

<u>ИПМ им.М.В.Келдыша РАН</u> • <u>Электронная библиотека</u> <u>Препринты ИПМ</u> • <u>Препринт № 14 за 2018 г.</u>



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

Колесниченко А.В.

О вкладах УФ-излучения Солнца, химических и фотохимических реакций в энергетическое уравнение для верхней атмосферы

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Колесниченко А.В. О вкладах УФ –излучения Солнца, химических и фотохимических реакций в энергетическое уравнение для верхней атмосферы // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2018. № 14. 39 с. doi:10.20948/prepr-2018-14

URL: http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2018-14

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

А.В. Колесниченко

О вкладах УФ излучения Солнца, химических и фотохимических реакций в энергетическое уравнение для верхней атмосферы

Москва — 2018

Колесниченко А.В.

О вкладах УФ-излучения Солнца, химических и фотохимических реакций в энергетическое уравнение для верхней атмосферы.

В работе рассматриваются внешние газовые оболочки планет и комет, расположенные в пограничных областях между атмосферой и космосом. Для их адекватного моделирования развит подход, основанный на кинетических уравнениях Больцмана для многокомпонентных смесей многоатомных газов с учетом излучения и химических реакций в интегралах столкновений. Он позволяет корректно учитывать вклады в энергетическое уравнение радиационных и химических источников нагрева среды, обусловленных прямым поглощением солнечной УФ радиации и инициируемым ею многоканальным комплексом аэрономических процессов. В качестве примера приведена функция нагревания термосферы Земли солнечным ионизирующим излучением и энергичными частицами, оказывающими наиболее существенное влияние на тепловой режим, динамику и эмиссионные свойства высокоширотных областей термосферы.

Ключевые слова: кинетическое уравнение, реагирующие газовые смеси, аэрономические процессы, функция нагревания термосферы.

Aleksander Vladimirovich Kolesnichenko

On the contributions of the UV–radiation of Sun, chemical and photochemical reactions to the energy equation for the upper atmosphere.

Considered the outer gas envelopes of planets and comets, located in the border areas between the atmosphere and outer space. On the basis of Boltzmann kinetic equations for multicomponent mixtures of polyatomic gases taking into account radiation and chemical reactions in collision integrals, an approach is developed that allows to take into account correctly the contribution to the energy equation of radiation and chemical sources of heating of the medium due to direct absorption of solar energy and the multi-channel complex of aeronomical processes. As an example, the function of heating the Earth's thermosphere by solar ionizing radiation and energetic particles is presented, which have the most significant effect on the thermal regime, dynamics and emission properties of high-latitude regions of the thermosphere.

Key words: kinetic equation, reacting gas mixture, aeronomical processes, function of heating the thermosphere.

ВВЕДЕНИЕ

Внешние газовые оболочки небесных тел (планет, комет) представляют собой разреженный многокомпонентный газ, подверженный прямому воздействию солнечного электромагнитного и корпускулярного излучения. Структура и физико-химические свойства подобных сред, лежащих в пограничных областях между атмосферой и космосом и обычно называемых верхней атмосферой и/или околопланетным пространством, существенно различаются в зависимости от массы тела, его расстояния от Солнца, наличия магнитного поля, условий формирования и эволюции космического объекта. Общим для данных областей является наличие процессов фотолиза (сопровождаемых диссоциацией, ионизацией и многочисленными прямыми и обратными элементарными процессами и химическими реакциями) и их определяющая роль в динамике, тепловом режиме и структуре атмосферы. Очевидно, в зависимости от характерных временных и пространственных масштабов изучаемых явлений, адекватное описание таких сред возможно как в рамках газокинетического, так и гидродинамического подходов (см., например, Четверушкин, 1985; Маров, Колесниченко, 1987; Marov, Kolesnichenko, 2001, 2013; Kolesnichenko, 2017). Вместе с тем, учёт специфики происходящих в верхней атмосфере процессов сопряжён с необходимостью определённой модификации традиционных подходов, требующих привлечения элементов космической физики, химической кинетики, электродинамики и др. На этом пути открываются широкие возможности математического моделирования малодоступных областей пространства, экспериментальные сведения о которых, как правило, крайне ограничены, включая прогнозирование их состояния и пространственно-временные вариации.

Указанные проблемы вызвали к жизни разработку разнообразных моделей подобных сред, соответствующих алгоритмов и программных комплексов для их численной реализации (см. Четверушкин, Шильников, 2008; Мингалев и др., 2010). Определяющее влияние на этот процесс оказало совершенствование экспериментальных методов наблюдений и космические исследования ближайших окрестностей Земли и планет Солнечной системы, которые способствовали развитию теоретической и прикладной аэрономии (Маров, Колесниченко, 1987). Принципиальные подходы, лежащие в основе теоретической аэрономии и использующие как гидродинамические, так и кинетические методы, подробно изложены, например, в монографиях (Колесниченко, Маров, 1999; Колесниченко, 1917), где приведены также конкретные модельные разработки. В них подробно исследуется, в частности, возможность перехода от исходных кинетических представлений к методам механики сплошной среды, и одновременно показывается эффективность кинетических методов при изучении неравновесных аэрономических процессов в разреженном атмосферном газе, обусловленных как электромагнитной, так и корпускулярной радиацией Солнца. В своей совокупности современные гидродинамические и кинетические подходы значительно расширили класс решаемых задач, что позволило отказаться во многих случаях от использования в гидродинамических уравнениях некоторых входных параметров модели, которые необходимо настраивать для получения согласования численных результатов с экспериментальными данными (см. Мингалев, Мингалев, 2005; Четверушкин и др., 2017). При этом возникают, однако, проблемы достижения необходимой точности при постановках физически самосогласованных задач, что непосредственно связано с экономичностью (эффективностью) алгоритмов, используемых для получения численных решений.

Одной из таких наиболее актуальных проблем является детальное описание процессов взаимодействия вещества и Солнечного излучения, в том числе в самом общем неравновесном случае, и возможность корректного учёта вкладов (фотохимических и химических реакций) от такого взаимодействия в гидродинамические уравнения (Сэмпсон, 1969). В частности, речь идет о возможном получении общего вида функции нагревания верхней атмосферы, обусловленного совокупностью эндо-и экзотермических реакций, сопровождающих приток в атмосферу солнечной УФ энергии. При таком подходе точность описания энергетического баланса неравновесной (в общем случае) среды, зависящая от степени отклонения системы от ЛТР, определяется значительным числом факторов, включающих константы элементарных (столкновительных и радиативных) процессов, ограниченное (по необходимости) число возбуждённых уровней состояния, скорости и сечения химических реакций и др.

Таким образом, коротковолновая часть солнечного спектра (УФ и рентген) оказывает решающее влияние на состояние внешних областей газовых оболочек Земли и планет, определяя свойства их верхних атмосфер и характер аэрономических процессов, хотя доля энергии, излучаемой Солнцем в этих диапазонах, составляет менее 10^{-4} от полной энергии излучения. Поглощение в земной атмосфере выше ≈ 30 км энергии солнечного излучения во всем коротковолновом диапазоне ($\lambda \leq 3000$ Å) имеет сложный характер. Это обусловлено сильными вариациями сечений поглощения основных атмосферных составляющих (N_2 , 0_2 , 0, а также O_3) зависимости от длины волны, с чем связаны, в первую очередь, процессы фотолиза (диссоциация, ионизация), возбуждения и их различные комбинации. Процессам диссоциации и ионизации отвечают соответствующие континуумы поглощения, в то время как возбуждение молекул даёт в наблюдаемом спектре молекулярные полосы поглощения или атомные линии. Промежуточным случаям процессов пред диссоциации или ионизации соответствуют диффузные полосы или линии. Можно, таким образом, рассматривать сечение поглощения как сумму парциальных сечений различных процессов, причем от величины парциального сечения зависит относительное содержание образующихся при поглощении конечных или промежуточных продуктов. Следует отметить, что в тепловой баланс определенных областей атмосферы планеты (например, средней атмосферы Земли, атмосферы Марса, надоблачной атмосферы Венеры) существенный вклад, помимо коротковолнового солнечного излучения, вносит перенос длинноволнового излучения Солнца, планеты и припланетной атмосферы. Вклады радиации в тепловой баланс среды обычно рассматривают отдельно для коротковолнового и длинноволнового диапазонов длин волн¹.

В данной работе показано, как из системы обобщённых кинетических уравнений для многокомпонентных смесей многоатомных газов умеренной плотности, с учётом УФ излучения и химических реакций в интегралах столкновений и в предположении термического равновесия по поступательным степеням свободы, выводятся гидродинамические уравнения движения неравновесной газовой среды, определяющие уравнения (в том числе уравнение переноса радиационной энергии), выражения для вкладов неравновесных химических реакций и элементарных процессов взаимодействия частиц вещества с солнечным излучением в уравнения химической кинетики, а также общий вид функции нагревания верхней атмосферы, позволяющий корректно оценивать эффективность тепловыделения при взаимодействии излучения с веществом. При этом при расчетах функции нагревания атмосферы коротковолновым солнечным излучением будем пренебрегать функцией источника в уравнении переноса излучения, так как собственное излучение атмосферы в рентгеновском и ультрафиолетовом диапазонах слишком мало при характерных температурах в термосфере (~ 1000 К). Большинство фотонов в эмиссиях, возникающих вследствие диссоциации с возбуждением или ионизации, рождаются в ближнем ультрафиолете и, обладая большими длинами пробега, уходят из термосферы. Рассеянное же солнечное излучение также не учитываем, поскольку сечение рэлеевского рассеяния имеет порядок ~10⁻²⁴ см², а сечение поглощения ~ 10^{-17} см² в ионизационном континууме (40-1025,7 Å) и ~10⁻¹⁹ см² в континууме Шумана-Рунге (1300-1750 \dot{A}).

В качестве примера приведены функции нагревания атмосферы солнечным коротковолновым излучением и частицами, оказывающими наиболее существенное влияние на тепловой режим, динамику и эмиссионные свойства высокоширотных областей атмосферы.

¹) Проблеме нагревания атмосферы солнечным длинноволновым излучением будет посвящена следующая работа автора.

1. УРАВНЕНИЯ РАДИАЦИОННОЙ ГИДРОДИНАМИКИ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ВЕРХНЕЙ АТМОСФЕРЫ

Проходя сквозь газовую оболочку небесного тела (планеты, кометы), солнечное излучение взаимодействует с веществом, многократно поглощаясь, переизлучаясь и рассеиваясь. Перенос энергии фотонами вызывает следующие радиативные процессы: 1) фотовозбуждение, или связанносвязанное поглощение, при котором фотон поглощается атомом (или молекулой), что приводит к переходу электрона между его дискретными квантовыми состояниями, и обратный процесс девозбуждения атома с испусканием фотона в результате столкновения его с другой частицей; 2) фотоионизация, или связанно-свободное поглощение, при котором происходит отрыв связанного электрона атома (молекулы) с одного из дискретных уровней и его переход с конечной кинетической энергией в состояние континуума с непрерывным энергетическим спектром, а также обратный процесс захвата свободного электрона на связанный уровень с рождением фотона (радиативная рекомбинация); 3) свободно-свободное поглощение, при котором фотон поглощается свободным электроном, движущимся в поле иона, в результате чего изменяется его кинетическая энергия относительно иона, в поле которого он движется, и обратный процесс, приводящий к излучению фотона (тормозное излучение); 4) рассеяние фотонов, в том числе когерентное рэлеевское рассеяние (связанными системами атомов и молекул), неупругое комбинационное рассеяние связанными системами и комптоновское рассеяние (свободными электронами), при которых фотон не исчезает, а только изменяет направление движения и, возможно, слегка смещается по частоте. Эти процессы определяют перенос излучения в атмосферном газе и околопланетном пространстве.

Описание указанных физико-химических процессов в верхней атмосфере удобно проводить в рамках методов кинетической теории многоатомных газов, исходя из системы обобщённых уравнений Больцмана для одночастичных функций распределения $f_{\alpha s}(r, p_{\alpha}, s, t)$ для каждого сорта частиц вещества и фотонов. Для обозначения вещественных компонентов используем далее греческие буквы $\alpha, \beta, ... (=1,2,...,N)$, для обозначения фотона используем его частоту v; s = 0 соответствует основному энергетическому уровню молекулы.

Система уравнений Больцмана для частиц сорта α в квантовом энергетическом состоянии *s* имеет вид (Сэмпсон,1969; Маров, Колесниченко, 1987)

$$\frac{\partial \mathbf{f}_{\alpha s}}{\partial t} + \boldsymbol{c}_{\alpha} \cdot \nabla_{\boldsymbol{r}} \mathbf{f}_{\alpha s} + \boldsymbol{F}_{\alpha} \cdot \nabla_{\boldsymbol{p}_{\alpha}} \mathbf{f}_{\alpha s} = \delta \mathbf{f}_{\alpha s} / \delta t, \qquad (1)$$

$$\delta f_{\alpha s} / \delta t = h^{-3} \sum_{\beta,\beta',\alpha' \leq \beta'} \sum_{j,s',j'} \int \left\{ f_{\alpha's'} f_{\beta'j'} \left[1 \pm f_{\alpha s} \right] \left[1 \pm f_{\beta j} \right] - f_{\alpha s} f_{\beta j} \left[1 \pm f_{\alpha's'} \right] \left[1 \pm f_{\beta'j'} \right] \right\} v_{\alpha \beta} d\sigma(p_{\alpha}, s, p_{\beta}, j \rightarrow p_{\alpha'}, s', p_{\beta'}, j') dp_{\beta},$$

$$(\alpha = 1, 2, ...N; \quad s = 1, 2, ...),$$
(2)

где интегрирование производится по всем значениям импульсов $p_{\alpha'}, p_{\beta'}$ и p_{β} , совместным с условиями сохранения массы, импульса и энергии сталкивающихся частиц. Столкновительный член (2) представляет собой изменение функции распределения $f_{\alpha s}$ в единицу времени за счёт как упругих столкновений, меняющих только скорость c_{α} частиц, так и неупругих столкновений, которые ведут либо к изменению внутреннего состояния сталкивающихся частиц, либо к исчезновению или появлению частиц сорта α . Здесь h – постоянная Планка; $F_{\alpha} = F_{\alpha}(r, p_{\alpha}, t)$ – макроскопическая сила, действующая на частицу α -сорта (в случае излучения $F_{\nu} \cong 0$); $\nu_{\alpha\beta} = \left| c_{\alpha} - c_{\beta} \right|$ – модуль относительной скорости частиц α и β сортов; $f_{\alpha s} \equiv f_{\alpha s}(r, p_{\alpha}, s, t), f_{\alpha' s'} \equiv f_{\alpha' s'}(r, p_{\alpha'}, s', t)$, причём штрихованные и нештрихованные величины отмечают начальное и конечное состояния соответ-

ственно; здесь для упрощения обозначений принято $\sum_{\alpha' \le \beta'} \sum_{\beta'}^{p} \sum_{\alpha'=1}^{p}$, где

