

⑤ 425-430

# 非平衡行星大气发射与透射的 Line-by-Line 计算模式

向安平 朱世德<sup>Y</sup> 任基

(成都气象学院基础科学系, 四川, 成都, 610041)

P422

**摘要** 导出了非局域热力学平衡(NLTE)行星大气发射与透射的基本公式, 假设转动能级是热力学平衡(LTE)的, 建立了一个精确的 Line-by-Line(LBL)NLTE 发射与透射的数值算法计算较高层行星大气红外活跃样品的辐射强度, 用本算法计算了地球大气  $^{12}\text{CO}$  的  $4.0\mu\text{m}$  和  $15\mu\text{m}$  带在白天、夜晚和 NLTE、LTE 条件下的临边辐射强度, 揭示了 NLTE 辐射强度对 LTE 辐射强度有显著而重要的偏离。

**关键词** NLTE, 发射与透射, 辐射强度, LBL 算法.

大气发射 大气透射  
地球

## 引言

在行星大气, 特别是地球大气辐射传输研究中, 迄今仍然普遍采用的是局域热力学平衡(LTE)假设. 业已证明<sup>[1-2]</sup>, 在较高层行星大气(40~60km 以上)中, LTE 假设不再有效. 有关非局域热力学平衡(NLTE)条件下, 行星大气分子辐射传输的理论和算法是目前大气物理学研究的热点之一<sup>[3-4]</sup>.

NLTE 问题包括行星大气分子的受激与退受激过程, 即辐射的吸收和发射、光化学反应及各种碰撞过程; 分子按能级布居的统计平衡方程, 即分子能级总的布居率等于其总的退布居率; 辐射传输方程, 它使得同跃迁对应的较高能级和较低能级的布居与相应谱线的辐射场相关. 统计平衡方程是非线性的, 且与辐射传输方程相互耦合.

本文假定行星大气分子按能级的 NLTE 布居是已知的, 导出了 NLTE 行星大气发射与透射的基本公式, 建立了精确的 Line-by-Line 算法, 还给出了计算实例及其结果的分析.

## 1 NLTE 辐射传输

本文只考虑受激态分子的受激和自发辐射、以及较低态分子的受激吸收过程, 略去大气的散射过程. 因此, 分子线辐射传输方程可直接由三个 Einstein 系数和分子较低、较高辐射态的布居导出. 利用这些系数间的关系<sup>[5]</sup>, 我们得到

$$\frac{dI_\nu(s)}{ds} = \frac{1}{8\pi\nu_n^2} A_{ul} f_\nu(s) \frac{g_u}{g_l} n_l(s) \{2c\nu_0^2 \beta(s) - I_\nu(s)[1 - \beta(s)]\}, \quad (1)$$

式(1)中,  $I_\nu$  是波数为  $\nu(\text{cm}^{-1})$  的光谱辐射强度,  $s$  为观察路径参数,  $A_{ul}$  是 Einstein 自发发射系数 ( $\text{s}^{-1}$ ),  $f_\nu$  是线型函数,  $g_l$  和  $g_u$  分别是较低和较高辐射态的统计权重,  $\nu_0$  是共振跃迁波数 ( $\text{cm}^{-1}$ ),  $c$  是光速,  $\beta$  定义为

$$\beta(s) = g_u n_u(s) / [g_u n_u(s) + g_l n_l(s)] \quad (2)$$

式(1)和式(2)中,  $n_l$  和  $n_u$  分别是较低和较高振转能级的布居, 因子  $(1-\beta)$  揭示了诱导发射. 在导出式(1)时, 假设发射和吸收线型是相同的, 应注意的是, 分子较低和较高振转能级的布居与其振动能级的布居是不容混淆的, 振动能级的布居是我们模式的输入参数.

将式(1)与标准的辐射传输方程比较, 得吸收系数 ( $\text{cm}^2 \cdot \text{molecule}^{-1}$ )

$$K_\nu(s) = \frac{1}{8\pi c \nu_0^2} A_{ul} f_\nu(s) \frac{n_l(s)}{\rho(s)} \cdot \frac{g_u}{g_l} \cdot [1 - \beta(s)] \quad (3)$$

和源函数 ( $\text{photons} \cdot \text{cm}^{-2} \cdot \text{sr}^{-1} \cdot \text{cm} \cdot \text{s}^{-1}$ )

$$J_\nu(\tau) = 2c\nu_0^2 \beta(s) / [1 - \beta(s)], \quad (4)$$

式(3)中,  $\rho$  是分子数密度 ( $\text{molecule} \cdot \text{cm}^{-3}$ ), 发射系数仍定义为吸收系数与源函数之积, 当分子振转能级的布居满足 Boltzmann 分布律时, 上述结论简化为 LTE 条件下的结果.

