

DOI: 10.3969/j.issn.1673-6141.2019.05.003

中高层大气临边红外辐射的 LTE 与 non-LTE 模拟对比

刘 栋^{1,2}, 戴聪明^{1*}, 魏合理^{1,2}

(1 中国科学院安徽光学精密机械研究所中国科学院大气光学重点实验室 安徽 合肥 230031;

2 中国科学技术大学, 安徽 合肥 230026)

摘 要: 利用战略高空辐亮度代码 (Strategic high-altitude radiance code, SHARC) 和通用大气辐射传输代码 (Combined atmospheric radiative transfer, CART) 模拟分析中高层大气临边红外辐射的算法适用范围。通过模拟结果的对比, 初步验证了 CART 临边模式的有效性。模拟结果表明, 在主要的红外波段上, 至少 45 km 以下的平流层区域内临边红外辐亮度的计算都可以采取局域热力学平衡模式 (Local thermodynamics equilibrium, LTE); 不同的红外波段在不同的大气条件下, 需要采用非局域热力学平衡模式 (Non-local thermodynamics equilibrium, non-LTE) 的高度不同, 其中 15 μm 波段在至少 80 km 的切点高度以下都可以使用 LTE 模式模拟, 但是对于 CO_2 4.3 μm 带主导的 3~5 μm 波段和 O_3 9.6 μm 带主导的 8~12 μm 波段, 在中间层的多数区域内就必须采用 non-LTE 模式。

关键词: 大气光学; 中高层大气; 红外辐射; 局域热平衡; 非局域热平衡

中图分类号: O432.1

文献标识码: A

文章编号: 1673-6141(2019)05-0337-08

Comparison of LTE and non-LTE Model for Limb Infrared Radiation Simulation of Middle and Upper Atmosphere

LIU Dong^{1,2}, DAI Congming^{1*}, WEI Heli^{1,2}

(1 Key Laboratory of Atmospheric Optics, Anhui Institute of Optics and Fine Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Hefei 230031, China;

2 University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China)

Abstract: The simulation algorithms for limb infrared radiation in the middle and upper atmosphere are investigated using strategic high-altitude radiance code (SHARC) and combined atmospheric radiative transfer

基金项目: Supported by National Defense Basic Scientific Research Program of China (国防基础科研计划项目, JCKY2016204C602), National Defense Pre-Research Foundation of China (装备预研项目, 41416020204)

作者简介: 刘 栋 (1991 -), 男, 博士研究生, 主要从事中高层大气红外辐射特征与应用方面的研究。

E-mail: ldwl2012@mail.ustc.edu.cn

导师简介: 魏合理 (1965 -), 男, 研究员, 博士生导师, 主要从事大气红外辐射方面的研究。

E-mail: hlwei@aiofm.ac.cn

收稿日期: 2018-05-03; **修改日期:** 2018-05-14

* **通信联系人.** E-mail: cmdai@aiofm.ac.cn

(CART) model. The results confirm the availability of CART limb model preliminarily. The comparison shows that local thermodynamics equilibrium(LTE) model is effective under at least 45 km tangent altitude for the main limb infrared radiance simulation, while non-local thermodynamics equilibrium(non-LTE) model should be applied starting from different altitudes for the different infrared bands and atmospheric conditions. For 15 μm band, LTE model can be effective under at least 80 km tangent altitude; but for 4.3 μm band and 9.6 μm band, non-LTE model should be applied about above the stratosphere.

Key words: atmospheric optics; middle and upper atmosphere; infrared radiation; local thermodynamics equilibrium; non-local thermodynamics equilibrium

1 引言

随着高灵敏红外测量技术的发展和临近空间应用需求的增加,中高层大气的红外波段辐射(光学)特性的研究正成为大气光学和大气辐射领域的热点课题,对中高层大气的参数廓线的反演、复杂化学/光化学反应的分析和临近空间红外工程应用等都具有重要意义^[1-5]。通过数值模拟的方法研究中高层大气红外辐射特性则是一种必不可少的手段。

