



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 19 за 2016 г.



ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

Герцев М.Н.

**Восстановление сечений
молекулярного поглощения
излучения из базы данных
NITRAN**

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Герцев М.Н. Восстановление сечений молекулярного поглощения излучения из базы данных NITRAN // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2016. № 19. 22 с. doi:[10.20948/prepr-2016-19](https://doi.org/10.20948/prepr-2016-19)
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2016-19>

**Ордена Ленина
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В.Келдыша
Российской академии наук**

М.Н.Герцев

**Восстановление сечений
молекулярного поглощения излучения
из базы данных HITRAN**

Москва — 2016

Герцев М.Н.

Восстановление сечений молекулярного поглощения излучения из базы данных HITRAN

Описана методика и программный код, предназначенные для восстановления сечений поглощения и испускания инфракрасного излучения атмосферными газами из базы данных параметров линий HITRAN с учетом основных механизмов уширения линий.

Ключевые слова: молекулярное поглощение излучения, атмосферные газы, база данных HITRAN.

Gertsev M.N.

Reconstruction of molecular absorption cross-sections of radiation from data base HITRAN

The technique and the program code designed to restore the absorption cross-sections and emission of infrared radiation by atmospheric gases from the HITRAN database with the main line broadening mechanisms are described.

Key words: molecular absorption of radiation, atmospheric gases, the HITRAN database

Оглавление

Введение	3
Теория	3
Сечения молекулярного поглощения и испускания излучения	3
Контур линии поглощения	4
База данных HITRAN	7
Восстановление спектральных сечений	9
Построение сетки по энергии фотонов	9
Восстановление сечений поглощения	10
Программа построения базы данных сечений	12
Литература	13
Приложение 1. Структура файла «.par»	14
Приложение 2. Файловая структура	15
Приложение 3. Примеры файлов	16
Приложение 4. Модули	17

Введение

Препринт является первым из серии публикаций, в которой описывается комплекс программ для проведения численных расчётов переноса излучения в одномерной плоской атмосфере с акцентом на точный учёт эффектов, связанных со спектром излучения.

В работе приводится описание программы для восстановления детальных сечений молекулярного поглощения по базе спектроскопических данных HITRAN [1-4]. Восстановленные детальные сечения сохраняются в новую базу данных. Для расчёта фойгтовского профиля линий поглощения применяются квадратурные формулы Гаусса-Кристоффеля.

Программы доступны по ссылке:

<http://cpt.imamod.ru/people/gertsev.html/atrad>

Элементы теории

Сечения молекулярного поглощения и испускания излучения

Сечение поглощения и испускания излучения молекулами газа «*B*» при условии равновесного заселения квантовых состояний внутренней энергии молекул даётся выражением:

$$\sigma_{B,[\text{cm}^2]}(E, T, P) = \sum_{\ell} S_{B,\ell}(T) F_{B,\ell}(E - E_{B,\ell}),$$
$$\int_{-\infty}^{\infty} F_{B,\ell}(E - E_{B,\ell}) dE = 1.$$

Сечение зависит от энергии фотонов E , температуры T , давления смеси газов P и представляет собой сумму по линиям поглощения « ℓ ». Каждое слагаемое равно произведению силы « ℓ -й» линии поглощения $S_{B,\ell}$ и контура линии $F_{B,\ell}$, имеющего максимум на энергии перехода $E_{B,\ell}$ и нормированного на единицу. Силы линий, как это принято в базе данных HITRAN, умножены на относительную натуральную встречаемость изотопических модификаций молекулы «*B*». В результате умножения на общую концентрацию молекул они дают верную поглощательную способность единичного объёма газа «*B*», если он имеет природное происхождение. Кроме молекулярных постоянных, силы линий включают: экспоненциальный больцмановский фактор для населенностей начального состояния перехода, статистические суммы молекулы и поправку на процессы вынужденного испускания излучения. Эти факторы зависят от температуры газа. Результирующая температурная зависимость силы линии может быть приведена к виду, согласованному с хранимыми в базе данных HITRAN стандартными параметрами линий:

$$S_{B,\ell}(T) = S_{B,\ell}(T_S) \cdot \frac{S_{B,\ell}(T)}{S_{B,\ell}(T_S)} =$$

$$= S_{B,\ell}(T_S) \cdot \frac{\Sigma_B(T_S)}{\Sigma_B(T)} \exp\left(aE_{B,\ell}^* \frac{T - T_S}{TT_S}\right) \frac{1 - \exp(-aE_{B,\ell}/T)}{1 - \exp(-aE_{B,\ell}/T_S)}.$$

Здесь $T_S = 296^\circ\text{K}$ — нормальная температура, $E_{B,\ell}[\text{cm}^{-1}]$ — энергия перехода, $E_{B,n}^*[\text{cm}^{-1}]$ — энергия нижнего состояния перехода, $\Sigma_B(T)$ — произведение вращательной и колебательной статистических сумм молекулы, $a = 1,438769$ — вторая радиационная постоянная. Банк данных HITRAN содержит стандартные параметры, приведенные к нормальной температуре $S_{B,\ell}(T_S)$, $E_{B,\ell}^*$, $E_{B,\ell}$, а также (в отдельном файле) функцию $\Sigma_B(T)$.

