DOI: https://doi.org/10.15688/mpcm.jvolsu.2026.2.6

УДК 551.521.3
ББК 22.344

Дата поступления статьи: 06.07.2026
Дата принятия статьи: 09.08.2026

УЧЕТ ПЕРЕКРЫВАНИЯ СПЕКТРОВ МОЛЕКУЛЯРНОГО ПОГЛОЩЕНИЯ РАЗНЫХ ГАЗОВ ПРИ АППРОКСИМАЦИИ ФУНКЦИИ ПРОПУСКАНИЯ РЯДОМ ЭКСПОНЕНТ [1]

Алексей Александрович Размолов

Ассистент кафедры радиофизики,
Волгоградский государственный университет
RazmolovAA@volsu.ru
просп. Университетский, 100, 400062 г. Волгоград, Российская Федерация

Татьяна Юрьевна Чеснокова

Кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник,
Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева Сибирского отделения РАН
ches@iao.ru
площадь Академика Зуева, 1, 634055 г. Томск, Российская Федерация

Константин Михайлович Фирсов

Доктор физико-математических наук, профессор кафедры радиофизики,
Волгоградский государственный университет
fkm@volsu.ru
https://orcid.org/0000-0002-8448-1483
просп. Университетский, 100, 400062 г. Волгоград, Российская Федерация

Цитирование: Размолов А. А., Чеснокова Т. Ю., Фирсов К. М. Учет перекрывания спектров молекулярного поглощения разных газов при аппроксимации функции пропускания рядом экспонент // Математическая физика и компьютерное моделирование. 2026. Т. 29, № 2. С. 86–104. DOI: https://doi.org/10.15688/mpcm.jvolsu.2026.2.6

Citation: Razmolov A.A., Chesnokova T.Yu., Firsov K.M. Accounting for the Overlap of Molecular Absorption Spectra of Different Gases in the Approximation of Transmission Function by a Series of Exponents. *Mathematical Physics and Computer Simulation*, 2026, vol. 29, no. 2, pp. 86-104. (in Russian).
DOI: https://doi.org/10.15688/mpcm.jvolsu.2026.2.6

© Размолов А.А., Чеснокова Т.Ю., Фирсов К.М., 2026

Аннотация. Предложен новый метод учета перекрывания полос различных газов при аппроксимации функции пропускания рядом экспонент, который обеспечивает аддитивный учет эффективных коэффициентов молекулярного поглощения разных газов. Показано, что этот метод позволяет получить короткие ряды экспонент (малое количество параметров), что обеспечивает высокую скорость расчетов переноса излучения в атмосфере Земли. Разработанный нами метод применим при расчетах переноса излучения как в длинноволновом, так и коротковолновом диапазонах спектра, в том числе и с учетом многократного рассеяния на аэрозольных и облачных частицах.

Ключевые слова: перекрывание полос поглощения, параметризация уравнения переноса излучения, функция пропускания, ряды экспонент, молекулярное поглощение.

Введение

Развитие спектроскопии высокого разрешения обеспечивает достаточно высокое качество решения задач переноса излучения в атмосфере Земли. Созданы и постоянно обновляются базы данных параметров спектральных линий атмосферных и примесных газов атмосферы [29; 33–39], и с их использованием разработаны прямые методы расчета спектров молекулярного поглощения line-by-line [25; 27]. Однако непосредственное применение этих методов затруднено для широкого круга прикладных задач атмосферной оптики, таких как: моделирование климата, предсказания погоды, обработка спутниковых данных, моделирование пожаров и др. В таких задачах возникает необходимость моделировать спектры низкого разрешения для широкого диапазона термодинамических условий, обеспечивая при этом взаимоисключающие условия: высокую точность и высокую скорость расчетов. Сложность решения данной проблемы состоит в том, что для обеспечения высокой точности расчета спектров молекулярного поглощения и излучения необходимо учитывать большое количество спектральных линий. Так, например, в HITRAN-2024 содержится примерно 5×10^5 линий CO_2 [28]. Эта база позволяет проводить расчеты для температур, не превышающих 1000 К. При более высоких температурах (более 1000 К) у молекул возбуждаются более высокие энергетические состояния, и число линий, которые надо учитывать, возрастает. В этом случае следует использовать другие базы данных, либо HITEMP-2010 (содержащую уже 10^7 линий), либо CDSD-4000 (содержащую 5×10^8 линий). Другой особенностью спектров молекулярного поглощения является их высокая селективность. Так, например, для атмосферы Земли типичные значения полуширин линий (характеризующие смещение относительно центра линии, когда коэффициент поглощения уменьшается в два раза) составляют примерно $10^{-1} - 10^{-3}$ см$^{-1}$ в зависимости от давления воздуха, тогда как коэффициенты рассеяния молекулами и аэрозольными частицами имеют существенно более слабую спектральную зависимость [15]. Характерный масштаб изменения коэффициентов рассеяния составляет сотни и тысячи см$^{-1}$. Вследствие этого, при решении задач переноса излучения в атмосфере Земли и других планет весь рассматриваемый спектр разделяется на подынтервалы, в пределах которых коэффициенты рассеяния слабо меняются, а число спектральных линий велико (может достигать десятков тысяч). По этим причинам разработаны многочисленные способы параметризации характеристик молекулярного поглощения, которым посвящено большое количество статей и монографий, например: [2; 3; 30]. В данной работе мы ограничиваемся лишь методами, которые основываются на разложении функций пропускания в ряд экспонент с параметрами, определяемыми на основе тонкой структуры спектров молекулярного поглощения. Эти методы в настоящее время получили наибольшее распространение, так как, с одной стороны, они обеспечивают высокую

точность расчета уравнения переноса излучения, а с другой стороны, позволяют получить параметрическое описание функции пропускания в виде ряда экспонент, причем показатели экспонент обладают свойством аддитивности при рассмотрении различных атмосферных трасс и различных газовых компонент. Эти два свойства аналогичны функциональным зависимостям аналитических решений уравнения переноса излучения и, следовательно, обеспечивают удобство применения этих аппроксимаций для различных численных методов решения уравнения переноса излучения.

Одной из первых работ, где функция пропускания была представлена в виде ряда экспонент, была работа К.Я. Кондратьева [4]. Однако до тех пор, пока не появились спектроскопические базы данных, содержащие информацию о тонкой струкутуре спектров атмосферных газов, этот подход представлял лишь академический интерес. В 1973 г. появилась одна из первых версий спектроскопической базы данных под названием «атлас спектральных линий McClatchey». Создание спектроскопических баз данных стимулировало работы по созданию компьютерных программ для решения уравнения переноса излучения прямыми методами на основе информации о тонкой структуре линий, а также разработке методов аппроксимации функций пропускания рядами экспонент. В западной литературе этот метод получил название «метод k-распределения»[23; 26]. Впервые в работе [26] для получения ряда экспонент было предложено использовать преобразование Лапласа, и было показано, что функция пропускания атмосферы определяется функцией распределения коэффициента излучения. Именно с этим и было связано название «k-распределение». В работе [24] модель k-распределения была применена для расчета скорости радиационного выхолаживания в полосах поглощения атмосферы Земли. В работе [41] отмечалось, что для отдельного газа хорошим приближением является модель k-корреляции. Однако в случае перекрытия полос поглощения разных газов эта модель давала неудовлетворительные результаты. Два способа учесть перекрывание полос рассматривались в работе [30]. Эти способы основывались на моделях полос поглощения, с которыми можно ознакомиться в монографиях [2; 3; 10]. Первый способ – суммарное пропускание рассматривается в виде произведения функций пропускания различных газов. В этом случае число членов ряда экспонент возрастало экспоненциально. Чтобы уменьшить этот эффект, в работе [30] предлагалось для заданной трассы отранжировать все члены ряда и оставить наиболее значимые. Этот способ не нашел широкого применения, так как он не является универсальным (условие аддитивности оптических толщ не выполняется) и, как следствие, усложняет расчетную схему вычислений. Другой способ основывался на модели полос Малкмуса [31]. В работе [30] параметры модели Малкмуса были рассчитаны на основе спектроскопической базы данных HITRAN в предположении, что центры линий случайным образом расположены в спектре. Согласно [30] данная модель удовлетворительно описывала молекулярное поглощение в тропосфере, но приводила к погрешностям в стратосфере. Выбор модели Малкмуса был обусловлен тем, что она позволяла получить аналитическое выражение при осуществлении преобразования Лапласа, а также учитывать перекрытие полос разных газов, используя модельные представления. Этот способ применяется до настоящего времени в задачах моделирования спектров излучения применительно к пламенам [21].

