ИЗВЕСТИЯ РАН. СЕРИЯ ФИЗИЧЕСКАЯ, 2021, том 85, № 3, с. 393–397

УДК 523.43-852

УЧЕТ НАРУШЕНИЯ ЛОКАЛЬНОГО ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО РАВНОВЕСИЯ В ВЕРХНЕЙ АТМОСФЕРЕ ЗЕМЛИ В КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ ПОЛОСАХ МОЛЕКУЛ УГЛЕКИСЛОГО ГАЗА В РАДИАЦИОННОМ БЛОКЕ МОДЕЛИ ОБЩЕЙ ЦИРКУЛЯЦИИ АТМОСФЕРЫ ЗЕМЛИ

© 2021 г. И. В. Мингалев[1, 2, *], К. Г. Орлов[1], Е. А. Федотова[1]

[1]Федеральное государственное бюджетное научное учреждение Полярный геофизический институт, Мурманск, Россия

[2] Филиал федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования "Мурманский арктический государственный университет" в г. Апатиты, Апатиты, Россия

**E-mail: mingalev_i@pgia.ru*

Поступила в редакцию 25.09.2020 г.
После доработки 20.10.2020 г.
Принята к публикации 27.11.2020 г.

Изложена методика расчета поля солнечного излучения в атмосфере Земли с учетом нарушения локального термодинамического равновесия в колебательных полосах CO_2 и O_3. Эта методика позволяет проводить расчеты с высоким спектральным разрешением (line by line), а также строить параметризации оптических параметров верхней атмосферы Земли, предназначенные для расчетов поля солнечного излучения.

DOI: 10.31857/S0367676521030194

ВВЕДЕНИЕ

Для расчета нагрева атмосферы при моделировании общей циркуляции нижней и средней атмосферы Земли необходимо проводить расчет нагрева атмосферы собственным ИК излучением в диапазоне частот от 10 до 2000 $см^{-1}$ и солнечным излучением в диапазоне частот от 2000 до 50 000 $см^{-1}$. Начиная с некоторой высоты, время жизни молекул CO_2 и O_3 в возбужденном состоянии становится меньше, чем время свободного пробега между столкновениями. Это приводит к тому, что населенности колебательных состояний не описываются распределением Больцмана при температуре атмосферы, т.е. нарушается колебательное локальное термодинамическое равновесие (ЛТР), и излучение атмосферного газа не описывается функцией Планка.

В атмосфере Земли нарушение ЛТР в колебательных полосах CO_2 с длиной волны около 15 мкм наступает ночью на высотах выше 75–80 км и днем на высотах выше 70 км, а в колебательных полосах с длиной волны около 4.3 и 2.7 мкм наступает днем и ночью на высотах выше 70 км. В колебательных полосах O_3 с длиной волны около 9.6 мкм нарушение ЛТР существенно проявляется днем и ночью на высотах выше 75 км.

При нарушении ЛТР уравнение переноса излучения должно решаться совместно с кинетическими уравнениями для населенностей колебательных состояний [1–5]. Разными группами исследователей разрабатываются модели формирования населенностей колебательных состояний молекул CO_2 в условиях нарушения локального термодинамического равновесия (ЛТР) по колебательным степеням свободы молекул (колебательное не-ЛТР) [3–12]. Наиболее полная теория методов учета нарушения ЛТР при решении уравнения переноса излучения изложена в монографии [1].

ИЗЛУЧЕНИЕ АТМОСФЕРНОГО ГАЗА ПРИ НАРУШЕНИИ ЛТР

Будем считать атмосферу плоской и горизонтально однородной и рассмотрим собственное излучение атмосферы с частотой ν, которое мы будем считать зависящим только от высоты над поверхностью z и от угла между направлением импульса фотона и вертикальным направлением. Этот угол будем называть зенитным. Иногда его отсчитывают от направления вниз.

Введем обозначения u – косинус зенитного угла, z_{max} – высота верхней границы столба атмо-

сферы, в котором производится расчёт поля излучения, а $I(z,\nu,u)$ – интенсивность излучения с частотой ν и зенитным углом, косинус которого равен u, на высоте z, $K_{ab}(z,\nu)$ и $K_{sc}(z,\nu)$ – объемные коэффициенты поглощения и рассеяния излучения с частотой ν на высоте z.