## 2 NLTE 算法

### 2.1 NLTE 线强与光学厚度

光学厚度是计算透过率和辐射强度时必须计算的量, 能够证明, NLTE 线强可表示为

$$S(T) = S^e(T_s) \cdot \frac{n_l}{n_l^e} \cdot \frac{1 - \beta}{1 - \beta^e} = S^e(T_s) \cdot \frac{g_u n_l - g_l n_u}{g_u n_l^e - g_l n_u^e} \quad (5)$$

式(5)中, 上标“es”表示在 LTE 和参考温度  $T_s = 296\text{K}$  条件下取值,  $S^e(T_s)$  为 LTE 条件下的 HITRAN 线强<sup>[6]</sup>, 式(5)中等号右边  $S^e(T_s)$  后的因子可定义为 NLTE 线强转换因子  $Y_{lu}$ , 在 LTE 条件下,  $Y_{lu}$  变为 LTE 线强  $S(T) = S^e(T_s) Y_{lu}^e$  的温度修订因子<sup>[6]</sup>.

假设分子的所有转动能级是 LTE 的, 即转动温度等于大气动力学温度<sup>[4]</sup>, 则分子振转能级的布居可由相应振动能级的布居方便地求出, 如用振动能级的布居定义振动温度<sup>[7]</sup>, 则振动能级的布居亦可由振动温度表示, 同时振动温度能直观地揭示 NLTE 对 LTE 的偏离.

在 NLTE 中, 仍假设大气平面是平行的, 因此, 可把有限大气分为具有均匀温度、压强和数密度的层结构, 任一层的温度用其边界值的算术平均值近似, 而分子数密度则用其边界值的几何平均值近似, 由于高层大气廓线具有较大的不确定性, 因而, 更精确的分层模式是没有现实意义的, 设第  $m$  层大气的边界为  $s_m$  和  $s_{m+1}$  ( $m=0, 1, 2, \dots, M-1$ , 参考点对应于  $m=M$ , 观察点对应于  $m=0$ ), 层内温度和数密度分别为  $T_m$  和  $\rho_m$ , 则由光学厚度的定义和式(5)可得, 第  $m$  层的光学厚度为

$$\tau_\nu(s_{m+1}, s_m) = \Delta\tau_{\nu m} = S^e(T_s) Y_{lu} f_{\nu m} \rho_m \Delta s_m = \Delta\tau_{\nu m}^e Y_{lu} / Y_{lu}^e, \quad (6)$$

式(6)中,  $\Delta s_m = s_{m+1} - s_m$ ,  $\Delta\tau_{\nu m}^e = S^e(T_s) Y_{lu}^e f_{\nu m} \rho_m \Delta s_m$  是 LTE 条件下的光学厚度.

可见, NLTE 光学厚度等于 LTE 光学厚度乘以线强转换因子之比  $Y_{lu} / Y_{lu}^e$ , 因此, NLTE

大气透过率的计算方法与 LTE 是一样的.

## 2.2 辐射强度

对参考点  $s'$  与观察点  $s$  间的有限大气,即使观察路径始点处的辐射强度(外源)  $I_i(s')$  不为零,它亦可独立处理为大气的衰减.假设参考点处的辐射强度  $I_i(s')=0$ ,则辐射传输方程的形式解完全由大气发射决定,且最终可表示为

$$I_i(s) = \sum_{m=0}^{M-1} J_m [1 - \exp(-\Delta\tau_m)] \exp\left[-\sum_{j=m+1}^{M-1} \Delta\tau_j\right], \quad (7)$$

注意到越远离观察点的大气对辐射强度的贡献越小的特点,式(7)可按如下算法计算,令

$$T_m = \exp(-\Delta\tau_m), \quad R_m = J_m(1 - T_m), \quad X_{M-1} = 1,$$

$$\text{则} \quad X_{m-1} = X_m T_m, \quad I_i(s) = \sum_{m=M-1}^0 X_m R_m,$$

当光学厚度很大时,来自远距离层的贡献因衰减可忽略不计,显然上述算法非常容易实现求和的截断.在上述算法中,  $X_m$  是第  $m$  层的近边到观察点的总透过率.

在我们的模式中,线型函数选取 Voigt 函数,其算法见文献[8],算法的最大相对误差小于  $5 \times 10^{-4}$ .当精度要求不高时,亦可选取 Doppler 线型.

