1 ACLBL における定式化

ACLBL には, line-by-line 法によって吸収係数を求めるプログラムが格納されている. 以下にその定式化について述べる.

1.1 吸収係数

ある波数 ν における吸収係数 k は, 各吸収線からの寄与の足し合わせで求められる.

$$k(\nu) = \sum_i k_i(\nu) \tag{1.1}$$

ただし, $_i$ は吸収線 i での値である事を示す.

吸収線 i による波数 ν での吸収係数は吸収線強度 S 及び線型関数 f を用いて,

$$k_i(\nu) = S_i(T) f(\nu - \nu_{0,i}) \tag{1.2}$$

である. ただし, T は温度, ν_0 は吸収線の中心波数である.

1.2 吸収線強度

吸収線強度は参照温度での値を吸収線データベースより取得し, 温度補正を行う事によって任意温度での吸収線強度を求める (Rothman et al. 2001).

$$S_i(T) = S_i(T_{ref}) \frac{\exp(-hcE_{j,i}/kT)}{\exp(-hcE_{j,i}/kT_{ref})} \frac{Q(T_{ref})}{Q(T)} \frac{[1 - \exp(-hc\nu_{0,i}/kT)]}{[1 - \exp(-hc\nu_{0,i}/kT_{ref})]} \tag{1.3}$$

ただし, T_{ref} は参照温度, h はプランク定数, c は光速, E_j は吸収線の遷移前エネルギー準位, k はボルツマン定数, Q は分配関数である. $S_i(T_{ref}), E_j$ は吸収線データベースより取得可能である.

分配関数は

$$Q(T) \equiv \sum_j g_j \exp\left(-\frac{\varepsilon_j}{kT}\right) \tag{1.4}$$

で定義される. ただし, g は重縮度, ε_j は励起前のエネルギー準位である. しかしながら, 本モデルではこの式を直接的に使用せず, HITRAN から提供されるサブルーチン TIPSglh を用い, 各温度での分配関数データベースを内挿している.

1.3 吸収線型

吸収線型にはドップラー効果, 衝突の効果を考慮するか否かにより, いくつかの線型がある. ここでは, 両方の効果を考慮したボイド線型を用いている. また, 線型はいくつかの仮定が含まれるため, 実験値による補正を行っている.

1.3.1 ローレンツ線型

ローレンツ線型は衝突の効果のみを考慮した場合のものである. 波数確率分布は以下の式でかける.

$$f_L(\nu-\nu_0) = \frac{\alpha_L(p,T)}{\pi[(\nu-\nu_0)^2+\{\alpha_L(p,T)\}^2]} \tag{1.5}$$

ただし, ν_0 は吸収線の中心波数であり, α_L は

$$\alpha_L(p,T) = \alpha_L(p_{ref},T_{ref})\frac{p}{p_{ref}}\left(\frac{T_{ref}}{T}\right)^{T_L} \tag{1.6}$$

で表されるローレンツ半値幅である. ここで, p_{ref} は参照圧力であり, T_L はローレンツ半値幅の温度依存係数である. $\alpha_L(p_{ref},T_{ref}), T_L$ は吸収線データベースより取得可能である.

1.3.2 ドップラー線形

分子のドップラー効果のみを考慮した場合, 線型の波数確率分布は以下の式でかける.

$$f_D(\nu-\nu_0) = \frac{1}{\alpha_D(T)\pi^{1/2}}\exp\left[-\left(\frac{\nu-\nu_0}{\alpha_D(T)}\right)^2\right] \tag{1.7}$$

$$\alpha_D(T) = \frac{\nu_0}{c}\left(\frac{2RT}{M_r}\right)^{1/2} \tag{1.8}$$

ただし M_r は分子量である.

1.3.3 ボイド線型

吸収線に及ぼす衝突効果, ドップラー効果は互いに独立であると仮定することでボイド線型での確率分布を二つの線型のたたみ込みで得る.

$$
\begin{aligned}
f_V(\nu-\nu_0) &= \int_0^\infty f_L(\nu'-\nu_0) f_D(\nu-\nu')\, d\nu' && (1.9)\\
&= \int_0^\infty \frac{\alpha_L(p,T)}{\pi[(\nu'-\nu_0)^2+\{\alpha_L(p,T)\}^2]} \frac{1}{\alpha_D(T)\pi^{1/2}} \exp\left[-\left(\frac{\nu-\nu'}{\alpha_D(T)}\right)^2\right] d\nu' && (1.10)\\
&= \frac{1}{\alpha_D\sqrt{\pi}} Voigt(x,y) && (1.11)
\end{aligned}
$$

ただし,

$$
\begin{aligned}
Voigt(x,y) &= \frac{y}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{y^2+(x-t)^2}\exp(-t^2)\, dt && (1.12)\\
x = \frac{\nu-\nu_0}{\alpha_D(T)},&\quad y = \frac{\alpha_L(p,T)}{\alpha_D(T)},\quad t = \frac{\nu-\nu'}{\alpha_D(T)} && (1.13)
\end{aligned}
$$

ボイド関数を数値的に解く手法はいくつか公開されている. 本モデルでは Kuntz 1997 に Ruyten 2004 で指摘された修正を加えて用いる.