Уравнение переноса собственного излучения атмосферы в данном случае можно записать в виде

$$u\frac{dI(z,\nu,u)}{dz} = -\left(K_{ab}(z,\nu) + K_{sc}(z,\nu)\right)I(z,\nu,u) + \\ + W(z,\nu) + K_{sc}(z,\nu)S[I](z,\nu,u), \quad (1)$$

где $W(z,\nu)$ – слагаемое, задающее излучение, $S[I](z,\nu,u)$ – нормированная плотность источника рассеянного излучения на частоте ν на высоте z и с зенитным углом, имеющим косинус u. Эта плотность задана формулой

$$S[I](z,\nu,u) = \frac{1}{4\pi}\int_{-1}^{1} I(z,\nu,u)\left(\int_{0}^{2\pi}\chi(z,\nu(w,u,\varphi))d\varphi\right)dw,$$

где w и u – косинусы зенитных углов до и после рассеяния, φ – разность между азимутальным углом излучения до рассеяния и этим же углом после рассеяния, $\nu(w,u,\varphi) = uw + \cos\varphi\sqrt{(1-u^2)(1-w^2)}$ – косинус угла рассеяния, а $\chi(z,\ \nu)$ – индикатриса рассеяния для излучения с частотой ν на высоте z на угол, косинус которого равен ν.

При выполнении ЛТР слагаемое $W(z,\nu)$ задано через функцию Планка

$$W(z,\nu) = K_{ab}(z,\nu)B(T(z),\nu),$$
$$B(T,\nu) = \frac{2h\nu^3}{c^2\left(\exp(h\nu/(k_BT)) - 1\right)},$$

где h – постоянная Планка, k_B – постоянная Больцмана, c – скорость света, $T(z)$ –температура атмосферного газа на высоте z.

Рассмотрим случай, когда атмосферный газ состоит из смеси нескольких газов и нескольких типов аэрозольных частиц, и когда ЛТР нарушается для нескольких линий поглощения некоторых газов. В этом случае слагаемое $W(z,\nu)$ есть сумма вкладов всех газовых составляющих и аэрозольных частиц

$$W(z,\nu) = \sum_{\alpha} W_{\alpha}(z,\nu) + K_{aer,ab}(z,\nu)B(T(z),\nu), \quad (2)$$

в которой индекс α обозначает сорт молекул, а $K_{aer,ab}(z,\nu)$ – объемный коэффициент поглощения аэрозольных частиц. Коэффициент $K_{ab}(z,\nu)$ есть сумма объемных коэффициентов молекулярного поглощения всех газовых составляющих и аэрозольных частиц

$$K_{ab}(z,\nu) = \sum_{\alpha} n_{\alpha}(z)\sigma_{mol,ab,\alpha}(z,\nu) + K_{aer,ab}(z,\nu), \quad (3)$$

где $n_{\alpha}(z)$ – концентрация молекул сорта α, а $\sigma_{mol,ab,\alpha}(z,\nu)$ – сечение поглощения молекулы этого сорта на высоте z. Это сечение кроме частоты зависит еще от температуры и парциальных давлений атмосферных газов и, согласно общепринятой методике, вычисляется как сумма вкладов всех линий поглощения молекулы сорта α по формуле

$$\sigma_{mol,ab,\alpha}(z,\nu) = \sum_{i} S_{\alpha i}(T(z))F_{\alpha i}(z,\nu-\nu_{\alpha i}), \quad (4)$$

где i – номер линии поглощения молекулы сорта α, $\nu_{\alpha i}$ – частота центра этой линии поглощения, $S_{\alpha i}(T(z))$ – интенсивность этой линии, $F_{\alpha i}(z,\nu-\nu_{\alpha i})$ – контур Фойгта этой линии поглощения на высоте z. Интенсивность линии вычисляется по формуле

$$S_{\alpha i}(T) = S_{\alpha i}(T_{ref})\times \\ \times\frac{Q_{\alpha}(T_{ref})\exp(-C_2E_{\alpha n}/T)(1-\exp(-C_2E_{\alpha i}/T))}{Q_{\alpha}(T)\exp(-C_2E_{\alpha n}/T_{ref})(1-\exp(-C_2E_{\alpha i}/T_{ref}))},$$

в которой $T_{ref} = 296$ K – нормальная температура, $Q_{\alpha}(T)$ – произведение вращательной и колебательной статистических сумм молекулы сорта α, $E_{\alpha n}$ – энергия (в см^{-1}) нижнего уровня перехода этой молекулы, $E_{\alpha i}$ – энергия (в см^{-1}) перехода, соответствующая линии поглощения с номером i этой молекулы, $C_2 = hc/k_B = 1.438769$ см · K – вторая радиационная постоянная, c – скорость света, k_B – постоянная Больцмана.

