



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

Препринты ИПМ • Препринт № 31 за 2016 г.



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

Герцев М.Н., [Шильков А.В.](#)

Подготовка оптических констант для поточечных и лебеговских расчётов атмосферной радиации

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Герцев М.Н., Шильков А.В. Подготовка оптических констант для поточечных и лебеговских расчётов атмосферной радиации // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2016. № 31. 24 с. doi:[10.20948/prepr-2016-31](https://doi.org/10.20948/prepr-2016-31)
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2016-31>

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

М.Н. Герцев, А.В. Шильков

**Подготовка оптических констант
для поточечных и лебеговских расчётов
атмосферной радиации**

Москва — 2016

Герцев М.Н., Шильков А.В.

Подготовка оптических констант для поточечных и лебеговских расчётов атмосферной радиации

В работе дано описание программ для расчёта коэффициентов поглощения в атмосфере Земли, предназначенных для проведения расчётов переноса атмосферной радиации прямым line-by-line методом и с использованием метода лебеговского осреднения. Описаны две процедуры подготовки лебеговых коэффициентов: «точная» и «ускоренная» с использованием базы данных лебеговых сечений.

Ключевые слова: коэффициент поглощения, атмосферная радиация, лебеговское осреднение.

Gertsev M.N., Shilkov A.V.

The preparation of optical constants for line-by-line and Lebesgue calculations of atmospheric radiation transport

The paper contains a description of the programs to calculate the absorption coefficients, which are the input data for the radiation transport calculation in Earth's atmosphere by the "line-by-line" method and by the Lebesgue averaging method. We describe two preparation procedures of the Lebesgue coefficients: "accurate" and "express", that uses the Lebesgue crosssection database.

Key words: opacity, atmospheric radiation, Lebesgue averaging.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №14-11-00699).

Оглавление

Введение	3
Подготовка коэффициентов для «line-by-line» расчётов переноса излучения	4
Подготовка коэффициентов для лебеговского расчёта переноса излучения.....	7
Метод лебеговского осреднения.....	7
Точный расчёт лебеговых коэффициентов.....	13
Создание базы данных лебеговых сечений	15
Приближённый расчёт лебеговых коэффициентов	18
Литература	20
Приложение 1. Программный блок выделения носителей резонансов.....	22
Приложение 2. Создание сетки по лебеговой переменной.....	24

Введение

Препринт посвящён описанию программ, рассчитывающих коэффициенты поглощения излучения — «входные данные» для транспортных программ, выполняющих расчёты переноса атмосферной радиации прямым методом на подробной сетке по энергии фотонов и программ, выполняющих расчёт переноса излучения методом лебеговского осреднения спектра излучения. Дано краткое изложение метода лебеговского осреднения. Приведён алгоритм расчёта «точных» лебеговых коэффициентов, а также алгоритм быстрой сборки лебеговых коэффициентов из специально подготовленной базы данных.

Программы можно найти по ссылке:

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

Перенос атмосферной радиации в приближении плоской атмосферы описывается уравнением:

$$\mu \frac{\partial I}{\partial z} + (\chi^{ab} + \kappa^{(0)})I = \chi^{ab} I^{Pl} + \frac{\kappa^{(0)}}{2} \int_{-1}^1 w(\mu\mu') I(\mu') d\mu', \quad (1)$$

$$I^{Pl}(E, T) = \frac{\sigma}{\pi} \cdot \frac{15}{\pi^4} \frac{a^4 E^3}{e^{aE/T} - 1},$$

$$\sigma = \frac{2\pi^5 k^4}{15c^2 h^3} = 5.670373(21) \cdot 10^{-5} \frac{\text{эрг}}{\text{сек} \cdot \text{см}^2 \text{К}^4}, \quad a = \frac{ch}{k} = 1.4387770(13) \text{ см} \cdot \text{К}.$$

Здесь: $I(E, \mu, z)$ — интенсивность излучения, зависящая от пространственной координаты z , угловой переменной μ и энергии фотонов E ; $I^{Pl}(E, T)$ — планковская интенсивность тепловых источников излучения; $T(z)$ — температура; $\chi^{ab}(E, z)$ — коэффициент поглощения излучения, $\kappa^{(0)}(E, z)$ — коэффициент рассеяния излучения, $w(E, \mu_0, z)$ — индикатриса рассеяния. Коэффициент поглощения χ^{ab} смеси газов выражается через концентрации газов $N^{mlc}(z)$ и сечения молекулярного поглощения σ_{mlc} :

$$\chi^{ab}(E, z) = \sum_{mlc} N^{mlc}(z) \sigma_{mlc}(T, P, E), \quad T = T(z), \quad P = P(z),$$

где $P(z)$ — давление. Индикатрису рассеяния принято представлять в виде разложения по многочленам Лежандра:

$$\frac{\kappa^{(0)}}{2} w(\mu\mu') = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{2} \kappa^{(n)} P_n(\mu\mu'), \quad \int_{-1}^1 w(\mu_0) d\mu_0 = 1, \quad \mu_0 = \mu\mu',$$

где P_n — многочлены Лежандра, $\kappa^{(n)}(E, z)$ — коэффициенты разложения ядра рассеяния.

Методика расчёта сечений молекулярного поглощения σ_{mlc} на основе данных HITRAN [1–3] приведена в работе [4]. Итогом работы описанных в [4] программ является база данных спектральных сечений молекулярного поглощения, которые представлены в виде многомерного табличного массива интервальных величин

$$\langle \sigma \rangle_{mlc,i,j,k}^{db} = \int_{E_k}^{E_{k+1}} \sigma_{mlc}(T_i^{db}, P_j^{db}, E) dE.$$

Здесь « mlc » — номер молекулы, « i » и « j » — индексы сеток температуры и давления, « k » — индекс сетки по энергии фотонов, « db » — индекс базы данных с исходной информацией, T_i^{db} , P_j^{db} , E_k — значения температуры, давления и энергии в узлах сеток. Сетки по температуре, давлению и энергии являются общими («сквозными») для всех молекул « mlc ». Величина интервала по энергии не превышает доплеровской полуширины линии поглощения.

Подготовка коэффициентов для «line-by-line» расчётов переноса излучения

Расчётные формулы. При решении широкого класса задач переноса атмосферной радиации высотные профили термодинамических параметров $T(z)$, $P(z)$ задаются моделями стандартных атмосфер.

