

СОВРЕМЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ ДИСТАНЦИОННОГО ЗОНДИРОВАНИЯ ЗЕМЛИ ИЗ КОСМОСА
ИКИ РАН 12 Ноября 2024 г.



Дистанционное зондирование планет Солнечной системы

MARFA: Универсальный и эффективный инструмент для расчета молекулярного поглощения в планетных атмосферах

Б.А. Фомин^{a,b}, М.В. Разумовский^c, Д.В. Астанин^d

^a Центральная аэрологическая обсерватория, Долгопрудный, Россия; Институт глобального климата и экологии им. академика Ю. А. ИЗРАЭЛЯ, Москва, Россия

^c Московский физико-технический институт (государственный университет), Долгопрудный, Россия

^d НИЯУ МИФИ, Москва, Россия

Введение

Коэффициент поглощения в км^{-1} :

$$k(\nu; p, T) = n(p, T) \sum_j S_j(T) f_j(\nu - \nu_0; \gamma(p, T))$$

Сечение поглощения на одну молекулу в см^2 :

$$\sigma(\nu; p, T) = \sum_j S_j(T) f_j(\nu - \nu_0; \gamma(p, T))$$

Обычно эти характеристики рассчитываются для набора значений температур и давлений и хранятся в виде РТ-таблиц для передачи в модели по расчету радиации

Пример - Венерианские условия



Мотивация:

- Различные температурные профили
- Неопределенности в концентрациях газовых составляющих
- Недостаточное знание континуума (только в окнах прозрачности)
- Большие условия обрезания линии
- Отсутствие централизованной базы для венерианской спектроскопии
- Различные варианты функций для поправок на крыло линии

MARFA (Molecular atmospheric Absorption with Rapid and Flexible Analysis)

Входные параметры

1. **Название** газовой составляющей
2. **Спектральный диапазон** для расчета
3. **Файл со спектральной базой**
4. **Условие обрезания линии** (cm^{-1})
5. **Название функции** для корректировки крыла (χ -фактор)
6. **Наименование выходной величины** (сечение или коэффициент поглощения)
7. **Атмосферный файл** (профиль давления, температуры и концентрации)



Выходные параметры

1. **Сечение поглощения** на одну молекулу (cm^2)
2. **Коэффициенты поглощения** (km^{-1})

Характеристики:

1. Фиксированное разрешение: $5 \times 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$
2. Зависимость от волнового числа и атмосферного уровня
3. Запись в файлы прямого доступа

Сценарии применения и ограничения



Сценарии применения:

1. Неопределенность спектроскопических и атмосферных параметров
2. Отсутствие континуальной функции
3. Большие условия обрезания контура линий
4. Изначальный фокус – Венерианские условия

Текущие ограничения:

- Не рассматривается микроволновый диапазон
- Не рассматриваются инструментальные функции

Функционал: интерполяционная техника

В ядре **MARFA** располагается эффективный алгоритм суммирования вкладов линий, основанный на мультисеточной интерполяционной технике (Fomin 1995). На данный момент используется девять сеток.