В дальнейшем метод рядов экспонент развивался и освободился от модельных представлений, и параметры ряда экспонент стали рассчитывать на основе спектроскопических баз данных и прямого метода line-by-line. В настоящее время метод аппроксимации функции пропускания атмосферы рядом экспонент имеет различные названия: ряды экспонент, ряды Дирихле, k-распределение, лебеговское осреднение и др. В зарубежной литературе имеются подразделения на узкополосные и широкополосные, детальный обзор которых можно найти в работе [21]. Все вышеупомянутые модификации этого метода различаются способом полу-

чения ряда экспонент, особенностями расчета параметров разложения, учета функций источников, а также способами учета перекрывания полос поглощения различных газов.

Математические аспекты разложения функций пропускания в ряд экспонент при использовании рядов Дирихле либо преобразования Лапласа можно найти в работах [8; 9; 11–13; 16; 40]. Следует также отметить серию работ [1; 18–20], в которых для этих целей получил развитие метод «лебеговского осреднения». Однако до настоящего времени нет удовлетворительного решения проблемы учета перекрывания полос поглощения различных газов. Все, что предлагается в литературе, фактически сводится к двум способам. Первый – следует из моделей полос поглощения, когда суммарное пропускание рассматривается в виде произведения функций пропускания различных газов, например, [30]. Основная идея второго способа основывалась на разделении газов на две категории: доминирующий и второстепенный, например, [19; 42]. Для доминирующего газа преобразование Лапласа из пространства частот в пространство кумулятивных частот осуществлялось для интервала в целом, а для другого газа исходный интервал предварительно разбивался на подынтервалы, а затем уже осуществлялось преобразование Лапласа. Тем самым предпринималась попытка учесть корреляцию между спектрами поглощения разных газов. Однако этот способ не всегда корректно учитывал перекрывание спектров поглощения, и для достижения успеха приходилось вводить дополнительные разбиения [42]. Это усложняло расчет и значительно увеличивало число членов ряда экспонент, причем не было понимания, когда эти процедуры учета перекрывания дают положительный результат. Ни один из методов, описанных в этих работах, не имел точной математической формулировки учета этих корреляционных связей, что и вызывало сложности при их практической реализации.

Ранее в нашей работе [16] был описан метод, позволяющий формализовать процедуру учета перекрывания полос поглощения для двух разных газов. Однако этот метод также неявно предполагал дополнительное разбиение на подынтервалы, что приводило к увеличению числа членов ряда. Целью данного исследования являлась разработка такого метода параметризации характеристик молекулярного поглощения, входящих в уравнение переноса излучения, который позволит формализовать учет спектральных особенностей перекрывающихся полос разных газов и представить функцию пропускания в виде короткого ряда экспонент.

1. Преобразование Лапласса – Стилтьеса

Впервые в работе [26] для получения ряда экспонент было предложено использовать преобразование Лапласа. Более детальное и последовательное описание этого метода было представлено в работе [12]. Первоначально рассмотрим функцию пропускания, обусловленную поглощением молекулярных газов в заданном спектральном интервале $[\nu_1,\nu_2]$, для случая однородной трассы:

$$T(U) = \frac{1}{\nu_2 - \nu_1}\int_{\nu_1}^{\nu_2} \exp\left(-k(\nu)\cdot U\right)d\nu = \frac{1}{\nu_2 - \nu_1}\int_{\nu_1}^{\nu_2} \exp\left(-\tau(\nu)\right)d\nu, \qquad (1)$$

где $k(\nu)$ – коэффициент молекулярного поглощения, в размерности км$^{-1}$; ν – волновое число, см$^{-1}$; U – длина трассы, км; $\tau(\nu)$ – оптическая толщина $\tau(\nu) = k(\nu)U$. Типичный вид спектральной зависимости коэффициентов поглощения, представляющей собой быстро меняющуюся функцию волнового числа ν, приведен на рисунке 1, причем число осцилляций пропорционально количеству спектральных линий. Для относительно широких спектральных интервалов число учитываемых спектральных линий может достигать 10^4 – 10^5 и более. Так, например, при расчете спектров поглощения H_2O и CO_2 в спектральном диапазоне

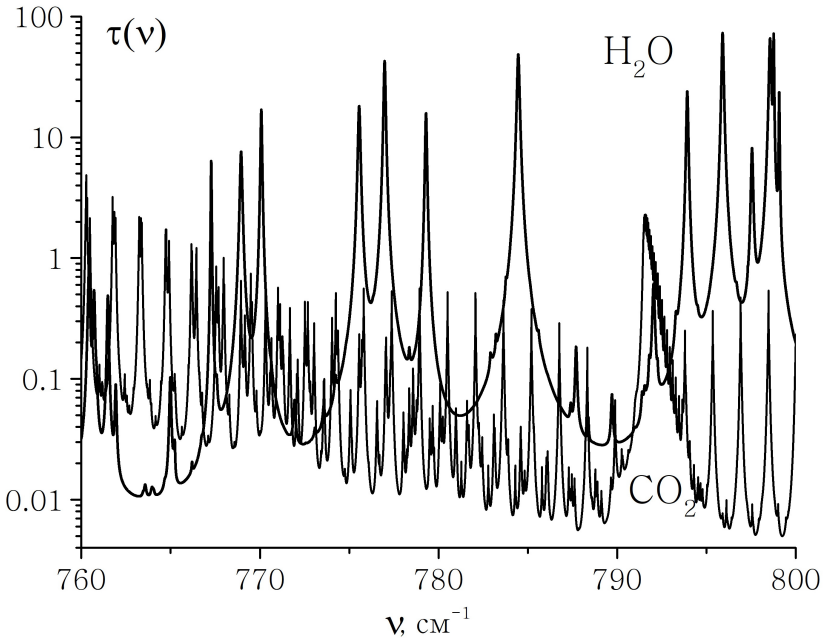


Рис. 1. Фрагмент спектра поглощения H_2O и CO_2 для летних условий метеомодели AFGL [22; 32] для однородной горизонтальной трассы длиной 1 км

760–800 см$^{-1}$ при использовании базы данных HITRAN-2012 приходилось учитывать более 15 000 спектральных линий. В более поздних версиях баз данных это число может значительно увеличиться [5]. Применение преобразования Лапласа – Стилтьеса позволяет заменить эту функцию на неубывающую, что в значительной мере облегчает расчет интеграла. Формально можно написать

$$T(U) = \int_0^\infty f(t) \cdot \exp(-t \cdot U) dt, \tag{2}$$

где $T(U)$ является изображением функции $f(t)$:

$$f(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\alpha - i\infty}^{\alpha + i\infty} T(U) \exp(t \cdot U) dU. \tag{3}$$

В (3) интеграл берется вдоль любой прямой $\mathrm{Re}(U) = \alpha > 0$ и понимается в смысле главного значения.

Далее введем новую переменную

$$g(k) = \int_0^k f(t) dt. \tag{4}$$

Подставив (3) в (4), можно получить:

$$g(k) = \frac{1}{2\pi i} \int_0^k \int_{\alpha - i\infty}^{\alpha + i\infty} T(U) \exp(t \cdot U) dU dt,$$

затем, переставив интегралы местами и вычислив интеграл по переменной t, найдем:

$$g(k) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\alpha - i\infty}^{\alpha + i\infty} \frac{T(U)}{U} [\exp(kU) - 1] dU. \tag{5}$$

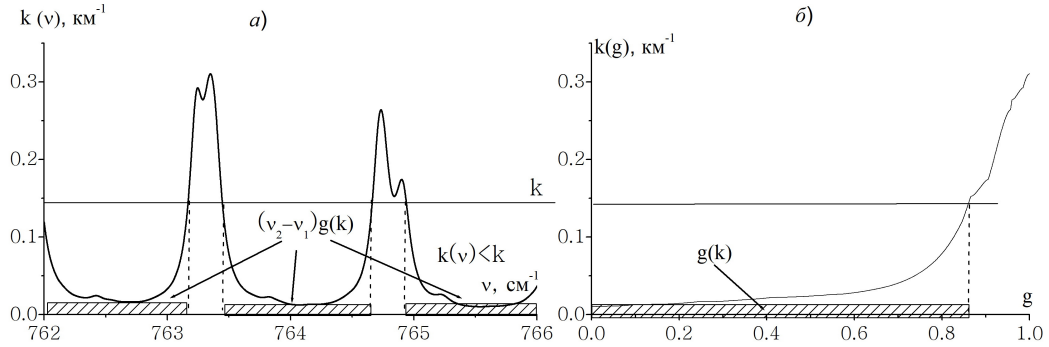


Рис. 2. Фрагмент спектра поглощения H_2O. Заштрихованный интервал определяет функцию распределения коэффициента поглощения

Подстановка (1) в (5) и замена порядка интегрирования позволяет получить:

$$g(k) = \frac{1}{\nu_2 - \nu_1} \int_{\nu_1}^{\nu_2} \left[\frac{1}{2\pi i} \int_{\alpha - i\infty}^{\alpha + i\infty} \frac{\exp(k - k(\nu))U}{U} dU \right] d\nu = \\ = \frac{1}{\nu_2 - \nu_1} \int_{\nu_1}^{\nu_2} \delta(k - k(\nu)) d\nu. \tag{6}$$

Здесь использовалось хорошо известное в теории функций комплексного переменного соотношение [6]

$$\delta(k) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\alpha - i\infty}^{\alpha + i\infty} \frac{\exp(kU)}{U} dU = \begin{cases} 1, & k < 0 \\ 0, & k > 0 \end{cases}. \tag{7}$$

Из формул (6) и (7) следует, что $g(k)$ – неубывающая функция, изменяющаяся от 0 до 1, и ее можно интерпретировать как функцию распределения коэффициента поглощения k в спектральном интервале $[\nu_1,\nu_2]$. Соотношение (6) является интегралом в смысле Лебега. Способ вычисления $g(k)$ представлен на рисунке 2а.