Транспортные программы расчёта переноса излучения используют средние коэффициенты поглощения в ячейках пространственной сетки \varkappa_n , или, что эквивалентно, — оптические толщины ячеек $\tau_n = \varkappa_n \Delta z_n$, где n — номер ячейки (слоя), $\Delta z_n = z_{n+1} - z_n$ — толщина ячейки (слоя). В качестве среднего коэффициента \varkappa_n в спектральных и многогрупповых расчётах используется средний по интервалу энергий (узкому или широкому) коэффициент, в расчётах с использованием метода лебеговского осреднения — средний лебегов коэффициент. Коэффициенты берутся при средних для ячейки значениях термодинамических параметров $\langle T \rangle_n$, $\langle P \rangle_n$. При использовании логарифмической интерполяции между узловыми значениями (модели стандартных атмосфер содержат именно узловые значения термодинамических параметров) средние значения даются выражениями:

$$\langle T \rangle_n = \sqrt{T(z_n)T(z_{n-1})}, \quad \langle P \rangle_n = \sqrt{P(z_n)P(z_{n-1})}.$$

Оптическая толщина $\tau_{n,k}$ n -го слоя атмосферы ($n = \overline{1; n_{\max}}$) на интервале $(E_k; E_{k+1})$ вычисляется по формуле:

$$\begin{aligned} \tau_{n,k} &= \varkappa_{n,k}^{ab} \cdot \Delta z_n = \frac{1}{E_{k+1} - E_k} \int_{z_{n-1}}^{z_n} \int_{E_k}^{E_{k+1}} \varkappa(T(z), P(z), E) dE dz \approx \\ &\approx \Delta z_n \cdot \sum_{mlc} \frac{N_n^{mlc}}{E_{k+1} - E_k} \int_{E_k}^{E_{k+1}} \sigma_{mlc}(\langle T \rangle_n, \langle P \rangle_n, E) dE. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь z — пространственная координата, z_n ($n = \overline{1; n_{\max}}$) — узлы пространственной сетки, $\Delta z_n = z_n - z_{n-1}$, $T(z)$, $P(z)$ — температура и давление в слое воздуха, $\langle T \rangle_n$, $\langle P \rangle_n$ — соответствующие средние для ячейки, N_n^{mlc} — концентрация молекул типа « mlc » в ячейке, $\sigma_{mlc}(\langle T \rangle_n, \langle P \rangle_n, E)$ — микросечение поглощения одной молекулой « mlc ».

Алгоритм работы программы. Сначала программа выделяет массив из нулей для хранения результата и загружает информацию базы данных сечений молекулярного поглощения.

Программа начинает с первого слоя ($n = 1$). Считывает из файла входных данных информацию о температуре $T(z)$ и плотности $P(z)$ на его границах z_n и z_{n+1} , а также количество молекул каждого типа внутри слоя $(\Delta z_n \cdot N_n^{mlc})$. Рассчитав среднеквадратичные температуру $\langle T \rangle_n$ и давление $\langle P \rangle_n$, программа находит индексы i и j в сетке базы данных, для которых выполнены неравенства $T_i^{db} < \langle T \rangle_n < T_{i+1}^{db}$ и $P_j^{db} < \langle P \rangle_n < P_{j+1}^{db}$.

Далее, начиная с первой молекулы ($mlc = 1$), программа проводит восстановление сечения поглощения $\sigma_{mlc}(\langle T \rangle_n, \langle P \rangle_n, E)$. Для этого происходит загрузка восстановленного сечения поглощения молекулы « mlc » из базы данных для пар $(T_i^{db}; P_j^{db})$, $(T_{i+1}^{db}; P_j^{db})$, $(T_i^{db}; P_{j+1}^{db})$, $(T_{i+1}^{db}; P_{j+1}^{db})$. При помощи двойной логарифмической интерполяции загруженных данных в точку $(\langle T \rangle_n, \langle P \rangle_n)$ программа получает необходимое сечение. Далее происходит умножение полученного сечения на количество молекул в слое $\Delta z_n \cdot N_n^{mlc}$ и прибавка произведения к результирующему массиву. Далее программа переходит к следующей молекуле ($mlc \rightarrow mlc + 1$).

Когда все молекулы пройдены, результирующий массив содержит необходимую величину $\tau_{n,k}$, которую программа сохраняет в файл. Далее

программа обнуляет результирующий массив и переходит к следующему слою ($n \rightarrow n+1$).

Параллельно с расчётом оптических толщин программа создаёт файлы с табличными интегралами по энергии от интенсивности планковского излучения $\int_{E_k}^{E_{k+1}} I^{Pl}(E,T)dE$. Файл создаётся для температур, указанных в исходном файле и строке **border T** раздела **[base]** файла **transition.ini**.

Запуск программы и структура файлов. Программа **prepare_koef.exe** содержит три параметра командной строки. Пример запуска:

```
bin\prepare_koef.exe ATM .not. mlc.dat
```

Здесь:

- первый параметр указывает рабочую директорию с входными данными (в приведённом примере — `..\results\ATM\`);
- второй параметр остался от предыдущих версий и сейчас не используется;
- третий параметр — имя файла с единой расчётной сеткой (в примере — `..\db\grids\mlc.dat`).

В текстовом файле **atmosphere.inf** хранится информация о модели атмосферы. Строки файла содержат информацию о её слоях:

$$Z_n[cm] \in \mathbb{N} \quad P_n[bar] \quad T_n[K] \quad N_n^1 \quad \dots \quad N_n^{max}$$

Первая строка соответствует $n=0$, при этом информация о количестве молекул (коэффициенты N_0^{mlc}) может быть любой. Пример исходных данных:

```
0 1.013E+06 288.2 0.00000E+00 0.00000E+00 0.00000E+00 .....
50000 9.542E+05 284.95 9.06940E+21 4.07051E+20 3.36103E+16 ...
100000 8.988E+05 281.7 7.64718E+21 3.88148E+20 3.36367E+16 ...
200000 7.950E+05 275.2 1.17240E+22 7.22058E+20 6.73893E+16 ...
300000 7.012E+05 268.7 7.70340E+21 6.53972E+20 6.49844E+16 ...
400000 6.166E+05 262.2 4.74986E+21 5.90792E+20 6.00509E+16 ...
500000 5.405E+05 255.7 2.84246E+21 5.32203E+20 5.76277E+16 ...
600000 4.722E+05 249.2 1.66850E+21 4.78037E+20 5.69946E+16 ...
700000 4.111E+05 242.7 9.57754E+20 4.28114E+20 5.88564E+16 ...
800000 3.565E+05 236.2 5.37550E+20 3.82204E+20 6.33159E+16 ...
```

Результат работы программы записывается в папку **Tau** (в случае с примером выше — `..\results\ATM\Tau`). Для каждого слоя создаётся свой файл с именем **[zn] T[Tn] P[Pn[atm]].dat**, где **[zn]** — высота, взятая из исходных данных, **[Tn]**, **[Pn[atm]]** — температура $\langle T \rangle_n$ (в градусах Кельвина) и давление $\langle P \rangle_n$ (в атмосферах). Для получения среднего коэффициента поглощения в слое следует разделить все данные файла на толщину

соответствующего слоя. Файлы, соответствующие приведённой атмосфере, будут иметь имена:

```
50000 T 286.57 P 0.97.DAT
100000 T 283.32 P 0.91.DAT
200000 T 278.43 P 0.83.DAT
300000 T 271.93 P 0.74.DAT
400000 T 265.43 P 0.65.DAT
.....
```

Файлы с табулированными функциями Планка сохраняются в ту же директорию с именами:

```
U T 0.00.DAT
U T 288.95.DAT
U T 284.95.DAT
U T 281.70.DAT
.....
```

Все файлы содержат данные типа `real(4)` и являются бинарными.