Интенсивность линии при нормальной температуре $S_{\alpha i}(T_{ref})$ и параметры $E_{\alpha n}$, $E_{\alpha i}$ для всех линий содержатся в базе данных HITRAN 2012. Параметр $Q_{\alpha}(T)$ для каждого сорта молекул вычисляется с помощью интерполяционных таблиц, приведенных в работе [13]. Подпрограммы для вычисления $Q_{\alpha}(T)$ входят в набор программ, прилагаемых к HITRAN.

База данных HITRAN 2012 описана в работах [14–17] и содержит спектроскопические параметры для 7400 447 спектральных линий для 47 молекул. Ее можно скачать с официальной страницы в интернете http://www.cfa.harvard.edu/hitran.

Контур Фойгта представляет собой свертку доплеровского и лоренцевского контуров и достаточно хорошо описывает экспериментальный контур в промежуточной области давлений. Для

линии с номером i молекул сорта α этот контур на высоте z задан формулами

$$F_{\alpha i}(z,\nu-\nu_{\alpha i})=\frac{y}{a_D\pi\sqrt{\pi}}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{\exp(-t)^2dt}{y^2+(x-t)^2},\qquad x=\frac{\nu-\nu_{\alpha i}}{a_D},\quad y=\frac{a_L}{a_D},\tag{5}$$

где a_D – параметр доплеровской ширины линии, а a_L – полуширина линии контура Лоренца, которая на высоте z вычисляется по формуле

$$a_L=\left(\gamma_{\alpha i}^{self}\left(\frac{P_\alpha(z)}{P_{ref}}\right)+\gamma_{\alpha i}^{air}\left(\frac{P(z)-P_\alpha(z)}{P_{ref}}\right)\right)\left(\frac{T_{ref}}{T(z)}\right)^{\beta_{\alpha i}},$$

в которой $\gamma_{\alpha i}^{self}$ – коэффициент самоуширения линии с номером i молекул сорта α (за счет столкновений этих молекул между собой), $\gamma_{\alpha i}^{air}$ – коэффициент уширения воздухом этой линии (за счет столкновений этих молекул с молекулами других сортов), $\beta_{\alpha i}$ – коэффициент температурной зависимости этой линии, $P_{ref}=1$ атм, $P_\alpha(z)$ – парциальное давление молекул сорта α, а $P(z)$ – полное давление атмосферного газа на высоте z.

Параметры $\gamma_{\alpha i}^{self}$, $\gamma_{\alpha i}^{air}$ и $\beta_{\alpha i}$ для всех линий содержатся в базе данных HITRAN 2012. Параметр a_D на высоте z задан формулой

$$a_D=\frac{\nu_{\alpha i}}{c}\sqrt{\frac{2RT(z)}{\mu_\alpha}}$$

в которой c – скорость света, R – универсальная газовая постоянная, $\mu\alpha$ – молярная масса молекул сорта α.

Слагаемое $W_\alpha(z,\nu)$ в формуле (2) вычисляется как сумма вкладов всех линий поглощения молекулы сорта α по формуле

$$W_\alpha(z,\nu)=\sum_i n_\alpha(z)S_{\alpha i}(T(z))F_{\alpha i}(z,\nu-\nu_{\alpha i})J_{\alpha i}(z,\nu),\tag{6}$$

где $J_{\alpha i}(z,\nu)$ – функция источника излучения молекул сорта α за счет линии поглощения с номером i. При выполнении ЛТР $J_{\alpha i}(z,\nu)=B(T,\nu)$.