Контур линии поглощения

Контур линии $F_{B,\ell}(E - E_{B,\ell})$ определяется процессами *уширения спектральных линий*. *Уширение за счёт столкновений молекул* играет значительную роль при формировании контуров линий поглощения и излучения в атмосферах планет. Детальная теория столкновительного уширения линий достаточно сложна, продолжает развиваться и совершенствоваться, а её подробное изложение даётся в ряде монографий [8], [9]. Различные теории уширения линий за счёт столкновений дают различные, часто очень сложные, выражения для контуров линий излучения и поглощения. Одна из наиболее простых теорий — теория ударного уширения Майкельсона–Лоренца — даёт контур:

$$F_{B,\ell}^L(E - E_{B,\ell})dE = \frac{\gamma_{B,\ell}^L/\pi}{[E - E_{B,\ell}]^2 + [\gamma_{B,\ell}^L]^2} dE, \quad (1)$$

$$\gamma_{B,\ell}^L = \gamma_{B,\ell}^0 + [\gamma_{B,\ell}^A[1 - C_B] + \gamma_{B,\ell}^B C_B] \cdot \frac{P}{P_S} \left[\frac{T_S}{T} \right]^n,$$

где $\gamma_{B,\ell}^L$ — полуширина линии, равная сумме естественной полуширины $\gamma_{B,\ell}^0$, полуширины $\gamma_{B,\ell}^A$, обусловленной столкновениями с молекулами буферного газа «А» (воздуха), и полуширины $\gamma_{B,\ell}^B$, обусловленной столкновениями с молекулами этого же газа «В». Столкновительные полуширины умножаются на фактор, учитывающий их изменение при изменении температуры и давления от значений при нормальных условиях. Здесь C_B — молярная доля газа «В» в смеси газов, P_S — нормальное давление, T_S — нормальная температура, n —

показатель температурной зависимости полуширины линии. Если показатель не задан, то он полагается равным 0.5.

Ещё одна причина уширения линий связана с эффектом Доплера. Если молекула обладает составляющей скорости v в направлении луча зрения и если $v \ll c$, где c — скорость света, то с точки зрения покоящегося наблюдателя частота излучения (поглощения) молекулы ν_0 заменится на частоту $\nu = \nu_0(1 \pm v/c)$. Знак в выражении зависит от направления движения молекулы: плюс соответствует движению по направлению к наблюдателю, минус — от него. Осреднение доплеровского сдвига по максвелловскому распределению молекул приводит к контуру Доплера $F_{B,\ell}^D$:

$$\begin{aligned} F_{B,\ell}^D(E - E_{B,\ell})dE &= \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \cdot \exp\left(-\ln 2 \cdot \frac{[E - E_{B,\ell}]^2}{[\gamma_{B,\ell}^D]^2}\right) \frac{dE}{\gamma_{B,\ell}^D} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{[E - E_{B,\ell}]^2}{[\Delta_{B,\ell}]^2}\right) \Delta_{B,\ell} \end{aligned} \quad (2)$$

где $\gamma_{B,\ell}^D = \Delta_{B,\ell} [\ln 2]^{1/2}$ — параметр доплеровской ширины. Он вычисляется по формуле

$$\Delta_{B,\ell} = \frac{\gamma_{B,\ell}^D}{\sqrt{\ln 2}} = E_{B,\ell} \left[\frac{2kTN_{Av}}{A_B c^2} \right]^{1/2} = 4.301 \cdot 10^{-7} \cdot E_{B,\ell} \left[\frac{T_{[K]}}{A_B} \right]^{1/2},$$

где A_B — молекулярный вес газа «B», $T_{[K]}$ — температура в градусах Кельвина.

Результат действия основных механизмов уширения линий даёт контур Фойгта, который есть свёртка лоренцевского и доплеровского контуров линий:

$$F_{B,\ell}(E - E_{B,\ell}) = \int_{-\infty}^{\infty} F_{B,\ell}^L(E - E_{B,\ell} - E') F_{B,\ell}^D(E' - E_{B,\ell}) dE'. \quad (3)$$

Для вычисления фойгтовского профиля можно применить квадратурную формулу Гаусса-Кристоффеля. Однако прямое применение (без проведения дополнительных преобразований) даёт неудовлетворительные результаты. Удачное предварительное преобразование свёртки (перед аппроксимацией интеграла по Гауссу) предложено Никифоровым и Уваровым [10]. Приведём здесь их выкладки:

$$F_{B,\ell}(E - E_{B,\ell}) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\gamma_{B,\ell}^L/\pi}{[E - E_{B,\ell} - E']^2 + [\gamma_{B,\ell}^L]^2} \sqrt{\frac{1}{\pi}} \cdot \exp\left(-E'^2/[\Delta_{B,\ell}^D]^2\right) \frac{dE'}{\Delta_{B,\ell}^D} =$$

$$= \frac{y^2}{\pi^{3/2} \gamma_{B,\ell}^L} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(-s^2)}{[x-s]^2 + y^2} ds.$$

Здесь сделана замена:

$$y = \frac{\gamma_{B,\ell}^L}{\Delta_{B,\ell}^D}, \quad x = \frac{E - E_{B,\ell}}{\Delta_{B,\ell}^D}, \quad s = \frac{E'}{\Delta_{B,\ell}^D}.$$