Следует заметить, что при численной реализации существенно проще рассчитать функцию $k(g)$, которая является обратной к $g(k)$. Для этого достаточно провести расчет спектра поглощения $k(\nu)$ прямым методом line-by-line с постоянным шагом по частоте $\delta\nu$, а затем провести сортировку полученного массива $k_i = \{k(\nu_i)\}_{i=1}^{n}$ в порядке возрастания, с последующей нормировкой спектрального интервала $[\nu_1,\nu_2]$ на единицу, при этом шаг кумулятивной частоты $\triangle g = \delta\nu/(\nu_2 - \nu_1)$. По аналогии с пространством частот ν вводят понятие пространства кумулятивных частот g. С учетом (4) формулу (2) можно записать в виде [14]:

$$T(U) = \int_0^\infty \exp(-k \cdot U) f(k) dk = \int_0^\infty \exp(-k \cdot U) dg(k), \tag{8}$$

где $g(k)$ – интегрирующая функция, а интеграл понимается в смысле Стилтьеса. Если функция $g(k)$ имеет скачки (функция распределения дискретной величины), то (8) по сути превращается в ряд, причем в случае замены переменных необходимо сохранять дискретные вклады в точках разрыва. Функция $f(k)$ представима в виде [23]:

$$f(k) = \sum_{i=1}^{N} f_i(k) = \frac{1}{\nu_2 - \nu_1} \sum_{i=1}^{N} \left| \frac{d\nu_i(k)}{dk} \right| [U_+(k - k_{i,\min}) - U_+(k - k_{i,\max})], \tag{9}$$

где $U_+(k)$ – ступенчатая функция

$$U_+(k) = \begin{cases} 0, & k \le 0 \\ 1, & k > 0 \end{cases}.$$

Функция $f(k)$ была получена из следующих соображений. Спектральный интервал $\triangle\nu$ разбивается на N подынтервалов, в пределах каждого из которых $k(\nu)$ монотонно возрастает, либо монотонно убывает, а на границах принимает значения $k_{i,\min}$ и $k_{i,\max}$. Это позволяет ввести обратную функцию для каждого подынтервала и в итоге получить (9). Более детальное описание можно найти в работе [23]. В статье [8] приведен типичный вид функции $f(k)$, которая имеет N точек разрыва, где N пропорционально числу спектральных линий. Функция $g(k)$, определяемая формулой (6), является кусочно-непрерывной, ступенчатой и недифференцируемой. В этом случае интеграл (8) превращается, по сути, в сумму. При численном расчете $k(g)$, описанном выше, функция поглощения представима в виде:

$$T(U) = \sum_{i=1}^{N} \exp(-k_i \cdot U) \triangle g,$$

где $k_i = k(g_i)$ – кусочно-непрерывная функция, а $\triangle g = \delta\nu/(\nu_2 - \nu_1)$ – одинакова для всех интервалов. В случае большого числа спектральных линий функцию $k(g)$ можно сгладить так, чтобы $g(k) = k^{-1}(g)$ – стала монотонно возрастающей и дифференцируемой. Действительно, чем шире спектральный интервал, тем большее количество спектральных линий попадает в заданный спектральный диапазон и тем более гладкие кривые $k(g)$ получаются. В частности, на рисунке 1 приведен относительно узкий фрагмент спектра, но, тем не менее, достаточно гладкий. Типичные значения спектральных интервалов, используемых для усреднения, составляют величины порядка нескольких десятков, а иногда и сотен см$^{-1}$, тогда как типичные значения полуширин спектральных линий в ИК-диапазоне спектра составляют величины 10^{-3} – 10^{-1} см$^{-1}$ в зависимости от атмосферного давления и спектрального диапазона. Соответственно, при расчете спектров поглощения атмосферы используется частотная сетка объемом $n \sim 10^3$ – 10^6. Следует заметить, что число спектральных линий может быть достаточно велико и сопоставимо с n. Согласно замечанию можно сделать соответствующую замену переменных и, применяя те или иные квадратуры для численного интегрирования, легко получить короткий ряд экспонент:

$$\frac{1}{\nu_2 - \nu_1} \int_{\nu_1}^{\nu_2} \exp(-\tau(\nu)) d\nu = \int_0^1 \exp(-\tau(g)) dg = \sum_{k=1}^{N} C_k \exp(-\tau(g_k)). \qquad (10)$$

Применение квадратур высокого порядка чебышевских либо гауссовских [8; 14] позволяет сгладить спектральную зависимость $k(g)$ и обеспечить высокую точность вычислений интеграла.

Соотношение (10) позволяет получить лишь короткий ряд экспонент, но не решает проблему оптимизации вычислений, поскольку все основные вычислительные сложности, связанные с методом line-by-line, сохранились, так как этот метод является наиболее трудоемким. При изменении метеорологических условий в атмосфере Земли (температуры и давления воздуха), а также изменения концентраций газов все вычисления, в том числе line-by-line, необходимо проводить заново. По этой причине необходимо получить параметрическую зависимость $\tau(g_k)$, входящую в (10), от термодинамических величин.

2. Уравнение переноса излучения и ряды экспонент

В задачах моделирования климата и прогноза погоды при решении задач переноса излучения в атмосфере Земли широко распространено разбиение спектрального интервала на два диапазона: коротковолновый, где доминирует солнечное излучение (длины волн менее 3 мкм), и длинноволновый, где определяющим является собственное излучение поверхности и атмосферы. Решения уравнения переноса излучения для этих двух частных случаев будем использовать, чтобы обсудить проблемы получения ряда экспонент. Для коротковолнового диапазона спектра будем следовать анализу, проведенному в работах [11; 27].

Для описания коротковолновой радиационной модели рассмотрим интегральное уравнение переноса с обобщенным ядром в виде [7]:

$$z(x) = \int_x k(x', x) z(x') dx' + \Psi(x). \tag{11}$$

Решение уравнения (11) представимо в виде ряда Неймана:

$$z(x) = \sum_{i=1}^{\infty} K^i \Psi = \int_X k(x_1, x)\Psi(x_1)dx_1 + \int_X \int_X k(x_1, x)k(x_2, x_1)\Psi(x_2)dx_1 dx_2 + \dots, \tag{12}$$

где X – фазовое пространство координат и направлений; $x = (\mathbf{r}, \mathbf{n})$ – точка в фазовом пространстве; $z(x)$ – определяют, как плотность столкновений, связанную с интенсивностью излучения соотношением:

$$I(\mathbf{r}, \mathbf{n}) = \mid \mu_\theta \mid S_\theta \frac{z(\mathbf{r}, \mathbf{n})}{\alpha(\mathbf{r})}, \tag{13}$$

$\alpha(r) = \sigma(r) + \alpha_a(r) + \alpha_m(r)$ – коэффициент ослабления $\alpha(r)$ является суммой коэффициентов рассеяния (аэрозольного и молекулярного) $\sigma(r)$ и коэффициентов поглощения аэрозольного $\alpha_a(r)$ и молекулярного $\alpha_m(r)$, $\mu_\theta = \cos(\theta)$, θ – зенитный угол Солнца, S_θ – Солнечная постоянная. Характерной особенностью молекулярного поглощения является высокая спектральная селективность, тогда как аэрозольное рассеяние и поглощение, а также молекулярное рассеяние имеют достаточно слабую спектральную зависимость. Обобщенное ядро описывается выражением:

$$k(x', x) = \frac{\omega(\mathbf{r}) f(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \mathbf{n}') \alpha(\mathbf{r}) \exp\left(-\tau(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\right)}{\mid r - \mathbf{r}' \mid^2} \delta\left(\mathbf{n} - \frac{r - \mathbf{r}'}{\mid r - \mathbf{r}' \mid}\right), \tag{14}$$

где $\omega(\mathbf{r}) = \sigma(\mathbf{r})/\alpha(\mathbf{r})$ – альбедо однократного рассеяния; $f(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \mathbf{n}')$ – индикатрисса рассеяния; $\Psi(x)$ – плотность распределения источников:

$$\Psi(x) = \sigma(\mathbf{r}) \exp\left(-\tau(\mathbf{r}, \mathbf{r}_\infty)\right) \delta(\mathbf{n} - \mathbf{n}_\theta). \tag{15}$$

Уравнение (11) записано для рассеянного излучения, и, чтобы рассчитать полную интенсивность излучения, следует к решению (12) добавить прямое излучение, прошедшее через атмосферу от Солнца [15]. Следует отметить также, что (11) и (12) описывают стандартную задачу, когда поверхность рассматривается как черное тело. Решение этого уравнения легко обобщается на случай диффузно отражающей поверхности [15].