При нарушении ЛТР в атмосфере Земли хорошо выполняются приближение слабой заселенности колебательных состояний молекул CO_2 и O_3 и приближение двухуровневой модели для расчета заселенности этих состояний. В этом приближении функция $J_{\alpha i}(z,\nu)$, как показано в [1], задается формулой

$$J_{\alpha i}(z,\nu)=\frac{L_{\alpha i}(z)+\varepsilon(z)B(T(z),\nu)}{1+\varepsilon(z)},\quad \varepsilon(z)=\frac{f_{\alpha i}(z)}{A_{\alpha i}},\tag{7}$$

где $A_{\alpha i}$ – коэффициент Эйнштейна для линии поглощения с номером i молекул сорта α, $f_{\alpha i}(z)$ – частота дезактивирующих столкновений возбужденных молекул сорта α, соответствующих линии поглощения с номером i,

$$L_{\alpha i}(z)=\frac{1}{2}\int\limits_0^\infty\left(F_{\alpha i}(z,\nu-\nu_{\alpha i})\int\limits_{-1}^{1}I(z,\nu,u)du\right)d\nu.\tag{8}$$

Процедура вычисления частоты столкновений $f_{\alpha i}(z)$ описана в монографии [13].

Из формул (2), (6)–(8) следует, что интенсивность излучения на одной частоте зависит от интенсивностей на других частотах. Это существенно усложняет расчет поля излучения в атмосфере Земли. Однако, в атмосфере Земли формулу (8) можно существенно упростить по следующим двум причинам.

Первая состоит в том, что существенное нарушение ЛТР наблюдается в колебательных полосах CO_2 и O_3 на высотах более 70 км, где контуры линий поглощения становятся очень узкими и практически совпадают с контуром Доплера.

Вторая состоит в том, что для длин волн около 15 и 9.6 мкм основной вклад в интеграл (8) вносит идущее снизу излучение атмосферы, которое формируется на высотах ниже 20 км. Это излучение на высотах более 40 км практически постоянно на ширине линий поглощения, в которых нарушается ЛТР. Вклад в интеграл (8) прямого и рассеянного излучения от верхних слоев атмосферы для указанных длин волн пренебрежимо мал.

Для длин волн около 4.3 и 2.7 мкм основной вклад в интеграл (8) вносит прямое солнечное и рассеянное солнечное излучение атмосферы, которое формируется на высотах ниже 20 км. Это излучение также практически постоянно на ширине линий поглощения, в которых нарушается ЛТР. Вклад в интеграл (8) рассеянного верхними слоями атмосферы солнечного излучения для указанных длин волн пренебрежимо мал. В силу перечисленных выше причин для колебательных полос CO_2 и O_3 на высотах более 70 км формулу (8) можно заменить формулой

$$L_{\alpha i}(z)=\frac{1}{2}\int\limits_{-1}^{1}I(z,\nu,u)du.\tag{9}$$

Использование формул (2), (6), (7) и (9) позволяет проводить расчет поля излучения в атмосфере Земли с учетом нарушения ЛТР в колебательных полосах CO_2 и O_3 независимо для каждой частоты.

Авторами данной работы были проведены эталонные расчеты поля собственного излучения атмосферы Земли в приближении горизонтальной однородной атмосферы с разрешением по частоте 0.001 $см^{-1}$ в интервале высот от поверхности Земли до высоты 100 км. Расчеты проводились с помощью изложенной выше методики учета нарушения ЛТР в колебательных полосах CO_2 с длина-