Далее:

$$\begin{aligned} F_{B,\ell} &= \frac{y^2}{\pi^{3/2} \gamma_{B,\ell}^L} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-s^2}}{[x-s]^2 + y^2} ds = \frac{iy}{2\pi^{3/2} \gamma_{B,\ell}^L} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-s^2}}{x-s+iy} ds - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-s^2}}{x-s-iy} ds \right] = \\ &= \frac{iy e^{a^2}}{2\pi^{3/2} \gamma_{B,\ell}^L} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-t^2+2iat}}{x-t+i[y+a]} dt - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-t^2-2iat}}{x-t-i[y+a]} dt \right] = \\ &= \frac{y e^{a^2}}{\pi^{3/2} \gamma_{B,\ell}^L} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-t^2} [[y+a] \cos 2at - [x-t] \sin 2at]}{[x-t]^2 + [y+a]^2} dt = \\ &= \frac{e^{a^2}}{\pi^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-t^2} [[\gamma_{B,\ell}^L + a\Delta_{B,\ell}^D] \cos 2at - [E - E_{B,\ell} - t\Delta_{B,\ell}^D] \sin 2at]}{[E - E_{B,\ell} - t\Delta_{B,\ell}^D]^2 + [\gamma_{B,\ell}^L + a\Delta_{B,\ell}^D]^2} dt. \end{aligned}$$

Здесь в первом интеграле сделана замена $s = t - ia$, а во втором — замена $s = t + ia$, где a есть параметр порядка единицы. Введение параметра « a » позволяет эффективно расширить профиль линии. Применение к преобразованному интегралу квадратурной формулы Гаусса–Кристоффеля даёт весьма хорошую аппроксимацию контура Фойгта:

$$F_{B,\ell}(E - E_{B,\ell}) = \frac{e^{a^2}}{\pi^{3/2}} \sum_{k=-K}^K \lambda_k \frac{[\gamma_{B,\ell}^L + a\Delta_{B,\ell}^D] \cos 2at_k - [E - E_{B,\ell} - t_k \Delta_{B,\ell}^D] \sin 2at_k}{[E - E_{B,\ell} - t_k \Delta_{B,\ell}^D]^2 + [\gamma_{B,\ell}^L + a\Delta_{B,\ell}^D]^2} \quad (4).$$

Здесь $t_k = -t_{-k}$ суть нули полинома Эрмита степени « $2K+1$ », величины $\lambda_k = \lambda_{-k}$ — коэффициенты Кристоффеля (веса квадратурной формулы).

Главное преимущество данной аппроксимации перед другими аппроксимациями профиля Фойгта [5–6] состоит в ее простой аналитической форме. Она позволяет выполнить интегрирование профиля Фойгта и суммарного сечения поглощения по любому интервалу спектра (в том числе большому интервалу) в элементарных функциях с сохранением площади под контурами линий:

$$\begin{aligned}
\langle \sigma_{B,j} \rangle \Delta E &\equiv \int_{E_j}^{E_{j+1}} \sigma_B dE = \sum_{\ell} S_{B,\ell} \int_{E_j}^{E_{j+1}} F_{B,\ell}(E - E_{B,\ell}) dE = \\
&= \sum_{\ell} S_{B,\ell} \int_{E_j}^{E_{j+1}} \frac{e^{a^2}}{\pi^{3/2}} \sum_{k=-K}^K \lambda_k \frac{[\gamma_{B,\ell}^L + a\Delta_{B,\ell}^D] \cos 2at_k - [E - E_{B,\ell} - t_k \Delta_{B,\ell}^D] \sin 2at_k}{[E - E_{B,\ell} - t_k \Delta_{B,\ell}^D]^2 + [\gamma_{B,\ell}^L + a\Delta_{B,\ell}^D]^2} = \\
&= \sum_{\ell} S_{B,\ell} \sum_{k=-K}^K \frac{e^{a^2}}{\pi^{3/2}} \lambda_k \int_{E_j}^{E_{j+1}} \frac{[\gamma_{B,\ell}^L + a\Delta_{B,\ell}^D] \cos 2at_k - [E - E_{B,\ell} - t_k \Delta_{B,\ell}^D] \sin 2at_k}{[E - E_{B,\ell} - t_k \Delta_{B,\ell}^D]^2 + [\gamma_{B,\ell}^L + a\Delta_{B,\ell}^D]^2} = \\
&= \sum_{\ell} S_{B,\ell} \sum_{k=-K}^K \frac{e^{a^2} \lambda_k}{\pi^{3/2}} \left[\cos 2at_k \arctan \left(\frac{E - E_{B,\ell} - t_k \Delta_{B,\ell}^D}{\gamma_{B,\ell}^L + a\Delta_{B,\ell}^D} \right) - \right. \\
&\quad \left. - \frac{\sin 2at_k}{2} \ln \left(1 + \left(\frac{E - E_{B,\ell} - t_k \Delta_{B,\ell}^D}{\gamma_{B,\ell}^L + a\Delta_{B,\ell}^D} \right)^2 \right) \right]_{E_j}^{E_{j+1}}.
\end{aligned}$$

Реализованный на этой основе программный код вычисляет не значения сечения поглощения в узлах сетки по энергии фотонов (такое представление спектральных сечений может приводить к большим погрешностям на грубых сетках), а непосредственно «средние по интервалу» значения спектрального сечения.

В проведённых нами расчётах по восстановлению сечений молекулярного поглощения мы использовали значения $a=1$ и $K=3$ (семь узлов квадратурной формулы). Для контроля точности восстановления сечений вычислялся параметр

$$k = \sum_{B,\ell} S_{B,\ell} / \sum_{B,\ell} \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} F_{B,\ell} dE, \quad (5)$$

где E_{\min} , E_{\max} — точки обрезания крыла. «Идеальное» восстановление сечений соответствует значению параметра $k=1$. В проведённых расчётах параметр принимал значения не ниже 0.997.