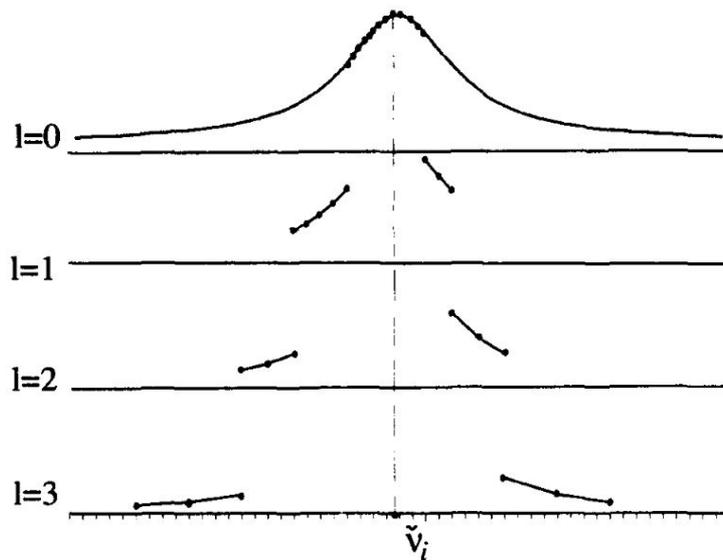
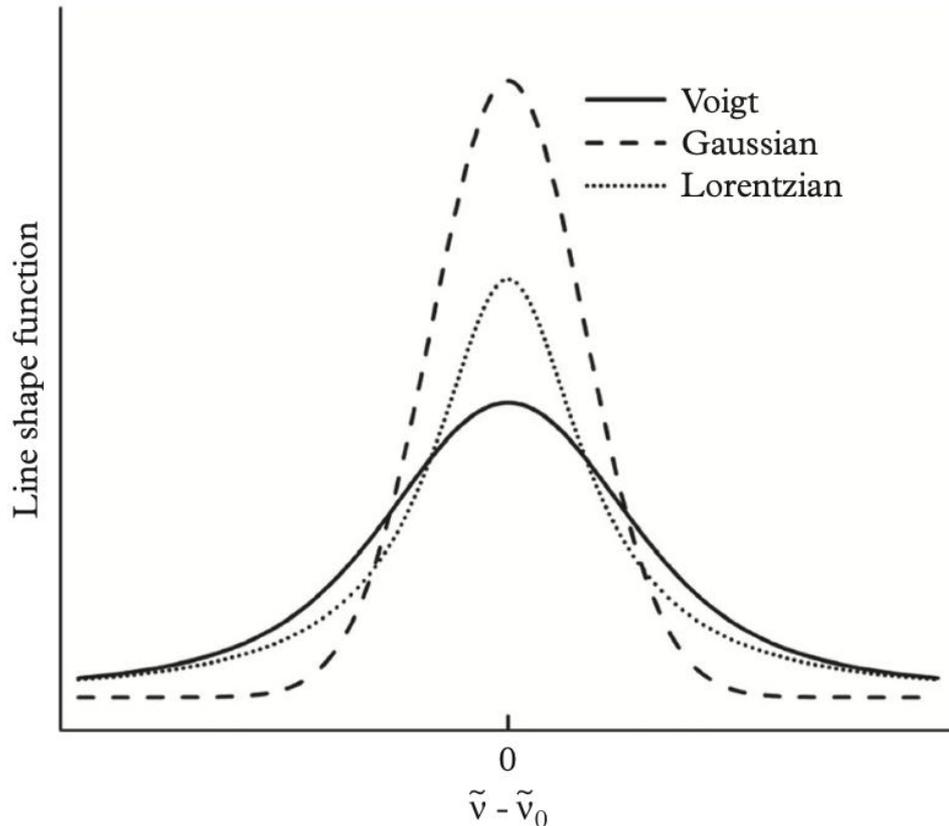


Иллюстрация интерполяционной техники,
использующей серию сеток

Функционал: контуры линий



Voigt:

$$f_V(\nu - \nu_0; \gamma_L, \alpha_D) = \frac{\sqrt{\ln 2/\pi}}{\alpha_D} K(x, y),$$
$$K(x, y) = \frac{y}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-t^2}}{(x-t)^2 + y^2} dt,$$

Gaussian:

$$f_G(\nu; T) = \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi \alpha_D^2}} \exp\left(-\frac{(\nu - \nu_0)^2 \ln 2}{\alpha_D^2}\right)$$

Lorentzian:

$$f_L(\nu; p, T) = \frac{1}{\pi} \frac{\gamma_L}{\gamma_L^2 + (\nu - \tilde{\nu}_0)^2}$$

Также есть возможность добавления кастомных контуров линий

Функционал: χ -факторы

1. **Поправка Тонкова** на лоренцевское крыло для углекислого газа (Tonkov, 1996)

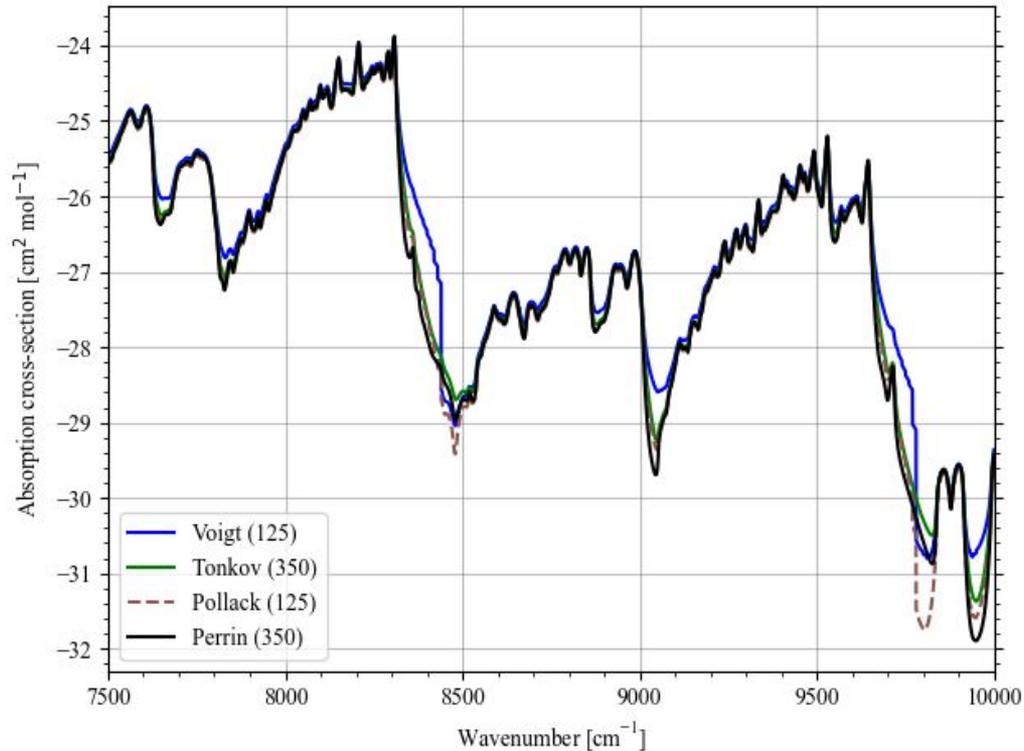
$$f(\nu - \nu_0) = f_L(\nu - \nu_0)\chi_{\text{Tonkov}}(\nu - \nu_0)$$