Подготовка коэффициентов для лебеговского расчёта переноса излучения

Метод лебеговского осреднения

При решении уравнения переноса излучения имеется ряд проблем. Одна из них — наличие множества резонансов (линий) в коэффициенте поглощения/испускания излучения (см. *Рис. 1*) и возникающей вследствие этого сильно немонотонной зависимости функции распределения фотонов от энергии. Для учёта немонотонностей, индуцированных резонансными линиями, разработан ряд методов осреднения (агрегации) спектра излучения: многогрупповое приближение, метод функций пропускания излучения на широких участках спектра, различные варианты замены интегрирования спектра излучения «по Риману» на интегрирование «по Лебегу» [6–14]. Основной идеей последней группы методов является объединение фотонов в одну расчётную группу не по их принадлежности к одному интервалу энергий, а по принадлежности к одному интервалу величины коэффициента поглощения. Точность такого объединения определяется тем, насколько хорошо удаётся учесть искажения коэффициента поглощения в пространстве. Искажения можно разделить на два типа: (а) уширение линий поглощения/испускания излучения вследствие изменения давления и температуры, (б) разное изменение сил линий, принадлежащих разным газам, вследствие разного распределения концентраций газов по высоте атмосферы.

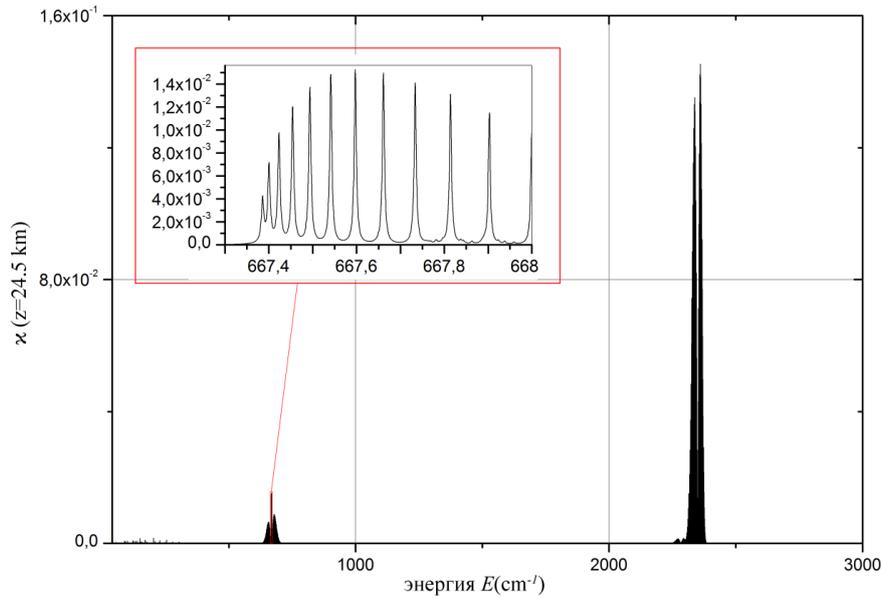


Рис. 1. Коэффициент поглощения атмосферы US Standart [5] на высоте 24.5 км.

Данная работа посвящена практической реализации метода лебеговского осреднения [15–17], в котором последовательно учитываются отмеченные выше проблемы замены интегрирования спектра по Риману на интегрирование по Лебегу.

Разбиение спектра на носители резонансов. Для учёта неоднородного изменения относительных концентраций оптически активных атмосферных газов с высотой применяется деление спектра на носители резонансов. Для учёта сильных температурных перестроений функции источников и коэффициентов производится дополнительное деление носителей в соответствии с квантилями планковского распределения¹. Перенос излучения на каждом носителе резонансов рассматривается независимо.

Для первичного разбиения спектра на носители резонансов вычисляется полная оптическая толщина атмосферы при поглощении излучения молекулами сорта « mlc »:

$$\tau_{mlc}(E) = \int_0^H N_{mlc}(z) \sigma_{mlc}(E, z) dz, \quad (3)$$

где H — высота атмосферы. Процедура деления шкалы энергий на носители резонансов двух газов: CO_2 и паров H_2O — иллюстрирует Рис. 2. К носителю резонансов углекислого газа CO_2 относятся интервалы энергий, отмеченные

¹ Деление спектра энергий $0 < E < \infty$ на шесть интервалов-квантилей производится так, что интеграл от распределения Планка по квантилю равняется $1/6$ от интеграла по всему спектру энергий.

цифрой 1, где оптическая толщина поглощения излучения этим газом больше, чем у воды H_2O .

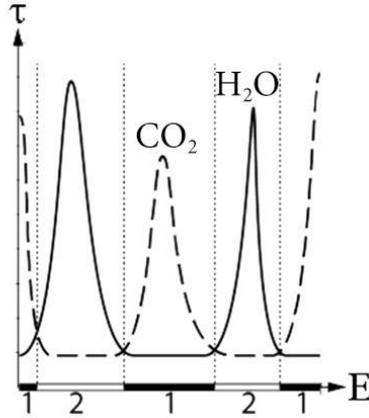


Рис. 2. Иллюстрация деления шкалы энергий на носители резонансов. Сплошной кривой изображена оптическая толщина поглощения водяным паром, пунктиром — углекислым газом.

В задачах переноса теплового излучения в атмосфере Земли в целях моделирования климата в качестве «претендентов» на отдельный носитель резонансов могут выступать около 30 молекул (атмосферных газов). Носитель резонансов G молекулы « mlc » определяется следующим образом:

$$G = \{E \mid \tau_{mlc}(E) > \tau_l(E) \quad \forall l \neq mlc\}. \quad (4)$$

Качество разбиения на носители можно оценивать долей энергетического спектра, на котором поглощение «ведущим» газом больше суммы поглощения всеми остальными газами:

$$\frac{\text{meas} \left(\left\{ E \mid \tau_{mlc}(E) > \sum_{g \neq mlc} \tau_g(E) \right\} \right)}{\text{meas} \left(\left\{ E \mid \tau_{mlc}(E) > \tau_g(E), \quad \forall g \neq mlc \right\} \right)}. \quad (5)$$

Число носителей резонансов можно уменьшить объединением газов с подобными пространственными профилями концентраций.

Система лебеговых множеств. Решение кинетического уравнения переноса излучения (1) ищется в пределах носителя резонансов « G », $E \in G$.