由于中高层大气的总密度远小于低层大气,大气分子间热碰撞作用随高度的逐渐减弱,局域气团的热力学状态随高度的增加也会逐渐由局域热平衡状态(Local thermodynamics equilibrium, LTE)转变为非局域热平衡状态(Non-local thermodynamics equilibrium, non-LTE)。对于 non-LTE 状态的大气,模拟时就不能直接利用 Planck 函数给出源函数,而是需要通过计算得到分子能级数密度分布,再计算源函数。对于不同种类的分子,由于决定能级分布的微观机制不同,开始偏离 LTE 状态的高度也会不同;不同的大气条件也会导致能级分布偏离 LTE 状态的高度不同。尽管从物理原理上看, non-LTE 模式包含 LTE 情形,总是可以给出正确的计算结果,但是鉴于 non-LTE 模式的计算复杂度远大于 LTE 模式,研究两种模式的适用范围是很有必要的。

另一方面,在绝大多数红外波段,处于中高层大气的路径相比于相同长度的低层大气路径,无论是对辐射的衰减作用还是对辐射的产生作用往往都会小数个量级。因此,为避开低层大气辐射的影响,对中高层大气红外辐射的测量和模拟研究主要都针对临边视线的情形。

本文通过对利用战略高空辐射代码(Strategic high-altitude radiance code, SHARC)^[6-7]中的 non-LTE 临边模式和通用大气辐射传输代码(Combined atmospheric radiative transfer, CART)^[8-9]中的 LTE 临边模式模拟获得的中高层大气临边红外辐射结果进行对比分析,初步验证基于 CART 快速拟合算法发展的 LTE 临边辐亮度模式,并研究两种模式算法在中高层大气红外辐射研究中的适用范围。

2 模式简介

2.1 LTE 模式

CART 是本课题组开发的适用于低层大气任意两点间 $1\sim 25000\text{ cm}^{-1}$ 背景辐亮度和透过率模拟的综合通用大气辐射数值模式,最高光谱分辨率为 1 cm^{-1} 。该模式已经被多种测量实验与模拟结果的对比以及模式间的对比充分地验证,并成功应用于红外测量的大气修正等多项研究中^[10-13]。

这里所指的“低层大气”一般就是指对流层大气,但是对于满足 LTE 状态的平流层等中层大气区域,原理上也可以利用 CART 中的基于逐线积分快速拟合的算法计算。此拟合算法相比于逐线积分算法快了数百倍,但是计算精度的损失很小,适用于各种中等光谱分辨率的大气分子吸收谱的模拟和相关应用^[8]。

另一方面, 对于临边辐射, 地球曲率对路径的影响不可忽略, 它体现在路径上的当地天顶角不断变化, 这样就需要采用有别于平面分层的方法计算均匀分层的路径信息。CART 模式本身未包含对地球曲率的处理, 为了研究 LTE 与 non-LTE 算法的适用性, 基于 CART 的分子吸收算法, 重新编写了 CART 临边红外透过率和辐亮度计算模式。

如图 1 所示, 对于临边路径, 采用球面分层模型, 各均匀分层内的路径长度可以表示为

$$s_i = \sqrt{(r + h_i)^2 - (r + h_t)^2} - \sqrt{(r + h_{i-1})^2 - (r + h_t)^2}, \quad (1)$$

式中 r 为地球半径; h_t 为切点高度, h_i 为第 i 层大气的上边界高度, s_i 就是第 i 层均匀层内路径的长度。根据这种分段路径的计算方法, 结合 CART 的非均匀路径透过率快速拟合算法, 就可以计算临边路径上指定两点间的透过率。根据所计算的透过率可以计算得到临边红外辐亮度为

$$I_t = \sum_i B(i)[T(i) - T(i-1)] \quad (2)$$

式中 I_t 表示切点高度 h_t 处的临边辐亮度, $B(i)$ 为第 i 分段的源函数, 在 LTE 模式中由 Planck 函数计算, $T(i)$ 为第 i 分段靠近探测器一侧边界到达探测器处的透过率, $T(i-1)$ 为第 i 分段远离探测器一侧边界到达探测器处的透过率。