ограничение $\alpha' \leq \beta'$ при суммировании по сортам сделано для того, чтобы не учитывать одни и те же реакции дважды; $d\sigma(p_{\alpha}, s, p_{\beta}, j \rightarrow p_{\alpha'}, s', p_{\beta'}, j')$ – дифференциальное эффективное сечение бинарной реакции $\alpha(s) + \beta(j) \Leftrightarrow \alpha'(s') + \beta'(j')$ между частицами α и β сортов в состояниях s и j(заметим, что рассмотрение столкновений трёх и более частиц не изменило бы основных выводов данной статьи (Сэмпсон,1969), т.е. вероятность того, что в результате столкновения молекулы сорта α в состоянии s, имеющей импульс p_{α} , с молекулой сорта β в состоянии j и импульсом p_{β} образуются молекулы сортов α' и β' , импульсы и внутренние квантовые состояния которых будут, соответственно, ($p_{\alpha'}, s'$) и ($p_{\beta'}, j'$), причём значения импульсов $p_{\alpha'}$ и $p_{\beta'}$ ограничены условиями сохранения массы, импульса и энергии при столкновении:

$$\mathbf{M}_{\alpha} + \mathbf{M}_{\beta} = \mathbf{M}_{\alpha'} + \mathbf{M}_{\beta'}, \quad \boldsymbol{p}_{\alpha} + \boldsymbol{p}_{\beta} = \boldsymbol{p}_{\alpha'} + \boldsymbol{p}_{\beta'},$$

$$\frac{p_{\alpha}^2}{2M_{\alpha}} + \frac{p_{\beta}^2}{2M_{\beta}} = \frac{p_{\alpha'}^2}{2M_{\alpha'}} + \frac{p_{\beta'}^2}{2M_{\beta'}} + \Im, \quad \Im \equiv \delta \varepsilon_{\alpha'}(s') + \delta \varepsilon_{\beta'}(j') - \delta \varepsilon_{\alpha}(s) - \delta \varepsilon_{\beta}(j);$$

 \Im – разность энергий связи систем (α,β) и (α',β'), причём, если \Im – величина положительная, то она представляет пороговую энергию эндотермической реакции $\alpha(s)+\beta(j) \Rightarrow \alpha'(s')+\beta'(j')$. При написании столкновительного члена в виде (2) предполагается равенство $f_{\alpha s}(p_{\alpha},s) = f_{\alpha s}(p_{\alpha'}(-s))$ – справедливое, когда молекулы не обладают внутренним моментом импульса (спиновым, орбитальным, вращательным) и использовано соотношение взаимности

$$dp_{\alpha}dp_{\beta} v_{\alpha\beta} d\sigma(p_{\alpha}, s, p_{\beta}, j \rightarrow p_{\alpha'}, s', p_{\beta'}, j') =$$

$$= dp_{\alpha'} dp_{\beta'} v_{\alpha'\beta'} d\sigma(p_{\alpha'}, s', p_{\beta'}, j' \rightarrow p_{\alpha}, s, p_{\beta}, j).$$
(3)

Множители $\left[1\pm f_{\alpha s}\right]$ в выражении (2) для интеграла столкновений $\delta f_{\alpha s}/\delta t$ учитывают зависимость вероятности столкновения частиц от функций распределения, получающихся после столкновения (принцип запрета Паули); при этом знаки "+" и "-" относятся соответственно к частицам бозевского и фермиевского типов. Для учёта вкладов в интеграл столкновений (2) неупругих столкновений более общего типа (например, столкновений с участием более двух частиц, включая фотон в начальном состоянии, когда относительна скорость $v_{\alpha\beta}$ равна скорости света *c*) в выражении (2) следует считать, что некоторые или все символы β , α' и β' относятся к более чем одной частице. Рецепт для записи правой части уравнения Больцмана, явно выраженной через одночастичные функции распределения для каждого сорта частиц, для этого случая приведён, например, в работе (Сэмпсон, 1969).

Анализ происходящих в верхней атмосфере физико-химических процессов на основе прямого использования системы интегродифференциальных уравнений (1) весьма сложен. Вместе с тем, с точки зрения макроскопических свойств атмосферу можно рассматривать как континуальную среду и для её адекватного описания использовать уравнения многокомпонентной радиационной гидродинамики, к которым при ряде дополнительных допущений сводится система (1). Используя для этого функции распределения частиц вещества $f_{\alpha s}$ ($\alpha = 1, 2, ..., N$), опреде-

лим гидродинамические структурные параметры среды, а также термо-

динамические потоки, характеризующие перенос массы, импульса и энергии в газе, следующим образом:

$$n_{\alpha} = \sum_{s} n_{\alpha s}, \quad \rho = \sum_{\alpha} M_{\alpha} n_{\alpha}, \quad V = \rho^{-1} \sum_{\alpha} M_{\alpha} n_{\alpha} \langle c_{\alpha} \rangle, \quad u_{\alpha} = c_{\alpha} - V,$$

$$\varepsilon_{\alpha} = \langle \delta \varepsilon_{\alpha}(s) + M_{\alpha} u_{\alpha}^{2} / 2 \rangle, \quad w_{\alpha} = \langle u_{\alpha} \rangle, \quad \vec{P}_{\alpha} = M_{\alpha} n_{\alpha} \langle u_{\alpha} u_{\alpha} \rangle,$$

$$p = \frac{1}{3} \sum_{\alpha} \vec{P}_{\alpha} : \vec{I}, \quad \vec{\pi} = p\vec{I} - \sum_{\alpha} \vec{P}_{\alpha}, \quad \varepsilon = \rho^{-1} \sum_{\alpha} n_{\alpha} \varepsilon_{\alpha},$$

$$q = \sum_{\alpha} n_{\alpha} \langle u_{\alpha} [\delta \varepsilon_{\alpha}(s) + M_{\alpha} u_{\alpha}^{2} / 2] \rangle, \quad \langle \phi_{\alpha} \rangle \equiv (n_{\alpha})^{-1} h^{-3} \sum_{s} \int \phi_{\alpha} f_{\alpha s} dp_{\alpha}.$$

Здесь $n_{\alpha s}(\mathbf{r}, t) = h^{-3} \int f_{\alpha s} d\mathbf{p}_{\alpha}$ – число частиц сорта α , находящихся в состоянии s; M_{α} , $n_{\alpha}(\mathbf{r}, t)$, $\varepsilon_{\alpha}(\mathbf{r}, t)$ – соответственно масса молекулы, полное число частиц в единице объёма и средняя внутренняя энергия на одну частицу сорта α ; $w_{\alpha}(r, t)$ – скорость диффузии α -го компонента; $\ddot{P}_{\alpha}(r, t)$ – парциальный тензор давления вещества сорта α ; $\delta \varepsilon_{\alpha}(s)$ – внутренняя энергия молекулы α-го сорта для состояния *s*; p(r, t), $\rho(r, t)$, - соответственно давление, массовая плотность, полная $V(\mathbf{r},t), \ \varepsilon(\mathbf{r},t)$ среднемассовая скорость и средняя внутренняя энергия единицы массы газовой смеси; q(r, t), $\ddot{\pi}(r, t)$ – вектор полного потока тепла и тензор вязких напряжений газовой смеси; *І* – единичный тензор; (...) – символ усреднения по пространству импульсов; $dp_{_{V}} = p_{_{V}}^2 d|p_{_{V}}| d\Omega$ – элемент объёма в пространстве импульсов.

Используя функцию распределения фотонов $f_{vs}(r, p_v, s, t)$ (здесь $p_v = h v \Omega/c$, Ω – единичный вектор в направлении распространения фотонов) или полностью ей эквивалентную величину – спектральную интенсивность излучения

$$I_{v}(r, \Omega, t) = h^{-3} \sum_{s} c h v p_{v}^{2} \frac{h}{c} f_{v} = \frac{2hv^{3}}{c^{2}} f_{v}$$

(множитель 2 появляется здесь в результате суммирования по поляризациям фотона *s*), введём следующие макроскопические характеристики поля излучения:

$$u_{R}(\boldsymbol{r},t) \equiv n_{v} \langle \mathbf{h} \mathbf{v} \rangle = \frac{1}{c} \int_{\mathbf{v} \boldsymbol{\Omega}} I_{v} d\boldsymbol{\Omega} \, d\mathbf{v},$$

$$q_{R}(\mathbf{r},t) \equiv n_{v} \langle \mathbf{h} \mathbf{v} c \boldsymbol{\Omega} \rangle = \int_{\mathbf{v}} \int_{\boldsymbol{\Omega}} \boldsymbol{\Omega} I_{v} d\boldsymbol{\Omega} d\mathbf{v} = \int_{\mathbf{v}} q_{Rv} dv,$$

$$\vec{T}_{R}(\boldsymbol{r},t) \equiv n_{v} \langle \mathbf{h} \, \mathbf{v} \boldsymbol{\Omega} \, \boldsymbol{\Omega} \rangle = \frac{1}{c} \int_{v \, \boldsymbol{\Omega}} \boldsymbol{\Omega} \, \boldsymbol{\Omega} \, I_{v} d\boldsymbol{\Omega} \, dv.$$

Здесь u_R , q_R , \ddot{T}_R – объёмная полная плотность энергии излучения, вектор потока радиации (вектор Пойнтинга) и тензор радиационного давления соответственно.

Гидродинамические уравнения сохранения массы, импульса и энергии для системы «вещество плюс излучение» получаются из системы (1) обычным образом – путём умножения системы уравнений (1) на аддитивные инварианты: $h^{-3} \phi_{\alpha}^{(i)}$ (i = 1, 2, 3) (здесь: $\phi_{\alpha}^{(1)} = M_{\alpha}$, $\phi_{\alpha}^{(2)} = p_{\alpha}$, $\phi_{\nu}^{(1)} = M_{\nu} = 0$; $\phi_{\alpha}^{(3)} = \Delta \varepsilon_{\alpha}(s) \equiv \delta \varepsilon_{\alpha}(s) + \frac{p_{\alpha}^2}{2M_{\alpha}}$, $\phi_{\nu}^{(3)} = \Delta \varepsilon_{\nu} = h\nu$), интегрирова-

нием полученного выражения в пространстве импульсов и суммированием по индексам α и *s* (Ферцигер, Капер, 1976). В результате будем иметь:

ſ

$$\begin{cases} \rho \, d\rho^{-1} / \, dt = \nabla \cdot V, \\ \rho \, dV / dt = -c^{-2} \partial q_R \, / \, \partial t - \nabla p - \nabla \cdot (\vec{T}_R - \vec{\pi}) + \sum_{\alpha} n_\alpha \langle F_\alpha \rangle, \\ \rho \, d\varepsilon \, / dt = - \, \partial u_R / \partial t - \nabla \cdot (q_R + q) - p \nabla \cdot V + \vec{\pi} : \nabla V + \sum_{\alpha} n_\alpha \langle F_\alpha \rangle \cdot w_\alpha + \\ + V \cdot (\nabla \cdot \vec{T}_R) + c^{-2} V \cdot \partial q_R \, / \partial t, \end{cases}$$

$$\tag{4}$$

где $d(..)/dt \equiv \partial(..)/\partial t + V \cdot \nabla(..)$ – оператор «полной производной по времени». Кроме этого из системы (1) могут быть получены следующие уравнения сохранения для парциальных составляющих частиц $n_{\alpha s}$:

$$\rho d(n_{\alpha s} / \rho) / dt = -\nabla \cdot (n_{\alpha s} w_{\alpha}) + \dot{n}_{(\alpha s)}, \quad \dot{n}_{(\alpha s)} \equiv h^{-3} \int (\delta f_{\alpha s} / \delta t) dp_{\alpha}, \quad (5)$$

где $\dot{n}_{(\alpha s)}$ – скорость образования частиц сорта α в состоянии s в результате всех рассматриваемых в модели аэрономических реакций. В источниковом члене $\dot{n}_{(\alpha s)}$ учтены столкновения следующих видов: 1) $\alpha \neq \alpha'; \beta \neq \beta';$ индексы s, j, s', j' – любые; 2) $\alpha = \alpha'; \beta = \beta'; s \neq s';$ индексы j, j' – любые. В тех случаях, когда функции $f_{\alpha s}$ не зависят от некоторых внутренних состояний s, естественно использовать вместо соответствующих уравнений (5) уравнения кинетики для населённости $n_{\alpha k}$ *l*-го уровня (под уровнем понимается набор вырожденных и неразличимых квантовых состояний с одинаковой энергией), получающиеся из (5) суммированием по вырожденным состояниям s_l . В этом случае в выражениях для $\dot{n}_{(\alpha l)} (\equiv \sum_{s}^{(l)} \dot{n}_{\alpha s})$ будем считать, что сечения $d\sigma(..)$ уже просуммированы по конечным вырожденным состояниям (по соответствующим значениям индексов s', j') и усреднены по вырожденным начальным состояниям, т.е. по соответствующим s и j (Сэмпсон, 1969). Из системы кинетических уравнений (1) могут быть получены и другие макроскопические уравнения переноса, например полумакроскопическое уравнение энергии для электронов (уравнение для величины ε_e).

Пусть L и t_{zud} – характерный пространственный масштаб и характерное время макроскопических процессов в атмосфере. Тогда

$$c^{-2} \left| \partial \boldsymbol{q}_R / \partial t \right| / \left| \nabla \cdot \ddot{\boldsymbol{T}}_R \right| \propto L / ct_{zu\partial}, \quad \left| \partial u_R / \partial t \right| / \left| \nabla \cdot \boldsymbol{q}_R \right| \propto L / ct_{zu\partial}.$$

и в случае движения излучающего газа с нерелятивистскими скоростями имеем $L/ct_{zud} <<1$ (условие справедливое для всех атмосфер). Поэтому в уравнениях (4) можно пренебречь соответственно членами $c^{-2}q_R$ и u_R по сравнению с величинами, содержащими \ddot{T}_R и q_R ; кроме этого, пренебрежение слагаемыми $\partial u_R / \partial t$ и $c^{-2} \partial q_R / \partial t$ даёт возможность не учитывать временную производную $\partial f_v / \partial t$ в уравнениях (1). Заметим также, что в задачах аэрономии, как правило, $\ddot{T}_R <<\sum_{\alpha} \ddot{P}_{\alpha}$, $u_R <<\rho\varepsilon$; это позволяет па-

раметры излучения, такие как q_R , $\sigma_b^{a'b'}$ и т.п., вычислять в сопутствующей системе координат, в которой частица среды покоится; в этой системе координат, например, параметр $\sigma_b^{a'b'}(v)$ (см. (15)) не зависит от вектора Ω .

