

УДК 523.43–852

ОДНОМЕРНАЯ МОДЕЛЬ ВЕРТИКАЛЬНОГО ПЕРЕНОСА ХИМИЧЕСКИХ СОСТАВЛЯЮЩИХ В АТМОСФЕРЕ МАРСА ВПЛОТЬ ДО ВЫСОТ ТЕРМОСФЕРЫ

© 2024 г. Е. О. Киливник^{*, а, б}, А. С. Петросян^{а, б},
А. А. Федорова^а, О. И. Кораблев^{а, б}

^а Институт космических исследований РАН, Москва, Россия

^б Московский физико-технический институт (национальный
исследовательский университет), Москва, Россия

*e-mail: Kilivnik.e@phystech.edu

Поступила в редакцию 24.10.2023 г.

После доработки 09.11.2023 г.

Принята к публикации 17.11.2023 г.

Работа посвящена исследованию переноса химических составляющих атмосферы Марса. Была поставлена задача исследования турбулентной диффузии химических компонент атмосферы Марса. Для достижения этой цели в приближении диффузии малой составляющей было составлено уравнение непрерывности, а также соответствующая разностная схема. Были поставлены граничные условия в соответствии с известными на данный момент экспериментальными и теоретическими данными, а также получены необходимые профили температуры и давления. Для моделирования были выбраны две модели турбулентной диффузии, которые в дальнейшем использовались при расчетах. Моделирование выполнялось с использованием модернизированного метода Ньютона. Модели показали существенные различия в распределении малых составляющих атмосферы, в частности, водородсодержащих молекул, что указывает на важность выбора описания коэффициента турбулентной диффузии при построении одномерной фотохимической модели атмосферы.

Ключевые слова: атмосфера Марса, гравитационная диффузия, модель Линдзена, турбулентная диффузия

DOI: 10.31857/S0320930X24020049, EDN: NUKQVU

ВВЕДЕНИЕ

Определение и моделирование химического состава атмосфер планет является чрезвычайно важной задачей физики планет. Данная задача позволяет определять скорости потери массы атмосферой планеты (особенно водородной составляющей), что, в свою очередь, может дать ответ на вопрос о причине различий атмосфер таких планет, как Марс и Земля. С использованием полученных данных имеется возможность прогнозировать судьбу химического состава атмосферы нашей планеты: будет ли это эволюция в сторону Марса, который имеет достаточно сильно разреженную атмосферу, или же в сторону больших атмосферных плотностей на примере Венеры.

Многочисленные космические миссии позволили получить обширные данные о составе атмосферы Марса, в том числе вертикального профиля распределения химических компонент. На основании результатов таких наблюдений по-

строены различные теоретические модели газопереноса на разных высотах.

Одной из основных трудностей, возникающих в моделировании аэрономических процессов в планетной атмосфере, является выбор достаточно обоснованных значений такой ее важной динамической характеристики, как коэффициент K вертикальной турбулентной диффузии для компонент. При изучении работ по этой тематике были определены ключевые модели, описывающие вклад турбулентной диффузии в стратосфере и термосфере Марса.

Основной мотивацией для разработки модели атмосферы Марса, работающей вплоть до высот термосферы, является необходимость понимания трансформации химической составляющей атмосферы Марса в верхней атмосфере, включающей заряженную компоненту (ионосферно-тропосферная система, известная как I/T-система). Для решения такой задачи требуется модель,

хорошо согласующаяся с I/T-системой, в которой определяющими являются внутренние гравитационные волны. Поэтому для параметризации турбулентной вязкости естественно использовать модель, в которой турбулентность и турбулентная вязкость связаны с нестабильным разрушением приливов и с нелинейным взаимодействием внутренних гравитационных волн. Представляется также необходимым провести сравнение с традиционными моделями с турбулентной диффузией.

В работе приводится подробный анализ имеющихся одномерных моделей вертикального переноса химических составляющих в атмосфере Марса. Дано подробное описание новой модели турбулентной диффузии в марсианской атмосфере, основанной на модели Линдзена, предложенной для земной атмосферы. Подробно описана численная реализация модели переноса, которая используется для моделирования как с традиционной моделью турбулентной вязкости, так и с моделью Линдзена. Приведены результаты численного моделирования при различных выражениях для коэффициента турбулентной вязкости и показано увеличение точности прогноза химического состава марсианской атмосферы в одномерной модели переноса с турбулентной вязкостью, предложенной Линдзеном.

