k) = \int\limits_0^k f(k)dk$, то функцию пропускания можно записать в форме

$$P_{\triangle\nu} = \int\limits_0^1 \exp[-k(g)u]dg.$$

K-Метод иллюстрация



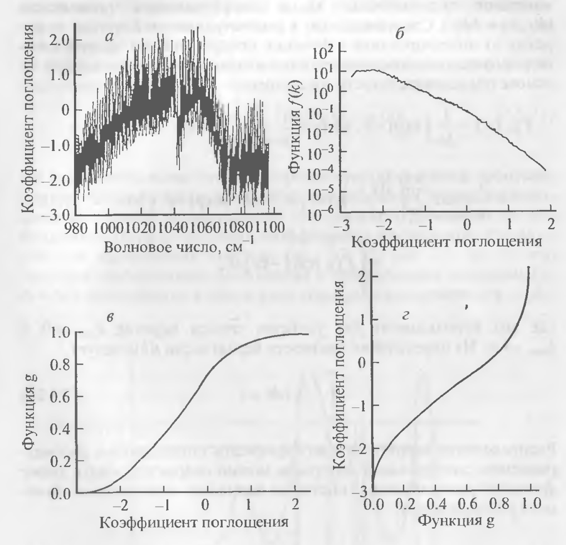
k-Метод

так как функции $f(k)$, $g(k)$ более гладкие при вычислении функций пропускания можно ограничиться квадратурами с небольшим числом узлов

$$P_{\triangle\nu} = \sum_{k=1}^{L} f(k_k)\exp\{-k_k u\}\triangle k_k \approx \sum_{k=1}^{L} \exp\{-k_k(g)u\}\triangle g_k,$$

при этом число членов в выражении для вычисления функций пропускания оказывается относительно небольшим (5-10) по сравнению с сотнями и тысячами. Данное разложение часто называют **приближение экспонентациального разложения функции пропускания**.

k-Метод иллюстрация



Эффективные методы интерополяции для расчета (Line-by-Line)

Последовательное суммирование линий поглащения задается формулой $K(\nu) = \sum_i f_i(\nu, \tilde{\nu}_i)$, в результате примеенения приводит к интегрирования по частоте $\int_{\triangle\nu} K(\nu) d\nu$. При величине интервала $\triangle\nu / H \sim 10^4/10^3 \sim 10^7$. Рассмотрим область около центра отедельно взятой линии $\tilde{\nu}$
$T < |\nu - \tilde{\nu}| < D$, где $T = \frac{2}{3}(\alpha_L + \alpha_D)$.

1. для области $|\nu - \tilde{\nu}| < T$ возможно применить интерполяцию на 10 точках неравномерной сетки;
2. для области $T < |\nu - \tilde{\nu}| < D \sim 3cm - 1$ форма спектра пропорциональна функции $(\nu - \tilde{\nu})^{-2}$;
3. корректирюуй для данного интервала фактор можно получить по формуле $[1 + (1.5\alpha_D^2 - \alpha_L^2)/(\nu - \tilde{\nu})^2]$

Line-by-Line

Произведем слудующее разбиение исходного интервала

$$(\tilde{\nu} - D, \tilde{\nu} - 2^{L-1}T), \ldots, (\tilde{\nu} - 2^2T, \tilde{\nu} - 2T), (\tilde{\nu} - 2T, \tilde{\nu} - T),$$

$$(\tilde{\nu} + T, \tilde{\nu} + 2T), (\tilde{\nu} + 2T, \tilde{\nu} + 2^2T), \ldots, (\tilde{\nu} + 2^{L-1}T, \tilde{\nu} + D).$$

В качестве примера для параметров $D = 4cm^{-1}$, $T = 10^{-3}$ получается 4096 точек.

Line-by-Line 2

Для каждой отдельной линии проводим суммирование

$$\tilde{\varphi}_j^l = \tilde{\varphi}_j^l + f_i(\nu_j^l, \tilde{\nu}_i),$$

$$\varphi_{j+1}^l = \varphi_{j+1}^l + f_i(\nu_{j+1}^l, \tilde{\nu}_i),$$

$$\bar{\varphi}_{j+2}^l = \bar{\varphi}_{j+2}^l + f_i(\nu_{j+2}^l, \tilde{\nu}_i),$$

интерполяция по трем точкам

$$p(\nu^*) \approx 0.375p(\nu_a) + 0.75p(\nu_b) - 0.125p(\nu_c),$$

$$p(\nu^{**}) \approx 0.375p(\nu_c) + 0.75p(\nu_b) - 0.125p(\nu_a),$$

где $\nu_b = 0.5(\nu_a + \nu_c)$, $\nu_b = 0.5(\nu_a + \nu_b)$, $\nu_b = 0.5(\nu_c + \nu_b)$.

Line-by-Line 3

$$\tilde{\varphi}_m^{l-1} = \tilde{\varphi}_m^{l-1} + \tilde{\varphi}_{m/2}^{l},$$

$$\varphi_{m+1}^{l-1} = \varphi_{m+1}^{l-1} + 0.375\tilde{\varphi}_{m/2}^{l} + 0.75\varphi_{m/2+1}^{l} - 0.125\bar{\varphi}_{m/2+2}^{l},$$

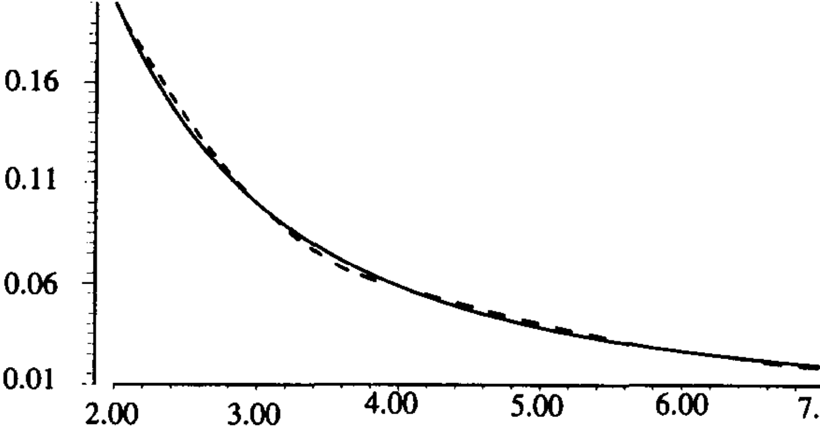
$$\tilde{\varphi}_{m+2}^{l-1} = \tilde{\varphi}_{m+2}^{l-1} + \varphi_{m/2+1}^{l},\ \bar{\varphi}_{m+2}^{l-1} = \bar{\varphi}_{m+2}^{l-1} + \varphi_{m/2+1}^{l},$$

$$\varphi_{m+3}^{l-1} = \varphi_{m+3}^{l-1} - 0.125\tilde{\varphi}_{m/2}^{l} + 0.75\varphi_{m/2+1}^{l} + 0.375\bar{\varphi}_{m/2+2}^{l},$$

$$\bar{\varphi}_{m+4}^{l-1} = \bar{\varphi}_{m+4}^{l-1} + \varphi_{m/2+2}^{l},$$

для $m = 0, 4, 8...,\ l = L, L-1, .., 2$

lbl пример аппроксимации



квадратичная аппроксимация дает ошибку менее 1 процента, которая может быть легко уменшана при использовании например пяти-точечной аппроксимации.