1.4 線型の補正

吸収線型は吸収線中心から遠くなるほど理論式とのずれが顕著になる. そのため, 線型自体を補正する χ 因子を導入し, かつ吸収線の wing の領域は無視する.

$$
f'(\nu-\nu_0) = f(\nu-\nu_0)\chi(\nu-\nu_0)CUT(\nu-\nu_0) \qquad (1.14)
$$

本モデルでは, 線型の補正式は用いないが, 25 cm^{-1} 以遠の wing の効果は無視している.

$$
\begin{aligned}
\chi(\nu-\nu_0) &= 1 && (1.15)\\
CUT(\nu-\nu_0) &= 1 \quad (|\nu-\nu_0| \le 25\mathrm{cm}^{-1}) && (1.16)\\
&= 0 \quad (|\nu-\nu_0| > 25\mathrm{cm}^{-1}) && (1.17)
\end{aligned}
$$

ボイド関数の数式

ここでは本モデルで用いたボイド関数を記述する.

$|x| + y > 15$ の場合

$$
\begin{aligned}
Voigt(x,y) &= \frac{a_1 + b_1 x^2}{a_2 + b_2 x^2 + x^4} \\
a_1 &= 0.2820948y + 0.5641896y^3 \\
b_1 &= 0.5641896y \\
a_2 &= 0.5 + y^2 + y^4 \\
b_2 &= -1.0 + 2.0y^2
\end{aligned}
$$

$5.5 < |x| + y < 15$ の場合

$$
\begin{aligned}
Voigt(x,y) &= \frac{a_3 + b_3 x^2 + c_3 x^4 + d_3 x^6}{a_4 + b_4 x^2 + c_4 x^4 + d_4 x^6 + x^8} \\
a_3 &= 1.05786y + 4.65456y^3 + 3.10304y^5 + 0.56419y^7 \\
b_3 &= 2.962y + 0.56419y^3 + 1.69257y^5 \\
c_3 &= 1.69257y^3 - 2.53885y \\
d_3 &= 0.56419y \\
a_4 &= 0.5625 + 4.5y^2 + 10.5y^4 + 6.0y^6 + y^8 \\
b_4 &= -4.5 + 9.0y^2 + 6.0y^4 + 4.0y^6 \\
c_4 &= 10.5 - 6.0y^2 + 6.0y^4 \\
d_4 &= -6.0 + 4.0y^2
\end{aligned}
$$

$|x| + y < 5.5$ かつ $y > 0.195|x| - 0.176$ の場合

$$
\begin{aligned}
Voigt(x,y) &= \frac{a_5 + b_5 x^2 + c_5 x^4 + d_5 x^6 + e_5 x^8}{a_6 + b_6 x^2 + c_6 x^6 + d_6 x^8 + e_6 x^8 + x^{10}} \\
a_5 &= 272.102 + 973.778y + 1629.76y^2 + 1678.33y^3 + 1174.8y^4 \\
&\quad +581.746y^5 + 204.510y^6 + 49.5213y^7 + 7.55895y^8 + 0.564224y^9 \\
b_5 &= -60.5644 - 2.34403y + 220.843y^2 + 336.364y^3 + 247.198y^4 \\
&\quad +100.705y^5 + 22.6778y^6 + 2.25689y^7 \\
c_5 &= 4.58029 + 18.546y + 42.5683y^2 + 52.8454y^3 + 22.6798y^4 \\
&\quad +3.38534y^5 \\
d_5 &= -0.128922 + 1.66203y + 7.56186y^2 + 2.25689y^3
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
e_5 &= 0.000971457 + 0.564224y \\
a_6 &= 272.102 + 1280.83y + 2802.87y^2 + 3764.97y^3 + 3447.63y^4 \\
&\quad +2256.98y^5 + 1074.41y^6 + 369.199y^7 + 88.2674y^8 + 13.3988y^9 + y^{10} \\
b_6 &= 211.678 + 902.306y + 1758.34y^2 + 2037.31y^3 + 1549.68y^4 \\
&\quad +793.427y^5 + 266.299y^6 + 53.5952y^7 + 5.0y^8 \\
c_6 &= 78.866 + 308.186y + 497.302y^2 + 479.258y^3 + 269.292y^4 \\
&\quad +80.3928y^5 + 10.0y^6 \\
d_6 &= 22.0353 + 55.0293y + 92.7568y^2 + 53.5952y^3 + 10.0y^4 \\
e_6 &= 1.49645 + 13.3988y + 5.0y^2
\end{aligned}
$$