Рассмотрим зависимость коэффициента поглощения $\chi^{ab}(E, z)$ от энергии фотонов E на высоте z . Построим на оси энергий фотонов систему лебеговых множеств $\varepsilon(\gamma, z)$. В множество $\varepsilon(\gamma, z)$ включим точки носителя резонансов $E \in G$, в которых коэффициент поглощения $\chi^{ab}(E, z)$ не превышает линии

уровня « γ », т.е. $\varepsilon(\gamma, z) = \{E \mid \varkappa^{ab}(E, z) \leq \gamma\}$ (см. Рис. 3). Множество состоит из серии интервалов $E_k^- < E < E_k^+$, $k=1, 2, \dots, K(\gamma)$. Границы интервалов $E_k^\pm(\gamma, z)$ (далее – точки с равновеликим поглощением) удовлетворяют неравенствам:

$$\frac{\partial E_k^-}{\partial \gamma} \leq 0, \quad \frac{\partial E_k^+}{\partial \gamma} \geq 0.$$

При значениях линии уровня $\gamma > \gamma_{\max}(z) = \max_E \varkappa^{ab}(E, z)$ лебегово множество совпадает с носителем резонансов $\varepsilon(\gamma_{\max}(z), z) = G$, при значениях $\gamma < \gamma_{\min}(z) = \min_E \varkappa^{ab}(E, z)$ это множество пусто $\varepsilon(\gamma_{\min}(z), z) = \emptyset$.

Введём весовую функцию $S(E, z)$ и меру $m(\gamma, z)$ лебегова множества $\varepsilon(\gamma, z)$:

$$S(E, z) = \frac{I^{Pl}(E, z)}{\int_G I^{Pl}(E, z) dE}, \quad \int_G S(E, z) dE = 1$$

$$m(\gamma, z) = \int_{\varepsilon(\gamma, z)} S(E, z) dE = \sum_k \int_{E_k^-}^{E_k^+} S(E, z) dE, \quad (6)$$

$$\frac{\partial m(\gamma, z)}{\partial \gamma} = \sum_k \left[S(E_k^+, z) \frac{\partial E_k^+}{\partial \gamma} - S(E_k^-, z) \frac{\partial E_k^-}{\partial \gamma} \right] = \sum_k S(E_k, z) \frac{\partial E_k}{\partial \gamma} \Big|_{-}^{+} \geq 0,$$

$$0 \leq m(\gamma, z) \leq 1, \quad m(\gamma_{\min}, z) = 0, \quad m(\gamma_{\max}, z) = 1.$$

Мера есть неубывающая функция аргумента γ и меняется от нуля до единицы, следовательно существует обратная функция $\gamma = \gamma(m, z)$.

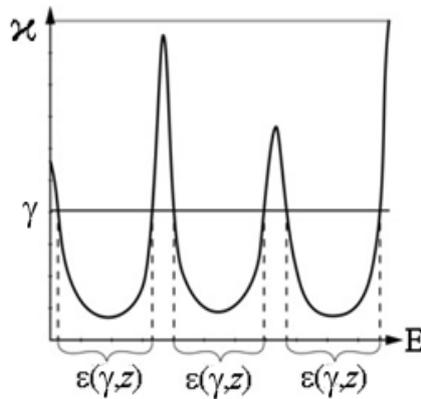


Рис. 3. Построение лебеговых множеств по линии уровня γ .

Лебегова интенсивность излучения. Введём кумулятивную (нарастающим итогом) интенсивность излучения на лебеговом множестве $\varepsilon(m) = \varepsilon(\gamma(m, z), z)$ как функцию меры m (далее — лебегову интенсивность):

$$J(m, \mu, z) = \int_{\varepsilon(m)} I(E, \mu, z) dE = \sum_k \int_{E_k^-}^{E_k^+} I(E, \mu, z) dE, \quad (0 \leq m \leq 1), \quad (7)$$

$$J(0, \mu, z) = 0, \quad J(1, \mu, z) = I_G(\mu, z) = \int_G I(E, \mu, z) dE.$$

Вычислим частную производную лебеговой интенсивности по лебеговой мере:

$$\begin{aligned} \frac{\partial J}{\partial m} &= \sum_k \left[\frac{I(E_k^+)}{S(E_k^+)} S(E_k^+) \frac{\partial E_k^+}{\partial m} - \frac{I(E_k^-)}{S(E_k^-)} S(E_k^-) \frac{\partial E_k^-}{\partial m} \right] = \\ &= \left\langle \frac{I}{S} \right\rangle \cdot \sum_k \left[S(E_k^+) \frac{\partial E_k^+}{\partial m} - S(E_k^-) \frac{\partial E_k^-}{\partial m} \right] = \left\langle \frac{I}{S} \right\rangle. \end{aligned}$$

Последнее равенство показывает, что производная по мере равна среднему отношению спектральной интенсивности излучения к весовому спектру в точках с равновеликим поглощением $E_k^\pm(m, z)$, $k=1, 2, \dots$

Формулы интегрирования по Лебегу. Можно доказать следующие точные и приближённые равенства [18]:

$$\int_{\varepsilon(m)} \chi^{ab}(E, z) \cdot I(E, \mu, z) dE = \int_0^m \chi^{ab}(m, z) \cdot \frac{\partial J(m, \mu, z)}{\partial m} dm, \quad (8)$$

$$\int_{\varepsilon(m)} \chi^{ab}(E, z) I^{Pl}(E, T) dE = \int_0^m \chi^{ab}(m, z) \cdot \frac{\partial J^{Pl}(m, z)}{\partial m} dm,$$

$$\chi^{ab}(m, z) = \frac{\frac{\partial}{\partial m} \int_{\varepsilon(m)} \chi^{ab}(E) I^{Pl}(E) dE}{\frac{\partial}{\partial m} \int_{\varepsilon(m)} I^{Pl}(E) dE},$$

$$\int_{\varepsilon(m)} \kappa^{(n)}(E, z) \cdot I(E, \mu, z) dE \approx \int_0^m \kappa^{(n)}(m, \mu, z) \cdot \frac{\partial J(m, \mu, z)}{\partial m} dm,$$

$$\kappa^{(n)}(m, z) = \frac{\sum_k \kappa^{(n)}(E_k) S(E_k) \left. \frac{\partial E_k}{\partial m} \right|_{-}^{+}}{\sum_k S(E_k) \left. \frac{\partial E_k}{\partial m} \right|_{-}^{+}} = \frac{\partial}{\partial m} \int_{\varepsilon(m)} \kappa^{(n)}(E) S(E) dE. \quad (9)$$

Здесь $\chi^{ab}(m)$ — лебегов коэффициент поглощения, $\kappa^{(n)}(m)$, ($n = 0, 1, \dots$) — осреднённые по лебеговым множествам коэффициенты рассеяния излучения. Равенства (8)–(9) доказываются через дифференцирование по лебеговой мере m выполнением осреднения коэффициентов (если требуется) на множестве точек с равновеликим поглощением $E_k^{\pm}(m, z)$, $k=1, 2, \dots$, и обратным интегрированием.