База данных HITRAN

База данных HITRAN состоит из файлов, содержащих различную информацию. Далее будут описаны только те файлы, которые использовались нами для восстановления сечений молекулярного поглощения.

Корневой папкой считается директория

<ftp://cfa-ftp.harvard.edu/pub/HITRAN2008/>

(для входа на сайт необходимо запросить имя и пароль при помощи формы на сайте <http://www.cfa.harvard.edu/hitran/>).

Директория HITRAN2008 содержит файлы с расширением «.par» (их структуру смотри в Приложении 1) (и их заархивированные zip-архиватором копии), содержащие в себе информацию о линиях поглощения (см. там же).

HITRAN2008\HITRAN08.par

Единый файл, содержащий информацию сразу обо всех газах (за исключением SF₆, ClONO₂ и CF₄), отсортированную по энергиям резонансного перехода $E_{B,i}$.

HITRAN2008\HITRAN08.zip

Архивированный предыдущий файл.

HITRAN2008\by-molecule\Uncompressed-files

Содержит отдельные файлы для каждой «основной» молекулы. Номер молекулы включён в название файла.

HITRAN2008\by-molecule\Compressed-files

Содержит отдельные архивы для каждого файла из предыдущей директории.

HITRAN2008\Supplemental

Содержит файлы с данными и архивы для молекул SF₆, ClONO₂ и CF₄.

Global_Data\molparam.txt

Содержит данные по молекулам: название молекулы, номер, список изотопов. Для каждого изотопа даны: номер изотопа; натуральная встречаемость; произведение вращательной и колебательной статистических сумм молекулы при нормальной температуре ($\Sigma_B(T_s)$); молярная масса.

Global_Data\parsum.dat

Содержит произведение вращательной и колебательной статистических сумм молекулы ($\Sigma_B(T)$) для температур от 70°К до 3000°К. Шаг по температуре — 1°К.

HITRAN — база данных, содержащая спектроскопические данные о молекулярном поглощении для 29 газов, из которых состоит основная часть атмосферного воздуха Земли. Всего газов в базе — 42. База данных поддерживается и разрабатывается Гарвард–Смитсоновским центром астрофизики, с сайта которого и была взята база данных. Данные, представленные в базе, — результаты экспериментов, позволяющие восстановить спектры поглощения и излучения.

Версия HITRAN2012 аналогична по структуре, содержит большее количество газов (52), файл **Global_Data\parsum.dat** отсутствует. Однако прилагается код на языке Fortran, позволяющий его сгенерировать.

Для перевода программного комплекса с HITRAN2008 на HITRAN2012 необходимо изменить пути и имена файлов, а также внести изменения в блок работы с **parsum.dat**.

Восстановление спектральных сечений

Построение сетки по энергии фотонов

Если сетка по температуре и давлению, требуемая для создания базы данных сечений молекулярного поглощения, задаётся вручную, то процесс построения сетки по энергетической переменной автоматизирован.

Процесс построения расчётной сетки по энергетической переменной разделяется на два этапа. На первом составляются сетки, состоящие из энергий резонансного перехода с добавлением точек локального минимума между соседними линиями газа. Газы обрабатываются по очереди. Это гарантирует то, что единая итоговая сетка будет содержать все экстремальные точки коэффициента поглощения, но не гарантирует хорошее описание контура сечения поглощения при малых давлениях. В связи с этим на втором этапе формируется единая расчётная сетка объединением всех сеток, построенных на первом этапе, и квазиравномерной сетки из «доплеровских полуширин», шаг которой не превышает доплеровской ширины линии. Единая расчётная сетка позволяет подробно прописывать ход сечений молекулярного поглощения при термодинамических параметрах как нижних, так верхних слоёв планетных атмосфер.

Первый этап. Сетка экстремумов

На этом этапе для каждого «.par» файла из директории HITRAN2008\bu-molecule\ производится чтение волнового числа и характеристики линий (см. Приложение 1) для одной молекулы. Создаётся массив из волновых чисел, в который добавляется волновое число — минимум действия двух соседних ли-

ний: $E_{add} = \frac{E_1 + kE_2}{1+k}$, $k = \left(\frac{S_2\gamma_2}{S_1\gamma_1} \right)^{\frac{1}{3}}$, где E_{add} — добавляемое волновое число, E_1

и E_2 — волновые числа двух последовательно идущих линий; S_1 и S_2 — силы соответствующих линий; γ_1 и γ_2 — полуширины *фойгтовского профиля* при нормальной температуре и давлении: $T = T_S = 296^\circ\text{K}$, $P = P_S = 1\text{atm}$.

Второй этап. Построение единой сетки

На данном этапе в один массив собираются точки экстремума всех газов. Затем добавляются точки сетки из «доплеровских полуширин»: $E_1 = 1$; $E_{\ell+1} = E_\ell + E_\ell \cdot 10^{-6}$. Элементы полученного массива округляются до шестого знака после запятой в соответствии с точностью данных HITRAN: $E_\ell \rightarrow \left[E_\ell \cdot 10^6 \right] \cdot 10^{-6}$. Далее массив сортируется и из него убираются повторяющиеся элементы. Полученный в итоге массив является единой расчётной сеткой, содержащий экстремальные точки сечения поглощения всех газов, и позволяющий подробно прописывать сечение поглощения при любых термодинамических параметрах.