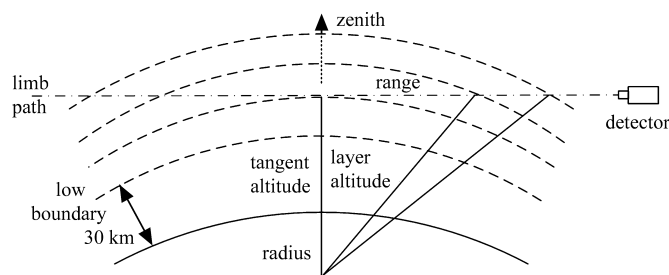


图 1 临边辐射探测示意图

Fig.1 Diagram of limb radiation detection

由于目前 CART 拟合系数库的温度和气压范围的选取, 在临边模式的计算中, 将大气层顶的高度设置在 80 km。只要扩展拟合系数库, 此临边模式的计算范围可以更广。

2.2 non-LTE 模式

对于处于 non-LTE 状态的大气, 需要根据所有决定分子能级跃迁的微观过程, 采用一定的参数化方案有效地建立描述所有微观过程的化学 / 动力学反应数据库, 并据此建立分子能级数密度的统计方程。根据求解的分子能级数密度分布, 计算得到具体条件下的发射辐射源函数, 再计算指定路径的透过率和辐亮度。图 2 展示出 non-LTE 和 LTE 模式的基本计算流程, 直观地呈现出两种模式算法的区别。

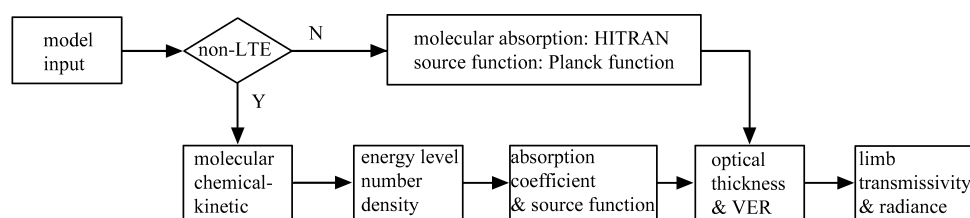


图 2 non-LTE 模式计算流程与 LTE 模式计算流程的区别

Fig.2 Diagram of flow chart of non-LTE and LTE

SHARC 是美国空军研究室 (Air force research laboratory, AFRL) 发展的专门用于中高层大气红外背景辐亮度计算的完整的 non-LTE 模式^[6-7]。可以计算 30~300 km 范围内的 CO₂、O₃、NO、OH、H₂O、CO、CH₄ 七种分子的主要振动能级数密度, 并根据分子能级数密度计算结果, 采用带模式算法计算 30~300 km 范围内指定两点间路径大气红外透过率和辐亮度, 可计算的波段范围为 250~10000 cm⁻¹。

3 模拟结果与分析

3.1 模拟说明

为了保证在相同的大气条件下对比模拟结果, SHARC 和 CART 均采用由高层大气参数生成器 (SHARC atmosphere generator, SAG)^[14] 生成的典型中纬度夏季白天与夜晚大气参数廓线作为输入参数, 首先模拟对比 500~3000 cm⁻¹ 范围内大气临边辐亮度谱, 再模拟对比 3~5 μm (2000~3333 cm⁻¹) 波段、8~12 μm (833~1250 cm⁻¹) 波段、15 μm (580~760 cm⁻¹) 波段的大气临边辐亮度廓线。

3.2 临边辐亮度谱的对比分析

图 3 展示出典型中纬度夏季白天条件下 SHARC non-LTE 模式和 CART LTE 模式模拟的切点高度 30 km 处的临边辐亮度谱。可以看到, 在重要的红外吸收带 CO₂ 15 μm 带、O₃ 9.6 μm 带等 LTE 结果与 non-LTE 结果符合得很好; 主要红外吸收带中只有 CO₂ 4.3 μm 带的结果有一定的偏差, 但是这里不认为此偏差是由 non-LTE 效应导致的, 因为根据能级数密度计算的结果, 在 30 km 处 CO₂ 4.3 μm 带的相关能级仍处于 LTE 状态, 而临边辐射 (尤其是强吸收带) 主要由切点附近高度的大气辐射性质决定。