ИСХОДНЫЕ УРАВНЕНИЯ. ОПИСАНИЕ ИЗВЕСТНЫХ МОДЕЛЕЙ

С момента получения первых данных об атмосфере Марса были предложены различные способы построения теоретических моделей вертикального переноса химических составляющих. Рассмотрим основные из них.

В качестве исходной используется система уравнений неразрывности (Куликов, 2018), описывающая процесс вертикального массопереноса в приближении горизонтально однородной атмосферы. Она имеет следующий вид:

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} w_i(z, t) \right] n_i(z, t) = Q_i(z, t). \quad (1)$$

Здесь t — время, z — высота над средним уровнем поверхности, w_i и n_i — вертикальная составляющая скорости и концентрации i -го компонента химического состава, Q_i — скорость образования и уничтожения i -го компонента в результате всех химических реакций, включая процессы фотодиссоциации. Приведем явный вид “источникового” члена Q_i , связанного со скоростью появления и исчезновения частиц сорта i в химических реакциях, включая процессы диссоциации (Хайрер, Ваннер, 1999). Существуют два типа реакций: одна, в которой возникает

i -компонент, и вторая, в которой он расходуется ($n_+, n_- = n_i$, просто стоят в разных частях):

$$k_a \times a + k_b \times b = k_i \times n_+ + k_d \times d,$$

$$k_i \times n_- + k_d \times d = k_a \times a + k_b \times b.$$

Тогда Q_i может быть выражена как

$$Q_i(z, t) = \frac{dn_{i+}}{dt} - \frac{dn_{i-}}{dt} = k_i \times v_+ - k_i \times v_- = \\ = \sum J_{ab}(T) n_a^{k_a} n_b^{k_b} - \sum J_{id}(T) n_i^{k_i} n_d^{k_d},$$

где n_a, n_b, n_i, n_d — концентрации компонент в реакции, a — доля компоненты n_i в продуктах реакции, $J_{ab}(T)$ — константа реакции, приведенная в таблице.

Для паров (Courtney, 1962):

$$QV_v = k_v n_c (n_{VS} - n_v),$$

где $k_v = 3\alpha m_w V / 4r\rho_{ice}$ — “константа” скорости конденсации пара; m_w — масса молекулы воды; α — коэффициент конденсации паров, называемый также коэффициентом аккомодации для процесса конденсации; r — средний радиус частиц конденсата; ρ_{ice} — плотность водяного льда; n_c — концентрация конденсата, n_v — концентрация паров воды. Концентрация насыщенного водяного пара n_{VS} — над плоской поверхностью конденсата рассчитывалась по формуле Гоффа—Грэтча (Куликов, 2018).

Усредненный по времени поток i -го компонента в вертикальном направлении

$$\psi_i = n_i w_i + \overline{n_i' w_i'} \quad (2)$$

состоит из двух частей: молекулярная диффузия $\psi_i^m = n_i w_i$ и турбулентная диффузия $\psi_i^T = \overline{n_i' w_i'}$. Здесь w_0 — среднемассовая скорость движения атмосферы, w_i — диффузионная скорость, а n_i' и w_i' — значения величины пульсаций концентрации и скорости i -го компонента, возникающих за счет турбулентности.

Чтобы описать каждую из величин ψ_i^T , можно воспользоваться соотношениями Стефана—Максвелла, которые хорошо подходят для описания газа, состоящего из многих компонент. Однако, как правило, ввиду того факта, что углекислый газ занимает почти 95% от всего химического состава Марса, используется следующее, так называемое приближение диффузии малой составляющей:

$$\psi_i^m = -D_i \left[\frac{\partial n_i}{\partial z} + \left(\frac{1}{H} + \frac{1+a_i}{T} \frac{\partial T}{\partial z} \right) n_i \right], \\ \psi_i^T = -K \left[\frac{\partial n_i}{\partial z} + \left(\frac{1}{H} + \frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial z} - \frac{1}{\mu} \frac{\partial \mu}{\partial z} \right) n_i \right]. \quad (3)$$

Здесь D_i — коэффициент диффузии i -го компонента в CO_2 , $H_i = RT / \mu_i g$ — высота однородной атмосферы, R — универсальная газовая постоянная, T — температура газа, g — ускорение свободного падения, μ_i и α_i — молекулярный вес и коэффициент термодиффузии i -го компонента, H — шкала высот однородно перемешанной атмосферы, а μ — ее средний молекулярный вес.