Для построения расчётной сетки необходимо:

- а) запустить

Lines_add.exe <.par file>

для всех необходимых «.par» файлов. Результат будет записан в файл <.par file>.dat. То есть результат работы программы

Lines_add.exe 01_hit08.par

будет содержаться в файле 01_hit08.par.dat.

b) запустить

Lines.exe <file mask> <max number>

Программа требует, чтобы имена файлов с результатами предыдущего этапа отличались только числом (должно быть больше нуля), записанным при помощи двух чисел. <file mask> представляет собой именно это имя, в котором число заменено на “***”. <max number> — максимальное из всех чисел. Например, для 41 файла запуск программы будет выглядеть так:

Lines.exe **_hit08.par.dat 41

Итоговая сетка хранится в файле **grid.dat** — бинарный файл, содержащий **double precision**. Доступ к данным файла аналогичен изложенному в конце следующего раздела, только тип считываемой переменной должен быть **double precision**.

Восстановление сечений поглощения

Поскольку процесс восстановления контура каждой линии на всём интервале энергий — длительная задача, применяется обрезание далеких крыльев фойгтовского контура. Поскольку

$$\int_{E_0-300\Delta_{B,\ell}^D}^{E_0+300\Delta_{B,\ell}^D} F_{B,\ell}^D(E-E_0)dE > 0.999 \text{ и } \int_{E_0-300\gamma_{B,\ell}^L}^{E_0+300\gamma_{B,\ell}^L} F_{B,\ell}^L(E-E_0)dE > 0.995,$$

то обрезание крыльев на расстоянии в 300 суммарных полуширин $(\gamma_{B,\ell}^L + \Delta_{B,\ell}^D)$ от центра резонанса поглощения достаточно для учёта 99% от силы линии.

В работе [7] описан более сложный критерий обрезания линий поглощения, основанный на оценке оптической толщины атмосферы. Этот метод позволяет сократить время расчёта, но оказывается более зависимым от дальнейших целей использования констант (менее универсальный).

Самый простой и очевидный алгоритм восстановления — прочитать из «.par» файла данные об одной линии (E — волновое число линии), вычислить её полуширину γ для заданных температуры и давления и для волновых чисел в промежутке $[E-300(\gamma_{B,\ell}^L + \Delta_{B,\ell}^D); E+300(\gamma_{B,\ell}^L + \Delta_{B,\ell}^D)]$, найти вклад данной линии (восстановить интеграл (3), умноженный на интенсивность линии) и прибавить к рассчитанному ранее.

По этой программе должно производиться большое количество расчётов, а значит, будет затрачиваться большое количество времени. Таким образом, для уменьшения времени работы программы целесообразно использовать совре-

менные технологии расчёта на многоядерных машинах. Код разрабатывался для работы на стационарном компьютере с применением технологии OpenMP. Поскольку предложенный выше вариант неэффективен для распараллеливания, необходимо использовать следующий алгоритм.

Программа загружает данные по всем линиям поглощения для данной молекулы. Далее выбираются термодинамические параметры T и P из соответствующих файлов [см. Приложение 3]. Далее переходим к параллельному блоку.

Каждый параллельный процесс рассчитывает сечение на своём наборе интервалов $(E_\ell; E_{\ell+1})$. Далее процессу необходимо найти все линии j , которые покрывают своим 300-полуширинным интервалом рассчитываемый

$$(E_\ell; E_{\ell+1}) \subset [E_j - 300(\gamma_j + \Delta_j); E_j + 300(\gamma_j + \Delta_j)],$$

и просуммировать вклад от каждой. Поскольку все линии отсортированы по энергии резонансного перехода E_j , то программе достаточно найти номер первой и далее учитывать вклад всех последующих линий, пока не дойдём до линии, расположенной от рассчитываемого интервала на расстоянии более трёхсот полуширин. Номер первой линии не увеличивается при переходе к следующему интервалу, что позволяет уменьшить время её поиска. Поскольку при поиске мы можем столкнуться с линией, у которой маленькая полуширина, и не посчитать значительный вклад линий с большей энергией и большей полушириной, — программа продолжает расчёт интервала, пока количество рассчитанных линий, отстоящих от интервала $(E_\ell; E_{\ell+1})$ на триста полуширин, не достигнет ста. Это не самый точный метод обрезания линий, но он не требует значительного количества дополнительных проверок и позволяет получить удовлетворительные данные.

Когда параллельный блок закончил свою работу, программа записывает результат в бинарный файл. Файл помещается в директорию (если такой нет — создаётся) `..\db\molecular_absorptions\<молекулы>\`. Файлу даётся имя `hit08_<температура>_<давление>.kappa`. Например: сечение поглощения молекулой водяного пара при температуре 200 К и давлении 1 atm имеет имя: `..\db\molecular_absorptions\H2O\hit08_200_1.0.kappa`

Далее программа переходит к следующей паре термодинамических параметров.

Для того чтобы узнать интегральное среднее сечение на интервале $(E_n; E_{n+1})$ (номер n находится по файлу сетки), необходим код, аналогичный следующему:

```
Real :: sigma
  . . . . .
OPEN(1, FILE="hit08_200_1.0.kappa", access="stream")
CALL FSEEK(1, sizeof(sigma)(n-1), 0)
READ(1) sigma
CLOSE(1)
```

Программа построения базы данных сечений

Программа `.\bin\molecules_absorption.exe` предназначена для создания базы данных сечений молекулярного поглощения. Исходный код программы содержится в файле `.\source\molecules_absorption.f90`. Для компактности комплекса программ для проведения расчётов переноса излучения в атмосфере Земли и планет с различными способами осреднения спектра был написан ряд модулей, располагающийся в директории `.\source\inc\`. Описание каждого модуля приводится в данной работе в Приложении 4.