$$\chi_{\text{Tonkov}} = \begin{cases} 1.084 \exp(-0.027 |\nu - \nu_0|) & \text{if } 3 \text{ cm}^{-1} \leq |\nu - \nu_0| \leq 150 \text{ cm}^{-1}, \\ 0.208 \exp(-0.016 |\nu - \nu_0|) & \text{if } |\nu - \nu_0| > 150 \text{ cm}^{-1}, \\ 1 & \text{otherwise.} \end{cases}$$

2. Другие χ -факторы для венерианских условий: Pollack 1993, Perrin and Hartmann 1989
3. Возможность добавлять кастомные функции χ -факторов

Пример расчета для CO₂

Спектр CO₂ на поверхности Венеры с разными χ -факторами и разными условиями обрезания линий :



Особенности имплементации

- **Исходный код:** Fortran - ядро (fpm - проект), python - для графиков и преобразования файлов
- **Гибкое взаимодействие с пользователем:** через fpm проект (исходный код), доступен для скачивания на github и веб-интерфейс: marfa-spectra.com
- **Параметризация данных:** практически все данные вынесены из кода, а исходный код представляет собой функциональное ядро
- **Модульная архитектура**
- **Документация:** предоставлены инструкции по установке и запуску проекта, добавлению кастомных функций
- **Стандарт Fortran2023** использовался для большей части кода
- **Открытый доступ:** код может улучшаться и распространяться согласно установленным лицензиям

Оценки быстродействия

Расчеты на чипе M1 для одного атмосферного уровня

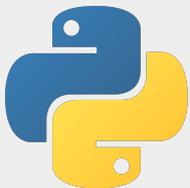
species	spectral interval (cm⁻¹)	cut off condition (cm⁻¹)	execution time (s)
CO ₂	4000 - 4100	25	0.06
CO ₂	4000 - 4100	250	0.24
CO ₂	10 - 3000	25	4.08
CO ₂	10 - 3000	250	25.2

Веб-интерфейс

Фронтенд:



Бэкенд:



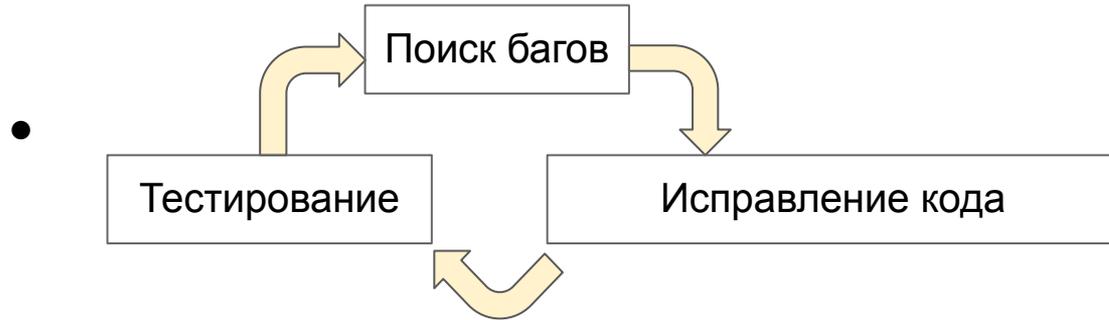
Серверная инфраструктура:



Интеграция с MARFA:

- **Django ViewSet** вызывает Fortran-ядро MARFA через модуль subprocess в Python
- Запуск вычислений с помощью Fortran Package Manager (fpm)
- Результирующие PT-таблицы сохраняются на сервере
- Доступ к результатам через ссылки для скачивания

План на будущее



- **Распараллеливание расчетов на разных атмосферных уровнях**
- **Динамическое разрешение поглощающих характеристик**
- **Имплементация микроволнового диапазона**



Спасибо за внимание !

Репозиторий с исходным кодом: <https://github.com/Razumovskyy/MARFA>

Веб-интерфейс: <https://marfa-spectra.com/>

Препринт статьи: Razumovskiy, M., Fomin, B., & Astanin, D. (2024). MARFA: An Effective Line-by-Line Tool for Calculating Absorption Coefficients and Cross-Sections in Planetary Atmospheres. *arXiv preprint*, arXiv:2411.03418. Available at: <https://arxiv.org/pdf/2411.03418>