Кинетическое уравнение. Кинетическое уравнение для лебеговой интенсивности изучения выводится интегрированием уравнения (1) по лебегову множеству и применением формул (8)–(9):

$$\mu \cdot \frac{\partial J}{\partial z} + \int_0^m [\chi^{ab}(m) + \kappa^{(0)}(m)] \cdot \frac{\partial J}{\partial m} dm = \int_0^m \chi^{ab}(m) \frac{\partial J^{Pl}}{\partial m} dm + \int_{-1}^1 d\mu' \int_0^m w(\mu\mu', m) \frac{\partial J(m, \mu', z)}{\partial z} dm + \frac{\partial J}{\partial m} \cdot \mathbf{AS}, \quad (10)$$

$$w(\mu\mu', m, z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2n+1}{4\pi} \kappa^{(n)}(m, z) \cdot P^{(n)}(\mu\mu'), \quad \mathbf{AS} = \mu \cdot \left(\frac{\partial m}{\partial z} - \int_{\varepsilon(m)} \frac{\partial}{\partial z} S(E) dE \right).$$

Дискретная форма кинетического уравнения. Введём сетку по лебеговой переменной $\{m_q, q=0, 1, \dots, N\}$, $m_0=0$, $m_N=1$. Вычитая из уравнения (10), записанного для узла m_q , уравнение для узла m_{q-1} , получим кинетическое уравнение относительно функции $J_q = J(m_q) - J(m_{q-1})$:

$$\mu \cdot \frac{\partial J_q}{\partial z} + [\chi_q^{ab} + \kappa_q^{(0)}] J_q = \chi_q^{ab} J_q^{Pl} + \frac{\kappa_q^{(0)}}{2} \int_{-1}^1 w_q(\mu\mu') J_q d\mu' + a_q J_q - a_{q-1} J_{q-1}, \quad (11)$$

$$\frac{\kappa_q^{(0)}(z)}{2} w_q(\mu\mu', z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2n+1}{4\pi} \kappa_q^{(n)}(z) \cdot P^{(n)}(\mu\mu'),$$

$$a_q(\mu, z) = \frac{\mathbf{AS}_q}{\Delta m_q} = \frac{\mu}{\Delta m_q} \cdot \left(\frac{\partial m_q}{\partial z} - \int_{\varepsilon(m_q)} \frac{\partial}{\partial z} S(E) dE \right), \quad \Delta m_q = m_q - m_{q-1},$$

$$\kappa_q^{(n)} = \frac{\int_{\varepsilon(m_q)}^{\varepsilon(m_{q-1})} \kappa^{(n)}(E) I^{Pl}(E) dE - \int_{\varepsilon(m_{q-1})}^{\varepsilon(m_q)} \kappa^{(n)}(E) I^{Pl}(E) dE}{\int_{\varepsilon(m_q)}^{\varepsilon(m_{q-1})} I^{Pl}(E) dE - \int_{\varepsilon(m_{q-1})}^{\varepsilon(m_q)} I^{Pl}(E) dE}, \quad (12)$$

$$\chi_q^{ab} = \frac{\int_{\varepsilon(m_q)}^{\varepsilon(m_{q-1})} \chi^{ab}(E) I^{Pl}(E) dE - \int_{\varepsilon(m_{q-1})}^{\varepsilon(m_q)} \chi^{ab}(E) I^{Pl}(E) dE}{\int_{\varepsilon(m_q)}^{\varepsilon(m_{q-1})} I^{Pl}(E) dE - \int_{\varepsilon(m_{q-1})}^{\varepsilon(m_q)} I^{Pl}(E) dE}.$$

Суммарная интенсивность излучения на носителе G , суммарная скорость поглощения и испускания излучения равны:

$$I_G(\mu, z) = \int_G I dE = \sum_{q=1}^N J_q, \quad \int_G \chi^{ab} I dE = \sum_{q=1}^N \chi_q^{ab} J_q.$$

В работе [18] показано, что слагаемым $a_q J_q - a_{q-1} J_{q-1}$ в (11) можно пренебречь. Кинетическое уравнение (11) для лебеговой интенсивности излучения имеет структуру исходного кинетического уравнения (1). Поэтому для тестирования различных методик осреднения коэффициентов кинетического уравнения можно использовать один и тот же транспортный код, осуществляющий поиск пространственного распределения излучения. Такая процедура тестирования позволяет выявлять погрешности, связанные именно с методиками агрегации спектра излучения, отделяя их от погрешностей, вносимых тем или иным транспортным кодом.

Точный расчёт лебеговых коэффициентов

Аналог оптической толщины (12) в методе лебеговского осреднения вычисляется по формуле:

$$\langle \tau \rangle_{n,q} = \frac{\int_{\varepsilon(m_q)}^{\varepsilon(m_{q-1})} \tau_n I^{Pl}(E, \langle T \rangle_n) dE - \int_{\varepsilon(m_{q-1})}^{\varepsilon(m_q)} \tau_n I^{Pl}(E, \langle T \rangle_n) dE}{\int_{\varepsilon(m_q)}^{\varepsilon(m_{q-1})} I^{Pl}(E, \langle T \rangle_n) dE - \int_{\varepsilon(m_{q-1})}^{\varepsilon(m_q)} I^{Pl}(E, \langle T \rangle_n) dE} =$$

$$= \frac{\int_{\varepsilon(m_q)}^{\varepsilon(m_{q-1})} \tau_n I^{Pl}(E, \langle T \rangle_n) dE - \int_{\varepsilon(m_{q-1})}^{\varepsilon(m_q)} \tau_n I^{Pl}(E, \langle T \rangle_n) dE}{(m_q - m_{q-1}) \int_{E_1}^{E_{k_{\max}}} I^{Pl}(E, \langle T \rangle_n) dE}. \quad (13)$$

Алгоритм работы программы. Для проведения лебеговой обработки коэффициента поглощения необходимо его сперва собрать, в точности как в программе подготовки «line-by-line» коэффициента, поэтому был взят алгоритм предыдущей программы. Изменения коснулись начального этапа (добавлена загрузка сетки по лебеговой переменной), а вывод результатов в файл был полностью заменён на лебеговую обработку.

Рассчитав оптическую толщину слоя n , программа формирует таблицу:

$\tau_{n,k}$	$\int_{E_k}^{E_{k+1}} I^{Pl}(\langle T \rangle_n) dE$	$\int_{E_k}^{E_{k+1}} \tau_k I^{Pl}(\langle T \rangle_n) dE$
--------------	---	--

Далее программа сортирует таблицу по увеличению значения в первом столбце ($\tau_{n,k}$). После сортировки программа суммирует значения во втором и третьем столбце нарастающим образом. В итоге программа получает следующую таблицу:

$\tau_{n,k}$	$\int_{\tau_n(E) < \tau_{n,k}} I^{Pl}(\langle T \rangle_n) dE$	$\int_{\tau_n(E) < \tau_{n,k}} \tau_n(E) I^{Pl}(\langle T \rangle_n) dE$
--------------	--	--

Здесь $\tau_n(E) = \tau_{n,k}$, если $E \in (E_k; E_{k+1})$.

С учётом определений лебеговой меры m (6) и лебеговых множеств $\varepsilon(m)$, таблица содержит:

$\gamma(m_k)$	$m_k \cdot \int_{E_1}^{E_{k_{\max}}} I^{Pl}(E, \langle T \rangle_n) dE$	$\int_{\varepsilon(m_k)} \tau_n(E) I^{Pl}(\langle T \rangle_n) dE$
---------------	---	--

Далее программа проходит по таблице, выбирая строки k в соответствии с сеткой по лебеговой переменной ($m_k = m_q$), сохраняет значение второго столбца (лебегов образ интенсивности планковского излучения) и лебегов коэффициент, вычисленный по формуле (13).