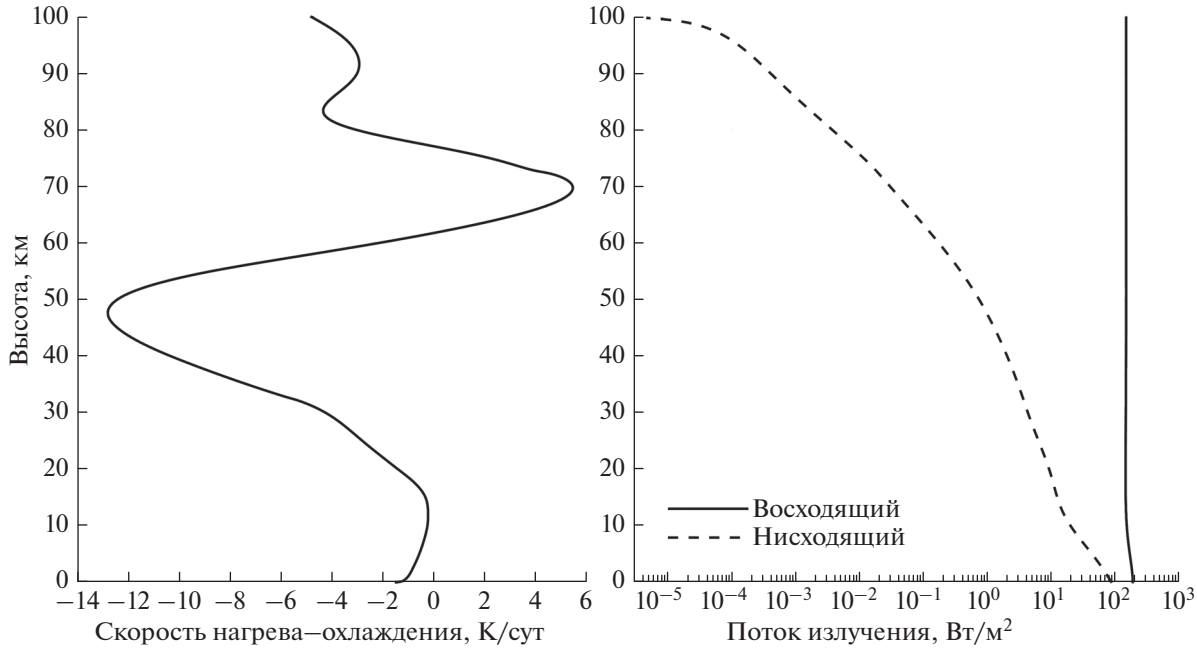

Рис. 1. Потоки восходящего и нисходящего собственного излучения в частотном диапазоне 500–1000 см$^{-1}$ (справа) и скорости нагрева–охлаждения атмосферного газа за счет этих потоков (слева), полученные при эталонных расчетах.

ми волн около 15 мкм. Для численного решения уравнение переноса излучения применялся вариант метода дискретных ординат, детально описанный в работе [18]. В расчетах использовались равномерная сетка по высоте с шагом 200 метров и равномерная сетка по зенитным углам с шагом менее 9 градусов, учитывалось молекулярное и аэрозольное рассеяние. В расчетах использовались вертикальные профили температуры и концентраций основных атмосферных газов, рассчитанные по эмпирической модели NRLMSISE-00 для условий июля над северной Атлантикой на широте 55°, а также вертикальные профили объемных долей малых газовых составляющих. Учитывалось наличие в атмосфере трех типов фоновых аэрозолей: континентальные, морские и стратосферные аэрозоли. Оптические параметры этих аэрозолей взяты из работы [19].

На рис. 1 справа представлены потоки восходящего и нисходящего собственного излучения в частотном диапазоне 500–1000 см$^{-1}$ в безоблачной атмосфере, а слева представлены скорости нагрева-охлаждения атмосферного газа за счет этих потоков, полученные с помощью эталонных расчетов. На рис. 1 видно, что на высотах ниже 62 км имеет место охлаждение, причем на высоте 48 км скорость охлаждения достигает примерно 13 К/сут. Также видно, что на высотах от 62 до 77 км имеет место нагрев, причем максимальная скорость нагрева около 5.5 К/сут достигается на высоте примерно 70 км. На высотах от 77 до 100 км имеет место охлаждение, причем скорость охлаждения не превышает 5.5 К/сут. Полученный вертикальный профиль скорости нагрева-охлаждения атмосферного газа согласуется с результатами расчетов других авторов, в частности, с результатами, представленными в монографии [1]. Расчеты, проведенные без учета нарушения ЛТР дают существенно завышенную скорость нагрева на высотах более 70 км.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе предложен и обоснован метод расчета функции источника излучения в колебательных полосах CO_2 и O_3 с учетом нарушения ЛТР в верхней атмосфере Земли. Этот метод позволяет проводить расчеты поля излучения в атмосфере Земли с высоким разрешением по частоте (Line by Line) независимо для каждого узла сетки по частоте. Также этот метод позволяет строить параметризации оптических параметров атмосферы Земли, с помощью которых можно быстро и точно рассчитывать поля теплового и солнечного излучения в нижней, средней и верхней атмосфере Земли с учетом рассеяния. Метод был проверен с помощью тестовых расчетов и показал свою эффективность.