Основное отличие моделей турбулентной диффузии состоит в определении коэффициента K . Например, согласно выводам работы (Изаков, 1976), для удовлетворительного соответствия рассчитанного состава атмосферы Марса и данных измерений необходимо, чтобы $K = 4 \times 10^8 \text{ см}^2 \text{ с}^{-1}$. Столь высокое значение K требуется, с одной стороны, для того, чтобы обеспечить быстрый перенос в нижнюю атмосферу атомарного кислорода и ограничить тем самым скорость образования O_2 на уровне ~ 30 км в реакции $\text{O} + \text{OH} \rightarrow \text{O}_2 + \text{H}$. С другой стороны, большие величины K необходимы для достаточно быстрого переноса вниз атомарного водорода, образующегося в ионосфере, с тем чтобы обеспечить поддержание концентрации H на экзобазе (225 км) на уровне, не превышающем $3 \times 10^4 \text{ см}^{-3}$. В работе (Huntен, 1974) предполагалось, что коэффициент K зависит от высоты и может изменяться в пределах $(3 \times 10^6 \text{ см}^2 \text{ с}^{-1}) < K < (2.8 \times 10^{10} \text{ см}^2 \text{ с}^{-1})$. На основании результатов своих расчетов авторы (Huntен, 1974) пришли к выводу, что величина K на высотах 30–40 км является критическим параметром модели и должна составлять здесь не менее $7 \times 10^7 \text{ см}^2 \text{ с}^{-1}$. Влияние высотной зависимости K на состав атмосферы Марса исследовалось также в (Изаков, 1976). Согласно результатам этой работы, уменьшение K приводит к падению концентраций H и H_2 на уровне экзобазы.

Важный прогресс был достигнут в работе (Куликов, 2018), где использовалась следующая модель:

$$K(z) = K_1 \exp(S_1(z - z_m) - S_2(z - z_m)^2), \quad (4)$$

где $S_2 = 0$ при $z \leq z_m$. Значения параметров были взяты следующие: $K_m = 10^{7.5} \text{ см}^2 \text{ с}^{-1}$, $z_m = 107$ км, $S_1 = 5.83 \times 10^{-2} \text{ км}^{-1}$ и $S_2 = 3.89 \times 10^{-3} \text{ км}^{-2}$.

В работе (Куликов, 2018) исследуются следующие нейтральные компоненты: CO_2 , CO , $\text{O}(^3P)$, $\text{O}(^1D)$, O_3 , H_2O , OH , H , HO_2 , H_2O_2 , H_2 , ионы CO_2^+ и CO_2H^+ , а также исследуется аэрозольная составляющая, образованная частицами конденсата водяного пара. В нашей работе мы будем учитывать компоненты в рамках той же самой аэрономии атмосферы Марса, с тем чтобы понять

важную роль модели турбулентной диффузии в средней и верхней атмосфере. Схема химических реакций приведена в таблице.

В работе (Chaffin и др., 2017) предсказан повышенный выброс атомарного водорода из атмосферы Марса, вызванный присутствием воды на большой высоте. При моделировании процессов переноса газа в нижней атмосфере также учитывались химические реакции, показанные в таблице. До высоты $z_0 = 65$ км коэффициент турбулентной диффузии был константой и численно равен $1.0 \times 10^6 \text{ см}^2 \text{ с}^{-1}$, после чего менялся с высотой следующим образом (Краснопольский, 1982):

$$K_2(z) = K_0 \left(\frac{P(z)}{k_b T(z)} \right)^{-\frac{1}{2}}, \quad (5)$$

где $K_0 = 10^{13} \text{ см}^2 \text{ с}^{-1}$.