Рассмотрим первое слагаемое в формуле (12) (однократно рассеянное излучение):

$$\begin{aligned} I(\mathbf{r}, \mathbf{n}) = \mid \mu_\theta \mid S_\theta \sigma(\mathbf{r}) \int \exp\left(-\tau_m(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_\infty) - \tau_m(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1)\right) \times \\ \times \frac{\sigma(\mathbf{r}_1) f(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \mathbf{n}_1) \exp\left(-\tau_\sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}_\infty) - \tau_\sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1)\right)}{\mid r - \mathbf{r} \mid^2} \delta\left(\mathbf{n} - \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}_1}{\mid r - \mathbf{r}_1 \mid}\right) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{n}_1. \end{aligned} \tag{16}$$

Из соотношения (16) следует, что первый экспоненциальный сомножитель обусловлен молекулярным поглощением. Все остальные сомножители связаны с аэрозольным и молекулярным рассеянием. Характерной особенностью молекулярного поглощения является высокая спектральная селективность, тогда как аэрозольное рассеяние и поглощение, а также молекулярное рассеяние имеют достаточно слабую спектральную зависимость. Типичный вид спектральных зависимостей коэффициентов аэрозольного и молекулярного рассеяния, а также коэффициентов молекулярного поглощения приведен в статье [17]. Вследствие этого при усреднении полученного решения уравнения переноса излучения по спектральному интервалу $\triangle\nu$, в пределах которого аэрозольное ослабление и молекулярное рассеяние мало меняются, появляется функция пропускания, обусловленная молекулярным поглощением

$$T^{(j)} = \frac{1}{\triangle\nu}\int_{(\triangle\nu)} \exp(-\tau^{(j)}(\nu))d\nu,$$

где $\tau^{(j)}(\nu)$ – оптическая толща j-го члена ряда (12) на частоте ν, в случае однократного рассеяния она имеет вид $\tau^{(j=1)}(\nu) = \tau_m(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_\infty) + \tau_m(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1)$. Если рассматривать второй член разложения (12), то получим аналогичную формулу, с той лишь разницей, что она будет описывать уже двукратно рассеянное излучение, и молекулярное поглощение будет описываться формулой:

$$\tau^{(j=2)}(\nu) = \tau_m(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_\infty) + \tau_m(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + \tau_m(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1). \tag{17}$$

Из формул (16)–(17) следует, что интенсивность излучения экспоненциально зависит от оптической толщи τ_m.

С учетом вышесказанного для отдельного спектрального канала можно получить выражение для функции пропускания атмосферы в случае прямого излучения:

$$T_{\triangle\nu} = \frac{1}{\nu_2 - \nu_1}\int_{\nu_1}^{\nu_2} \exp\left(-\tau_m(\mathbf{r}, \mathbf{r}_\infty)\right)d\nu, \tag{18}$$

и аналогично двукратного рассеяния:

$$T_{\triangle\nu} = \frac{1}{\nu_2 - \nu_1}\int_{\nu_1}^{\nu_2} \exp\left(-\tau_m(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_\infty) - \tau_m(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) - \tau_m(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1)\right)d\nu. \tag{19}$$

Следует еще раз отметить, что вышеуказанный интервал $\triangle\nu$ содержит, как правило, большое число спектральных линий. Оптическая толща в пространстве волновых чисел ν связана с массовым коэффициентом поглощения

$$\tau(\nu, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \int_{\mathbf{r}_1}^{\mathbf{r}_2}\sum_{i=1}^{N} k_i(\nu, l)\rho_i(l)dl = \sum_{i=1}^{N}\int_{\mathbf{r}_1}^{\mathbf{r}_2} k_i(\nu, l)\rho_i(l)dl, \tag{20}$$

где $k_i(\nu, l)$ – массовый коэффициент молекулярного поглощения i-го газа с концентрацией $\rho_i(l)$; l – пространственная переменная; dl – элемент длины. Из формулы (20) следует, что суммирование по газам и интегрирование по пространству перестановочны. Однако после преобразования Лапласа это не гарантировано, так как преобразование проводится по отношению к функции $\tau^{(j)}(\nu) \rightarrow \tau^{(j)}(g)$. В пространстве кумулятивных частот соотношения (17) и (20) уже не выполняются. Преобразование Лапласа – Стилтьеса позволяет осуществить переход из пространства частот, где $\tau^{(j)}(\nu)$ – быстро осциллирующая функция частоты, в пространство кумулятивных частот g. В пространстве кумулятивных частот $\tau(g, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ – монотонно

возрастающая функция, и применяя те или иные квадратурные формулы, можно получить короткий ряд экспонент

$$T_{\triangle\nu}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \int_0^1 \exp\left(-\tau(g, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\right) dg = \sum_{i=1}^{N} C_i \exp\left(-\tau(g, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\right), \tag{21}$$

где g_i – узлы, а C_i – коэффициенты соответствующих квадратурных формул. В случае гауссовских квадратур, как правило, достаточно $n = 10$, чтобы получить погрешность расчета пропускания, не превышающую 1 %. Описанная выше процедура позволяет получить короткий ряд экспонент, но и только. Для эффективной параметризации необходимо связать $\tau(g, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ с массовым коэффициентом поглощения $k_i(\nu, l)$. Для отдельного газа хорошо выполняется условие k-корреляции:

$$\tau_i(g, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \int_{\mathbf{r}_1}^{\mathbf{r}_2} k_i(g, l)\rho_i(l) dl, \tag{22}$$

а массовый коэффициент в пространстве кумулятивных частот $k_i(g, l)$ можно рассчитать на основе $k_i(\nu, l)$ посредством простой сортировки. Кроме того, $k_i(g, l)$ так же как и $k_i(\nu, l)$ является функцией температуры и давления, что дает возможность получить относительно простые параметрические зависимости для $k_i(g, l)$ от этих параметров. Термин «k-корреляция» означает, что спектры поглощения отдельного газа коррелируют на разных высотах. Однако в случае разных газов такое приближение не выполняется, причем зачастую коэффициент корреляции близок к нулю. Следствием этого является то, что в пространстве кумулятивных частот суммарная оптическая толща разных газов уже не является аддитивной функцией, и нельзя переставить местами суммирование и интегрирование как в пространстве частот (20).

Следует отметить, что при расчете широкополосной функции пропускания легко учесть Солнечную постоянную S_θ:

$$T_{\triangle\nu} = \int_{\triangle\nu} S_\theta(\nu) T(\nu) d\nu \Big/ \int_{\triangle\nu} S_\theta(\nu) d\nu,$$

а вместо формулы (6) следует использовать

$$g(k) = \frac{1}{\nu_2 - \nu_1} \int_{\nu_1}^{\nu_2} G(\nu)\delta(k - k(\nu)) d\nu,$$

где $G(\nu) = S_\theta(\nu) / \int_{\triangle\nu} S_\theta(\nu) d\nu$.

Аналогичные соотношения можно получить и для длинноволнового диапазона. Только там будет фигурировать функция Планка для различных уровней по высоте атмосферы Земли. Однако последнее справедливо, если нет сильных температурных градиентов.