Для работы программы необходимо передать через параметры командной строки от одного до трёх параметров. Они должны содержать:

- 1) номер молекулы из HITRAN;
- 2) имя файла с сеткой по энергии из папки с сетками [см. Приложение 2] (по умолчанию, если не задан, то имя файла — `from_40_molecular.dat`);
- 3) тип восстанавливаемого профиля (1 — лоренцевский профиль, 2 — фойгтовский профиль, является значением по умолчанию, если параметр не задан).

Остальные настройки программы хранятся в файлах (см. Приложение 2 и Приложение 3):

- 1) сетки по температуре и плотности хранятся в файлах `.\config\t.ini` и `.\config\p.ini` соответственно;
- 2) данные об именах молекул для формирования директорий, соответствие между номерами молекул создаваемой базы данных и номерами молекул из HITRAN хранятся в файле `.\config\molecules.ini`;
- 3) информация о среднем составе (коэффициент C_B в (1)) хранится в файле `.\config\percial_press.ini`.

Запускать программу необходимо из директории `.\Programs\`, где расположен файл `base.ini`, содержащий информацию о файловой структуре.

Пример запуска программы:

`.\bin\molecules_absorption.exe_1_grid.dat_2` — восстанавливает фойгтовский профиль молекулярного поглощения для молекулы 1 (H_2O). Сетка по энергетической переменной хранится в файле `..\db\grids\grid.dat`.

`.\bin\molecules_absorption.exe_2` — восстанавливает фойгтовский профиль молекулярного поглощения для молекулы 2 (CO_2). Сетка по энергетической переменной хранится в файле `..\db\grids\from_40_molecular.dat`.

`.\bin\molecules_absorption.exe_3_abs_grid.dat_1` — восстанавливает лоренцевский профиль молекулярного поглощения для молекулы 3 (O_3). Сетка по энергетической переменной хранится в файле `..\db\grids\abs_grid.dat`.

Литература

- [1]. L.S. Rothman, R.R. Gamache, A. Goldman, L.R. Brown, R.A. Toth, H.M. Pickett, R.L. Poynter, J.-M. Flaud, C. Camy-Peyret, A. Barbe, N. Husson, C.P. Rinsland, M.A.H. Smith, The HITRAN database: 1986 edition // *Appl Opt* 26, 4058-4097 (1987)
- [2]. L.S. Rothman, et al. The HITRAN 2008 molecular spectroscopic database // *JQSRT* 110, 533-572 (2009)
- [3]. L.S. Rothman, et al. The HITRAN2012 molecular spectroscopic database // *J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer*. 2013, Vol. 130, pp. 4-50.
- [4]. HITRAN: <http://hitran.org/>
- [5]. J. Humlicek, Optimized computation of the Voigt and complex probability functions, *JQSRT*, 27(4), 437-444 (1982)
- [6]. F. Schreier, The Voigt and complex error function: A comparison of computational methods, *JQSRT*, 48(5/6), 743-762 (1992).
- [7]. А.В. Шильков, И.Л. Цветкова, С.В. Шилькова. Система “АТРАД” для расчетов атмосферной радиации: реконструкция микросечений поглощения и рассеяния. // *Матем. моделирование*, Т.8, № 8 (1996), С.104–127.
- [8]. Р.М.Гуди. Атмосферная радиация. 1. Основы теории. М.: Мир, 1966, 552 с.
- [9]. В.Е. Зуев. Спектроскопия атмосферы. Л.: Гидрометеиздат, 1987, 247 с.
- [10]. А.Ф.Никфоров, В.Б. Уваров. Специальные функции математической физики. М.: Наука. 1978. 320 с.
- [11]. А.В. Шильков, М.Н. Герцев, Е.Н. Аристова, С.В. Шилькова. Методика эталонных “line-by-line” расчетов атмосферной радиации. // *Компьютер. исследования и моделир.*, Т. 4, № 3 (2012), С.553–562.
- [12]. А.В. Шильков, М.Н. Герцев. Верификация метода лебеговского осреднения // *Математ. моделирование*, 2015, Т. 27, № 8. С.13–31.

Приложение 1. Структура файла «.par»

Файл «.par» — текстовый файл, каждая 160-символьная строка которого содержит информацию об одной линии поглощения в расчёте на одну молекулу (один атом). Информация записана следующим образом.

Номера символов	Описания
1–2	номер молекулы (см. приложение 2);
3	номер изотопа (1 — самый распространённый, 2 — второй по распространённости, ...);
4–15	волновое число $[\text{cm}^{-1}]$
16–25	сила линии $(S_{B,i}(T_S))$ при нормальной температуре $T_S = 296^\circ\text{K}$ $[\text{cm}^{-1}/(\text{molecule} \cdot \text{cm}^{-2})]$;
26–35	коэффициент Эйнштейна A ;
36–40	полуширина линии $(\gamma_{B,i}^A)$, обусловленная столкновениями с молекулами воздуха при нормальном давлении и нормальной температуре $[\text{cm}^{-1}/\text{atm}]$;
41–45	полуширина линии $(\gamma_{B,i}^B)$, обусловленная столкновениями с собственными молекулами при нормальном давлении и нормальной температуре $[\text{cm}^{-1}/\text{atm}]$;
46–55	энергия нижнего состояния перехода $(E_{B,n}^*)$ $[\text{cm}^{-1}]$;
56–59	показатель температурной зависимости полуширины линии (n) ;
60–67	сдвиг давлением линии воздушного уширения при нормальной температуре $[\text{cm}^{-1}/\text{atm}]$;
68–82	верхний глобальный уровень квантования;
83–97	нижний глобальный уровень квантования;
98–112	верхний локальный уровень квантования;
113–127	нижний локальный уровень квантования;
128–133	неопределённость показателей волнового числа, $S_{B,i}(T_S)$, $\gamma_{B,i}^A$, $\gamma_{B,i}^B$, n , сдвига давлением;
134–145	индексы для таблицы ссылок;
146	флаг;