Таким образом, из приведенного обсуждения отличий высотных профилей коэффициента турбулентной диффузии, используемых при изучении аэрономии Марса, а также из противоречивости выводов различных авторов становится очевидной необходимость критического анализа проведенных ранее расчетов состава атмосферы.

ГРАВИТАЦИОННАЯ ТУРБУЛЕНТНОСТЬ. ЧИСЛЕННАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ МОДЕЛИ ВЕРТИКАЛЬНОГО ПЕРЕНОСА

Мы предлагаем использовать модель турбулентности Линдзена (Lindzen, 1981), которая хорошо описывает турбулентную диффузию для земной атмосферы, для улучшения результатов моделирования марсианской атмосферы на средних и больших высотах. Предполагается, что механизмом, вызывающим турбулентную диффузию, является нелинейное взаимодействие внутренних гравитационных волн различных типов. Известны два механизма разрушения внутренних гравитационных волн на больших высотах атмосферы Марса. Один из механизмов представляет собой увеличение амплитуды внутренней волны вследствие уменьшения давления атмосферы с высотой, а другой механизм — это резонансное взаимодействие ветра и внутренней волны при равенстве скорости ветра и групповой скорости внутренней волны. Поэтому такая модель может рассматриваться как адекватная альтернатива для предсказания трансформации химических компонент атмосферы Марса на высотах, включающих ионосферу. Разрыв волны, по-видимому, происходит на высоте около 85 км, что приводит к слою усиленной вихревой диффузии и вызванного волной ускорения, простирающемуся в области между 85 км и примерно 108 км, выше которой преобладает молекулярный перенос.

Система химических реакций, рассматриваемая в данной работе

№	Реакция	Константа реакции J
1	$\text{CO}_2 + h\nu(40 - 2062) \rightarrow \text{CO} + \text{O}$	4×10^{-7}
2	$\text{O}_2 + h\nu(40 - 2062) \rightarrow \text{O} + \text{O}$	1.8×10^{-6}
3	$\text{H}_2\text{O} + h\nu(1515 - 2000) \rightarrow \text{OH} + \text{H}$	1.46×10^{-6}
4	$\text{HO}_2 + h\nu(2000 - 3600) \rightarrow \text{O} + \text{OH}$	5.14×10^{-4}
5	$\text{H}_2\text{O}_2 + h\nu(2000 - 3600) \rightarrow \text{OH} + \text{OH}$	7.12×10^{-5}
6	$\text{CO} + \text{O} + \text{CO}_2 \rightarrow \text{CO}_2 + \text{CO}_2$	$1.0 \times 10^{-32} \exp(-2190/T)$
7	$\text{CO} + \text{OH} \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}$	$2.1 \times 10^{-32} \exp(-116/T)$
8	$\text{O} + \text{O} + \text{CO}_2 \rightarrow \text{O}_2 + \text{CO}_2$	$3.0 \times 10^{-33} \exp(-300/T)^{2.9}$
9	$\text{O} + \text{O}_2 + \text{CO}_2 \rightarrow \text{O}_3 + \text{CO}_2$	$1.4 \times 10^{-33} \exp(-300/T)^{2.5}$
10	$\text{O} + \text{O}_3 \rightarrow \text{O}_2 + \text{O}_2$	$2.0 \times 10^{-11} \exp(-2280/T)$
11	$\text{O} + \text{H}_2 \rightarrow \text{OH} + \text{H}$	$7.0 \times 10^{-11} \exp(-5000/T)$
12	$\text{O} + \text{OH} \rightarrow \text{O}_2 + \text{H}$	4.0×10^{-11}
13	$\text{O} + \text{HO}_2 \rightarrow \text{OH} + \text{O}_2$	$8.0 \times 10^{-11} \exp(-500/T)$
14	$\text{O} + \text{H}_2\text{O}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{O}_2$	$2.3 \times 10^{-11} \exp(-3200/T)$
15	$\text{O} + \text{H}_2\text{O}_2 \rightarrow \text{HO}_2 + \text{O}_2$	$2.3 \times 10^{-11} \exp(-3200/T)$
16	$\text{O}(^1D) + \text{CO}_2 \rightarrow \text{O}(^3P) + \text{CO}_2$	1.8×10^{-10}
17	$\text{O}(^1D) + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{OH} + \text{OH}$	3.0×10^{-10}
18	$\text{O}(^1D) + \text{H}_2 \rightarrow \text{OH} + \text{H}$	3.0×10^{-10}
19	$\text{H} + \text{HO}_2 \rightarrow \text{OH} + \text{OH}$	$4.2 \times 10^{-10} \exp(-950/T)$
20	$\text{H} + \text{HO}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{O}$	$8.3 \times 10^{-11} \exp(-500/T)$
21	$\text{H} + \text{HO}_2 \rightarrow \text{H}_2 + \text{O}_2$	$4.2 \times 10^{-11} \exp(-350/T)$
22	$\text{H} + \text{O}_2 + \text{CO}_2 \rightarrow \text{HO}_2 + \text{CO}_2$	$2.0 \times 10^{-31} \exp(-273/T)^{1.3}$
23	$\text{H} + \text{H} + \text{CO}_2 \rightarrow \text{H}_2 + \text{CO}_2$	$1.0 \times 10^{-32} \exp(-273/T)^{0.7}$
24	$\text{H} + \text{O}_3 \rightarrow \text{OH} + \text{O}_2$	2.6×10^{-11}
25	$\text{OH} + \text{OH} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{O}$	$1.0 \times 10^{-11} \exp(-550/T)$
26	$\text{OH} + \text{H}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{H}$	$3.6 \times 10^{-11} \exp(-2590/T)$
27	$\text{OH} + \text{O}_3 \rightarrow \text{HO}_2 + \text{O}_2$	$1.3 \times 10^{-12} \exp(-956/T)$
28	$\text{OH} + \text{HO}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{O}_2$	$8.3 \times 10^{-11} \exp(-500/T)$
29	$\text{OH} + \text{H}_2\text{O}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{HO}_2$	$4.1 \times 10^{-11} T^{0.5} \exp(-600/T)$
30	$\text{HO}_2 + \text{HO}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O}_2 + \text{O}_2$	$1.7 \times 10^{-11} \exp(-500/T)$
31	$\text{CO}_2^+ + \text{H}_2 \rightarrow \text{CO}_2\text{H}^+ + \text{H}$	1.4×10^{-9}
32	$\text{CO}_2\text{H}^+ + e \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}$	3.5×10^{-7}