3. Методика учета перекрывания полос поглощения различных газов

Методику учета перекрывания полос различных газов рассмотрим для случая двух газов. Для одного из рассматриваемых газов переход от $k_i(\nu, l)$ к $k_i(g, l)$ осуществлялся стандартным образом: путем сортировки $k_i(\nu, l)$ для заданных значений пространственной переменной l. В результате получается зависимость k от g, аналогичная той, что показана на рисунке 2б. Для второго газа первоначально осуществлялось аналогичное преобразование, а затем фиксировалось g_0 (положение минимума функции $k_a(g)$), а сама функция $k_a(g)$ перестраивалась из $k(g)$ таким образом, чтобы мера Лебега $g(k)$ для этих двух функций была одинаковой. На

рисунке 3 показан способ построения функции $k_a(g)$ для случая, когда $g_0 < 0.5$. Алгоритм следующий: 1) задается g_0; 2) в интервале $[2g_0,1]$ функция $k_a(g) = k(g)$; 3) в интервале $[g_0, 2g_0]$ строится сжимающее отображение $k_a(g)$ с коэффициентом сжатия, равным двум на основе $k(g)$, определенного на интервале $[0, 2g_0]$; 4) а затем $k_a(g)$ из интервала $[g_0, 2g_0]$ отображается на интервал $[0, g_0]$ зеркально-симметрично. Если коэффициент поглощения $k_i(\nu, l)$ рассчитан с постоянным шагом по частоте, то все вышеописанные процедуры могут быть легко выполнены путем соответствующих сортировок и перестановок. Аналогичный алгоритм можно легко построить и для случая $g_0 > 0.5$. В итоге для двух газов функция пропускания будет иметь вид, аналогичный тому, как и в пространстве волновых чисел, и интеграл по частоте может быть записан в виде квадратурных формул или ряда экспонент:

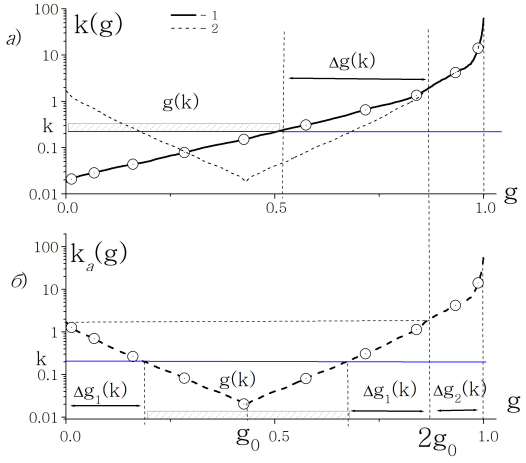


Рис. 3. Методика построения функции $k_a(g)$ (2) (а), 1 – исходная функция $k(g)$. Кружками обозначены узлы гауссовских квадратур

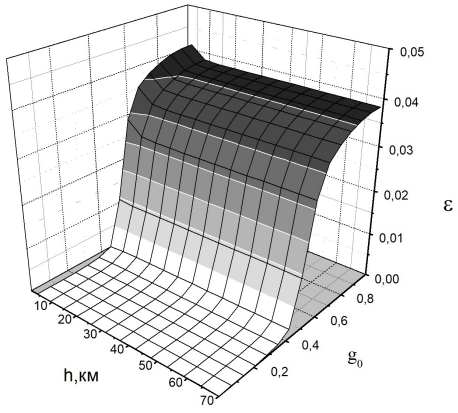


Рис. 4. Погрешность расчета пропускания атмосферы в случае поглощения H_2O и O_3 в спектральном интервале 1060–1080 см$^{-1}$. Функция пропускания на разных атмосферных трассах варьировалась в пределах 0.004–0.9

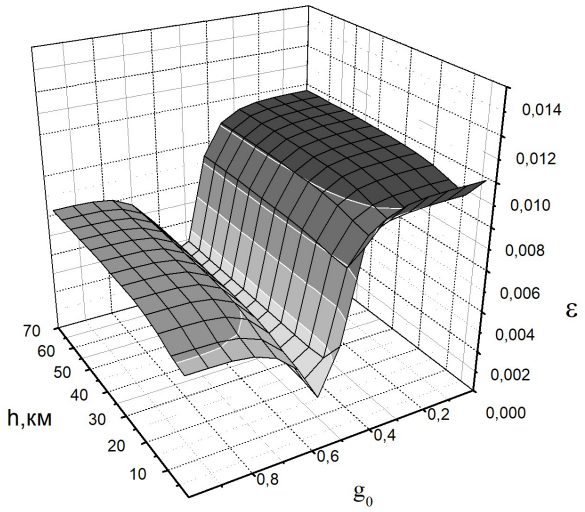


Рис. 5. Погрешность расчета пропускания атмосферы в случае поглощения H_2O и CO_2 в спектральном интервале 760–800 см$^{-1}$. Функция пропускания на разных атмосферных трассах варьировалась в пределах 0.04–0.9

$$T = \sum_{i=1}^{n} C_i \exp\Big(\int_{\mathbf{r}_1}^{\mathbf{r}_2} [k_1(g_i, l)\rho_1(l) + k_{a2}(g_i, l)\rho_2(l)]dl\Big). \tag{23}$$

Последующая задача состоит в том, чтобы найти g_0, при котором формула (23) обеспечит минимальную погрешность в сравнении с прямым методом счета.

Данную методику применили для расчета пропускания атмосферы на неоднородной трассе, обусловленного поглощением двух различных газов H_2O и CO_2, H_2O и O_3, H_2O и CH_4. Выбор этих газов был обусловлен следующими факторами: во-первых, поглощение водяным паром присутствует практически во всех спектральных интервалах ИК-диапазона спектра, тогда как остальные газы присутствуют в ограниченных диапазонах спектра. Во-вторых, вертикальные профили этих четырех газов значительно различаются. Водяной пар сосредоточен главным образом у поверхности Земли, углекислый газ относится к равноперемешанным по высоте газам и его концентрация спадает по высоте пропорционально давлению воздуха, а вертикальный профиль концентрации метана спадает несколько медленнее, чем концентрация CO_2, что обусловлено его участием в фотохимических процессах в атмосфере Земли, а концентрация озона полностью определяется фотохимическими процессами и максимальна на высотах 20–25 км. Расчеты были проведены прямым методом line-by-line и по аппроксимационной формуле. На рисунке 4 приведена зависимость абсолютной погрешности расчета пропускания ϵ при различных значениях высот h и g_0. Из рисунка видно, что при оптимальном значении $g_0 > 0.5$ погрешность ϵ не превышает 0.01. Результаты моделирования показали, что в случае перекрывания полос поглощения H_2O и O_3 погрешности аппроксимации минимальны, в сравнении с другими газами. Причина этого состоит в том, что формула (23) асимптотически точна, когда поглощает лишь один газ, а в случае, когда на трассе поглощают два газа, соответствующим подбором параметра g_0 для одного из них можно добиться высокой точности аппроксимации. В расчетах, приведенных выше, зависимость $k(g)$ для H_2O представлялась в виде монотонно возрастающей функции аргумента g, а для O_3 параметр g_0 подбирался. В случае поглощения в спектральном интервале 760–800 см$^{-1}$ газами H_2O и CO_2 был также получен вполне удовлетворительный результат. Рассматривались пропускания для трассы, проходящей от верхней границы $z = 90$ км до текущей границы z (рис. 5).

Из приведенного рисунка видно, что можно подобрать значение g_0, которое применимо для всех трасс. Это обеспечивает использование формулы (23) для расчета пропускания атмосферы при перекрывании полос поглощения двух разных газов. В случае поглощения H_2O и CH_4 для ряда спектральных интервалов вышеописанная аппроксимация давала достаточно хороший результат (рис. 6а). Однако для некоторых интервалов (рис. 6б), подобрать значение g_0, которое можно было бы использовать для всех трасс, не представлялось возможным. Разбиение спектрального диапазона 2950–3000 см$^{-1}$ на более узкие подынтервалы шириной 5 см$^{-1}$ позволило уменьшить погрешность расчета пропускания атмосферы для всех трасс до приемлемых значений (менее 1 %). На рисунке 7 приведены результаты моделирования для двух подынтервалов из диапазона 2950–3000 см$^{-1}$. Следует отметить, что на рисунке 7а приведены минимальные погрешности аппроксимации, а на рисунке 7б – максимальные погрешности из всех рассмотренных 10 подынтервалов.

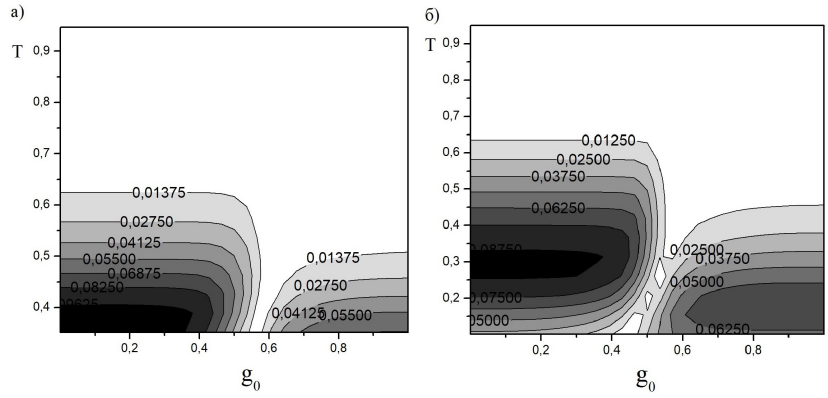


Рис. 6. Погрешность расчета пропускания атмосферы в случае поглощения H_2O и CH_4 в спектральном интервале 2900–2950 см$^{-1}$ (а), 2950–3000 см$^{-1}$ (б). По оси ординат отложено значение функции пропускания на разных атмосферных трассах от высоты h до 70 км, где h – нижняя граница, которая изменялась 0–69 км с шагом 1 км