$|x| + y < 5.5$ かつ $y > 0.195|x| - 0.176$ の場合

$$
\begin{aligned}
Voigt(x,y) &= exp(y^2 - x^2)cos(2xy) \\
&\quad -(a_7 + b_7x^2 + c_7x^4 + d_7x^6 + e_7x^8 + f_7x^{10} + g_7x^{12} + h_7x^{14} \\
&\qquad +o_7x^{16} + p_7x^{18} + q_7x^{20} + r_7x^{22} + s_7x^{24} + t_7x^{26}) \\
&\quad /(a_8 + b_8x^2 + c_8x^4 + d_8x^6 + e_8x^8 + f_8x^{10} + g_8x^{12} + h_8x^{14} \\
&\qquad +o_8x^{16} + p_8x^{18} + q_8x^{20} + r_8x^{22} + s_8x^{24} + t_8x^{26} + x^{28}) \\
a_7 &= 1.16028e9y - 9.86604e8y^3 + 4.56662e8y^5 - 1.53575e8y^7 \\
&\quad +4.08168e7y^9 - 9.69463e6y^{11} + 1.6841e6y^{13} - 320772.0y^{15} \\
&\quad +40649.2y^{17} - 5860.68y^{19} + 571.687y^{21} - 72.9359y^{23} \\
&\quad +2.35944y^{25} - 0.56419y^{27} \\
b_7 &= -5.60505e8y - 9.85386e8y^3 + 8.06985e8y^5 - 2.91876e8y^7 \\
&\quad +8.64829e7y^9 - 7.72359e6y^{11} + 3.59915e6y^{13} - 234417.0y^{15} \\
&\quad +45251.3y^{17} - 2269.19y^{19} - 234.143y^{21} + 23.0312y^{23} \\
&\quad -7.33447y^{25} \\
c_7 &= -6.51523e8y + 2.47157e8y^3 + 2.94262e8y^5 - 2.04467e8y^7 \\
&\quad +2.29302e7y^9 - 2.3818e7y^{11} + 576054.0y^{13} + 98079.1y^{15} \\
&\quad -25338.3y^{17} + 1097.77y^{19} \\
&\quad +97.6203y^{21} - 44.0068y^{23} \\
d_7 &= -2.63894e8y + 2.70167e8y^3 - 9.96224e7y^5 - 4.15013e7y^7 \\
&\quad +3.83112e7y^9 + 2.2404e6y^{11} - 303569.0y^{13} - 66431.2y^{15} \\
&\quad +8381.97y^{17} + 228.563y^{19} - 161.358y^{21} \\
e_7 &= -6.31771e7y + 1.40677e8y^3 + 5.56965e6y^5 + 2.46201e7y^7 \\
&\quad +468142.0y^9 - 1.003e6y^{11} - 66212.1y^{13} + 23507.6y^{15} \\
&\quad +296.38y^{17} - 403.396y^{19}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
f_7 &= -1.69846e7y + 4.07382e6y^3 - 3.32896e7y^5 - 1.93114e6y^7 \\
&\quad -934717.0y^9 + 8820.94y^{11} + 37544.8y^{13} + 125.591y^{15} \\
&\quad -726.113y^{17} \\
g_7 &= -1.23165e6y + 7.52883e6y^3 - 900010.0y^5 - 186682.0y^7 + 79902.5y^9 \\
&\quad +37371.9y^{11} - 260.198y^{13} - 968.15y^{15} \\
h_7 &= -610622.0y + 86407.6y^3 + 153468.0y^5 + 72520.9y^7 + 23137.1y^9 \\
&\quad -571.645y^{11} - 968.15y^{13} \\
o_7 &= -23586.5y + 49883.8y^3 + 26538.5y^5 + 8073.15y^7 - 575.164y^9 \\
&\quad -726.113y^{11} \\
p_7 &= -8009.1y + 2198.86y^3 + 953.655y^5 - 352.467y^7 - 403.396y^9 \\
q_7 &= -622.056y - 271.202y^3 - 134.792y^5 - 161.358y^7 \\
r_7 &= -77.0535y - 29.7896y^3 - 44.0068y^5 \\
s_7 &= -2.92264y - 7.33447y^3 \\
t_7 &= -0.56419y \\
a_8 &= 1.02827e9 - 1.5599e9y^2 + 1.17022e9y^4 - 5.79099e8y^6 + 2.11107e8y^8 \\
&\quad -6.11148e7y^{10} + 1.44647e7y^{12} - 2.85721e6y^{14} + 483737.0y^{16} - 70946.1y^{18} \\
&\quad +9504.65y^{20} - 955.194y^{22} + 126.532y^{24} - 3.68288y^{26} + 1.0y^{28} \\
b_8 &= 1.5599e9 - 2.28855e9y^2 + 1.66421e9y^4 - 7.53828e8y^6 + 2.89676e8y^8 \\