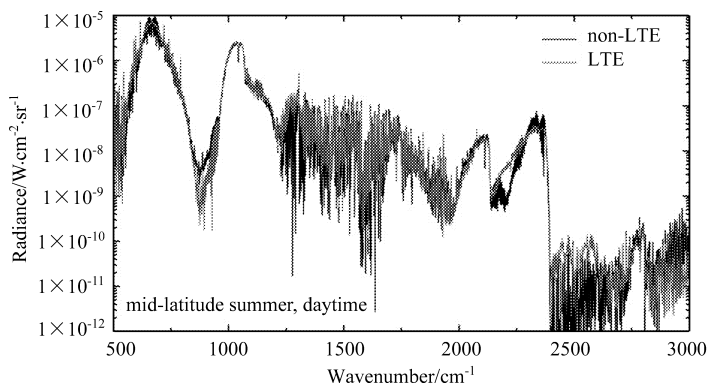


图 3 典型中纬度夏季白天条件下切点高度 30 km 处临边辐亮度谱

Fig.3 Limb radiance spectra at 30 km tangent altitude under typical middle latitude summer daytime conditions

图 4 展示出夜间条件下切点高度 30 km 处的临边辐亮度谱的 non-LTE 与 LTE 模拟结果。夜间的情况与白天的情况相似, 进一步证实了以上分析的正确性。

图 3 和图 4 中部分波数上模拟结果的差异主要来源于以下两个方面: 第一, SHARC 和 CART 均采用快速算法计算临边辐亮度, 其中 SHARC 采用的带模式可以引起 ±10% 的误差^[6], CART 采用的 C-G (Curtis-Godson) 近似方法也引起模拟结果与逐线积分方法的结果有一定偏差^[12], 因此两者间的差异部分是由于快速算法的近似性导致的。第二, CART 的吸收算法目前主要适用于低层大气的温度和气压范围, 对于高层的低气压和低温层节的计算是不可靠的, 因此为了避免非正常的计算结果出现, 目前编写的 CART 临边模式将大气上边界限定在 80 km, 以满足 CART 吸收算法的温度、气压适用范围; 这对于低层和中层大气的强吸收带计算是足够的, 但是一些弱吸收线的临边辐射来自于整个路径的大气发射辐射的积累, 因

此即使对于切点高度为 30 km 的临边视线, 80 km 以上的部分大气层节对总的临边辐亮度也有相当比例的贡献。

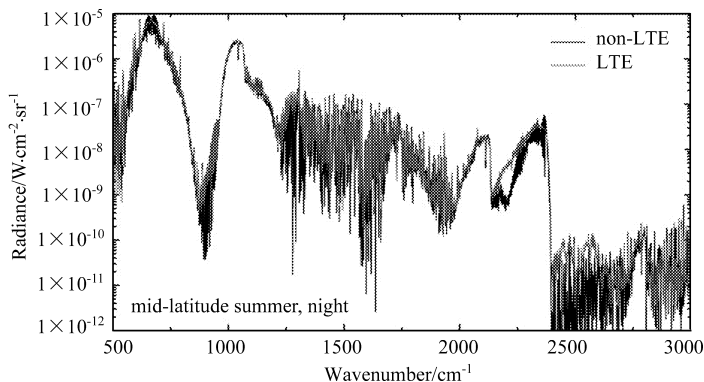


图 4 典型中纬度夏季夜晚条件下切点高度 30 km 处临边辐亮度谱

Fig.4 Limb radiance spectra at 30 km tangent altitude under typical middle latitude summer night conditions

3.3 主要红外谱带的对比分析

下面呈现三种主要红外波段的临边辐亮度随切点高度变化的模拟结果, 为了直观地给出 non-LTE 与 LTE 模拟结果的差异, 对每组模拟结果计算 non-LTE 与 LTE 的相对偏差 R 为

$$R = \frac{|I_{\text{non-LTE}} - I_{\text{LTE}}|}{I_{\text{non-LTE}} + I_{\text{LTE}}} \quad (3)$$