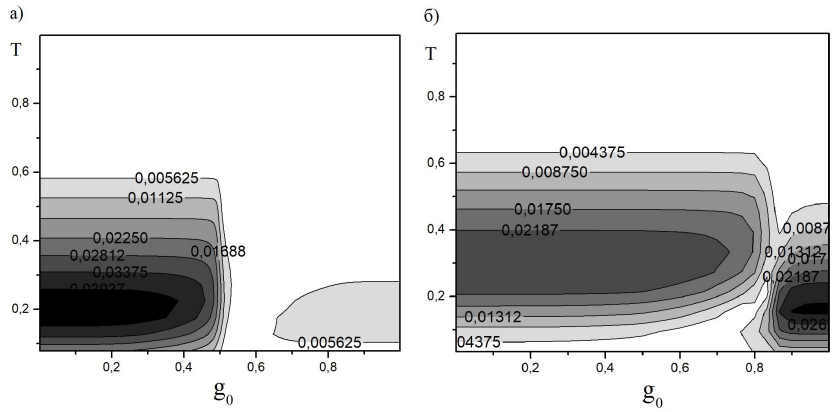


Рис. 7. Погрешность расчета пропускания атмосферы в случае поглощения H_2O и CH_4 в спектральном интервале 2970–2975 см$^{-1}$ (а), 2980–2985 см$^{-1}$ (б)

Заключение

Представленный в данной работе метод учета перекрывания молекулярных полос поглощения позволяет аппроксимировать широкополосную функцию пропускания коротким рядом экспонент с одинаковым числом членов ряда как в случае одного, так и двух учитываемых газов. Ширина спектральных интервалов определяется свойствами аэрозольного и молекулярного рассеяния, в пределах которых коэффициенты рассеяния можно считать неизменными. Данный метод является асимптотически точным при учете поглощения одним газом. При решении уравнения переноса излучения, наряду с коэффициентами молекулярного и аэрозольного рассеяния на заданной частоте, фундаментальными параметрами являются спектральные массовые коэффициенты молекулярного поглощения в пространстве кумулятивных частот, которые являются функциями температуры и давления воздуха, что позволяет эффективно их параметризовать. Следует отметить, что в полученном аппроксимационном решении оптические толщи молекулярного поглощения обладают аддитивными свойствами, аналогичными тому, как это представимо в прямом методе счета в пространстве частот, что обеспечивает применение любого из известных методов решения уравнения переноса излучения.

Попытка интерпретировать полученные результаты с точки зрения корреляции спектральных зависимостей коэффициентов поглощения не привела к успеху. Вообще говоря, термин «метод k-корреляции», широко используемый в зарубежной литературе, не является удачным. Дело в том, что коэффициент поглощения в широком спектральном интервале изменяется на несколько порядков, и при расчете коэффициентов корреляции в этом случае основной вклад дают центры спектральных линий. Если же обратиться к методам моделей полос [8], то можно показать, что основной вклад в пропускание дают ближние крылья линий, для которых оптическая толща близка к единице. По этой причине необходимо рассматривать корреляцию между спектральными пропусканиями разных газов на разных высотах. Именно это и позволяет интерпретировать полученные результаты.

ПРИМЕЧАНИЕ

[1] Работа выполнена в рамках государственного задания ИОА СО РАН.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Аристова, Е. Н. Метод лебеговского осреднения в серийных расчетах атмосферной радиации / Е. Н. Аристова, М. Н. Герцев, А. В. Шильков // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 2017. – № 57 (6). – С. 1033–1047. – DOI: http://dx.doi.org/. DOI: 10.7868/S0044466917060059

2. Гуди, Р. М. Атмосферная радиация. 1. Основы теории / Р. М. Гуди. – М. : Мир, 1966. – 552 с.

3. Зуев, В. Е. Распространение видимых и инфракрасных волн в атмосфере / В. Е. Зуев. – М. : Сов. радио, 1970. – 496 с.

4. Кондратьев, К. Я. Перенос длинноволнового излучения в атмосфере / К. Я. Кондратьев. – М. : Гостехиздат, 1950. – 288 с.

5. Корн, Г. Справочник по математике для научных работников и инженеров / Г. Корн, Т. Корн. – М. : Наука, 1973. – 831 с.

6. Лаврентьев, М. А. Методы теории функций комплексного переменного / М. А. Лаврентьев, Б. В. Шабат. – М. : Наука, 1973. – 736 с.

7. Метод Монте-Карло в атмосферной оптике / Г. И. Марчук, Г. А. Михайлов, М. А. Назаралиев, Н. А. Дарбинян, Б. А. Каргин, Б. П. Елепов. – Новосибирск : Наука, 1976. – 215 с.

8. Мицель, А. А. Развитие моделей молекулярного поглощения в задачах переноса излучения в атмосфере Земли / А. А. Мицель, К. М. Фирсов // Оптика атмосферы и океана. – 2000. – № 13 (02). – С. 179–197.

9. Мицель, А. А. Перенос оптического излучения в молекулярной атмосфере / А. А. Мицель, К. М. Фирсов, Б. А. Фомин. – Томск : STT, 2001. – 444 с.

10. Пеннер, С. С. Количественная молекулярная спектроскопия и излучательная способность газов / С. С. Пеннер. – М. : ИЛ, 1963. – 494 с.

11. Применение метода k-распределения при решении уравнения переноса коротковолнового излучения в пространственно неоднородной атмосфере / К. М. Фирсов, Т. Ю. Чеснокова, В. В. Белов, А. Б. Серебренников, Ю. Н. Пономарев // Оптика атмосферы и океана. – 2001. – № 14 (09). – С. 776–781.

12. Творогов, С. Д. Некоторые аспекты задачи о представлении функции поглощения рядом экспонент / С. Д. Творогов // Оптика атмосферы и океана. – 1994. – № 7 (03). – С. 315–326.

13. Творогов, С. Д. Применение рядов Дирихле в атмосферной спектроскопии / С. Д. Творогов // Оптика атмосферы и океана. – 1997. – № 10 (04–05). – С. 403–412.

14. Творогов, С. Д. Представление функций пропускания рядами экспонент / С. Д. Творогов, Л. И. Несмелова, О. Б. Родимова // Оптика атмосферы и океана. – 1996. – № 9 (03). – С. 373–377.

15. Тимофеев, Ю. М. Теоретические основы атмосферной оптики / Ю. М. Тимофеев, А. В. Васильев. – СПб. : Наука, 2003. – 474 с.

16. Фирсов, К. М. Новый метод учета перекрывания полос поглощения атмосферных газов при параметризации уравнения переноса / К. М. Фирсов, Т. Ю. Чеснокова // Оптика атмосферы и океана. – 1998. – № 11 (04). – С. 410–415.

17. Фирсов, К. М. Восстановление оптической толщи аэрозоля из наземных измерений солнечным фотометром SPM / К. М. Фирсов, Е. В. Бобров // Вестник Волгоградского государственного университета. Серия 1, Математика. Физика. – 2014. – № 2 (21). – С. 57–65.

18. Шильков, А. В. Методы осреднения сечений и энергетического спектра в задачах переноса нейтронов / А. В. Шильков // Математическое моделирование. – 1991. – № 3 (2). – С. 63–81.

19. Шильков, А. В. Верификация метода лебеговского осреднения / А. В. Шильков, М. Н. Герцев // Математическое моделирование. – 2015. – № 27 (8). – С. 13–31.

20. Шильков, А. В. Система «ATRAD» для расчетов атмосферной радиации: лебеговское осреднение спектров и сечений поглощения / А. В. Шильков, И. Л. Цветкова, С. В. Шилькова // Математическое моделирование. – 1997. – № 9 (6). – С. 3–24.

21. A Review on the Applications of Non-Gray Gas Radiation Models in Multi-Dimensional Systems / S. Zheng, R. Sui, Y. Sun, Y. Yang, Q. Lu // ES Energy Environ. – 2021. – Vol. 12. – P. 4–45. – DOI: 10.30919/esee8c423

22. AFGL Atmospheric Constituent Profiles (0–120 km). Technical Report AFGL-TR-86-0110 / G. P. Anderson, S. A. Clough, F. X. Kneizys, J. H. Chetwynd, E. P. Shettle. – Hanscom AFB, MA : Air Force Geophysics Laboratory, 1986. – 46 p.