Запуск программы и структура файлов. Структура файлов с результатами программы

`bin\prepare_lebeg_koef_from_molecuar.exe ATM_102 leb.dat mlc.dat`

ATM_102 — имя рабочей папки, которая содержит файлы начальных данных (точно такие же, как и для подготовки «line-by-line» коэффициента;

leb.dat — имя файла сетки по лебеговой переменной (расположена в папке `.\db\gridс\`) — см. приложение 2;

mlc.dat — имя файла сетки, по которой построена база данных (расположена в папке `.\db\gridс\`).

Результаты записываются в файлы в папку `.\results\ATM_102\Tau\Lebesgue\`. Имена файлов формируются точно так

же, как и в line-by-line случае, с добавлением A_{-} в начале. Структура файлов аналогична «line-by-line».

Создание базы данных лебеговых сечений

Подготовка точных лебеговых коэффициентов для каждой задачи отдельно — длительная процедура, не позволяющая проделывать расчёты переноса излучения методом лебеговского осреднения серийно. Поскольку все предполагаемые расчёты относятся к переносу атмосферной радиации, то можно надеяться, что структура лебеговых множеств не сильно меняется при смене модели атмосферы. Поэтому можно упростить процедуру сборки лебеговых коэффициентов, построив систему лебеговых множеств для некоторой опорной атмосферы, а осреднять уже коэффициент для требуемой модели атмосферы. В случае совпадения опорной и требуемой моделей атмосфер получаем точный лебегов коэффициент.

Поскольку точная база молекулярных сечений построена для некоторой сетки по температуре и давлению, а при реальных параметрах пользуемся двойной логарифмической интерполяцией по этим величинам, то можно попробовать переставить операции: сначала осреднить сечения по Лебегу на заданной сетке температур и давлений, а затем провести двойную интерполяцию полученных лебеговых коэффициентов.

Использование двух этих упрощений позволяет создать базу данных лебеговых сечений для серийных расчётов атмосферной радиации.

Реализация упрощённого алгоритма лебеговского осреднения. Для упрощённой сборки лебегова коэффициента представим его в виде:

$$\chi_q^{ab}(z) = \sum_{g=1}^{N(z)} N_g(z) \sigma_g^{(q)}(z) \quad (14)$$

$$\sigma_g^{(q)}(z) = \frac{\int_{\varepsilon(m_q)} \sigma_g(E, z) \cdot S(E, z) dE - \int_{\varepsilon(m_{q-1})} \sigma_g(E, z) \cdot S(E, z) dE}{m_q - m_{q-1}}. \quad (15)$$

Если заранее подсчитать лебеговы сечения по формуле (15) по коэффициенту поглощения для опорной атмосферы, то использование формулы (14) при окончательной сборке лебеговых коэффициентов позволяет проводить серийные расчёты.

Возможные неточности в формуле (14) обусловлены отличием структуры лебеговых множеств $\varepsilon(m_q)$ для точного коэффициента поглощения, используемого в расчёте, и построенного для опорной атмосферы. При совпадении метод переходит в точный.

Алгоритм подготовки базы данных лебеговых сечений выглядит следующим образом:

1. Взять набор моделей атмосфер (среднегодовая, зимняя, летняя, и т.д.).
2. Взять сетки по температуре и плотности $\{T_i^{db}\}, \{P_j^{db}\}$.
3. Для каждой модели атмосферы рассчитать носители резонансов.
4. На основании концентраций, заданных в опорных моделях атмосфер, построить коэффициент поглощения $\varkappa(E, z(T_i^{db}, P_j^{db})) = (E_{k+1} - E_k) \cdot \tau(E, z(T_i^{db}, P_j^{db}))$ по (2).
5. По $\varkappa(E, z(T_i^{db}, P_j^{db}))$ построить лебеговы множества $\varepsilon(m_q)$.
6. Для каждой опорной модели атмосферы на каждом носителе резонансов рассчитать лебеговы сечения по формуле:

$$\sigma_g^{(q)}(T_i^{db}, P_j^{db}) = \frac{\int_{\varepsilon(m_q)} \sigma_g(E, T_i^{db}, P_j^{db}) \cdot S(E, T_i^{db}) dE - \int_{\varepsilon(m_{q-1})} \sigma_g(E, T_i^{db}, P_j^{db}) \cdot S(E, T_i^{db}) dE}{m_q - m_{q-1}}.$$

Для ускоренной сборки лебегова коэффициента необходимо:

1. Взять заданную модель атмосферы.
2. Найти в наборе опорных моделей атмосфер наиболее близкую по высотному распределению концентраций атмосферных газов.
3. Загрузить посчитанные лебеговы сечения $\sigma_g^{(q)}(T_i^{db}, P_j^{db})$ для выбранной опорной атмосферы из базы данных.
4. Используя двойную логарифмическую интерполяцию $\sigma_g^{(q)}(T_i^{db}, P_j^{db})$ по температуре T и давлению P , получить лебегово сечение для требуемых температур и давлений $\sigma_g^{(q)}(T(z), P(z))$.
5. Рассчитать лебегов коэффициент по формуле (14).

Полученные коэффициенты готовы для подстановки в транспортный код. Поскольку функция Планка входит в определение меры m , то лебегово осреднение этой функции проходит автоматически.

Алгоритм работы программы. В начале программа загружает исходные данные: файлы сеток $E_k, S_\ell, T_i^{db}, P_j^{db}$; зависимость номера слоя опорной атмосферы n от давления P_j^{db} , заданного в базе данных: $n = n(P_j)$; разбиение на носители резонансов G ; файл модели атмосферы **atmosphere.inf** (см. подготовку для line-by-line расчётов). Для построения носителей резонансов используется комплекс программ, описанных в приложении 1.

Программа проходит все пары точек (T_i^{db}, P_j^{db}) . Для каждой точки загружаются сечения $\sigma_{mlc}(E, T_i^{db}, P_j^{db})$ всех молекул «mlc». Формируется таблица:

α	$(E_k; E_{k+1})$	$\tau_{n(j),k}$	$\int_{E_k}^{E_{k+1}} I^{Pl}(T_i) dE$	$\int_{E_k}^{E_{k+1}} \sigma_1 I^{Pl}(T_i) dE$	*	$\int_{E_k}^{E_{k+1}} \sigma_{\max} I^{Pl}(T_i) dE$
----------	------------------	-----------------	---------------------------------------	--	---	---

α показывает, к какому носителю относится интервал $(E_k; E_{k+1})$, $\tau_{n(j),k}$ вычисляется по формуле (2).

Полученная таблица сортируется сначала по возрастанию $\tau_{n(j),k}$, затем по α (для раздельной работы с каждым носителем отдельно).

Далее для каждого α программа выбирает строчки, соответствующие сетке по лебеговой переменной m_q (по столбцу 4), и сохраняет их в файл с именем, соответствующим α .