Отсутствие локального термодинамического равновесия в верхней атмосфере планеты, выражающееся, в частности, в отношении поступательных степеней свободы в различие кинетических температур

$$T_{\alpha} \equiv \frac{1}{3 k_{\rm B} n_{\alpha}} \int M_{\alpha} u_{\alpha}^2 f_{\alpha}(\mathbf{r}, \mathbf{p}_{\alpha}, t) d\mathbf{p}_{\alpha}$$

электронов, ионов и нейтральных частиц (Акасофу, Чепмен,1974), не позволяет в общем случае ограничиться при вычислении теплового баланса термосферы одним лишь суммарным энергетическим уравнением (4), записанным через общую кинетическую температуру $T = T_{\alpha}$ смеси. Учёт многотемпературности термосферной плазмы во многих случаях важен и может быть проведён, например, на основе трёх жидкостной гидродинамики (Акасофу, Чепмен,1974). Однако в данной работе мы, интересуясь главным образом определением радиационных и химических вкладов в перенос энергии, будем предполагать термическое равновесие по поступательным степеням свободы для всех компонентов смеси.

Вводя удельную энтальпию вещества $h = \varepsilon + p/\rho = \sum_{\alpha} h_{\alpha} n_{\alpha}/\rho$ в энерге-

тическое уравнение (4), запишем его, с учётом (5), в переменных *T* и *p* в следующем удобном для гео- и астрофизических приложений виде

$$\sum_{\alpha,s} n_{\alpha s} c_{P\alpha s} \frac{dT}{dt} - \frac{dp}{dt} = -\nabla \cdot \left(\boldsymbol{q} - \sum_{\alpha} n_{\alpha} h_{\alpha} \boldsymbol{w}_{\alpha} \right) + \boldsymbol{\pi} : \nabla \boldsymbol{V} - \nabla \cdot \boldsymbol{q}_{\mathrm{R}} - \nabla \boldsymbol{T} \cdot \sum_{\alpha,s} n_{\alpha s} c_{P\alpha s} \boldsymbol{w}_{\alpha} - \sum_{\alpha,s} \dot{n}_{(\alpha s)} h_{\alpha s} + \sum_{\alpha} n_{\alpha} \langle \boldsymbol{F}_{\alpha} \rangle \cdot \boldsymbol{w}_{\alpha} + Q_{d},$$
(6)

позволяющем, в частности, оценить влияние теплот аэрономических реакций на пространственное распределение кинетической температуры T. Здесь $h_{\alpha s}$, $c_{P\alpha s} \equiv \partial h_{\alpha s} / \partial T$ – соответственно энтальпия и теплоёмкость на одну частицу сорта α , находящуюся на *s*-м возбуждённом уровне; $h_{\alpha} = \sum_{s} h_{\alpha s} n_{\alpha s} / n_{\alpha}$ – энтальпия на одну частицу сорта α ; Q_d – возможные

локальные источники нагрева (Колесниченко, 2017).

Термодинамические функции и определяющие уравнения. Для того чтобы гидродинамические уравнения, описывающие процессы переноса в многокомпонентном газе верхней атмосферы, были замкнуты, необходимы расчетные соотношения для определения термодинамических величин (таких как ε_{α} , h_{α} , $c_{p\alpha}$, ε , h и т.п.) как функций основных параметров системы. Для полного решения этой задачи необходимо знание всех функций распределения f_{αs}. Если среда находится в состоянии локального термодинамического равновесия, то (Маров, Колесниченко, 1987)

$$f_{\alpha s} = f_{\alpha s}^{(0)}(T) = \left[\exp\left(\frac{\Delta \varepsilon_{\alpha} - \mu_{\alpha}}{k_{B}T}\right) \pm 1 \right]^{-1},$$

$$\mu_{\alpha} = k_{B} T n_{\alpha} - k_{B} T \ln\left[\left(2\pi M_{\alpha} k_{B} T\right)^{\frac{3}{2}} h^{-3} Z_{\alpha}^{\text{int}} \right],$$
(7)

где

$$\Delta \varepsilon_{\alpha} = \begin{cases} h \nu - \partial \lambda s & \text{фотонов,} \\ \\ \delta \varepsilon_{\alpha}(s) + M_{\alpha} u_{\alpha}^{2} / 2 - \partial \lambda s \, \text{частиц с ненулевой массой покоя,} \end{cases}$$

 μ_{α} – химический потенциал на одну частицу компоненты α в многокомпонентной смеси совершенных газов ($\mu_{\nu} = 0$); $k_{\rm B}$ – постоянная Больцмана; знак "+" используется в случае фермионов, а знак "–" для бозонов;

$$Z_{\alpha}^{\text{int}} \equiv \sum_{s} \exp\left[-\delta \varepsilon_{\alpha}(s) / k_{\text{B}} T\right] = \sum_{l} g_{\alpha l} \exp\left[-\delta \varepsilon_{\alpha}(l) / k_{\text{B}} T\right]$$

– статистическая сумма по внутренним степеням свободы для частиц сорта α ; $\varepsilon_{\alpha}(l)$ – энергия возбуждения l-го уровня молекулы сорта α (далее под уровнем понимается набор неразличимых – вырожденных квантовых состояний с одинаковой энергией); $g_{\alpha l}$ – кратность вырождения (статистический вес) уровня l, т.е. число состояний, которые имеют одинаковую энергию $\varepsilon_{\alpha}(l)$. Если состояние вырождено, то для населённости l-го уровня (плотности частиц, находящихся на уровне l) имеем формулу

$$n_{\alpha l} = \sum_{s}^{(l)} n_{\alpha s} = \frac{n_{\alpha} g_{\alpha l}}{Z_{\alpha}^{\text{int}}} \exp\left[-\delta \varepsilon_{\alpha}(l) / k_{\text{B}} T\right],$$

связывающую $n_{\alpha l}$ с полным числом частиц данного сорта n_{α} (здесь суммирование производится по вырожденным состояниям уровня l). Из этой формулы следует, в частности, используемое далее распределение Больцмана

$$\frac{n_{\alpha l}}{n_{\alpha s}} = \frac{g_{\alpha l}}{g_{\alpha s}} \exp\left\{-\frac{\delta\varepsilon_{\alpha}(l) - \delta\varepsilon_{\alpha}(s)}{k_{\rm B}T}\right\} = \frac{g_{\alpha l}}{g_{\alpha s}} \exp\left\{-\frac{h\,v_{sl}}{k_{\rm B}T}\right\},\tag{8}$$

дающее отношение плотности $n_{\alpha l}$ частиц данного типа, находящихся на верхнем уровне l, к их плотности $n_{\alpha s}$ на более низком уровне s (здесь $h v_{sl}$ – энергия фотона, равная разности этих уровней).

Для частиц с ненулевой массой покоя слагаемым ± 1 в выражении (7) часто можно пренебречь (Сэмпсон, 1969) (соответственно множитель $[1 \pm f_{\alpha s}]$ в (2) заменяется единицей, однако для общности множители $[1 \pm f_{\alpha s}]$ будем сохранять в некоторых случаях и для невырожденных абсорбентов). Тогда распределение (7) переходит в равновесное максвелл-больцмановское распределение классических частиц

$$f_{\alpha s}^{00}(\boldsymbol{p}_{\alpha}) = \frac{h^{3} n_{\alpha}}{\left(2\pi M_{\alpha} k_{B} T\right)^{3/2}} \frac{1}{Z_{\alpha}^{\text{int}}} \exp\left[-\frac{M_{\alpha} \boldsymbol{u}_{\alpha}^{2}}{2 k_{B} T} - \frac{\delta \varepsilon_{\alpha}(s)}{k_{B} T}\right].$$
(9)

Заметим, что в случае, когда для частиц данного сорта α слагаемым ± 1 в (7) пренебречь нельзя при всех значениях энергии, такие частицы называются вырожденными. Наиболее легко вырождаются среди всех частиц с ненулевой массой покоя электроны, так как их масса мала. Поскольку фотоны - суть бозе-частицы с нулевым химическим потенциалом ($\mu_v = 0$), то для них равновесное распределение имеет вид

$$f_{\nu}^{(0)}(T) = \left(\exp\frac{h\nu}{k_{\rm B}T} - 1\right)^{-1}.$$
 (7*)

Вычисленные с помощью равновесной функции распределения (8), термодинамические параметры для вещества, входящие в уравнения (5) и (6), имеют вид

$$\begin{split} \varepsilon_{\alpha}^{(0)} &= \frac{3}{2} \mathbf{k}_{\mathrm{B}} T + \varepsilon_{\alpha}^{\mathrm{int}}, \quad h_{\alpha}^{(0)} &= \frac{5}{2} \mathbf{k}_{\mathrm{B}} T + \varepsilon_{\alpha}^{\mathrm{int}}, \quad h_{\alpha s} &= \frac{5}{2} \mathbf{k}_{\mathrm{B}} T + \delta \varepsilon_{\alpha}(s), \quad c_{P\alpha} &= \frac{5}{2} \mathbf{k}_{\mathrm{B}}, \\ \varepsilon_{\alpha}^{\mathrm{int}} &= \mathbf{k}_{\mathrm{B}} T^{2} \frac{\partial \ln Z_{\alpha}^{\mathrm{int}}}{\partial T} = \frac{1}{Z_{\alpha}^{\mathrm{int}}} \sum_{s} \delta \varepsilon_{\alpha}(s) \exp\left[-\frac{\delta \varepsilon_{\alpha}(s)}{\delta T}\right], \\ p^{(0)} &= \mathbf{k}_{\mathrm{B}} Tn, \quad q^{(0)} = 0, \quad w_{\alpha}^{(0)} = 0, \quad \vec{\pi}^{(0)} = 0, \\ \dot{n}_{(\alpha)}^{(1)} &= \sum_{\beta,\beta' \leq \alpha' ss' jj'} \mathbf{h}^{-6} \int \left[\mathbf{f}_{\alpha's'}^{(00)} \mathbf{f}_{\beta'j'}^{(00)} - \right] \right] \end{split}$$

$$-f_{\alpha s}^{(00)}f_{\beta j}^{(00)} \bigg] v_{\alpha \beta} d\sigma(..) dp_{\alpha} dp_{\beta} = \sum_{\beta,\beta' \leq \alpha'} (\overset{\circ}{\mathcal{K}}_{\alpha'\beta'} n_{\alpha'} n_{\beta'} - \overset{\circ}{\mathcal{K}}_{\alpha\beta} n_{\alpha} n_{\beta}),$$

$$\overset{\alpha'\beta'}{\mathcal{K}}_{\alpha\beta} = \frac{\left(M_{\alpha}M_{\beta}\right)^{-3/2}}{\left(2\pi k_{B}T\right)^{3}Z_{\alpha}^{\text{int}}Z_{\beta}^{\text{int}}} \sum_{sjs''j'} \int \exp\left\{-\frac{1}{2k_{B}T}\left[M_{\alpha}u_{\alpha}^{2} + M_{\beta}u_{\beta}^{2} + 2\delta\epsilon_{\alpha}(s) + 2\delta\epsilon_{\beta}(j)\right]\right\} v_{\alpha\beta}d\sigma(...)dp_{\alpha}dp_{\beta}.$$

$$(10)$$

Здесь $\varepsilon_{\alpha}^{\text{int}}$ – средняя энергия частицы, связанная с внутренними степенями свободы; $n = \sum_{\alpha} n_{\alpha} = \sum_{\alpha,s} n_{\alpha s}$ – полная числовая плотность системы; $\dot{n}_{(\alpha)}^{(1)}$ – скорость образования (исчезновения) частиц сорта α в результате химических реакций (без участия фотонов) в случае, когда столкновения $\circ^{\alpha'\beta'} \circ^{\alpha\beta}$ не нарушают заметным образом распределения (9); $\mathcal{K}_{\alpha\beta}$, $\mathcal{K}_{\alpha'\beta'}$ – коэф-

фициенты скоростей прямых и обратных реакций, связанные с константой равновесия ${\mathcal K}$ соотношением

$$\frac{\partial \alpha^{\alpha}}{\partial \kappa_{\alpha'\beta'}} / \frac{\partial \alpha'\beta'}{\partial \kappa_{\alpha\beta}} = \mathcal{K} \equiv \frac{Z_{\alpha}^{\text{int}} Z_{\beta}^{\text{int}}}{Z_{\alpha'}^{\text{int}} Z_{\beta'}^{\text{int}}} \left(\frac{M_{\alpha} M_{\beta}}{M_{\alpha'} M_{\beta'}}\right)^{3/2},$$
(11)

не выполняющимся в неравновесном случае (Полак,1979). Гидродинамические уравнения (4) для величин (10) принимают форму Эйлера.

Определяющие соотношения. Для замыкания системы (4) в более общем случае, когда вещество находится в состоянии ЛТР, необходимы уравнения для величин q_R и $\dot{n}_{(\alpha s)}$, а также определяющие уравнения (линейные функции от градиентов макроскопических параметров), связывающие термодинамические потоки $\ddot{\pi}$, w_{α} , q с обобщёнными термодинамические потоки $\ddot{\pi}$, w_{α} , q с обобщёнными термодинамические потоки $\ddot{\pi}$, w_{α} , q с обобщёнными термодинамическими силами. Эти уравнения можно получить путём решения системы уравнений (1) (см. Ферцигер, Капер, 1976). Вопрос получения приближенного решения системы (1) с учетом внутренних степеней свободы частиц и излучения оказался весьма сложным. До настоящего времени получен лишь структурный вид соответствующих уравнений переноса, однако отсутствуют сколько-нибудь надёжные расчёты кинетических коэффициентов переноса из решения обобщённых уравнений Больцмана (1).

В связи с этим в гидродинамических задачах аэрономии до последнего времени используются уравнения переноса, выведенные без учёта взаимодействия вещества и излучения. Более того, в отношении кинетических коэффициентов переноса реагирующий газ часто рассматривается как нереагирующая смесь упругих молекул.

В рамках предположения, что вклад излучения в интегралы столкновений $\delta f_{\alpha s} / \delta t$ для частиц вещества мал, т.е. переносные свойства среды определяются только взаимодействием молекул между собой, с помощью модификации метода Чепмена–Энскога в работе (Маров, Колесниченко, 1987) получены следующие определяющие соотношения для химически активных многоатомных газовых смесей в высших приближениях кинетических коэффициентов переноса:

$$\begin{aligned} \ddot{\pi} &= -p'\vec{I} + \mu \bigg[\nabla V + (\nabla V)^{trasp} \bigg] - \left(\frac{2}{3}\mu - \mu_b\right) (\nabla \cdot V)\vec{I}, \\ q &= -\lambda \nabla T + \sum_{\alpha} h_{\alpha} n_{\alpha} w_{\alpha} + p \sum_{\alpha} k_{T\alpha} w_{\alpha}, \\ \sum_{\beta} \frac{n_{\alpha} n_{\beta} (w_{\beta} - w_{\alpha})}{n^2 \mathcal{D}_{\alpha\beta}^{(1)} g_{\alpha\beta}^N} - k_{T\alpha} \nabla \ln T = \nabla \bigg(\frac{n_{\alpha}}{n} \bigg) + \bigg(\frac{n_{\alpha}}{n} - \frac{n_{\alpha} M_{\alpha}}{\rho} \bigg) \nabla \ln p - \\ &- \frac{M_{\alpha} n_{\alpha}}{p \rho} \bigg(\frac{\rho}{M_{\alpha}} \langle F_{\alpha} \rangle - \sum_{\beta} n_{\beta} \langle F_{\beta} \rangle \bigg). \end{aligned}$$
(12)

Здесь p' – вклад в давление, возникающий из-за наличия химических реакций; $k_{T\alpha}$, $\mathcal{D}_{\alpha\beta}^{(1)}$, μ , μ_b , λ – коэффициенты переноса, выражающиеся известным образом через коэффициенты разложения функций возмущения равновесных функций распределения $f_{\alpha s}^{(00)}$ в ряды по полиномам Сонина в методе Чепмена-Энскога, $g_{\alpha\beta}^{N}$ – поправочный множитель к бинарным коэффициентам диффузии $\mathcal{D}_{\alpha\beta}^{(1)}$, зависящий от числа удерживаемых членов разложения функции $f_{\alpha s}$ в ряды.