23. Arking, A. The Influence of Line Shape and Band Structure on Temperatures in Planetary Atmospheres / A. Arking, K. Grossman // J. Atmos. Sci. – 1972. – Vol. 29, № 5. – P. 937–949. – DOI: 10.1175/1520-0469(1972)029<0937:TIOLSA>2.0.CO;2

24. Chou, M. D. Computation of Infrared Cooling Rates in the Water Vapor Bands / M. D. Chou, A. Arking // J. Atmos. Sci. – 1980. – Vol. 37, № 4. – P. 855–867. – DOI: 10.1175/1520-0469(1980)037<0855:COICRI>2.0.CO;2

25. Development and Recent Evaluation of the MT_CKD Model of Continuum Absorption / E. J. Mlawer, V. H. Payne, J.-L. Moncet, J. S. Delamere, M. J. Alvarado // Phil. Trans. R. Soc. A. – 2012. – Vol. 370, № 1968. – P. 2520–2556. – DOI: 10.1098/rsta.2011.0295

26. Domoto, D. A. Frequency Integration for Radiative Transfer Problems Involving Homogeneous Non-Gray Gases: The Inverse Transmission Function / D. A. Domoto // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. – 1974. – Vol. 14, № 9. – P. 935–942. – DOI: 10.1016/0022-4073(74)90020-X

27. Efficient Technique for Line-By-Line Calculating the Transmittance of the Absorbing

Atmosphere / A. A. Mitsel, I. V. Ptashnik, K. M. Firsov, B. A. Fomin // Atmos. Oceanic Opt. – 1995. – Vol. 8, № 10. – P. 847–850.

28. Gordon, I. E. The HITRAN2024 Molecular Spectroscopic Database / I. E. Gordon, L. S. Rothman, R. J. Hargreaves // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. – 2026. – Vol. 353. – P. 109807. – DOI: 10.1016/j.jqsrt.2026.109807

29. HITEMP, the High-Temperature Molecular Spectroscopic Database / L. S. Rothman, I. E. Gordon, R. J. Barber, H. Dothe, R. R. Gamache // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. – 2010. – Vol. 111, № 15. – P. 2139–2150. – DOI: 10.1016/j.jqsrt.2010.05.001

30. Lacis, A. A. A Description of the k-Distribution Methods for Modelling Nongray Gaseous Absorption, Thermal Emission, and Multiple Scattering in Vertically Inhomogeneous Atmospheres / A. A. Lacis, V. Oinas // J. Geophys. Res. – 1991. – Vol. 96, № D5. – P. 9027–9063. – DOI: 10.1029/90JD01945

31. Malkmus, W. Random Lorentz Band with Exponential-Tailed $1/S$ Line-Intensity Distribution Function / W. Malkmus // J. Opt. Soc. Am. – 1967. – Vol. 57, № 3. – P. 323–329. – DOI: 10.1364/JOSA.57.000323

32. McClatchey, R. A. AFCRL Atmospheric Absorption Line Parameters Compilation. AFCRL-TR-73-0096, Environmental Research Papers, No. 434 / R. A. McClatchey, W. S. Benedict, S. A. Clough. – Bedford, Mass. : Air Force Cambridge Research Laboratories, Optical Physics Laboratory, 1973. – 78 p.

33. Tashkun, S. A. CDSD-4000: High-Resolution, High-Temperature Carbon Dioxide Spectroscopic Databank / S. A. Tashkun, V. I. Perevalov // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. – 2011. – Vol. 112, № 9. – P. 1403–1410. – DOI: 10.1016/j.jqsrt.2011.03.005

34. The HITRAN2020 Molecular Spectroscopic Database / I. E. Gordon, L. S. Rothman, R. J. Hargreaves, R. Hashemi, E. V. Karlovets // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. – 2022. – Vol. 277. – P. 107949. – DOI: 10.1016/j.jqsrt.2021.107949

35. The HITRAN2016 Molecular Spectroscopic Database / I. E. Gordon, L. S. Rothman, C. Hill, R. V. Kochanov, Y. Tan // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. – 2017. – Vol. 203. – P. 3–69. – DOI: 10.1016/j.jqsrt.2017.06.038

36. The 2015 Edition of the GEISA Spectroscopic Database / N. Jacquinet-Husson, R. Armante, N. A. Scott, A. Chedin, L. Crepeau // J. Mol. Spectrosc. – 2016. – Vol. 327. – P. 31–72. – DOI: 10.1016/j.jms.2016.06.007

37. The HITRAN2012 Molecular Spectroscopic Database / L. S. Rothman, I. E. Gordon, Y. Babikov, A. Barbe, D. C. Benner // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. – 2013. – Vol. 130. – P. 4–50. – DOI: 10.1016/j.jqsrt.2013.07.002

38. The HITRAN 2008 Molecular Spectroscopic Database / L. S. Rothman, I. E. Gordon, A. Barbe, D. C. Benner, P. F. Bernath // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. – 2009. – Vol. 110, № 9–10. – P. 533–572. – DOI: 10.1016/j.jqsrt.2009.02.013

39. The 2020 Edition of the GEISA Spectroscopic Database / T. Delahaye, R. Armante, N. A. Scott, N. Jacquinet-Husson, A. Chedin // J. Mol. Spectrosc. – 2021. – Vol. 380. – P. 111510. – DOI: 10.1016/j.jms.2021.111510

40. Theory of Series of Exponents and Their Application for Analysis of Radiation Processes / S. D. Tvorogov, T. B. Zhuravleva, O. B. Rodimova, K. M. Firsov. – Berlin : Springer, 2008. – 240 p.

41. The Correlated-k Method for Radiation Calculations in Nonhomogeneous Atmospheres / R. Goody, R. West, L. Chen, D. Crisp // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. – 1989. – Vol. 42, № 6. – P. 539–550. – DOI: 10.1016/0022-4073(89)90019-1

42. Yang, S. Modified Correlated k-Distribution Methods for Remote Sensing Applications / S. Yang, P. Ricchiazzi, C. Gautier // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. – 2000. – Vol. 64, № 6. – P. 585–608. – DOI: 10.1016/S0022-4073(99)00140-5

REFERENCES

1. Aristova E.N., Gertsev M.N., Shilkov A.V. On the Asymptotic Behaviour Unbounded Solutions of the Elliptic Equation on the Model Riemannian Manifolds. *Zhurnal vychislitelnoy*

matematiki i matematicheskoy fiziki, 2017, no. 57 (6), pp. 1033-1047. DOI: http://dx.doi.org/. DOI: 10.7868/S0044466917060059

2. Gudi R.M. *Atmospheric Radiation. 1. Theoretical Basis*. Moscow, Mir Publ., 1966. 552 p.

3. Zuev V.E. *Propagation of Visible and Infrared Radiation in the Atmosphere*. Moscow, Sov. radio, 1970. 496 p.

4. Kondratyev K.Ya. *Longwave Radiation Transfer in the Atmosphere*. Moscow, Gostekhizdat, 1950. 288 p.

5. Korn G., Korn T. *Mathematical Handbook for Scientists and Engineers*. Moscow, Nauka Publ., 1973. 831 p.

6. Lavrentyev M.A., Shabat B.V. *Methods of the Theory of Functions of a Complex Variable*. Moscow, Nauka Publ., 1973. 736 p.

7. Marchuk G.I., Mikhaylov G.A., Nazaraliev M.A., Darbinyan N.A., Kargin B.A., Elepov B.P. *Monte Carlo Method in Atmospheric Optics*. Novosibirsk, Nauka Publ., 1976. 215 p.

8. Mitsel A.A., Firsov K.M. On the Asymptotic Behaviour Unbounded Solutions of the Elliptic Equation on the Model Riemannian Manifolds. *Optika atmosfery i okeana*, 2000, no. 13 (02), pp. 179-197.

9. Mitsel A.A., Firsov K.M., Fomin B.A. *Optical Radiation Transfer in a Molecular Atmosphere*. Tomsk, STT, 2001. 444 p.

10. Penner S.S. *Quantitative Molecular Spectroscopy and Gas Emissivity*. Moscow, IL, 1963. 494 p.

11. Firsov K.M., Chesnokova T.Yu., Belov V.V., Serebrennikov A.B., Ponomarev Yu.N. Use of K-Distribution Method for Solution of Shortwave Radiative Transfer Equation in a Spatially Inhomogeneous Atmosphere. *Optika atmosfery i okeana*, 2001, no. 14 (09), pp. 776-781.

12. Tvorogov S.D. Some Aspects of the Problem of Representation of the Absorption Function by a Series of Exponents. *Optika atmosfery i okeana*, 1994, no. 7 (03), pp. 315-326.

13. Tvorogov S.D. Application of Dirichlet Series in Atmospheric Spectroscopy. *Optika atmosfery i okeana*, 1997, no. 10 (04–05), pp. 403-412.

14. Tvorogov S.D., Nesmelova L.I., Rodimova O.B. Representation of Transmission Functions by Exponential Series. *Optika atmosfery i okeana*, 1996, no. 9 (03), pp. 373-377.

15. Timofeev Yu.M., Vasilyev A.V. *Theoretical Foundations of Atmospheric Optics*. Saint Petersburg, Nauka Publ., 2003. 474 p.

16. Firsov K.M., Chesnokova T.Yu. A New Method for Taking Into Account the Overlapping of Absorption Bands of Atmospheric Gases in the Parametrization of the Transfer Equation. *Optika atmosfery i okeana*, 1998, no. 11 (04), pp. 410-415.