式中 $I_{\text{non-LTE}}$ 是 non-LTE 模式模拟的临边辐亮度值, I_{LTE} 是 LTE 模式的模拟值。

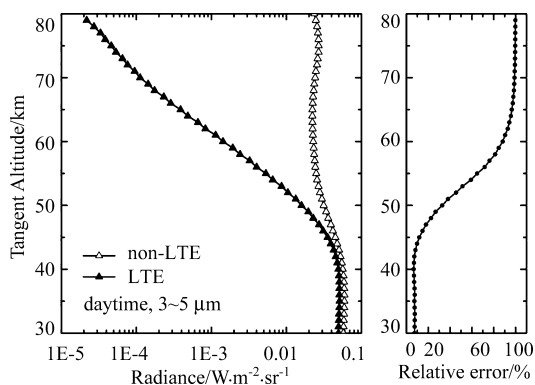


图 5 (a) 白天条件下 3~5 μm 波段临边辐亮度廓线;
(b) LTE 与 non-LTE 模拟的相对偏差

Fig.5 (a) Limb radiance of 3~5 μm in the daytime;
(b) relative error of LTE and non-LTE simulations

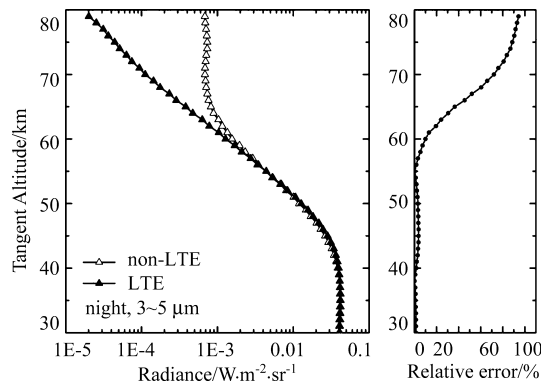


图 6 (a) 夜晚条件下 3~5 μm 波段临边辐亮度廓线;
(b) LTE 与 non-LTE 模拟的相对偏差

Fig.6 (a) Limb radiance of 3~5 μm at night;
(b) relative error of LTE and non-LTE simulations

图 5(a) 给出中纬度夏季白天条件下 3~5 μm 波段的临边辐亮度廓线的对比, (b) 是相对偏差随切点高度的变化。根据以上谱的分析, non-LTE 模拟结果与 LTE 模拟结果间相对偏差在 10% 以内时, 均认为两者的模拟结果是一致的。可以直观地看到, 白天条件下 non-LTE 与 LTE 的模拟结果在切点高度 45 km 以下都是符合地较好的; 在 45 km 以上 LTE 模拟结果开始明显偏离真实情况, 临边辐亮度值随切点高度的增加下降的更迅速, 在切点高度 80 km 附近, 相比于 non-LTE 结果小了超过 3 个数量级。这主要是因为 3~5 μm 波段由 CO₂ 4.3 μm 带主导, 在白天条件下其相关能级会受到太阳辐射的直接泵浦而在较低的

高度上就开始偏离 LTE 状态,但是在 45 km 以下的平流层范围内, LTE 模式仍然是有效的。

图 6 给出夜晚的模拟结果对比情况。可以看到,在 60 km 以下的切点高度上, LTE 模拟结果都与 non-LTE 模拟结果符合地很好,在切点高度 60 km 以上出现明显的偏差。这主要是因为夜晚条件下缺乏太阳辐射泵浦机制, CO_2 4.3 μm 带的相关能级相比于白天条件在更高的高度上才开始偏离 LTE 状态。

图 7 给出中纬度夏季白天条件下 8~12 μm 波段临边辐亮度廓线的对比情况。可以看到,此波段的临边辐亮度的 LTE 模拟结果在大约 55 km 以下的切点高度上都符合地很好,在此以上呈现出明显的差异。中高层大气的 8~12 μm 波段由 CO_2 9.6 μm 带主导,在中间层会受到化学/光化学反应的显著影响而开始偏离 LTE 状态,而在此以下 LTE 模式对临边辐射的模拟依然是有效的。