Таким образом, разреженный газ внешних газовых оболочек планет и комет, расположенных в пограничных областях между атмосферой и космосом, во многих практически важных случаях моделирования может описываться макроскопическими методами многокомпонентной радиационной гидродинамики. Однако, с учётом специфики этих сред, необходима разработка подходов, позволяющих корректно учитывать вклад радиационных и химических источников нагрева, обусловленных прямым поглощением солнечной энергии и инициируемым им многоканальным комплексом аэрономических процессов. Отклонение от ЛТР обуславливается неравновесностью падающего солнечного излучения по отношению к кинетическим параметрам газа верхних атмосфер. Заселённости возбужденных квантовых энергетических уровней, как правило, небольцмановские, и химические реакции, инициируемые нетермическим путём, имеют, по крайней мере на начальном участке, неравновесную стадию.

2. УРАВНЕНИЕ ПЕРЕНОСА ИЗЛУЧЕНИЯ

Вклад радиации в тепловой баланс газовой среды, согласно энергетическому уравнению (6), имеет вид

$$Q_R = -\nabla \cdot \boldsymbol{q}_R = -\iint_{\boldsymbol{v} \boldsymbol{\Omega}} \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla I_{\boldsymbol{v}} \, d\boldsymbol{\Omega} \, d\boldsymbol{v}, \quad I_{\boldsymbol{v}}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{\Omega}, t) = \frac{2 \, \mathrm{h} \, \mathrm{v}^3}{c^2} \, \mathrm{f}_{\boldsymbol{v}}. \tag{13}$$

Для определения функции I_v будем использовать уравнение Больцмана (1) для фотонов без учёта рассеяния, предполагая при этом стационарность поля излучения. Это справедливо для задач атмосферной радиации, поскольку время релаксации излучения с веществом τ (величина по*τ* ≈ (*сп*σ)⁻¹, где свободного пробега фотона времени рядка $\sigma \approx 10^{-17} - 10^{-18} \,\mathrm{cm^2}$, $n \ge 10^8 \,\mathrm{cm^{-3}}$) в термосфере существенно меньше характерного времени макроскопических процессов переноса ($t_{zud} > 1 ce\kappa$). Заметим попутно, что, даже будучи учтёнными, томпсоновское и рэлеевское рассеяния не дают вклада в выражение (13) для дивергенции потока излучения (Сэмпсон, 1969): именно по этой причине в гидродинамических задачах аэрономии рассеянием можно пренебречь. Уравнение Больцмана (1), записанное для фотонов, в этом случае упрощается и принимает вид:

$$c\boldsymbol{\Omega}\cdot\nabla \mathbf{f}_{\mathbf{v}} = \sum_{\beta,j,j'} c \mathbf{h}^{-3} \int \left\{ \mathbf{f}_{\beta j'} \left[1 + \mathbf{f}_{\mathbf{v}} \right] \left[1 \pm \mathbf{f}_{\beta j} \right] - \mathbf{f}_{\mathbf{v}} \mathbf{f}_{\beta j} \left[1 \pm \mathbf{f}_{\beta j'} \right] \right\} d\sigma_{\beta}(\mathbf{v}, j \rightarrow j') dp_{\beta} + \sum_{b,a' \leq b'} c \mathbf{h}^{-3} \int \left\{ \mathbf{f}_{a'} \mathbf{f}_{b'} \left[1 + \mathbf{f}_{\mathbf{v}} \right] \left[1 \pm \mathbf{f}_{b} \right] - \mathbf{f}_{\mathbf{v}} \mathbf{f}_{\beta} \left[1 \pm \mathbf{f}_{a'} \right] \left[1 \pm \mathbf{f}_{b'} \right] \right\} \times d\sigma(p_{\mathbf{v}}, p_{\beta}, j \rightarrow p_{\alpha'}, s', p_{\beta'}, j') dp_{\beta}.$$

$$(14)$$

Первое слагаемое в правой части (14) соответствует радиативным процессам, связанным либо с переходами между дискретными уровнями энергии атома или молекулы (фотовозбуждение на расположенные выше уровни, $j \to j'$; спонтанные и вынужденные переходы $j' \to j$), либо, в случае свободно-свободного поглощения, с переходами пар ион-электрон из одного энергетического состояния в другое. Второе слагаемое отвечает переходам, при которых одно из состояний принадлежит непрерывному энергетическому спектру, а другое – дискретному (фотодиссоциация с возбуждением, фотоионизация, спонтанные и вынужденные фоторекомбинации и т.п.). Индекс b (b'...) заменяет собой набор индексов $\beta, j, (\beta', j'...); \beta, \alpha, \beta', \alpha' \in [1, N].$ При написании выражения (14) предполагалось, что сечения поглощения и испускания усреднены и просуммированы соответственно по двум вырожденным состояниям поляризации фотона, т.е. зависимостью сечений реакций от поляризации фотона пренебрегалось; считалось также, что можно пренебречь зависимостью сечения импульса, справедливо тождество $d\sigma(p_{v}, p_{\beta}, j \rightarrow p_{\beta'}, j') \equiv$ ОТ т.е. $d\sigma_{\beta}(v, j \rightarrow j')$, поскольку при переходах с одного связанного уровня энергии на другой, импульс частицы, вообще говоря, не существенен (Сэмпсон, 1969). В этом случае уравнение (14) преобразуется к виду

$$c\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla f_{v} = \sum_{\beta,j,j'} ch^{-3} \int f_{\beta j} \left(1 \pm f_{\beta' j'}\right) \times \\ \times \left[1 - \frac{f_{\beta' j'} \left(1 \pm f_{\beta j}\right)}{f_{\beta j} \left(1 \pm f_{\beta' j'}\right)}\right] \left\{ \left[\frac{f_{\beta j} \left(1 \pm f_{\beta' j'}\right)}{f_{\beta' j'} \left(1 \pm f_{\beta j}\right)} - 1\right]^{-1} - f_{v}\right\} d\sigma_{\beta} (..) dp_{\beta} + \\ + \sum_{b,a' \le b'} ch^{-3} \int f_{b} \left(1 \pm f_{a'}\right) \left(1 \pm f_{b'}\right) \left[1 - \frac{\left(1 \pm f_{b}\right) f_{a'} f_{b'}}{\left(1 \pm f_{a'}\right) \left(1 \pm f_{b'}\right) f_{b}}\right] \times \\ \times \left\{ \left[\frac{\left(1 \pm f_{a'}\right) \left(1 \pm f_{b'}\right) f_{b}}{\left(1 \pm f_{b'}\right) f_{b'}} - 1\right]^{-1} - f_{v}\right\} d\sigma(..) dp_{\beta} = \\ = c \sum_{b,a' \le b'} n_{b} \sigma_{b}^{b'a'} (v) \left[f_{v}^{0} \left(T_{b'}^{b'a'}\right) - f_{v}\right] + c \sum_{\beta,j,j'} n_{\beta j} \sigma_{\beta j}^{\beta j'} (v) \left[f_{v}^{0} \left(T_{\beta j}^{\beta j'}\right) - f_{v}\right].$$
(15)

Здесь введены следующие обозначения:

$$\sigma_{\beta j}^{\beta j'}(\mathbf{v}) \equiv K_{\beta j}^{\beta j'}(\mathbf{v}) \left[1 - \exp\left(-\frac{\mathbf{h}\,\mathbf{v}}{\mathbf{k}_{\mathrm{B}}T_{\beta j}^{\beta j'}}\right) \right], \qquad (16)$$

$$K_{\beta j}^{\beta j'}(\mathbf{v}) \equiv \frac{1}{\mathbf{h}^{3}n_{\beta j}} \int \mathbf{f}_{\beta j} \left(1 \pm \mathbf{f}_{\beta' j'}\right) d\sigma_{\beta}(...) dp_{\beta}, \qquad (16)$$

$$\sigma_{b}^{b' a'}(\mathbf{v}) \equiv K_{b}^{b' a'}(\mathbf{v}) \left[1 - \exp\left(-\frac{\mathbf{h}\,\mathbf{v}}{\mathbf{k}_{\mathrm{B}}T_{b}^{b' a'}}\right) \right], \qquad (17)$$

$$K_{b}^{b' a'}(\mathbf{v}) \equiv \frac{1}{\mathbf{h}^{3}n_{b}} \int \mathbf{f}_{b} \left(1 \pm \mathbf{f}_{a'}\right) \left(1 \pm \mathbf{f}_{b'}\right) d\sigma(...) dp_{\beta}, \qquad (17)$$

где $K_{\beta j}^{\beta j'}(v), K_b^{b'a'}(v)$ – эффективные сечения поглощения фотона частоты v(в расчёте на одну частицу сорта β , находящуюся на уровне j) при переходах $\beta, j \rightarrow \beta, j'$ (в линии) и $b \rightarrow b', a'$ (в непрерывном спектре) соответственно (Бонд и др., 1968). Эти сечения определены здесь с учётом возможной вырожденности абсорбентов (например, электронов), при которой величины в скобках (16) и (17) не совпадают с единицей. В сечения поглощения в линиях $\sigma_{\beta j}^{\beta j'}(v)$ и в сечения фотодиссоциации $\sigma_b^{b'a'}(v)$ включены множители, связанные с индуцированным испусканием излучения; $T_b^{b'a'}$ – так называемая внутренняя температура, характеризующая распределение энергии по внутренним состояниям связанной системы и определяемая равенством (см. (7))

$$(1 \pm \mathbf{f}_{b}) \mathbf{f}_{a'} \mathbf{f}_{b'} / \mathbf{f}_{b} (1 \pm \mathbf{f}_{a'}) (1 \pm \mathbf{f}_{b'}) =$$
$$= \exp\left[-\left(\Delta \varepsilon_{a'} + \Delta \varepsilon_{b'} - \Delta \varepsilon_{b}\right)\right] / \mathbf{k}_{B} T_{b}^{b'a'} = \exp\left(-\mathbf{h} \mathbf{v} / \mathbf{k}_{B} T_{b}^{b'a'}\right),$$

где окончательный вид правой части записан с учетом закона сохранения энергии $\Delta \varepsilon_b + h \nu = \Delta \varepsilon_{b'} + \Delta \varepsilon_{a'}$ и условия химического равновесия $\mu_b + \mu_\nu = \mu_{b'} + \mu_{a'}$ (при температуре $T_b^{b'a'}$) для фотопроцесса $\beta(j) + h \nu \rightarrow \beta'(j') + \alpha'(s'); f_{\nu}^{(0)}(T_b^{b'a'}) - функция распределения для фотонов$ $(7*), соответствующая термическому равновесию при температуре <math>T_b^{b'a'};$ функция $f_{\nu}^{(0)}(T_{\beta j}^{\beta j'})$ и температура возбуждения *j*'-го уровня относительно j-го ($T_{\beta j}^{\beta j'}$) определяются аналогично. Из соотношений (7) следует, что в случае термического равновесия все внутренние температуры равны между собой и совпадают с кинетической температурой газа T. Однако в общем неравновесном случае разности типа ($T_b^{b'a'}-T$) при температурном описании состояния газа могут служить мерой отклонения отдельных равновесных поглощающих подсистем от термодинамического равновесия, а для определения параметров $T_{\beta j}^{\beta j'}$ ($T_b^{b'a'}$) (или соответствующих чиспользовать уравнения физической кинетики (5) для источниковых членов $\dot{n}_{\beta j}$.

Таким образом, уравнение Больцмана (15) для фотонного газа, записанное относительно спектральной интенсивности $I_v(r, \Omega, t)$, принимает вид уравнения переноса излучения (без учёта рассеяния)

$$\Omega \cdot \nabla I_{\nu} = \rho \kappa_{\nu a} (S_{\nu} - I_{\nu}),$$

$$\kappa_{\nu a} \equiv \rho^{-1} \Biggl[\sum_{\beta, j, j'} n_{\beta j} \sigma_{\beta j}^{\beta j'}(\nu) + \sum_{b, a' \le b'} n_b \sigma_b^{b' a'}(\nu) \Biggr],$$

$$S_{\nu} \equiv \left(\rho \kappa_{\nu a}\right)^{-1} \Biggl[\sum_{\beta, j, j'} n_{\beta j} \sigma_{\beta j}^{\beta j'}(\nu) B_{\nu}(T_{\beta j}^{\beta j'}) + \sum_{b, a' \le b'} n_b \sigma_b^{b' a'}(\nu) B_{\nu}(T_b^{b' a'}) \Biggr].$$
(18)

Здесь к_{va} – массовый коэффициент поглощения (излучения) газовой смесью; *S*_v – истинная функция внутренних источников излучения;

$$B_{\nu}(\tilde{T}) = \frac{2h\nu^3}{c^2} f_{\nu}^{(0)}(\tilde{T}) = \frac{2h\nu^3}{c^2} \left[\exp\frac{h\nu}{k_{\rm B}\tilde{T}} - 1 \right]^{-1}$$

– распределение интенсивности Планка при некоторой температуре \tilde{T} (распределение по частотам поля излучения при термодинамическом равновесии). В случае локального термодинамического равновесия при температуре T индексы у величин $T_b^{b'a'}$ и $T_{\beta j}^{\beta j'}$ в соотношениях (18) могут быть опущены. В этом случае для истинной функции внутренних источников излучения будем иметь $S_v = B_v(T)$.