Запуск программы и структура файлов. Для запуска программы необходимо воспользоваться командой:

```
.\bin\lebesgue_koef.exe leb.dat mlc.dat bases.dat <Dir>
```

leb.dat — файл сетки по лебеговой переменной m_q (см. приложение 2), **mlc.dat** — файл сетки E_k , **bases.dat** — разделение на носители резонансов, **<dir>** — имя папки для результатов.

Зависимость $n = n(P_j)$ и имя файла с моделью атмосферы берутся из раздела **[combination]** файла **.\config\multibase.ini**. Раздел содержит строчку с именем файла модели атмосферы, количество слоёв атмосферы и строчки соответствия между j и n . Факт того, что давлению P_5 ($j = 5$) соответствует 18 слой модели атмосферы ($n = 18$), отмечается строчкой **5=18**. Пример раздела:

```
[combination]
file=d:\...\atmosphere.inf
max=36
1=2
2=2
3=8
4=13
5=18
6=23
7=27
8=29
9=32
10=34
11=36
```

Результат работы программы записывается в файлы

`.\db\lebesgue\<DIR>\<α name>\hit08_[Ti]_[Pj].kappa.bin`

здесь `<DIR>` — параметр программы; `<α name>` — имя молекулы, которой соответствует носитель резонанса; `[Ti]` — температура, `[Pj]` — давление. Файл по структуре бинарный и содержит структуры вида:

```

TYPE :: Lebesgue_rec
  integer(1) :: Nositel
  Integer :: grid_index
  Double Precision :: int_U, int_Ut
  Double Precision :: int_S_U, int_S_UT, int_invS_U, int_invS_UT
  Double Precision :: int_aetU
  Double Precision, Dimension(1:29) :: int_S_U_v
  Real(4) :: koef
  Double Precision :: E
END TYPE Lebesgue_rec

```

Ряд переменных в структуре — вспомогательные. Основные:

- `Nositel` — индекс носителя резонанса (первый столбец);
- `int_U` — содержит $\int_{E_k}^{E_{k+1}} I^{Pl}(T_i) dE$ (четвертый столбец);
- `int_S_U_v(mlc)` — $\int_{E_k}^{E_{k+1}} \sigma_{mlc} I^{Pl}(T_i) dE$ (пятый и последующие столбцы);
- `koef` — $\tau_{n(j),k}$ (третий столбец).

Структура находится в файле `.\source\inc\Lebesgue_module.f90`.

Приближённый расчёт лебеговых коэффициентов

Лебеговы коэффициенты для каждого носителя резонансов G в соответствии с алгоритмом в предыдущем пункте и формулой (14) можно собрать на основании базы лебеговых сечений, построенной для опорной модели атмосферы. Вопрос подбора базы данных (сравнение задаваемой модели атмосферы с различными опорными) здесь не рассматривается.

Алгоритм работы программы. После проведения инициализации программа берёт первый слой ($n = 1$) и считывает из файла начальных данных информацию о температуре и плотности на его границах, а также о количестве молекул каждого типа внутри слоя. Рассчитав среднеквадратичные температуру $\langle T \rangle_n$ и давление $\langle P \rangle_n$, находим $T_i^{db} < \langle T \rangle_n < T_{i+1}^{db}$ и $P_j^{db} < \langle P \rangle_n < P_{j+1}^{db}$.

Далее происходит загрузка файлов из базы лебеговых сечений данных для пар (T_i^{db}, P_j^{db}) , (T_{i+1}^{db}, P_j^{db}) , (T_i^{db}, P_{j+1}^{db}) , $(T_{i+1}^{db}, P_{j+1}^{db})$. Загруженные данные

интерполируются в точку $(\langle T \rangle_n, \langle P \rangle_n)$ и суммируются по формуле (14). Результаты записываются в файл, и происходит переход к следующему слою воздуха.

Для всех температур из файла заданной модели атмосферы и указанных как **border T** в разделе **[bases]** файла **transition.ini** создаются файлы с лебеговыми образами планковской интенсивности излучения. Они вычисляются при помощи логарифмической интерполяции по температуре величин $m_q \cdot \int_G I^{Pl}(T_i^{db}) dE$, содержащихся в лебеговой базе данных.

Запуск программы и структура файлов.

Программа **prepare_lebeg_koef_from_bin.exe** содержит четыре параметра командной строки. Пример запуска:

```
bin\prepare_lebeg_koef_from_bin.exe ATM_102 2 leb.dat 1
```

- **ATM_102** — имя директории с исходными данными;
- **2** — имя папки из базы данных лебеговых сечений (номер группы в соответствии с разбиением шкалы энергий на квантили по планковской функции);
- **leb.dat** — файл сетки по лебеговой переменной;
- **1** — номер молекулы, которой соответствует носитель резонанса.

В данном случае:

- начальные данные берутся из текстового файла **..\results\ATM_102\atmosphere.inf**, и записи **border T** — из раздела **[base]** файла **..\results\ATM_102\transition.ini**;
- в качестве начальных данных берутся файлы базы данных из папки **..\db\lebesgue\2\H2O**;
- формат хранения результатов работы программы аналогичен результатам программы **prepare_koef.exe** (см. подготовка коэффициентов для line-by-line расчётов), которые сохраняются в папке **..\results\ATM_102\Tau\Lebesgue\2**, с именем вида **1_[zn] T[Tn] P[Pn[atm]].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]. М.Н. Герцев, Восстановление сечений молекулярного поглощения излучения из базы данных HITRAN // *Препринты ИПМ им. Келдыша*. 2016. № 19. 22 с. URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2016-19>
- [5]. Anderson G.P., Clough S.A., et.al. AFGL Atmospheric Constituent Profiles (0-120km). AFGL-TR-860110, US Air Force Geophysics Laboratory, Hanscom, Massachusetts, Environmental Research Papers, No. 954, 1986, 46 pp.
- [6]. V. Ambartzumian. The effect of the absorption lines on the radiative equilibrium of the outer layers of the stars // *Ученые записки Ленингр. университета, Ленинград, 1936, № 6, серия Мат. наук (Астрономия), вып. 1, с. 718. (in English)*.
- [7]. А.И. Лебединский. Лучевое равновесие земной атмосферы // *Ученые записки Ленингр. университета, Ленинград, 1939, №31, Серия Мат. наук (Астрономия), вып. 3*.
- [8]. К.Я. Кондратьев. Перенос длинноволнового излучения в атмосфере. — М.: Гостехиздат, 1950. 288 с.
- [9]. В.Я. Гольдин, Б.Н. Четверушкин. Эффективный метод решения уравнения переноса излучения в низкотемпературной плазме // *Докл. АН СССР, 1970, т.195, № 2, с.315—317*.
- [10]. В.Я. Гольдин, Б.Н. Четверушкин. Методы решения одномерных задач радиационной газовой динамики. // *Ж. Вычисл. математики и мат. физики*. 1972. т.12, №4, с.990—1001.
- [11]. J.C. Stewart. Non-grey radiative transfer // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 1964, Vol. 4, pp. 723-729.
- [12]. R.A. McClatchey, W.S. Benedict, S.A. Clough, D.E. Burch, R.F. Calfee, K. Fox, L.S. Rothman, J.S. Garing. AFCRL atmospheric absorption line parameters compilation. Air Force Cambridge Research Lab, 1973, Techn. Rep. AFCRLTR-0096, 87 p.
- [13]. М.Н. Николаев, А.А. Игнатов, Н.В. Исаев, В.Ф. Хохлов. Метод подгрупп для учета резонансной структуры сечений в нейтронных расчетах. Часть 1. // *Атомная энергия*. 1970, т. 29, №1, с.11—16.
- [14]. М.Н. Николаев, А.А. Игнатов, Н.В. Исаев, В.Ф. Хохлов. Метод подгрупп для учета резонансной структуры сечений в нейтронных расчетах. Часть 2. // *Атомная энергия*. 1971, т.30, №5, с.426—430.