## 2.3 积分辐射强度

### 2.3.1 厚线近似

计算积分辐射强度的一般方法是利用 Gauss-Legendre 求积公式.对厚线(线中心的光学厚度  $\tau_0$  很大),为了加速积分的计算,引入适当的近似是必要的.对任一中心频率为  $\nu_0$  的跃迁  $i$ ,把积分用某一截断频率  $\nu_c$  截断,使得积分辐射强度等于截尾(翼)后的积分辐射强度  $I_i(s, \nu_c)$  与远翼(尾)贡献  $I_i(s, \nu_c)$  之和,即

$$I(s) = I_i(s, \nu_c) + I_i(s, \nu_c) = 2 \int_{\nu_c}^{\nu_0} I_i(s, \nu) d\nu + 2 \int_{\nu_c}^{\infty} I_i(s, \nu) d\nu, \quad (8)$$

式(8)中,  $I_i(s, \nu) = I_i(s)$ .为了保证足够高的精度,把积分区间  $[\nu_c, \infty]$  分为  $J$  个子区间,对第  $j$  个子区间  $[\nu_j, \nu_{j+1}]$  ( $j=0, 1, 2, \dots, J-1$ ),使用 Gauss-Legendre 求积公式计算  $I_i(s, \nu_c)$ .从原则上讲,总可以通过选择足够大的  $\nu_c$ ,使得尾贡献  $I_i$  小得可以忽略不计.但是,这势必导致子区间数  $J$  变大,因而增加耗时量.我们的解决办法是,保留尾贡献,并最大限度地减少子区间数.子区间的长度和子区间数由程序自动计算确定.在计算时,可取 Legendre 多项式的节点数  $n=2, 4$  和  $8$ ,通常取  $n=4$  已获得足够高的精度.

截断频率  $\nu_c$  的确定是困难的,因为它明显依赖于光谱线  $i$  和观察路径以及预期的精度.在我们的模式中,采用了一个经验的关系式来确定  $\nu_c$ ,即

$$I_i \varepsilon / I_i > \tau_0 \delta, \quad (9)$$

式(9)中,  $\varepsilon$  为预期的精度;  $\delta$  是一个待定的可调参数,  $\tau_0$  是截断频率  $\nu_c$  处的光学厚度.我们发现,当  $\delta$  取值介于  $0.16 \sim 0.17$  之间时,用 Gauss-Legendre 求积公式计算的  $I_i$  与远翼贡献  $I_i$  之和的相对误差是小于预期的精度  $\varepsilon$  的.因此,我们取  $\delta=0.165$ .

当式(9)成立时,远翼处 ( $\nu > \nu_c$ ) 的光学厚度  $\tau_0 \ll 1$ .在翼区, Voigt 线型函数  $f$  可用 Lorentz 函数近似,或等效地用二点 Gauss-Hermite 求积公式近似<sup>[5]</sup>.因此,远翼(尾)贡献  $I_i$

$(s, \nu_c)$  可近似为

$$I_i(s, \nu_c) = \frac{2}{\pi} \cdot \frac{1}{\nu_c - \nu_0} \sum_{m=M-1}^0 J_m \alpha_{Lm} \cdot \frac{\Delta r_{im}}{f_{im}} \quad (10)$$

式(10)中,  $\alpha_{Lm}$  是第  $m$  层中的 Lorentz 半宽. 借助式(6)可知, 式(10)与积分变量  $\nu$  无关. 因此, 对每一跃迁  $i$ , 只需在跃迁波数  $\nu_0$  处对式(10)进行一次求和运算就能得到相应谱线的远翼积分辐射强度.

### 2.3.2 薄线近似

对薄线(线中心的光学厚度  $\tau_{i0} \ll 1$ ), 利用上述厚线近似计算积分辐射强度既耗时, 也没有必要. 尾贡献的近似过程提示我们, 可作类似的近似. 能够证明, 其为

$$I(s) = \sum_{m=M-1}^0 J_m \cdot \frac{\Delta r_{im}}{f_{im}} \quad (11)$$

在计算时, 我们采用如下经验关系式作为使用薄线近似的条件, 即

$$\tau_{i0}(s, s') < \epsilon / 2\delta \approx 3\epsilon \quad (12)$$

计算表明, 薄线近似总是高估积分辐射强度, 但其相对误差不超过  $\epsilon$ . 当条件式(12)不满足时, 用厚线近似计算积分辐射强度. 显然, 薄线近似同远翼近似一样, 具有简捷的特点.

综上所述, 本算法引入的数学近似的误差是小于相对误差的期望值  $\epsilon$  的, 因此, 计算结果的误差主要来源于输入大气廓线的不确定性和大气分层近似. 计算表明, 如果在 150km 以下采用 1~2km 厚的等厚层, 在 150km 以上采用 10km 厚的等厚层, 则大气分层近似引入的误差不超过 2%.