В случае термодинамического равновесия удобна другая форма записи для истинного коэффициента поглощения излучения веществом к_{va} и функции источников излучения S_v. Используя распределение Больцмана

(8) $\frac{n_{\beta j'}}{n_{\beta j}} = \frac{g_{\beta j'}}{g_{\beta j}} \exp\left[-hv_{j,j'}/k_BT\right]$ при температуре *T* для населённостей двух любых возбуждённых уровней *j* и *j'* частиц сорта β ($hv_{j,j'}$ – энергия возбуждения *j'*-го уровня; $g_{\beta j}$ и $g_{\beta j'}$ – статистические веса, приписываемые соответственно уровням *j* и *j'* для учёта числа вырожденных состояний), а также закон действующих масс для перехода $b \rightarrow b'a'$ при температуре *T*, взятый в виде

$$\frac{n_{b'}n_{a'}}{n_b} = \frac{g_{b'}g_{a'}}{g_b} \left(\frac{M_{b'}M_{a'}}{M_b}\right)^{3/2} \left(\frac{2\pi k_B T}{h^2}\right)^{3/2} \exp\left[-\frac{h\nu_{b\to b'a'}}{k_B T}\right]$$

(h $v_{b\to b'a'}$ – энергия перехода $b\to b'a'$; $g_{a'}$, $g_{b'}$ и g_b – кратности вырождения состояний a',b' и b), можно получить следующие выражения для величин κ_{va} и S_v :

$$\rho \kappa_{va} \equiv \sum_{\beta, j, j'} K_{\beta j}^{\beta j'}(v) \left[n_{\beta j} - \frac{g_{\beta j}}{g_{\beta j'}} n_{\beta j'} \right] + \sum_{b, a' \leq b'} K_{b}^{b'a'}(v) \left[n_{b} - \frac{n_{b'}n_{a'}g_{b}}{g_{a'}g_{b'}} \frac{h^{3}}{(2\pi k_{B}T)^{3/2}} \left(\frac{M_{b}}{M_{b'}M_{a'}} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{h(v - v_{b \to b'a'})}{k_{B}T} \right) \right],$$

$$S_{v} \equiv (\rho \kappa_{va})^{-1} \left\{ \sum_{\beta, j, j'} \frac{2h v_{j, j'}^{3}}{c^{2}} \frac{g_{\beta j}}{g_{\beta j'}} K_{\beta j}^{\beta j'}(v) n_{\beta j'} + \frac{2h v^{3}}{c^{2}} \sum_{b, a' \leq b'} K_{b}^{b'a'}(v) \frac{n_{b'}n_{a'}g_{b}}{g_{a'}g_{b'}} \frac{h^{3}}{(2\pi k_{B}T)^{3/2}} \left(\frac{M_{b'}M_{a'}}{M_{b}} \right)^{-3/2} \exp\left(-\frac{h(v - v_{b \to b'a'})}{k_{B}T} \right) \right\}.$$

Таким образом, поле излучения зависит от населенностей уровней всех частиц газовой смеси через коэффициенты поглощения κ_{va} и излучения $\kappa_{va}S_v$, влияющие на прохождение излучения через атмосферу. Поэтому в общем случае требуется полностью самосогласованное решение

уравнений переноса излучения и уравнений физической кинетики для населенностей энергетических уровней частиц вещества. Уравнения физической кинетики должны описывать все возможные процессы (как радиативные, так и ударные), ведущие к изменению со временем плотности числа частиц любой химической составляющей β, находящихся в произвольном (связанном или свободном) состоянии *j*.

При постановке физически самосогласованных задач планетной аэрономии в приближении многокомпонентной радиационной гидродинамики возникает, как одна из важнейших, проблема точного учёта вкладов взаимодействия вещества и излучения в макроскопические уравнения переноса. Получим теперь выражения, позволяющие учесть эндотермию и экзотермию химических реакций (включая процессы фотолиза) в структуре уравнений и тем самым определим общий вид функции нагревания верхней атмосферы.

3. ВКЛАДЫ ИЗЛУЧЕНИЯ В ГИДРОДИНАМИЧЕСКИЕ УРАВНЕНИЯ

Проинтегрировав стационарное уравнение (18) по всему спектру частот и по телесному углу Ω , можно получить следующее общее выражение для вклада радиации в тепловой баланс среды:

$$Q_R \equiv \mathcal{A} - \mathcal{R} = \iint_{\nu \Omega} \rho \kappa_{\nu} I_{\nu} d\nu d\Omega - 4\pi \int_{\nu} \rho \kappa_{\nu} S_{\nu} d\nu, \qquad (19)$$

где первый член \mathcal{A} соответствует поглощаемой (минус энергия индуцированного излучения), а второй член \mathcal{R} – спонтанно излучаемой радиационной энергии в единице объема в единицу времени. Соотношение (19) преобразуем к другому виду, удобному, в частности, при анализе влияния коротковолнового излучения Солнца на энергетический баланс верхней атмосферы. С учетом формул (18) для величин κ_{va} , S_v , $f_v^{(0)}(\tilde{T})$, а также соотношений (16) и (17) для эффективных сечений $\sigma_{\beta j}^{\beta j'}(v)$ и $\sigma_b^{b'a'}(v)$, количество излучаемой радиационной энергии \mathcal{R} может быть записано в виде

$$\mathcal{R} = \mathcal{R}_{1} + \mathcal{R}_{2} = \frac{8\pi h}{c^{2}} \sum_{\beta,j,j'} n_{\beta j} \int_{\nu} K_{\beta j}^{\beta j'}(\nu) \exp\left(-h\nu/k_{B}T_{\beta j}^{\beta j'}\right) \nu^{3} d\nu + \frac{8\pi h}{c^{2}} \sum_{b,a' \leq b'} n_{b} \int_{\nu} K_{b}^{b'a'}(\nu) \exp\left(-h\nu/k_{B}T_{b}^{b'a'}\right) \nu^{3} d\nu.$$

$$(20)$$

Применяя к выражению (16) соотношение взаимности (3), можно показать, что сечения поглощения и испускания в газе $K_{\beta j}^{\beta j'}(v)$ и $K_{\beta j'}^{\beta j}(v)$ связаны соотношением $K_{\beta j}^{\beta j'}(v)g_{\beta j} = K_{\beta j'}^{\beta j}(v)g_{\beta j'}$, где $g_{\beta j}$ и $g_{\beta j'}$ – кратности вырождения уровней ј и j' (здесь мы предполагаем, что состояния j и j'вырождены). Учитывая это, а также распределение Больцмана $n_{\beta j'}g_{\beta j} = n_{\beta j}g_{\beta j'}\exp\left(-hv/k_{\rm B}T_{\beta j'}^{\beta j}\right)$ для населённостей $n_{\beta j}$ и $n_{\beta j'}$ возбуждённых уровней j и j', получим для величины \mathcal{R}_1 следующее выражение:

$$\mathcal{R}_{1} \equiv \frac{8\pi h}{c^{2}} \sum_{\beta,j,j'} n_{\beta j'} \int_{\nu} K^{\beta j}_{\beta j'}(\nu) \nu^{3} d\nu \cong$$

$$\cong \frac{8\pi^{2}e^{2} h}{M_{e}c^{3}} \sum_{\beta,j,j'} n_{\beta j'} \frac{g_{\beta j}}{g_{\beta j'}} f_{\beta j,j'} \nu^{3}_{\beta(j,j')} = \sum_{\beta,j,j'} n_{\beta j'} h \nu_{\beta}(j,j') A_{\beta j',j}.$$
(21)

Две последние формулы для величины \mathcal{R}_1 записаны через силу осциллятора $f_{\beta j,j'}$ для поглощения при переходе $j \rightarrow j'$ и коэффициент Эйнштейна $A_{\beta j',j}$ для спонтанного излучения (атомные коэффициенты $A_{\beta j',j}$, характеризующие вероятности спонтанного перехода $j' \rightarrow j$ имеют порядок 10⁸, 10 и 1 с⁻¹ для электронных, колебательных и вращательных переходов соответственно) с учетом следующих известных соотношений (Гуди, 1966; Бонд и др., 1968)

$$K_{\beta j'}^{\beta j}(\nu) = \frac{\pi e^2}{cM_e} \Big| \mathbf{f}_{\beta j,j'} \Big| P_{\beta j,j'}(\nu), \quad A_{\beta j',j} = \frac{8\pi^2 e^2 \nu_{\beta (j,j')}^2 \Big| \mathbf{f}_{\beta j,j'} \Big| g_{\beta j}}{c^3 M_e g_{\beta j'}}.$$
 (22)

Здесь $v_{\beta(j,j')}$ – средняя частота фотона, испускаемого в радиативном переходе с уровня j' на уровень j; $f_{\beta j,j'}$ – сила осциллятора для поглощения при переходах $j \rightarrow j'$, являющаяся безразмерной величиной (атомная константа), лежащей в интервале от нуля до единицы ($f_{\beta j,j'} = -f_{\beta j',j} g_{\beta j'} / g_{\beta j}$); $P_{\beta j,j'}(v)$ – функция формы линии поглощения, описывающая распределение поглощения внутри линии (она характеризуется острым максимумом при $v = v_{\beta(j,j')}$ и нормирована так, что $\int_{0}^{\infty} P_{\beta j,j'}(v) dv = 1$ (интегрирование проводится по всем частотам данной линии)).

Выражение для \mathcal{R}_2 может быть преобразовано с учётом соотношений взаимности (3), определения сечения фотодиссоциации (17) и формулы для дифференциала импульса $dp_v = h^3 v^2 c^{-3} d\Omega dv$ (в сферических координатах) следующим образом

$$\mathcal{R}_{2} = 2 \operatorname{h} c \sum_{b,a' \leq b'} \operatorname{h}^{-6} \operatorname{v}_{(a'b' \rightarrow b)} \int f_{b} (1 \pm f_{a'}) (1 \pm f_{b'}) \times \\ \times \exp\left(-\frac{\operatorname{h} \operatorname{v}}{\operatorname{k}_{B} T_{b}^{b'a'}}\right) d\sigma(p_{v}, p_{\beta}, j \rightarrow p_{\alpha'}, s', p_{\beta'}, j') dp_{v} dp_{\beta} = \\ = \operatorname{h} \sum_{b,a' \leq b'} \operatorname{v}_{(a'b' \rightarrow b)} \operatorname{h}^{-6} \int f_{a'} f_{b'} (1 \pm f_{b}) \operatorname{v}_{\alpha'\beta'} \times \\ \times d\sigma(p_{\alpha'}, s', p_{\beta'}, j' \rightarrow p_{v'}, p_{\beta'}, j) dp_{\alpha'} dp_{\beta'} = \sum_{b,a' \leq b'} \operatorname{h} \operatorname{v}_{(a'b' \rightarrow b)} n_{a'} n_{b'} A_{a'b', b}.$$
(23)

Здесь $hv_{(a'b'\to b)} = \Delta \varepsilon_{\beta'}(j') + \Delta \varepsilon_{\alpha'}(s') - \Delta \varepsilon_{\beta}(j)$ – пороговая энергия (энергия диссоциации или потенциал ионизации) реакции $\beta(j) + hv \rightarrow \alpha'(s') + \beta'(j');$ $A_{a'b',b}$ – константа скорости для процесса спонтанной фоторекомбинации $\alpha'(s') + \beta'(j') \rightarrow \beta(j) + hv$, определяемая соотношением

$$A_{a'b',b} \equiv n_{a'}^{-1} n_{b'}^{-1} \operatorname{h}^{-6} \int \operatorname{f}_{a'} \operatorname{f}_{b'} \left(1 \pm \operatorname{f}_{b} \right) \nu_{\alpha'\beta'} d\sigma \left(\boldsymbol{p}_{\alpha'}, s', \boldsymbol{p}_{\beta'}, j' \to \boldsymbol{p}_{\nu}, \boldsymbol{p}_{\beta}, j \right) d\boldsymbol{p}_{\alpha'} d\boldsymbol{p}_{\beta'}.$$
(24)

Комбинируя выражения (18), (19), (21) и (23), легко получить для вклада излучения Q_R в уравнение переноса энергии (4) следующее окончательное выражение:

$$Q_{R} = \int_{\nu} \left[\sum_{\beta,j,j'} n_{\beta j} \sigma_{\beta j}^{\beta j'}(\nu) + \sum_{b,a' \le b'} n_{b} \sigma_{b}^{b'a'}(\nu) \right] \Phi_{\nu} d\nu - \sum_{b,a' \le b'} h_{\nu} v_{(a'b' \rightarrow b)} n_{a'} n_{b'} A_{a'b',b} - \sum_{\beta,j,j'} h_{\nu} v_{\beta}(j,j') n_{\beta j'} A_{\beta j',j}.$$

$$(25)$$

Здесь $h v \Phi_v \equiv \int_{\Omega} I_v d\Omega$ – спектральная интенсивность излучения, проинтегрированная по всему телесному углу Ω . Поскольку величина Φ_v зависит в общем случае от испускания и поглощения излучения в среде, то при вычислении Q_R по формуле (25) нужно учитывать перенос радиации. Для этого необходимо решать уравнения переноса излучения (18), что связано, как известно, с большими трудностями (за исключением, правда, приближений оптически тонкого или оптически толстого слоёв, часто используемых в атмосферных расчётах (Гуди, 1966; Бонд и др., 1968). В случае переноса коротковолновой радиации упрощение может быть достигнуто за счёт пренебрежения собственным излучением атмосферы.

В качестве примера выпишем здесь общее выражение для величины поглощения солнечной (УФ и рентгеновской) радиации стратифицированной атмосферой планеты. Пусть направление на Солнце определяется вектором Ω_{\odot} . Тогда спектральный поток солнечной радиации может быть записан в виде

$$\boldsymbol{q}_{v_{\odot}} = \int_{\Delta \boldsymbol{\Omega}_{\odot}} \boldsymbol{\Omega} \boldsymbol{I}_{v} d \boldsymbol{\Omega} \cong \boldsymbol{\Omega}_{\odot} \int_{\Delta \boldsymbol{\Omega}_{\odot}} \boldsymbol{I}_{v} d \boldsymbol{\Omega} = \boldsymbol{\Omega}_{\odot} h v \Phi_{v_{\odot}},$$

где $\Omega_{\odot} \Phi_{v_{\odot}}$ – спектральный поток солнечных фотонов (инсоляция), проходящих в единицу времени через единичную площадку с нормалью Ω_{\odot} . Для собственного УФ излучения верхняя атмосфера почти всегда прозрачна. Большинство фотонов в эмиссиях, возникающих вследствие диссоциации с возбуждением или ионизации, рождаются в мягком УФ (Акасофу, Чепмен,1974) и, обладая большими длинами пробега, уходят из термосферы. Поэтому можно пренебречь функцией источника S_v в уравнении переноса излучения (18); тогда для $\Phi_{v_{\odot}}$ будем иметь

$$\Phi_{v_{\odot}}(s) = \Phi_{v_{\infty}} \exp\left[-\int_{s}^{\infty} \rho \kappa_{v} ds\right] = \Phi_{v_{\infty}} \exp\left[-\int_{z}^{\infty} \rho \kappa_{v} \sec\theta dz\right], \quad (26)$$

где *s* - координата вдоль луча направления Ω_{\odot} ; $\Phi_{v\infty}$ – величина инсоляции на верхней границе атмосферы (экспериментально определяемая величина). Вторая форма записи в соотношении (26) справедлива для плоской модели атмосферы, когда $ds = \sec \theta \, dz$ (θ – зенитный угол Солнца; z – высота). Учёт кривизны атмосферных слоёв приводит к тому, что в (26) вместо $\sec \theta$ появляется функция Чепмена $Ch(\theta, z)$ (Маров, Колесниченко, 1987) (при $\theta < 80^{0}$, $Ch(\theta, z) \approx \sec \theta$). На основании (19) и (26) имеем соотношение

$$\mathcal{A}_{\odot} = \int_{v} hv \left[\sum_{\beta, j, j'} n_{\beta j} \sigma_{\beta j}^{\beta j'}(v) + \sum_{b, a' \le b'} n_{b} \sigma_{b}^{b' a'}(v) \right] \Phi_{v\infty} \exp\left[-\int_{z}^{\infty} \rho \kappa_{v} Ch(\theta, z) dz \right] dv, \quad (27)$$

являющееся основным при учете поглощения солнечной радиации в тепловом балансе верхней атмосферы.