- [15]. И.Л. Цветкова, А.В. Шильков. Осреднение уравнения переноса в резонансно поглощающей среде. // Математ. моделирование, 1989, т.1, №1, с.91-100.
- [16]. А.В. Шильков. Методы осреднения сечений и энергетического спектра в задачах переноса нейтронов // Математ. моделирование, 1991, т.3, №2, с.63-81.
- [17]. A.V. Shilkov. Generalized Multigroup Approximation and Lebesgue Averaging Method in Particle Transport Problems. // Transp. Theory and Stat. Physics. 1994, v.23, No 6, p.781-814.
- [18]. А.В.Шильков, М.Н. Герцев. Верификация метода лебеговского осреднения // Математ. моделирование, 2015, Т.27 №8 С.13–31.

Приложение 1. Программный блок выделения носителей резонансов

Метод лебеговского осреднения предполагает разделение всего спектра излучения на непересекающиеся множества с целью решения проблемы неоднородности относительных концентраций атмосферных газов по высоте.

Разделение на носители резонансов происходит по правилу: энергия излучения E входит в носитель резонанса G молекулы mlc , если поглощение молекулой mlc во всей толще атмосферы больше поглощения другими молекулами:

$$E \in G \Rightarrow \forall \alpha \neq mlc \int_0^H N_{mlc}(z) \sigma_{mlc}(T(z), P(z), E) dz > \int_0^H N_{\alpha}(z) \sigma_{\alpha}(T(z), P(z), E) dz,$$

где $N_{\alpha}(z)$ — объёмная концентрация газа α на высоте z ; $T(z)$, $P(z)$ — распределение температуры и давления по высоте; H — высота атмосферы.

Для создания файлов с носителями резонансов используются две программы. Первая — рассчитывает $\int_0^H N_{\alpha}(z) \sigma_{\alpha}(T(z), P(z), E) dz$ для всех молекул α и энергий E . Вторая — разделяет спектр излучения на носители.

Программа `optical_thinkness`

Для вычисления суммы

$$\tau_k^{mlc} = \sum_n \frac{N_n^{mlc}}{E_{k+1} - E_k} \int_{E_k}^{E_{k+1}} \sigma_{mlc}(\langle T \rangle_n, \langle P \rangle_n, E) dE$$

был взят алгоритм подготовки line-by-line коэффициентов с изменённым порядком циклов: внешний цикл по молекулам (по mlc), а внутренний — по слоям (по n).

Исходные данные и параметры программы точно такие же, как у программы подготовки коэффициентов для line-by-line расчёта. Результат записывается в файлы с именами: **1.dat**; **2.dat**; ...; **10.dat**; и т.д. (формат файлов и папка сохранения как и в line-by-line подготовке).

Программа `base_of_resonances`

Программа загружает файлы с результатами работы программы `optical_thinkness`. После сравнения данных в загруженных массивах формируется массив с номерами носителей резонансов.

Для уменьшения раздробленности отдельно взятого носителя программа формирует массив и отслеживает следующее условие:

если к некоторому носителю α относятся менее 6 последовательных интервалов (индексы k), при этом ни на одном из них не выполняется условие

$$\tau_k^\alpha > \sum_{mlc \neq \alpha} \tau_k^{mlc},$$

то эти интервалы присоединяются к носителю слева от интервалов.

Далее происходит вывод результатов в файлы, во время которого, программа проводит дополнительное разделение на большие группы по квантилям планковской функции (см. ниже).

Для запуска программы используется команда:

```
bin\base_of_resonances.exe ATM mlc.dat
```

Данная команда показывает, что результаты работы **optical_thinkness** находятся в папке `..\db\carriers\ATM\tau`, файл сетки $\{E_k\}$ располагается в файле `..\db\grids\mlc.dat`. Остальные данные берутся из конфигурационного файла `..\db\carriers\ATM\config.ini`.

Пример конфигурационного файла:

```
[base]
molecules count=29
big group count=6
[groups]
1=364.8807
2=517.4361
3=664.6786
4=834.8804
5=1075.857
```

Здесь указано: оптическая толщина была рассчитана отдельно для 29 газов; перед выводом результаты необходимо дополнительно поделить на 6 групп (соответствует разделению по квантилям планковской функции) в соответствии с энергиями в разделе **[groups]**, которые указывают на внутренние границы между квантилями (в cm^{-1}).

Результаты работы программы записываются в файлы **Nosite11.dat**, ..., **Nosite16.dat**. Файл **Nosite1_ALL.dat** содержит результат работы программы без разделения на носители резонансов.

Файлы результата — бинарные и содержат двухбитовые целые числа с номерами носителей резонансов каждого интервала расчётной сетки. Номер носителя совпадает с номером ассоциированной с ним молекулы. Если интервал не принадлежит никакому носителю (используется для разбиения на дополнительные группы по квантилям), то в файле на данной позиции записывается число -1 . То есть: в файле **Nosite11.dat** для тех интервалов, чья верхняя граница меньше 364.887, указывается, к какому носителю резонансов он относится. Остальные интервалы содержат -1 .

Приложение 2. Создание сетки по лебеговой переменной

Программа `create_lebesgue_grid` предназначена для построения сетки на отрезке $[0;1]$. Практика показала, что наилучшие результаты даёт сгущение сетки по лебеговой переменной в окрестности нуля. Сгущение делается в соответствии с геометрической прогрессией. Элементы сетки вычисляются по формуле:

$$m_\ell = C^{2 \cdot (1 - \ell/N)}, \quad \ell \in \overline{2; N}; \quad m_1 = 0.$$

N — количество точек в сетке, C — положение центрального элемента сетки на отрезке $[0;1]$, для сгущения в окрестности нуля необходимо положить $C < 0.5$. Смещение C от середины определяет степень неравномерности сетки.

Для запуска программы следует использовать:

```
bin\create_lebesgue_grid.exe 40 ..\db\grids\leb.dat [center=0.01]
```

здесь: **40** — значение переменной N (количество элементов в сетке); **..\db\grids\leb.dat** — имя файла, куда записывается результат. Параметр **center=0.01** задаёт значение переменной C (если не задано, то по умолчанию $C = 0.1$).

Файл с результатом — бинарный файл с данными типа **double precision**.