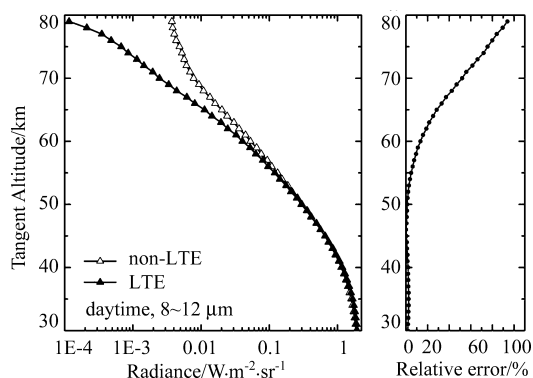


图 7 (a) 白天条件下 8~12 μm 波段临边辐亮度廓线;
(b) LTE 与 non-LTE 模拟的相对偏差

Fig.7 (a) Limb radiance of 8~12 μm in the daytime;
(b) relative error of LTE and non-LTE simulations

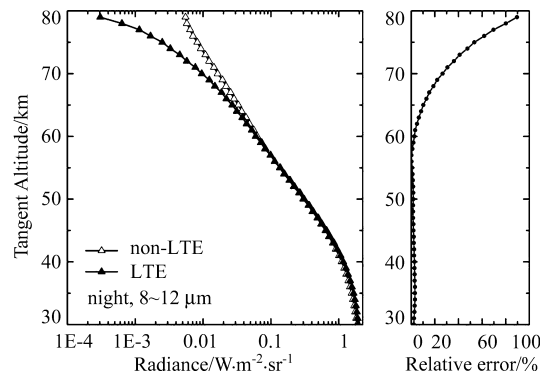


图 8 (a) 夜晚条件下 8~12 μm 波段临边辐亮度廓线;
(b) LTE 与 non-LTE 模拟的相对偏差

Fig.8 (a) Limb radiance of 8~12 μm at night;
(b) relative error of LTE and non-LTE simulations

图 8 给出夜晚的模拟结果对比情况。可以看到,在切点高度 65 km 以上 LTE 模拟结果才开始与 non-LTE 模拟结果产生较大的差异。 CO_2 9.6 μm 带几乎不会受到太阳辐射的直接泵浦作用,这里体现出的日夜变化主要来自于化学反应的日变化。

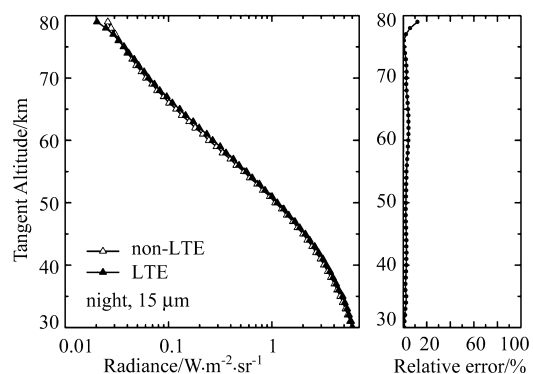


图 9 (a) 白天条件下 15 μm 波段临边辐亮度廓线;
(b) LTE 与 non-LTE 模拟的相对偏差

Fig.9 (a) Limb radiance of 15 μm in the daytime;
(b) relative error of LTE and non-LTE simulations

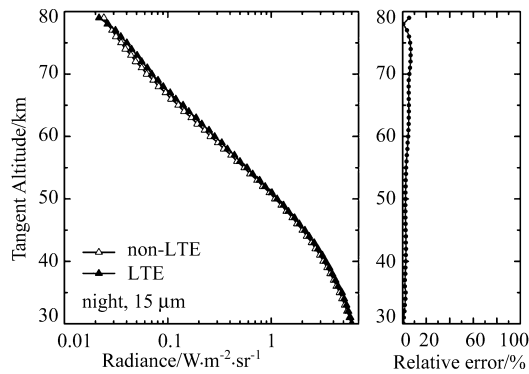


图 10 (a) 夜晚条件下 15 μm 波段临边辐亮度廓线;
(b) LTE 与 non-LTE 模拟的相对偏差

Fig.10 (a) Limb radiance of 15 μm at the night;
(b) relative error of LTE and non-LTE simulations