4. СКОРОСТИ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ПРОЦЕССОВ

Как отмечалось выше, энергетические степени свободы частиц термосферы возбуждаются в основном под действием УФ и рентгеновских солнечных фотонов или выбитых ими фотоэлектронов. Населённости возбуждённых квантовых энергетических уровней при этом, как правило, небольцмановские, химические реакции, инициируемые нетермическим путем, имеют, по крайней мере на начальном участке, неравновесную стадию. Отклонение от ЛТР в термосфере планеты обуславливается, в конечном счёте, неравновесностью падающего солнечного излучения по отношению к кинетическим параметрам атмосферного газа. Наиболее полное описание аэрономических реакций в верхней атмосфере возможно только в рамках неравновесной химической кинетики.

Сложность и многочисленность химических и фотохимических реакций, происходящих в верхней атмосфере, обусловлена присутствием основных атмофильных элементов, входящих в состав исходных газов, и наличием агентов ионизации (диссоциации) в виде энергичных фотонов излучения и фотоэлектронов (продуктов фотолиза). Их поглощение приводит к диссоциации, ионизации, и/или возбуждению вращательных и колебательных уровней, причем каждая из этих реакций может протекать как в прямом, так и в обратном направлении. Считая условно одни и те же частицы, находящиеся на разных уровнях возбуждения внутренних степеней свободы, различными компонентами газовой смеси, любую аэрономическую реакцию символически можно записать следующим образом:

$$\begin{aligned} & \mathcal{K}'_{\rho} \\ \eta'_{1\rho} \begin{bmatrix} 1 \end{bmatrix} + \eta'_{2\rho} \begin{bmatrix} 2 \end{bmatrix} + ... \Leftrightarrow \eta''_{1\rho} \begin{bmatrix} 1 \end{bmatrix} + \eta''_{2\rho} \begin{bmatrix} 2 \end{bmatrix} + ... \quad (\rho = 1, 2, ..., r), \qquad (28) \\ & \mathcal{K}''_{\rho} \end{aligned}$$

где $\eta'_{b\rho}$, $\eta''_{b\rho}$ – стехиометрические коэффициенты компоненты b по отношению к ρ -ой химической реакции; [b] – символ для обозначения частиц сортов b(b соответствует совокупности индексов α и j); r – число реакций. Естественно, что при последовательном учёте всех уровней возбуждения число компонент может возрастать до бесконечности. Однако при решении модельных аэрономических задач всегда приходится ограничиваться конкретным комплексом реакций, ответственных за приток и отток тепла в атмосфере на разных высотах; при этом степень приближения пространственного распределения структурных параметров (n_{α} , T, ρ ,...) к реальному их распределению определяется корректностью сделанного выбора.

Важнейшей задачей при моделировании химически активного газа является определение скорости ξ_{ρ} , с которой протекает каждая реакция в единице объема смеси. Если обозначить через \mathcal{K}_{ρ}' и \mathcal{K}_{ρ}'' постоянные скоростей прямой и обратной реакций соответственно, то общая скорость образования частиц сорта *b* в результате всех реакций (28) задаётся следующим образом

$$\dot{n}_{b} = \sum_{\rho=1}^{\prime} \left(\eta_{b\rho}^{\prime} - \eta_{b\rho}^{\prime\prime} \right) \xi_{\rho}, \quad \xi_{\rho} = \mathcal{K}_{\rho}^{\prime} \prod_{b} n_{b}^{\eta_{b\rho}^{\prime}} - \mathcal{K}_{\rho}^{\prime\prime} \prod_{b} n_{b}^{\eta_{b\rho}^{\prime\prime}}.$$
(29)

Получим, исходя из уравнений Больцмана (1), конкретный вид источниковых членов $\dot{n}_{\beta j} = h^{-3} \int (\delta f_{\beta j} / \delta t) dp_{\beta}$ в уравнениях баланса (5) для населённости энергетических состояний реагирующих частиц, обусловленных неравновесными химическими реакциями, элементарными процессами взаимодействия частиц вещества и радиативными процессами. Вклад бимолекулярных реакций $\beta(j) + \alpha(s) \Leftrightarrow \beta'(j') + \alpha'(s')$ (без участия фотонов) в правую часть (5), обозначаемый далее $\dot{n}_{\beta j}^{(1)}$, в случае максвелловского распределения по скоростям и произвольного распределения $F_{\beta}(j)$ реагирующих частиц по внутренним степеням свободы

$$f_{\beta j} = h^3 n_\beta \left(2\pi M_\beta k_B T\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{M_\beta u_\beta^2}{2k_B T}\right) F_\beta(j), \quad n_{\beta j} / n_\beta = g_{\beta j} F_\beta(j)$$
(30)

определяется соотношением

$$\dot{n}_{\beta j}^{(1)} = \sum_{\alpha,\beta' \leq \alpha'} \sum_{s,s',j'} h^{-6} \int \left[f_{\beta'j'} f_{\alpha's'} - f_{\beta j} f_{\alpha s} \right] v_{\alpha\beta} \times d\sigma \left(p_{\beta}, j, p_{\alpha'}, s \rightarrow p_{\beta'}, j', p_{\alpha'}, s' \right) dp_{\alpha} dp_{\beta} = \sum_{a,b' \leq a'} \left(\mathcal{K}_{b'a'}^{ba} n_{b'} n_{a'} - \mathcal{K}_{ba}^{b'a'} n_{b} n_{a} \right), \qquad (31)$$
$$(\beta = 1, 2, ..., N; \quad j = 1, 2, ...),$$

где константы скоростей определены формулами

$$\mathcal{K}_{ba}^{b'a'} = \frac{\left(M_{\alpha}M_{\beta}\right)^{-3/2}}{\left(2\pi k_{B}T\right)^{3} g_{\beta j} g_{\alpha s}} \int \exp\left[-\frac{M_{\alpha}u_{\alpha}^{2} + M_{\beta}u_{\beta}^{2}}{2k_{B}T}\right] \times \\ \times \nu_{\alpha\beta} d\sigma \left(p_{\beta}, j, p_{\alpha}, s \rightarrow p_{\beta'}, j', p_{\alpha'}, s'\right) dp_{\alpha} dp_{\beta}, \\ \frac{\mathcal{K}_{ba}^{b'a'}}{\mathcal{K}_{b'a'}^{ba}} = \left(\frac{M_{\alpha'}M_{\beta'}}{M_{\alpha}M_{\beta}}\right)^{3/2} \frac{g_{\beta'j'}g_{\alpha's'}}{g_{\beta j}g_{\alpha s}}, \quad (\alpha, \beta, \alpha', \beta' = 1, 2, ..., N).$$
(32)

Источник $\dot{n}_{\beta j}^{(1)}$ в задачах моделирования верхней атмосферы связан, в частности, с химическими реакциями, с процессами возбуждения молекул (атомов) при неупругих столкновениях или с их диссоциацией, а также с противоположными процессами – девозбуждения и безызлучательной рекомбинации. Путем суммирования (31) по *j* можно найти формулу для скорости образования (исчезновения) частиц химического элемента α в результате всех аэрономических реакций рассматриваемого типа:

$$\dot{n}_{\beta}^{(1)} = \sum_{\alpha,\beta' \le \alpha'} \left(\tilde{\mathcal{K}}_{\alpha'\beta'}^{\alpha\beta} n_{\alpha'} n_{\beta'} - \tilde{\mathcal{K}}_{\alpha\beta}^{\alpha'\beta'} n_{\alpha} n_{\beta} \right),$$
(33)

$$\tilde{\mathcal{K}}_{\alpha\beta}^{\alpha''\beta'} = \frac{\left(M_{\alpha}M_{\beta}\right)^{-3/2}}{\left(2\pi k_{B}T\right)^{3}} \sum_{js\,j's'} F_{\beta}(j)F_{\alpha}(s)\int \exp\left[-\frac{M_{\alpha}u_{\alpha}^{2} + M_{\beta}u_{\beta}^{2}}{2k_{B}T}\right] v_{\alpha\beta}d\sigma(..)dp_{\alpha}dp_{\beta}.$$
(34)

Отметим, что при таком подходе и для «обыкновенной» химической реакции между химическими элементами константу скорости можно определить как статистически среднюю скорость по всем энергетически доступным каналам столкновений. Это согласуется с представлением о том, что химическая реакция «возмущает» статистическое распределение как по внутренним, так и по поступательным степеням свободы и позволяет, вообще говоря, рассчитать теоретически (при знании как сечений химической реакции для индивидуальных состояний, так и распределений реагирующих молекул по внутренним состояниям во время протекания реакций) константу скорости для неравновесных реакций.

Вклад радиативных процессов в уравнение для $n_{\beta i}$ согласно (1) мож-

но представить в виде суммы $\dot{n}_{\beta j}^{(2)} + \dot{n}_{\beta j}^{(3)} + \dot{n}_{\beta j}^{(4)} + \dot{n}_{\beta j}^{(5)}$, где

$$\dot{n}_{\beta j}^{(2)} = 2 \sum_{a',b' \leq a'} c \, \mathbf{h}^{-6} \int \left\{ \mathbf{f}_{a'} \mathbf{f}_{b'} \left[1 \pm f_{\nu} \right] \left[1 \pm \mathbf{f}_{b} \right] - \mathbf{f}_{b} \mathbf{f}_{\nu} \left[1 \cdots \pm \mathbf{f}_{a'} \right] \left[1 \pm \mathbf{f}_{b'} \right] \right\} \times d\sigma \left(\mathbf{p}_{\beta}, j, \mathbf{p}_{\nu} \rightarrow \mathbf{p}_{\beta'}, j', \mathbf{p}_{\alpha'}, s' \right) d\mathbf{p}_{\nu} d\mathbf{p}_{\beta},$$
(35)

$$\dot{n}_{\beta j}^{(3)} = 2 \sum_{a,b'} h^{-6} \int \left\{ f_{b'} f_{\nu} \left[1 \pm f_{a} \right] \left[1 \pm f_{b} \right] - f_{b} f_{a} \left[1 + f_{\nu} \right] \left[1 \pm f_{b'} \right] \right\} \times \\ \times \nu_{\alpha\beta} d\sigma \left(p_{\beta}, j, p_{\alpha}, s \to p_{\beta'}, j', p_{\nu} \right) dp_{\alpha} dp_{\beta},$$
(36)

$$\dot{n}_{\beta j}^{(4)} = 2 \sum_{j'>j} c \, \mathbf{h}^{-6} \int \left\{ \mathbf{f}_{\beta j'} \left[1 + \mathbf{f}_{\nu} \right] \left[1 \pm \mathbf{f}_{\beta j} \right] - \mathbf{f}_{\beta j} \mathbf{f}_{\nu} \left[1 \pm \mathbf{f}_{\beta j'} \right] \right\} d\sigma_{\beta}(j, \nu \rightarrow j') d\boldsymbol{p}_{\nu} d\boldsymbol{p}_{\beta}, \quad (37)$$

$$\dot{n}_{\beta j}^{(5)} = 2 \sum_{j' < j} c \, \mathbf{h}^{-6} \int \left\{ \mathbf{f}_{\beta j'} \mathbf{f}_{\nu} \left[1 \pm \mathbf{f}_{\beta j} \right] - \mathbf{f}_{\beta j} \left[1 + \mathbf{f}_{\nu} \right] \left[1 \pm \mathbf{f}_{\beta j'} \right] \right\} d\sigma_{\beta}(j', \nu \rightarrow j) d\boldsymbol{p}_{\nu} d\boldsymbol{p}_{\beta}.$$
(38)

Величина $\dot{n}_{\beta j}^{(2)}$ обусловлена фотодиссоциацией (в том числе с возбуждением квантовых энергетических уровней образующихся частиц), фотоионизацией и процессами фоторекомбинации и радиативной ассоциации, приводящими, соответственно, к исчезновению и появлению частиц сорта β, j ; величина $\dot{n}_{\beta j}^{(3)}$ связана с теми же фотопроцессами, приводящими, соответственно, к появлению и исчезновению частиц сорта β, j ; величины $\dot{n}_{\beta j}^{(4)}$ и $\dot{n}_{\beta j}^{(5)}$ связаны с переходами межу дискретными уровнями энергии частиц сорта β : фотовозбуждение с расположенных ниже уровней и радиативные переходы (спонтанные и вынужденные) с метастабильных уровней на уровни, расположенные ниже.

С учетом соотношений (4), (17) и (24), а также процедуры преобразования величины \mathcal{R}_2 (ниже формулы (20)) перепишем (35) следующим образом:

$$\dot{n}_{\beta j}^{(1)} = 2 \sum_{a',b' \leq a'} c \operatorname{h}^{-6} \int f_b \left(1 \pm f_{a'}\right) \times$$

$$\times \left(1 \pm f_{b'}\right) \left\{ \frac{f_{b'} f_{a'} \left[1 \pm f_b\right]}{f_b \left[1 \pm f_{a'}\right] \left[1 \pm f_{b'}\right]} \left[1 + f_v\right] - f_v\right\} d\sigma(...) dp_v dp_\beta =$$

$$= 2 \sum_{a',b' \leq a'} c \operatorname{h}^{-3} \int n_b K_b^{b'a'}(v) \exp\left[-\frac{\operatorname{h} v \left(a'b' \rightarrow b\right)}{\operatorname{k}_B T_b^{b'a'}}\right] dp_v -$$

$$-2\sum_{a',b'\leq a'} c h^{-3} \int n_b \sigma_b^{b'a'}(v) f_v dp_v = \sum_{a',b'\leq a'} A_{a'b',b} n_{a'} n_{b'} - \sum_{a',b'\leq a'} n_b \int_v \sigma_b^{b'a'}(v) \Phi_v dv.$$
(35*)

Для дальнейшего преобразования выражения (36) используем соотношение взаимности (3). Так как получающаяся при этом подынтегральная величина при замене индексов a и b на индексы a' и b' отличается от аналогичной в (35) только знаком, то

$$\dot{n}_{\beta j}^{(3)} = -2\sum c \, \mathrm{h}^{-6} \int \left\{ \mathrm{f}_{b} \mathrm{f}_{a} \left[1+\mathrm{f}_{v} \right] \left[1\pm \mathrm{f}_{b'} \right] - \mathrm{f}_{b'} \mathrm{f}_{v} \left[1\pm \mathrm{f}_{a} \right] \left[1\pm \mathrm{f}_{b} \right] \right\} \times d\sigma \left(p_{\beta'}, j', p_{v} \rightarrow p_{\beta'}, j, p_{\alpha'}, s \right) dp_{v} dp_{\beta'} = \sum_{a,b'} n_{a} n_{b} A_{ab,b'} + \sum_{a,b'} n_{b'} \int_{v} \sigma_{b'}^{ba}(v) \Phi_{v} dv,$$

$$(36^{*})$$

где величина

$$A_{ab,b'} \equiv n_a^{-1} n_b^{-1} h^{-6} \int f_a f_b \left[1 \pm f_{b'} \right] \nu_{\alpha\beta} d\sigma \left(\boldsymbol{p}_{\beta}, j, \boldsymbol{p}_{\alpha'}, \boldsymbol{s} \rightarrow \boldsymbol{p}_{\beta'}, j', \boldsymbol{p}_{\nu} \right) d\boldsymbol{p}_{\alpha} d\boldsymbol{p}_{\beta} \quad (39)$$

есть константа скорости для процессов фоторекомбинации.