## 3 数值检验

利用上述算法, 我们用 FORTRAN 语言编制了计算程序, 命名为: NLTECOD1. 下面我们以地球大气  $^{12}\text{C}^{16}\text{O}_2$  4.3 和  $15\mu\text{m}$  带在白天和夜晚、NLTE 和 LTE 条件下的临边观察为例, 计算其光谱辐射强度、线积分辐射强度、带积分辐射强度和合成光谱辐射强度, 并对计算结果作简要的分析.

以 1976 年美国标准大气模式作为输入大气廓线, 所需光谱参数取自 HITRAN database<sup>[9]</sup>, 计算中涉及的主要相关振动能级在白天和夜晚条件下的布居分别取自文献[10]和[3]. 白天和夜晚条件下的 NLTE 和 LTE 带积分辐射强度结果如图 1~2 所示, 图例中含有  $x$ 、 $y$  和  $z$  的带为组带, 其取值说明了构成该组带的子带.

由图 1 可知, 无论是在白天还是夜晚条件下, 4.3  $\mu\text{m}$  带的 NLTE 辐射强度都是偏离 LTE 的. 在白天, 50~90km 高度内的 NLTE 辐射强度大于 LTE 辐射强度, 最大差值近似出现在 75km 正切高度; 在 90km 以上, NLTE 辐射强度小于 LTE 辐射强度, 且迅速减小; 在夜晚, 50km 高度以上的 NLTE 辐射强度具有白天 90km 高度以上的类似特点. 虽然 LTE 辐射强度在白天和夜晚条件下是完全相同的, 但是, 50km 高度以上的 NLTE 辐射强度在白天和夜晚条件下是明显不同的. 可见, 太阳泵浦对白天辐射强度有重要的贡献.

由图 2(a)和图 2(b)可知, 白天  $15\mu\text{m}$  带的辐射强度是近似处于 LTE 的, 而夜晚近似在

70km 以上则是近似处于 NLTE 的. 这种白天和夜晚条件下的明显差异表明, 太阳泵浦对白天  $15\mu\text{m}$  带的近似 LTE 辐射起着决定性的作用.

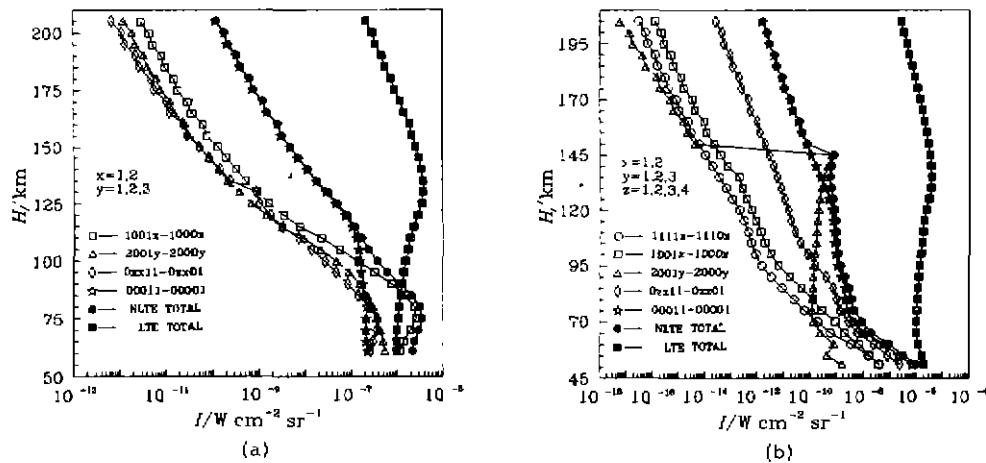


图 1  $\text{CO}_2$  626 同位素个别带对  $4.3\mu\text{m}$  模式 NLTE 辐射强度的贡献  
(a)白天 (b)夜晚

Fig. 1 Contributions of individual bands to the  $4.3\mu\text{m}$  model NLTE radiance for the  $\text{CO}_2$  626 isotope only (a) daytime (b) nighttime