图 9 给出中纬度夏季白天条件下 15 μm 波段临边辐亮度廓线的对比情况;图 10 给出夜晚的模拟结

果对比情况。可以看到, $15\ \mu\text{m}$ 波段在白天与夜晚呈现出相似的变化, 日夜差别很小, 并且直至切点高度 $80\ \text{km}$ 处 LTE 模式与 non-LTE 模式的模拟结果依然符合地很好。这意味着在平流层和中间层的大部分区域, 对于 $15\ \mu\text{m}$ 波段临边辐射的模拟, LTE 模式都是有效的。

中高层大气的 $15\ \mu\text{m}$ 波段由 CO_2 $15\ \mu\text{m}$ 带主导, 由于 CO_2 与 O 的热碰撞过程效率很高, 主导中间层与低热层的 CO_2 $15\ \mu\text{m}$ 带相关能级的数密度分布, 因此在 $80\sim 90\ \text{km}$ 处这些能级依然可以保持 LTE 状态。这导致在 $80\ \text{km}$ 以下的切点高度上都可以采用 LTE 模式模拟临边辐射。

这对于利用 CO_2 $15\ \mu\text{m}$ 带临边辐射反演中高层大气温度也有重要的意义。在切点高度至少 $80\ \text{km}$ 以下都可以采用简单的 LTE 模式作为反演算法的正向模式, 只有在需要考虑 non-LTE 效应的中间层顶与低热层区域才使用 non-LTE 模式作为正向模式, 这显著地降低了反演的数值复杂度。

4 结 论

根据以上临边辐亮度谱和临边辐亮度廓线的 LTE 与 non-LTE 模拟结果的对比分析, 在主要的红外波段上, 至少 $45\ \text{km}$ 以下的平流层区域内临边辐亮度都可以采取 LTE 模式模拟; 不同的红外波段在不同的大气条件下, 由于能级分布机制的不同, 在不同的高度上开始偏离 LTE 状态, 导致每个红外谱带的临边辐射的 LTE 模拟的适用高度上限也不同, 其中 $15\ \mu\text{m}$ 波段的情况具有最广的适用范围, 在至少 $80\ \text{km}$ 的切点高度以下都可以使用 LTE 模式模拟, 但是对于 CO_2 $4.3\ \mu\text{m}$ 带主导的 $3\sim 5\ \mu\text{m}$ 波段和 O_3 $9.6\ \mu\text{m}$ 带主导的 $8\sim 12\ \mu\text{m}$ 波段, 在中间层的多数区域内就必须采用 non-LTE 模式模拟。通过 LTE 和 non-LTE 模拟结果的对比, 也初步验证了 CART 临边模式的有效性。

由于 SHARC 模拟的低边界为 $30\ \text{km}$, 因此只比较了 $30\ \text{km}$ 以上的临边背景辐亮度。但是 CART 可以模拟 $30\ \text{km}$ 以下切点高度的分子发射辐射引起的临边辐亮度。而根据对比分析可以看到, 在 $30\ \text{km}$ 以下, CART 以及任意的 LTE 临边模式都能用于实际大气临边辐射的模拟。对于红外辐射数值模拟的光电工程应用而言, 这意味着对于机载 / 高空气球载的中高层大气红外探测以及探空火箭在中低层大气的临边红外探测都可以使用 CART 等 LTE 临边模式进行模拟分析。

参考文献:

- [1] Feofilov A G, Kutepov A A. Infrared radiation in the mesosphere and lower thermosphere: energetic effects and remote sensing [J]. *Surveys in Geophysics*, 2012, **33**(6): 1231-1280.
- [2] Goussev O. *Non-LTE Diagnostics of the Infrared Observations of the Planetary Atmosphere* [D]. München: Doctoral Dissertation of Ludwig-Maximilians-Universität München Dissertation, 2003.
- [3] Sharma R D, O'Neil R, Gardiner H, et al. Midcourse space experiment: auroral enhancement of nitric oxide medium-wave infrared emission observed by the Spatial Infrared Imaging Telescope III radiometer [J]. *Journal of Geophysical Research: Space Physics*, 2001, **106**(A10): 21351-21365.
- [4] O'Neil R R, Winick J R, Picard R H, et al. Auroral NO^+ $4.3\ \mu\text{m}$ emission observed from the midcourse space experiment: multiplatform observations of 9 February 1997 [J]. *Journal of Geophysical Research: Space Physics*, 2007, **112**(A6).
- [5] Picard R H, Dewan E M, Winick J R, et al. *Optical/Infrared Signatures for Space-Based Remote Sensing* [R]. Air Force Research Lab Hanscom Afb ma Space Vehicles Directorate, 2007.

- [6] Gruninger J H, Sundberg R L, Acharya P K, *et al.* User's Manual For SHARC-4 The Strategic High-Altitude Radiance Code [R]. Phillips Lab Hanscom Afb Ma, 1997.
- [7] Sundberg R L, Duff J W, Gruninger J H, *et al.* SHARC, a model for calculating atmospheric infrared radiation under non-equilibrium conditions [R]. *The Upper Mesosphere and Lower Thermosphere: A Review of Experiment and Theory*, 1995: 287-295.
- [8] Wei H L, Chen X H, Rao R Z, *et al.* A moderate-spectral-resolution transmittance model based on fitting the line-by-line calculation [J]. *Optics Express*, 2007, **15**(13): 8360-8370.
- [9] Wei Heli, Chen Xiuhong, Dai Congming. Combined atmospheric radiative transfer (CART) model and its applications [J]. *Infrared and Laser Engineering*, 2012, **41**(12):3360-3366.
魏合理, 陈秀红, 戴聪明. 通用大气辐射传输软件 (CART) 及其应用 [J]. *红外与激光工程*, 2012, **41**(12):3360-3366.
- [10] Wei Heli, Dai Congming. Research of atmospheric transfer correction in radiance measurement: atmospheric radiative transfer model and the analysis of key atmospheric parameters [J]. *Infrared and Laser Engineering*, 2014, **43**(3): 884-890.
魏合理, 戴聪明. 辐射特性测量大气传输修正研究: 大气辐射传输模式和关键大气参数分析 [J]. *红外与激光工程*, 2014, **43**(3): 884-890.
- [11] Wei Heli, Dai Congming. Research of atmospheric transfer correction in radiance measurement: atmospheric transfer correction system [J]. *Infrared and Laser Engineering*, 2014, **43**(4): 1019-1024.
魏合理, 戴聪明. 辐射特性测量大气传输修正研究: 大气传输修正系统 [J]. *红外与激光工程*, 2014, **43**(4): 1019-1024.
- [12] Dai Congming, Wei Heli, Chen Xiuhong. Validation of the precision of atmospheric molecular absorption and thermal radiance calculated by combined atmospheric radiative transfer (CART) code [J]. *Infrared and Laser Engineering*, 2013, **42**(1):174-180.
戴聪明, 魏合理, 陈秀红. 通用大气辐射传输软件 (CART) 分子吸收和热辐射计算精度验证 [J]. *红外与激光工程*, 2013, **42**(1):174-180.
- [13] Dai Congming, Wei Heli, Chen Xiuhong. Validation of atmospheric scattering radiance calculated by combined atmospheric radiance transfer (CART) code [J]. *Infrared and Laser Engineering*, 2013, **42**(6):1575-1581.
戴聪明, 魏合理, 陈秀红. 通用大气辐射传输软件 (CART) 大气散射辐射计算精度验证 [J]. *红外与激光工程*, 2013, **42**(6):1575-1581.
- [14] Shroll R M, Adler-Golden S, Duff J W, *et al.* User's Manual for SAG-2 SHARC/SAMM Atmosphere Generator [R]. SPEC