Действуя подобным же образом при преобразовании выражений (37) и (38), получим

$$\dot{n}_{\beta j}^{(4)} = \sum_{j'>j} n_{\beta j'} A_{\beta j',j} - \sum_{j'>j} n_{\beta j} \int_{\nu} \sigma_{\beta j}^{\beta j'}(\nu) \Phi_{\nu} d\nu, \qquad (37^*)$$

$$\dot{n}_{\beta j}^{(5)} = -\sum_{j' < j} n_{\beta j} A_{\beta j, j'} + \sum_{j' < j} n_{\beta j'} \int_{\nu} \sigma_{\beta j'}^{\beta j} (\nu) \Phi_{\nu} d\nu.$$
(38*)

Здесь $A_{\beta j,j'}$ – коэффициент Эйнштейна для спонтанного излучения при переходе в энергетически более низкое состояние $j \rightarrow j'$.

С учетом (31), (35*)–(38*) уравнение непрерывности (5) для плотности числа частиц сорта β в *j*-ом внутреннем состоянии принимает вид

$$\rho \frac{d}{dt} \left(\frac{n_{\beta j}}{\rho} \right) + \nabla \cdot \left[n_{\beta j} (w_{\beta} + V) \right] = \dot{n}_{\beta j}^{(1)} + \dot{n}_{\beta j}^{(2)} + \dot{n}_{\beta j}^{(3)} + \dot{n}_{\beta j}^{(4)} + \dot{n}_{\beta j}^{(5)}.$$
(40)

На практике при решении конкретных аэрономических задач почти всегда возможны различные упрощения уравнения (40): например, учёт относительной величины констант различных столкновительных и радиативных процессов в условиях термосферы позволяет опустить некоторые члены; реальное число возбужденных уровней часто может быть аппроксимировано одним или несколькими уровнями, которым приписана фиктивная высокая степень вырождения; в тех случаях, когда скорости прямых и обратных аэрономических реакций достаточно велики (т.е. времена реакций много меньше характерного гидродинамического времени t_{zud}), второй член слева становится пренебрежимо малым и уравнение переходит в уравнение химической кинетики, и т.д.

5. РАДИАЦИОННЫЙ И ХИМИЧЕСКИЙ НАГРЕВ ТЕРМОСФЕРЫ

Все аэрономические реакции сопровождаются либо переходом внутренней энергии в тепловую или излучение (экзотермические реакции), либо переходом энергии движения или излучения во внутреннюю энергию при образовании новых компонентов (эндотермические реакции). Теплота ρ-ой реакции определяется выражением (см. (6))

$$q_{\rho} \equiv \sum_{b} (\eta_{b,\rho}^{''} - \eta_{b,\rho}^{'}) h_{b} = \frac{5}{2} k_{B} T \Delta_{\rho} + q_{\rho}^{0}, \quad q_{\rho}^{0} \equiv \sum_{\beta,j} (\eta_{\beta j,\rho}^{''} - \eta_{\beta j,\rho}^{'}) \delta \varepsilon_{\beta}(j), \quad (41)$$

в котором для энтальпии на одну частицу сорта β в *j*-ом возбуждённом состоянии использовано соотношение

$$h_{\beta j} = \frac{5}{2} k_{\rm B} T + \delta \varepsilon_{\beta}(j), \quad (h_{\beta} = n_{\beta}^{-1} \sum_{j} n_{\beta j} h_{\beta j} = \sum_{j} h_{\beta j} F_{\beta j}).$$
(42)

В (41) $\Delta_{\rho} = \sum_{b} (\eta_{b,\rho}^{''} - \eta_{b,\rho}^{'})$ – алгебраическая сумма стехиометрических коэффициентов реакции (28). В условиях верхней атмосферы, как правило, $q_{\rho}^{0} >> \frac{5}{2} k_{B} T \Delta_{\rho}$ [1]; тогда в соответствии с (41) вклад всех аэрономических реакций Q_{ch} в уравнение переноса энергии (6) для кинетической температуры смеси может быть записан в следующем общем виде:

$$Q_{ch} = -\sum_{b} \dot{n}_{b} h_{b} = -\sum_{\rho} q_{\rho} \xi_{\rho} \cong -\sum_{\rho} q_{\rho}^{0} \xi_{\rho} .$$
(43)

Конкретизируем соотношение (43) для рассматриваемых бимолекулярных реакций общего типа. Введём обозначения $Q_{ch}^{(i)} = -\sum_b \dot{n}_b^{(i)} h_b$, (i = 1, 2, ..., 5); тогда $Q_{ch} = \sum_i^5 Q_{ch}^{(i)}$. Преобразуем каждое слагаемое $Q_{ch}^{(i)}$ к виду (43). С учетом (31), (34*)-(37*), а также симметричности коэффициентов $\mathcal{K}_{ba}^{b'a'}$ по верхним и нижним индексам возможны следующие упрощения:

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}_{ch}^{(1)} &= \frac{1}{2} \sum_{b,a} \sum_{b',a'} h_b \left(\mathcal{K}_{ba}^{b'a'} n_b n_a - \mathcal{K}_{b'a'}^{ba} n_b n_{a'} \right) = \\ &= \frac{1}{4} \sum_{b,a} \sum_{b',a'} (h_b + h_a - h_{b'} - h_{a'}) \mathcal{K}_{ba}^{b'a'} n_b n_a = \sum_{b \geq a} \sum_{b' \geq a'} q_{b'a'}^{b'a'} \mathcal{K}_{ba}^{b'a'} n_b n_a , \qquad (44) \\ \mathbf{Q}_{ch}^{(2,3)} &= \sum_{b} \left\{ \sum_{a,b'} h_b \left[n_a n_a A_{ab,b'} - n_{b'} \int_{\mathbf{v}} \sigma_{b'}^{ba'}(\mathbf{v}) \Phi_{\mathbf{v}} d\mathbf{v} \right] - \\ &- \frac{1}{2} \sum_{a,b'} \left[n_a n_{a'} A_{a'b',b} - n_b \int_{\mathbf{v}} \sigma_{b'}^{b'a'}(\mathbf{v}) \Phi_{\mathbf{v}} d\mathbf{v} \right] \right\} = \\ &= \sum_{b} \left\{ \frac{1}{2} \sum_{a',b'} (h_{b'} + h_{a'} - h_b) \right\} \left[n_{a'} n_{a'} A_{a'b',b} - n_b \int_{\mathbf{v}} \sigma_{b'}^{b'a'}(\mathbf{v}) \Phi_{\mathbf{v}} d\mathbf{v} \right] \right\} \cong \\ &\cong \sum_{b} \sum_{b' \geq a'} h \mathbf{v}_{(b'a' \rightarrow b)} \left[n_{a'} n_{a'} A_{a'b',b} - n_b \int_{\mathbf{v}} \sigma_{b'}^{b'a'}(\mathbf{v}) \Phi_{\mathbf{v}} d\mathbf{v} \right], \qquad (45) \\ \mathbf{Q}_{ch}^{(4,5)} &= \sum_{\beta} \left\{ \sum_{j,j' \leq j} h_{\beta j} \left[n_{\beta j'} A_{\beta j',j'} - n_{\beta j'} \int_{\mathbf{v}} \sigma_{\beta j'}^{\beta j'}(\mathbf{v}) \Phi_{\mathbf{v}} d\mathbf{v} \right] - \\ &- \sum_{j,j' \geq j} h_{\beta j} \left[n_{\beta j'} A_{\beta j',j} - n_{\beta j} \int_{\mathbf{v}} \sigma_{\beta j'}^{\beta j'}(\mathbf{v}) \Phi_{\mathbf{v}} d\mathbf{v} \right] \right\} \cong \\ &\cong \sum_{\beta} \sum_{j,j' \geq j} h_{\mathbf{v}} \beta_{(j,j')} \left[n_{\beta j'} A_{\beta j',j} - n_{\beta j} \int_{\mathbf{v}} \sigma_{\beta j'}^{\beta j'}(\mathbf{v}) \Phi_{\mathbf{v}} d\mathbf{v} \right], \qquad (45) \end{aligned}$$

где введены обозначения

$$\begin{split} h v_{(b'a' \to b)} &\equiv \delta \varepsilon_{\beta'}(j') + \delta \varepsilon_{\alpha'}(s') - \delta \varepsilon_{\beta}(j), \\ h v_{\beta(j,j')} &\equiv \delta \varepsilon_{\beta}(j') - \delta \varepsilon_{\beta}(j), \quad q_{ba}^{b'a'} \equiv h_{b'} + h_{a'} - h_b - h_a), \end{split}$$

для теплот соответствующих реакций.

С учетом (25), (43)-(46) совместный вклад радиационных и химических процессов (так называемая *функция нагревания* атмосферы) в уравнение (6) для кинетической температуры газовой смеси может быть записан в следующем общем виде:

$$\Xi_{Haz} = Q_{R} + Q_{ch} = \sum_{b} \sum_{b' \ge a'} n_{b} \int_{v} \sigma_{b}^{b'a'}(v) \left[hv - hv_{(b'a' \rightarrow b)} \right] \Phi_{v} dv -$$
$$-\sum_{b \ge a} \sum_{b' \ge a'} q_{b,a}^{b'a'} \mathcal{K}_{b,a}^{b'a'} n_{b} n_{a} + \sum_{\beta} \sum_{j,j \le j'} n_{\beta j} \int_{v} \sigma_{\beta j}^{\beta j'}(v) \left[hv - hv_{\beta(j,j')} \right] \Phi_{v} dv.$$
(47)

Это соотношение особенно удобно для расчёта нагревания верхней атмосферы коротковолновым солнечным излучением, поскольку поток может быть в этом случае с большой точностью заменен на легко рассчитываемый поток солнечных фотонов $\Phi_{v_{\sim}}$ (см. (26)).

Примеры функций нагревания. Проиллюстрируем изложенный здесь подход для двух конкретных процессов в атмосфере Земли. Как известно, одним из основных источников нагрева нижней термосферы является диссоциативное поглощение молекулами O_2 излучения $1350 \le \lambda \le 2500$ Å (Мак-Ивен, Филипс, 1978), причём в зависимости от энергии фотона могут возбуждаться различные электронные состояния продуктов диссоциации:

$$O_2 + hv \rightarrow O(^{3}P) + O(^{3}P u_{\lambda u}{}^{1}D).$$
 (a)

Энергия, затраченная на возбуждение одного из атомов до состояния ${}^{1}\text{D}$, может, помимо спонтанного излучения, перейти в кинетическую энергию частиц вследствие ударной дезактивации либо пойти на возбуждение состояния $b^{1}\Sigma_{g}^{+}$ молекул O_{2} :

$$O(^{1}D) \to O(^{3}P) + h\nu$$
, ($A_{O(D),O(P)}^{-1} = 110 \,\mathrm{c}$, красный дуплет), (6)

$$O(^{1}D) + N_{j} \rightarrow O(^{3}P) + N_{j}$$
(B)

($\mathcal{K}_{O(D)j}^{O(P)j} = 5.0 \times 10^{-11}$, 1.0×10^{-11} и 1.6×10^{-13} см³/с для N_2, O_2, O соответственно);

$$O(^{1}D) + O_{2}(x^{3}\Sigma_{g}^{-}) \rightarrow O(^{3}P) + O_{2}(b^{1}\Sigma_{g}^{+}),$$
 (r)

($\mathcal{K}_{O(D),O_2(x)}^{O(P),O_2(D)} = 2.0 \times 10^{-11} \, \text{см}^3/\text{c}$). Состояние $b^1 \Sigma_g^+$ кислорода также метастабильно:

$$O_2(b^1\Sigma_g^+) \to O_2(x^3\Sigma_g^-) + h\nu, \qquad (д)$$

 $(A_{O_2(b),O_2(x)}^{-1} = 145 \text{ с, атмосферные красные});$

$$O_2(b^1\Sigma_g^+) + N_j \to O_2(x^3\Sigma_g^-) + N_j$$
 (e)

 $(\mathcal{K}_{O_2(b)j}^{O_2(x)j} = 5.0 \times 10^{-15}, 9.0 \times 10^{-16}$ и 1.0×10^{-15} см³/с для N_2, O_2, O соответственно). Функция нагревания (46) для реакций (а-е) принимает вид

$$\Xi_{Ha2} = n_{O_2} \int_{v} \sigma_{O_2}^{O(P),O(P)}(v) \Big[h v - D_{O_2} \Big] \Phi_{v_{\odot}} dv +$$

$$+ n_{O_2} \int_{v} \sigma_{O_2}^{O(P),O(D)}(v) \Big[h v - D_{O_2} - W_{1D} \Big] \Phi_{v_{\odot}} dv + (W_{1D} - W_{1W}) \mathcal{K}_{O(D),O_2(x)}^{O(P),O_2(D)} +$$

$$+ W_{1D} \sum_{j}^{3} \mathcal{K}_{O(D),j}^{O(P),j} \cdot n_{O(D)} n_j + W_{1\Sigma} \sum_{j}^{3} \mathcal{K}_{O_2(b),j}^{O_2(x),j} \cdot n_{O_2(b)} n_j,$$
(47)

где D_{O_2} = 5.11эВ – энергия диссоциации O_2 ; W_{1D} = 1.96 эВ, $W_{1\Sigma}$ = 1.64 эВ – соответственно энергия возбуждения уровня 1D атома О и $b^1\Sigma_g^+$ молекулы O_2 .