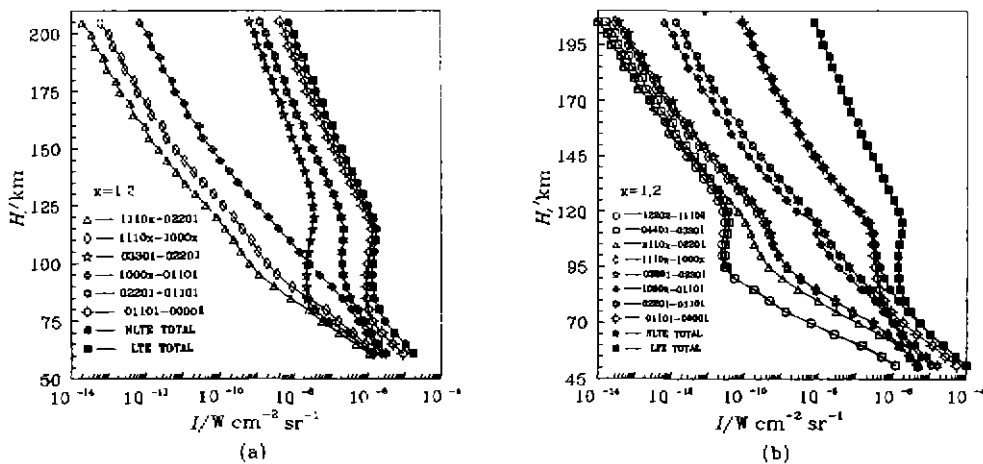


图 2  $\text{CO}_2$  626 同位素个别带对  $15\mu\text{m}$  模式 NLTE 辐射强度的贡献  
(a)白天 (b)夜晚

Fig. 2 Contributions of individual bands to the  $15\mu\text{m}$  model NLTE radiance for the  $\text{CO}_2$  626 isotope only (a) daytime (b) nighttime

上述计算表明, 在较高层行星大气辐射传输的数值计算中, NLTE 效应是重要的.

本文导出了 NLTE 行星大气发射与透射的基本公式, 以及 NLTE 线强和光学厚度与 LTE 线强和光学厚度的关系. 假设转动能级是 LTE 的, 建立了一个精确的 LBL NLTE 发射与透射的有效算法来计算较高层行星大气红外活跃样品的辐射强度. 把本算法应用于地

球大气 $^{12}\text{C}^{16}\text{O}_2$  3 $\mu\text{m}$  和 15 $\mu\text{m}$  带的临边辐射,揭示了在白天和夜晚条件下 NLTE 辐射对 LTE 辐射有显著而重要的偏离.

本文是较高层(40~60km 以上)行星大气 LBL NLTE 辐射传输模式的第一部分,文中关于积分辐射强度的算法同样适用于行星大气 NLTE 辐射受激率与退受激率的计算.

#### REFERENCES

- 1 López-Puertas M, et al. *J. Geophys. Res.*, 1989, **94**(D10):13045~13068
- 2 Stepanova G I, et al. *Soviet Astron.*, 1988, **32**(6):677~681
- 3 Sharma R D, et al. *AD-A239038*, 1991
- 4 Kutepov A A, et al. *JQSRT*, 1991, **46**(5):347~365
- 5 ZHU S D, XIANG A P, REN J. *Journal of Chengdu Institute of Meteorology*(朱世德,向安平,任基,成都气象学院学报), 1995, **10**(2):114~120
- 6 Rothman L S. *SPIE*, 1988, **928**:79~93
- 7 Shama R D. *Progress in Atmospheric Physics*, Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 1988, 177
- 8 XIANG A P, ZHU S D, REN J. *Journal of Infrared and Millimeter Waves*(向安平,朱世德,任基,红外与毫米波学报), 1995, **14**(2):125~131
- 9 Rothman L S, et al. *Appl. Opt.*, 1987, **26**(19):4058~4097
- 10 Sundberg R L, et al. *AD-A207667*, 1989

### LINE-by-LINE CALCULATION MODEL OF EMISSION AND TRANSMISSION FOR THE NON-EQUILIBRIUM PLANETARY ATMOSPHERES

XIANG An-Ping ZHU Shi-De REN Ji

(Department of Basic Sciences, Chengdu Institute of Meteorology, Chengdu, Sichuan 610041, China)

**Abstract** The basic formulas of the emission and transmission for the non-local thermodynamic equilibrium (NLTE) planetary atmospheres were derived. By assuming that rotational levels within a vibrational level remain in local thermodynamic equilibrium (LTE), an accurate and efficient line-by-line (LBL) algorithm of NLTE emission and transmission was developed to evaluate the radiance due to infrared-active species in the upper planetary atmospheres. The limb viewing radiance of the earth's atmosphere for the 4.3 $\mu\text{m}$  and 15 $\mu\text{m}$  bands of  $^{12}\text{C}^{16}\text{O}_2$  under daytime and nighttime, NLTE and LTE conditions was calculated by using this algorithm. The results of calculations reveal that NLTE radiance obviously departs from LTE.

**Key words** NLTE, emission and transmission, radiance, LBL algorithm.