17. Firsov K.M., Bobrov E.V. Retrieval of Aerosol Optical Depth from Ground-Based Measurements by the SPM Sun Photometer. *Vestnik Volgogradskogo gosudarstvennogo universiteta. Seriya 1: Matematika. Fizika* [Science Journal of Volgograd State University. Mathematics. Physics], 2014, no. 2 (21), pp. 57-65.

18. Shilkov A.V. Methods for Averaging Cross Sections and Energy Spectrum in Neutron Transport Problems. *Matematicheskoe modelirovanie* [Mathematical Models and Computer Simulations], 1991, no. 3 (2), pp. 63-81.

19. Shilkov A.V., Gertsev M.N. Verification of the Lebesgue Averaging Method. *Matematicheskoe modelirovanie* [Mathematical Models and Computer Simulations], 2015, no. 27 (8), pp. 13-31.

20. Shilkov A.V., Tsvetkova I.L., Shilkova S.V. The «ATRAD» System for Atmospheric Radiation Calculations: Lebesgue Averaging of Absorption Spectra and Cross Sections. *Matematicheskoe modelirovanie* [Mathematical Models and Computer Simulations], 1997, no. 9 (6), pp. 3-24.

21. Zheng S., Sui R., Sun Y., Yang Y., Lu Q. A Review on the Applications of Non-Gray Gas Radiation Models in Multi-Dimensional Systems. *ES Energy Environ.*, 2021, vol. 12, pp. 4-45. DOI: 10.30919/esee8c423

22. Anderson G.P., Clough S.A., Kneizys F.X., Chetwynd J.H., Shettle E.P. *AFGL Atmospheric Constituent Profiles (0–120 km). Technical Report AFGL-TR-86-0110*. Hanscom AFB, MA, Air Force Geophysics Laboratory, 1986. 46 p.

23. Arking A., Grossman K. The Influence of Line Shape and Band Structure on Temperatures in Planetary Atmospheres. *J. Atmos. Sci.*, 1972, vol. 29, no. 5, pp. 937-949. DOI: 10.1175/1520-0469(1972)029<0937:TIOLSA>2.0.CO;2

24. Chou M.D., Arking A. Computation of Infrared Cooling Rates in the Water

Vapor Bands. *J. Atmos. Sci.*, 1980, vol. 37, no. 4, pp. 855-867. DOI: 10.1175/1520-0469(1980)037<0855:COICRI>2.0.CO;2

25. Mlawer E.J., Payne V.H., Moncet J.-L., Delamere J.S., Alvarado M.J. Development and Recent Evaluation of the MT_CKD Model of Continuum Absorption. *Phil. Trans. R. Soc. A*, 2012, vol. 370, no. 1968, pp. 2520-2556. DOI: 10.1098/rsta.2011.0295

26. Domoto D.A. Frequency Integration for Radiative Transfer Problems Involving Homogeneous Non-Gray Gases: The Inverse Transmission Function. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 1974, vol. 14, no. 9, pp. 935-942. DOI: 10.1016/0022-4073(74)90020-X

27. Mitsel A.A., Ptashnik I.V., Firsov K.M., Fomin B.A. Efficient Technique for Line-By-Line Calculating the Transmittance of the Absorbing Atmosphere. *Atmos. Oceanic Opt.*, 1995, vol. 8, no. 10, pp. 847-850.

28. Gordon I.E., Rothman L.S., Hargreaves R.J. The HITRAN2024 Molecular Spectroscopic Database. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 2026, vol. 353, p. 109807. DOI: 10.1016/j.jqsrt.2026.109807

29. Rothman L.S., Gordon I.E., Barber R.J., Dothe H., Gamache R.R. HITEMP, the High-Temperature Molecular Spectroscopic Database. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 2010, vol. 111, no. 15, pp. 2139-2150. DOI: 10.1016/j.jqsrt.2010.05.001

30. Lacis A.A., Oinas V. A Description of the k-Distribution Methods for Modelling Nongray Gaseous Absorption, Thermal Emission, and Multiple Scattering in Vertically Inhomogeneous Atmospheres. *J. Geophys. Res.*, 1991, vol. 96, no. D5, pp. 9027-9063. DOI: 10.1029/90JD01945

31. Malkmus W. Random Lorentz Band with Exponential-Tailed $1/S$ Line-Intensity Distribution Function. *J. Opt. Soc. Am.*, 1967, vol. 57, no. 3, pp. 323-329. DOI: 10.1364/JOSA.57.000323

32. McClatchey R.A., Benedict W.S., Clough S.A. *AFCRL Atmospheric Absorption Line Parameters Compilation. AFCRL-TR-73-0096, Environmental Research Papers, No. 434*. Bedford, Mass., Air Force Cambridge Research Laboratories, Optical Physics Laboratory, 1973. 78 p.

33. Tashkun S.A., Perevalov V.I. CDSD-4000: High-Resolution, High-Temperature Carbon Dioxide Spectroscopic Databank. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 2011, vol. 112, no. 9, pp. 1403-1410. DOI: 10.1016/j.jqsrt.2011.03.005

34. Gordon I.E., Rothman L.S., Hargreaves R.J., Hashemi R., Karlovets E.V. The HITRAN2020 Molecular Spectroscopic Database. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 2022, vol. 277, p. 107949. DOI: 10.1016/j.jqsrt.2021.107949

35. Gordon I.E., Rothman L.S., Hill C., Kochanov R.V., Tan Y. The HITRAN2016 Molecular Spectroscopic Database. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 2017, vol. 203, pp. 3-69. DOI: 10.1016/j.jqsrt.2017.06.038

36. Jacquinet-Husson N., Armante R., Scott N.A., Chedin A., Crepeau L. The 2015 Edition of the GEISA Spectroscopic Database. *J. Mol. Spectrosc.*, 2016, vol. 327, pp. 31-72. DOI: 10.1016/j.jms.2016.06.007

37. Rothman L.S., Gordon I.E., Babikov Y., Barbe A., Benner D.C. The HITRAN2012 Molecular Spectroscopic Database. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 2013, vol. 130, pp. 4-50. DOI: 10.1016/j.jqsrt.2013.07.002

38. Rothman L.S., Gordon I.E., Barbe A., Benner D.C., Bernath P.F. The HITRAN 2008 Molecular Spectroscopic Database. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 2009, vol. 110, no. 9–10, pp. 533-572. DOI: 10.1016/j.jqsrt.2009.02.013

39. Delahaye T., Armante R., Scott N.A., Jacquinet-Husson N., Chedin A. The 2020 Edition of the GEISA Spectroscopic Database. *J. Mol. Spectrosc.*, 2021, vol. 380, p. 111510. DOI: 10.1016/j.jms.2021.111510

40. Tvorogov S.D., Zhuravleva T.B., Rodimova O.B., Firsov K.M. *Theory of Series of Exponents and Their Application for Analysis of Radiation Processes*. Berlin, Springer, 2008. 240 p.

41. Goody R., West R., Chen L., Crisp D. The Correlated-k Method for Radiation Calculations in Nonhomogeneous Atmospheres. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 1989, vol. 42, no. 6, pp. 539-550. DOI: 10.1016/0022-4073(89)90019-1

42. Yang S., Ricchiazzi P., Gautier C. Modified Correlated k-Distribution Methods for Remote Sensing Applications. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 2000, vol. 64, no. 6, pp. 585-608. DOI: 10.1016/S0022-4073(99)00140-5

ACCOUNTING FOR THE OVERLAP OF MOLECULAR ABSORPTION SPECTRA OF DIFFERENT GASES IN THE APPROXIMATION OF TRANSMISSION FUNCTION BY A SERIES OF EXPONENTS

Alexey A. Razmolov

Assistant, Department of Radiophysics,
Volgograd State University
RazmolovAA@volsu.ru
Prosp. Universitetsky, 100, 400062 Volgograd, Russian Federation

Tatyana Yu. Chesnokova

Candidate of Sciences (Physics and Mathematics), Senior Researcher,
V.E. Zuev Institute of Atmospheric Optics Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences
ches@iao.ru
Academician Zuev Sq., 1, 634055 Tomsk, Russian Federation

Konstantin M. Firsov

Doctor of of Sciences (Physics and Mathematics), Professor, Department of Radiophysics,
Volgograd State University
fkm@volsu.ru
https://orcid.org/0000-0002-8448-1483
Prosp. Universitetsky, 100, 400062 Volgograd, Russian Federation

Abstract. A new method is proposed for accounting for the overlap of absorption bands of different gases in the approximation of the transmission by a series of exponents. The method takes additively into account the effective molecular absorption coefficients of various gases. It is shown that this method makes it possible to obtain short exponential series (small number of parameters), that ensures high speed of the calculation of radiative transfer in the Earth's atmosphere. The developed method is applicable to the radiative transfer simulation in both the longwave and shortwave spectral regions, including cases of multiple scattering by aerosol and cloud particles.

Key words: overlap of absorption bands, parametrization of radiative transfer equation, transmission functions, series of exponents, molecular absorption.