Возможное упрощение соотношения (47) основано на том, что времена релаксации $\tau_{O(D)}$ и $\tau_{O_2(b)}$ заселённости возбуждённых уровней 1D и $b^1\Sigma_g^+$ ($\tau_{O(D)} \approx [\dot{n}_{O(D)} / n_{O(D)}]^{-1} \approx 100 \text{ c}, \quad \tau_{O_2(b)} \approx [\dot{n}_{O_2(b)} / n_{O_2(b)}]^{-1} \approx 140 \text{ c})$ намного больше соответствующих времён диссоциации и ассоциации. Поэтому можно считать, что значения $n_{O(D)}$ и $n_{O_2(b)}$ находятся в равновесии с мгновенными значениями $n_{O(P)}$ и $n_{O_2(x)}$, т.е.

$$\begin{split} \dot{n}_{\mathrm{O}(\mathrm{D})} &= n_{\mathrm{O}_{2}} \int_{\mathrm{v}} \sigma_{\mathrm{O}_{2}}^{\mathrm{O}(P),\mathrm{O}(D)}(\mathrm{v}) \Phi_{\mathrm{v}_{\odot}} d\mathrm{v} - n_{\mathrm{O}(\mathrm{D})} A_{\mathrm{O}(\mathrm{D}),\mathrm{O}(\mathrm{P})} - \sum_{j}^{3} \mathcal{K}_{\mathrm{O}(\mathrm{D}),j}^{\mathrm{O}(P),j} \cdot n_{\mathrm{O}(\mathrm{D})} n_{j} \approx 0 ,\\ \dot{n}_{\mathrm{O}_{2}(\mathrm{b})} &= \mathcal{K}_{\mathrm{O}(\mathrm{D}),\mathrm{O}_{2}(\mathrm{x})}^{\mathrm{O}(\mathrm{P}),\mathrm{O}_{2}(\mathrm{b})} \cdot n_{\mathrm{O}_{2}(\mathrm{x})} n_{\mathrm{O}(\mathrm{D})} - n_{\mathrm{O}_{2}(b)} A_{\mathrm{O}_{2}(b),\mathrm{O}_{2}(\mathrm{x})} - \sum_{j}^{3} \mathcal{K}_{\mathrm{O}_{2}(b),j}^{\mathrm{O}(2),j} \cdot n_{\mathrm{O}_{2}(b)} n_{j} \approx 0 ,\\ \text{откуда} \end{split}$$

$$n_{O(D)} = \frac{n_{O_2} \int_{v} \sigma_{O_2}^{O(P),O(D)}(v) \Phi_{v_{\odot}} dv}{A_{O(D),O(P)} + \sum_{j}^{3} \mathcal{K}_{O(D),j}^{O(P),j} \cdot n_j}, \quad n_{O_2(b)} = \frac{\mathcal{K}_{O(D),O_2(x)}^{O(P),O_2(b)} \cdot n_{O_2(x)} n_{O_2(x)} n_{O_2(x)}}{A_{O_2(b),O_2(x)} + \sum_{j}^{3} \mathcal{K}_{O_2(b),j}^{O_2(x),j} \cdot n_j}.$$
(48)

Подставляя (48) в (47), получим окончательную формулу для скорости тепловыделения в уравнении энергии (6) за счет фотодиссоциации с возбуждением:

$$\Xi_{haz} = n_{O_2} \int_{v} \left\{ \sigma_{O_2}^{O(P),O(P)}(v) \left[h v - D_{O_2} \right] + \sigma_{O_2}^{O(D),O(P)}(v) \left[h v - D_{O_2} - W_{1D}(1 - f_{1D}^*) \right] \right\} \Phi_{v\infty} \exp \left[-\int_{z}^{\infty} \rho \kappa_v Ch(\theta, z) dz \right] dv , (49)$$

где

$$f_{1D}^{*} = \left(A_{O(D),O(P)} + \sum_{j} n_{j} \mathcal{K}_{O(D),j}^{O(P),j}\right)^{-1} \left\{\sum_{j} n_{j} \mathcal{K}_{O(D),j}^{O(P),j} + n_{O_{2}(x)} \mathcal{K}_{O(D),O_{2}(x)}^{O(P),O_{2}(b)} \left[1 + \frac{W_{1\Sigma}}{W_{1D}} \left(\frac{\sum_{j} \mathcal{K}_{O_{2}(b),j}^{O_{2}(x),j} \cdot n_{j}}{A_{O_{2}(b),O(x)} + \sum_{j} \mathcal{K}_{O_{2}(b),j}^{O_{2}(x),j} \cdot n_{j}} - 1\right)\right]\right\}.$$
(50)

Таким образом, если радиационные времена жизни $A_{O(D),O(P)}^{-1}$ и $A_{O_2(b),O_2(x)}^{-1}$ возбуждённых атомов $O({}^1D)$ и $O_2(b{}^1\Sigma_g^+)$ много больше соответствующих столкновительных времён жизни $1/\sum_j n_j \mathcal{K}_{O(D)j}^{O(P)j}$ и

 $1/\sum_j n_j \mathcal{K}^{{\rm O}_2(x)j}_{{\rm O}_2(b)j}$, то ${\rm f}^*_{1D}\cong 1$, и в этом случае превышение фотонной энергии

над энергией диссоциации в фотохимическом процессе реализуется как кинетическая энергия продуктов реакции, т.е. идёт на нагревание термосферы – фотодиссоционное тепло. Остальная часть фотонной энергии реализуется как химическая энергия реакций рекомбинации. Однако в общем случае, согласно (49), механизмом ударной дезактивации переводится в тепло лишь часть энергии солнечных фотонов, затраченной на возбуждение продуктов фотопроцесса, остальная же часть высвечивается в космическое пространство. В качестве второго примера рассмотрим один из источников нагрева земной атмосферы в области озоносферы (≅30 км) – фотолиз озона. Фото-

диссоциация озона солнечным излучением $2000 < \lambda < 3200 \, A$

$$O_3({}^1A_1) + h\nu \to O({}^1D) + O_2(a{}^1\Delta_g u \lambda u b{}^1\Sigma_g^+)$$
 (**)

является источником метастабильных компонентов O(¹D), O₂($a^1\Delta_g$), O₂($b^1\Sigma_g^+$), которые в связи с большим радиативным временем жизни (110с, 12 с, 2.7×10^3 с соответственно) способны испытать большое число соударений, прежде чем произойдет высвечивание (Мак-Ивен, Филипс, 1978):

$$O_2(a^1 \Delta_g) \to O_2(b^1 \Sigma_g^-) + h \nu, \qquad (3)$$

($A_{O_2(a),O_2(x)} = 3.7 \times 10^{-4} c^{-1}$, инфракрасные атмосферные),

$$O_2(a^1 \Delta_g) + N_j \to O_2(b^1 \Sigma_g^-) + N_j, \qquad (и)$$

$$(\mathcal{K}_{O_2(b)j}^{O_2(x)j} = 2.0 \times 10^{-14}, 2.4 \times 10^{-18}, \le 3 \times 10^{-21}, \le 1.3 \times 10^{-16}$$
 см³/с для O_3 ,

 O_2 , N_2 и O соответственно);

$$O(^{1}D) + O_{3}(^{1}A_{1}) \to O(^{1}D) + O_{2}(b^{1}\Sigma_{g}^{+}) + O_{2}(x^{3}\Sigma_{g}^{-}), \qquad (\kappa)$$

 $(\mathcal{K}_{O(D),O_3}^{O_2(b),O(x)} = 3 \times 10^{-10} \text{ cm}^3/\text{c}).$

Легко показать, что функция нагревания (47) для комплекса реакций (а-е) (в которых в качестве дезактивирующей частицы следует учитывать озон) и (ж-к) принимает вид

$$\Xi_{Ha2} = n_{O_2} \int_{v} \sigma_{O_2}^{O(P),O(P)}(v) \Big[hv - D_{O_2} \Big] \Phi_{v_0} dv +$$

+ $n_{O_3} \int_{v} \sigma_{O_3}^{O(D),O_2(b)}(v) \Big[hv - D_{O_3} - W_{1D}(1 - f_{1D}) - W_{1\Sigma}(1 - f_{1\Sigma}) \Big] \Phi_{v_0} dv +$
+ $n_{O_2} \int_{v} \sigma_{O_2}^{O(P),O(D)}(v) \Big[hv - D_O - W_{1D}(1 - f_{1D}) \Big] \Phi_{v_0} dv +$

$$+n_{O_{3}}\int_{v}\sigma_{O_{3}}^{O(D),O_{2}(a)}(v)\left[hv-D_{O_{2}}-W_{1D}(1-f_{1D})-W_{1\Delta}(1-f_{1\Delta})\right]\Phi_{v_{\odot}}dv.$$
 (51)

где

$$f_{1\Sigma} = \frac{\sum_{j} n_{j} \mathcal{K}_{O_{2}(b),j}^{O_{2}(x),j}}{A_{O_{2}(b),O_{2}(x)} + \sum_{j} n_{j} \mathcal{K}_{O_{2}(b),j}^{O_{2}(x),j}}, \quad f_{1\Delta} = \frac{\sum_{j} n_{j} \mathcal{K}_{O_{2}(a),j}^{O_{2}(x),j}}{A_{O_{2}(a),O_{2}(x)} + \sum_{j} n_{j} \mathcal{K}_{O_{2}(a),j}^{O_{2}(x),j}}, \quad f_{1D} = \left\{\sum_{j} n_{j} \mathcal{K}_{O(D),j}^{O(P),j} + \frac{D_{O_{3}} - D_{O_{2}}}{W_{1D}} \sum_{j} n_{j} \mathcal{K}_{O_{2}(b),j}^{O_{2}(x),j} + \right. \\ \left. + \left[1 + \frac{W_{1\Sigma}}{W_{1D}} \left(-1 + f_{1\Sigma}\right)\right] \left(n_{O_{2}(x)} \mathcal{K}_{O(D),O_{2}(x)}^{O(P),O_{2}(b)} + n_{O_{3}} \mathcal{K}_{O(D),O_{3}}^{O_{2}(b),O_{2}(x)}\right)\right\} \times \\ \left. \times \left(A_{O(D),O(P)} + \sum_{j} n_{j} \mathcal{K}_{O(D),j}^{O(P),j} + n_{O_{3}} \mathcal{K}_{O(D),O_{3}}^{O_{2}(b),O_{2}(x)}\right)^{-1}.$$
 (53)

Здесь D_{O_3} – энергия диссоциации озона; $W_{1\Delta}$ (=0.98 эВ) – энергия возбуждения уровня $a^1\Delta_g$ молекулы O_2 . Представленный здесь метод применим с небольшими изменениями и к строгому расчёту нагревания среды солнечным ионизирующим излучением с учётом дополнительной ионизации быстрыми фотоэлектронами («свежие» фотоэлектроны, энергичные электроны и протоны в высокоширотных областях верхней атмосферы).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе рассматривается разреженный газ внешних газовых оболочек планет и комет, расположенных в пограничных областях между атмосферой и космосом. С учетом специфики этих сред приведён один из подходов, позволяющих корректно учитывать вклад в уравнения многокомпонентной радиационной гидродинамики радиационных и химических источников нагрева, обусловленных прямым поглощением солнечной энергии и инициируемым им многоканальным комплексом аэрономических процессов. Эти процессы аккуратно проанализированы с использованием исходной системы обобщённых кинетических уравнений Больцмана для многокомпонентных смесей многоатомных газов умеренной плотности с учётом излучения и химических реакций в интегралах столкновений. На этой основе получены уравнения гидродинамического типа для неравновесной среды, дополненные соответствующими определяющими соотношениями, а также получены общие выражения для вкладов элементарных процессов взаимодействия излучения с веществом и неравновесных химических реакций в уравнения химической кинетики для заселённостей энергетических уровней реагирующих частиц. Наряду с этим проанализированы источники нагрева и охлаждения многокомпонентной реагирующей смеси газа за счёт столкновительных и радиативных процессов в полном уравнении энергии рассматриваемой среды и предложен общий вид функции нагревания атмосферы планеты солнечным излучением, позволяющий оценить эффективность тепловыделения.

Работа выполнена при частичной поддержке Программы Президиума РАН № 28 и гранта РФФИ № 18-01-00064.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

Акасофу С.П., Чепмен С. Солнечно-земная физика. Ч.1. – М.: Мир, 1974.

Бонд Дж., Уотсон К., Уэлч Дж. Физическая теория газовой динамики. – М.: Мир, 1968.

Гуди Р. Атмосферная радиация. – М.: Мир, 1966.

Колесниченко А.В., Маров М.Я. Турбулентность многокомпонентных сред – М.: Наука, 1999.

Колесниченко А.В. Континуальные модели природных и космических сред. Проблемы термодинамического конструирования (Синергетика: от прошлого к будущему. № 79) – М.: ЛЕНАНД. 2017.

Мак-Ивен М., Филипс Л. Химия атмосферы. – М.: Мир, 1978.

Маров М.Я., Колесниченко А.В. Введение в планетную аэрономию. – М.: Наука. Гл. ред. Физ.-мат. лит., 1987.

Мингалев И.В., Мингалев В.С. Модель общей циркуляции нижней и средней атмосферы Земли при заданном распределении температуры//Матем. Моделирование. 2005. Т. 17. № 5. С. 24-40.

Мингалев В.С., Мингалев И.В., Мингалев О.В., Опарин А.М., Орлов К.Г. Обобщение монотонной гибридной схемы второго порядка для уравнений газовой динамики на случай нерегулярной пространственной сетки // *ЖВМ и МФ*. 2010. Т.50. № 5. С.923–936.

Полак Л.С. Неравновесная химическая кинетика и ее применение. – М.: Наука, 1979.

Сэмпсон Д. Уравнение переноса энергии и количества движения в газах с учетом излучения. – М.: Мир, 1969.

Ферцигер Дж., Капер Г. Математическая теория процессов переноса в газах.– М.: Мир, 1976.

Четверушкин Б.Н. Математическое моделирование задач динамики излучающего газа. – М.: Наука, 1985.

Четверушкин Б.Н., Шильников Е.В. Вычислительный и программный инструментарий для моделирования трехмерных течений вязкого газа на многопроцессорных системах // ЖВМ и МФ.2008. Т.48. № 2. С. 309–320.

Четверушкин Б.Н., Мингалев И.В., Орлов К.Г., Чечеткин В.М., Мингалев В.С., Мингалев О.В. Газодинамическая модель общей циркуляции нижней и средней атмосферы Земли // Матем. моделирование. 2017. Т.29. № 8. С. 59-73.

Marov M. Ya., Kolesnichenko A. V. Mechanics of turbulence of multicomponent gase. –Dordrecht/Boston/London: Kluwer Academic Publishers. 2001.

Marov M. Ya., Kolesnichenko A. V. Turbulence and Self-Organization. Modeling Astrophysical Objects. – New York/Heidelberg/Dordrecht/London: Springer. 2013.

оглавление

Вв	Введение	
1.	Уравнения радиационной гидродинамики для моделирования верхней атмосферы	5
2.	Уравнение переноса излучения	17
3.	Вклады излучения в гидродинамические уравнения	22
4.	Скорости элементарных процессов	26
5.	Радиационный и химический нагрев термосферы	31
3a	Заключение	
Сп	Список литературы	