&\quad -7.01358e7y^{10} + 1.39465e7y^{12} - 2.84954e6y^{14} + 498334.0y^{16} - 55600.0y^{18} \\
&\quad +3058.26y^{20} + 533.254y^{22} - 40.5117y^{24} + 14.0y^{26} \\
c_8 &= 1.17022e9 - 1.66421e9y^2 + 1.06002e9y^4 - 6.60078e8y^6 + 6.33496e7y^8 \\
&\quad -4.60396e7y^{10} + 1.4841e7y^{12} - 1.06352e6y^{14} - 217801.0y^{16} + 48153.3y^{18} \\
&\quad -1500.17y^{20} - 198.876y^{22} + 91.0y^{24} \\
d_8 &= 5.79099e8 - 7.53828e8y^2 + 6.60078e8y^4 + 5.40367e7y^6 + 1.99846e8y^8 \\
&\quad -6.87656e6y^{10} - 6.89002e6y^{12} + 280428.0y^{14} + 161461.0y^{16} - 16493.7y^{18} \\
&\quad -567.164y^{20} + 364.0y^{22} \\
e_8 &= 2.11107e8 - 2.89676e8y^2 + 6.33496e7y^4 - 1.99846e8y^6 - 5.01017e7y^8 \\
&\quad -5.25722e6y^{10} + 1.9547e6y^{12} + 240373.0y^{14} - 55582.0y^{16} - 1012.79y^{18} \\
&\quad +1001.0y^{20} \\
f_8 &= 6.11148e7 - 7.01358e7y^2 + 4.60396e7y^4 - 6.87656e6y^6 + 5.25722e6y^8 \\
&\quad +3.04316e6y^{10} + 123052.0y^{12} - 106663.0y^{14} - 1093.82y^{16} + 2002.0y^{18} \\
g_8 &= 1.44647e7 - 1.39465e7y^2 + 1.4841e7y^4 + 6.89002e6y^6 + 1.9547e6y^8 \\
&\quad -123052.0y^{10} - 131337.0y^{12} - 486.14y^{14} + 3003.0y^{16}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
h_8 &= 2.85721e6 - 2.84954e6y^2 + 1.06352e6y^4 + 280428.0y^6 - 240373.0y^8 \\
&\quad -106663.0y^{10} + 486.14y^{12} + 3432.0y^{14} \\
o_8 &= 483737.0 - 498334.0y^2 - 217801.0y^4 - 161461.0y^6 - 55582.0y^8 \\
&\quad +1093.82y^{10} + 3003.0y^{12} \\
p_8 &= 70946.1 - 55600.0y^2 - 48153.3y^4 - 16493.7y^6 + 1012.79y^8 \\
&\quad +2002.0y^{10} \\
q_8 &= 9504.65 - 3058.26y^2 - 1500.17y^4 + 567.164y^6 + 1001.0y^8 \\
r_8 &= 955.194 + 533.254y^2 + 198.876y^4 + 364.0y^6 \\
s_8 &= 126.532 + 40.5117y^2 + 91.0y^4 \\
t_8 &= 3.68288 + 14.0y^2
\end{aligned}
$$

参考文献

Rothman, L. S., Rinsland, C. P., Goldman, A., Massie, S. T., Edwards, D. P., Flaud, J.-M., Perrin, A., Camy-Peyret, C., Dana, V., Mandin, J.-Y., Schroeder, J., McCann, A., Gamache, R. R., Wattson, R. B., Yoshino, K., Chance, K., Jucks, K., Brown, L. R., Nemtchinov, V., Varanasi, P., 1998, The HITRAN Molecular Spectroscopic Database and HAWKS (HITRAN Atmospheric Workstation): 1996 Edition, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, **60**, 665–710

Kuntz, M.,1997, A new implementation of the humlicek algorithm for the alculation of the voigt profile function, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, **57**, 819–824

Ruyten, W., 2004, Comment on "A new implementation of the Humlicek algorithm for the calculation of the Voigt prole function" by M. Kuntz [JQSRT 57(6) (1997) 819-824], *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, **86**, 231–233