Работа И.В. Мингалева и К.Г. Орлова выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-29-03022-мк.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Lopez-Puertas M., Taylor F.W.* A non-LTE radiative transfer in the atmosphere. Series on atmospheric, oceanic and planetary physics. V. 3. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 2001. 487 p.
2. *Швед Г.М.* Избранные главы динамики атмосферы. СПб: Изд. СПбГУ, 2007.
3. *Lopez-Puertas M., Rodrigo R., Molina A., Taylor F.W.* // J. Atm. Terr. Phys. 1986. V. 48. No. 8. P. 729.
4. *Lopez-Puertas, M., Rodrigo R., Molina A., Taylor F.W.* // J. Atm. Terr. Phys. 1986. V. 48. No. 8. P. 749.
5. *Lopez-Puertas, M., Zaragoza G., Lopez-Valverde M.A.* 1 // J. Geoph. Res. 1998. V. 103. No. D7. Art. No. 8499.
6. *Огибалов В.П., Фомичев В.И., Кутепов А.А.* // Изв. РАН. Физ. атм. и океана. 2000. Т. 36. № 4. С. 493.
7. *Швед Г.М., Степанова Г.И., Кутепов А.А.* // Изв АН СССР. Физ. атм. и океана. 1978. Т. 14. № 8. С. 833.
8. *Швед Г.М., Семенов А.О.* // Астр. вестн. 2001. Т. 35. № 3. С. 234.
9. *Nebel H., Wintersteiner P.P., Picard R.H. et al.* // J. Geophys. Res. 1994. V. 99. Art. No. 10409.
10. *Ogibalov V.P., Kutepov A.A., Shved G.M.* // J. Atm. Sol.-Terr. Phys. 1998. V. 60. P. 315.
11. *Ogibalov V.P.* // Phys. Chem. Earth B. 2000. V. 25. P. 493.
12. *Ogibalov V.P., Shved G.M.* // J. Atm. Sol.-Terr. Phys. 2002. V. 64. P. 389.
13. *Gamache R.R., Hawkins R.L., Rothman L.S.* // J. Moll. Spec. 1990. V. 152. P. 205.
14. *Rothman L.S., Rinsland C.P., Goldman A. et al.* // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 1998. V. 60. No. 5. P. 665.
15. *Rothman L.S., Chance K., Goldman A.* // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2003. V. 82. No. 1–4. P. 5.
16. *Rothman L.S., Jacquemart D., Barbe A. et al.* // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2005. V. 96. P. 139.
17. *Rothman L.S., Gordon I.E., Babikov Y et al.* // J. Quant. Spectrosc. Rad. Transfer. 2013. V. 130. P. 4.
18. *Игнатьев Н.И., Мингалев И.В., Родин А.В., Федотова Е.А.* // ЖВМ и МФ. 2015. Т. 55. № 10. С. 109.
19. *McClatchey R.A., Bolle H.-J., Kondratyev K.Ya.* A preliminary cloudless standard atmosphere for radiation computation. World Climate Research Programme. International Association for Meteorology and Atmospheric Physics, Radiation Commission. 1986. WCP 112, WMO/TD-No. 24. 60 p.

Accounting for violations of local thermodynamic equilibrium in the upper atmosphere in the vibrational bands of carbon dioxide molecules in the radiation block model of the general circulation of the Earth's atmosphere

I. V. Mingalev[a, b, *], K. G. Orlov[a], E. A. Fedotova[a]

[a] *Polar Geophysical Institute, Apatity, 184209 Russia*

[b] *Apatity Branch of the Murmansk Arctic State University, Apatity, 184209 Russia*

**e-mail: mingalev_i@pgia.ru*

A method for calculating the solar radiation field in the Earth's atmosphere, taking into account the violation of local thermodynamic equilibrium in the vibrational bands of CO_2 and O_3, is described. This technique allows performing calculations with high spectral resolution (line by line), as well as constructing parameterizations of the optical parameters of the Earth's upper atmosphere, intended for calculating the solar radiation field.