147–153	статистический вес верхнего уровня;
154–160	статистический вес нижнего уровня.

Пример строки:

```
221_2625.497436_7.018E-34_2.405E-
08.02730.027_3247.45710.200.000000_.....
.....1.....0.....s_40q.....335440_3_2_
2_1_1_0_510.0_486.0
```

Здесь: 22 молекула — N₂; 1-й изотоп; 2625.497436 [cm⁻¹] — волновое число; 7.018·10⁻³⁴ [cm⁻¹/(molecule·cm⁻²)] — сила линии; 2.405·10⁻⁸ — коэффициент Эйнштейна; .0273 = 0.0273 [cm⁻¹/atm] — полуширина ($\gamma_{B,i}^A$); 0.027 [cm⁻¹/atm] — полуширина ($\gamma_{B,i}^B$); 3247.4571 [cm⁻¹] — нижний уровень энергии перехода; 0.20 — показатель *n*; и т.д.

Формат, для чтения файла в программе для языка Фортран.

```
Format(
I2,I1,F12.6,1P2E10.3,0P2F5.4,F10.4,F4.2,F8.6,4A15,6I1,6I2,A1,2F7.1
)
```

Приложение 2. Файловая структура

Все файлы, имеющие отношение к комплексу подготовки, делятся на три категории, каждой из которых отводится своя папка в корневой директории <base>:

<base>\Programs\ — программные файлы;

<base>\DB\ — базы данных;

<base>\Results\ — папка для сохранения результатов.

Программные файлы:

.\base.ini — файл содержит информацию о файловой структуре (имена различных папок, расположение HITRAN);

.\config\ — папка с файлами различных настроек для программ;

.\source\ — папка с исходными кодами;

.\source\inc\ — код модулей, используемых в программах;

.\bin\ — скомпилированные программы;

.\cmd\ — командные файлы для упрощения запуска программ.

Базы данных

.\carriers\ — папка содержит информацию о разбиении на носители резонансов;

.\grids\ — папка содержит различные сетки по энергетической переменной для line-by-line расчётов и по лебеговской переменной;

- `.\molecules_absorption\` — база данных подробных молекулярных сечений поглощения для проведения line-by-line расчётов;
`.\lebesgue\` — база данных лебеговских молекулярных сечений.

Приложение 3. «.ini» файлы

Структура файлов.

Файл сетки по температурной переменной `.\config\t.ini`

[base]\n=5 количество элементов
 [values] раздел строк вида <порядковый номер>=<температура>

Файлы сетки по переменной давления `.\config\p.ini`

[base]\n=5 количество элементов
 [values] раздел строк вида <порядковый номер>=<давление>

Файл информации о молекулах `.\config\molecules.ini`.

[base]\n=29 количество молекул в базе данных
 [directories] раздел с названиями молекул.
 [hitran] соответствие между номерами молекул в базе данных, создаваемой программой, и в HITRAN.

Файл с информацией о среднем процентном составе воздуха `.\config\percials_press.ini` содержит коэффициенты C_B из (1).

[base] раздел строк вида <номер молекулы в HITRAN>= C_B

Примеры файлов.

t.ini	p.ini
<pre>[base] n=5 [values] 1=200 2=230 3=273 4=330 5=400</pre>	<pre>[base] n=11 [values] 1=2.0 2=1.0 3=0.464 4=0.215 5=0.1 6=0.0464 7=0.0215 8=0.01 9=0.00464 10=0.00215 11=0.001</pre>

moleculs.ini		percial_press.ini
[base]	[hitran]	[base]
n=29	1=01	1=0.004
[directories]	2=02	2=0.0004
1=H2O	3=03	3=0.0000005
2=CO2	4=04	4=0.0000003
3=O3	5=05	5=0.0000001
4=N2O	6=06	6=0.0000016
5=CO	7=07	7=0.2
6=CH4	8=08	8=0.0000000004
7=O2	9=09	9=0.0000000014
8=NO	10=10	10=0.0000000025
9=SO2	11=11	11=0.0000000022
10=NO2	12=12	12=0.0000000045
11=NH3	13=13	13=0.000000000003
12=HNO3	14=14	14=0.00000000001
13=OH	15=15	15=0.0000000004
14=HF	16=16	16=0.000000000017
15=HCl	17=17	17=0.000000000003
16=HBr	18=18	18=0.0000000000055
17=HI	19=19	19=0.0000000005
18=ClO	20=20	20=0.00000000035
19=OCS	21=21	21=0.000000000015
20=H2CO	22=22	22=0.8
21=HOCl	23=23	23=0.00000000016
22=N2	24=24	24=0.0000000006
23=HCN	25=25	25=0.0000000001
24=CH3Cl	26=26	26=0.00000000007
25=H2O2	27=27	27=0.0000000016
26=C2H2	28=28	28=0.00000000000000000001
27=C2H6	29=34	34=0.00000005
28=PH3		
29=O		

Приложение 4. Модули

`.\source\inc\Euler_k.f90`

Содержит одну функцию, `Quadro_koef(t, lambda, S)` заполняющую массивы `t(1:S)` и `lambda(1:S)` нулями и весами полиномов Эрмита степени `S` соответственно. Используются в (4).

`.\source\inc\functions.f90`

Содержит вспомогательные функции:

`filesize(filename)` — возвращает размер файла `filename` в байтах;

`int2str(i)` — преобразовывает переменную целого типа в строку;

`str_replace(str, find, replace)` — заменяет в строке `str` первое вхождение `find` на `replace`;

`str_replace_chars(str, ch1, ch2)` — замена в строке `str` все вхождения символа `ch1` на `ch2`;

create_directory_for_file(filename) — создаёт директорию для возможности затем создать файл **filename**;

.\source\inc\interpolating.f90

Содержит функцию интерполяции

Interpolate(X_in, X, Y, N, M, Typ) — возвращает значение в точке **X(1:N)** при помощи интерполяции в **N**-мерном пространстве значений **Y(j) = Y(X_in(1:N, j))**, **j=1..M**. При этом результат по координате **i** (**X(i)**) получаем, как интерполяция типа **Typ(i)**. **Typ(i)** может иметь следующие значения:

- 1: линейная;
- 2: степенная;
- 3: показательная;
- 4: логарифмическая;
- 5: Паде.

Подразумевается, что **X_in(1:N, 1:M)** — кубовидная сетка, $M > 2^N$. Полная версия закомментирована, и оставлена оптимизированная версия для случая двойной интерполяции (**N=2**, **M=4**).

.\source\inc\load_grid.f90

Модуль с функциями для загрузки бинарных файлов, содержащих **double precision** сетку.

Load_grid_Full(filename, variable, length) — загружает сетку из файла **filename**, в переменную **variable** (место должно быть выделено заранее). Возвращает размер массива в **length**.

Load_grid_Custom(filename, variable, length, Start, End, StartIndex) — загружает часть сетки в промежутке от **Start** до **End** из файла **filename** в переменную **variable** (место должно быть выделено заранее). Возвращает размер массива в **length** и индекс первого элемента в **StartIndex**.

.\source\inc\load_ini.f90

Модуль предназначен для работы с **.ini** файлами.

ini_data — тип данных для хранения **.ini** файла.

Типы **G_str**, **ini_str** и процедуры **put_string(°, °)**, **get_string(°)** — вспомогательные для корректной работы модуля.

load_ini(filename, ini) — загружает **.ini** файл **filename** в переменную **ini**.

print_ini(ini) — Выводит на экран данные из переменной **ini**.

Функции **Get_ini_data(ini, section, °)**, **Get_ini_data_fromI(ini, section, °)**, **Get_ini_value(ini, section, °)**, **Get_ini_value_fromI(ini, section, °)**, **Get_ini_Array(ini, section, °)** — возвращают данные соответствующие ° из раздела **section** в **ini**-файле, загруженном в переменную **ini**. Имеют следующие различия:

Get_ini_data(ini, section, °) — результат и ° имеют строковый формат;

Get_ini_data_fromI(ini, section, ◦) — ◦ задаётся, как **integer**, а результат — строка.

Get_ini_value(ini, section, ◦) — ◦ задаётся строкой, а результат представляется как число **double precision**.

Get_ini_value_fromI(ini, section, ◦) — ◦ и результат являются числовыми переменными типов **integer** и **double precision** соответственно.

Get_ini_Array(ini, section, ◦, size) — возвращает числовой массив размера **size**, соответствующий строковому параметру ◦.

.\source\inc\path.f90

Модуль занимается формированием путей к файлам.

Процедура **Path_init()** предназначена для инициализации программ. Обрабатывает дополнительные параметры командной строки при помощи процедуры **parameters_prepare()** и загружает настройки из различных **.ini** файлов.

Prog_Parameter_last() — возвращает последний параметр программы

Prog_Parameter(var, input, description) — обрабатывает информацию о том, был ли программе передан параметр **var** и возвращает его значение, если оно задано; **1** — если параметр присутствует, но не задан.

Если параметр не задан, то результат задаётся в зависимости от вспомогательных параметров **input** и **description**. Если **input=.true.**, то программа задаст запрос **description** или же имя переменной **var** (если **description** не задан) и сохранит ответ. Если **input** не задан или равен **false**, результатом будет строка **"#0"**

Пример:

командная строка: **app.exe p1=o1 p2**

результаты работы функции:

Prog_Parameter("p1") вернёт **"o1"**

Prog_Parameter("p2") вернёт **"1"**

Prog_Parameter("p3") вернёт **"#0"**

Prog_Parameter("p3", .true.) запросит значение **"p3"** у пользователя с клавиатуры.

Path_Config() — возвращает полный путь папки с конфигурационными файлами.

Path_Hitran() — возвращает путь к папке с HITRAN.

Path_Grid() — путь к папке базы данных с сетками.

Path_Absorptionfile(mol, T, P) — возвращает имя файла с восстановленным молекулярным поглощением для температуры №T и давления №P (см. Приложение 2).

Path_CarrierDir() — папка с носителями резонансов.

Path_Result(atm) — папка результатов расчётов для задачи **atm**.