Ситуация в средних и высоких широтах более сложная. Гравитационные волны доминируют на этих высотах, и если такие волны возникают в тропосфере (что вероятно), то их фазовые скорости обычно будут варьироваться от нуля (что соответствует горным волнам и т. д.) до типичных скоростей тропосферного потока.

Для таких низких фазовых скоростей влияние среднего зонального распределения потока будет иметь решающее значение. Распределение потока будет эффективно определять, какие гравитационные волны (в зависимости от фазовой скорости) могут достигать мезосферы, и соответственно, амплитуды мезосферных гравитационных волн и их предельную высоту. Этот эффект, например, подразумевает, что высота, до которой учитывается гравитационная волна летом (70 км), будет больше, чем зимой (50 км). Кроме того, турбулентная диффузия и вызванные волнами ускорения больше не распространяются до некоторого уровня, где доминируют молекулярные процессы. Вместо этого они ограничены слоями, простирающимися до некоторого приблизительного критического уровня (где среднее значение скорости зонального ветра равно или почти равно фазовой скорости волны). Между критическими уровнями и термосферой ожидается резкий минимум вихревой диффузии. Вызванные волнами ускорения обеспечивают явный источник “трения”, необходимого для обращения вспять мезосферных сдвигов и, соответственно, для изменения температурного градиента от полюса к полюсу в мезопаузе.

Данная концепция приводит к следующему виду турбулентной диффузии на высоте 70–80 км:

$$K_3(z) = \frac{kc^4}{N^3 \left(1 + l^2/k^2\right)^{\frac{3}{2}}} \frac{1}{2H}, \quad (6)$$

где $k = 3 \times 10^{-6} \text{ м}^{-1}$, $c = 466 \text{ м/с}$,

$$\left(1 + l^2/k^2\right)^{\frac{1}{2}} \sim 1.54, \quad H = RT/g,$$

$$N^2 = g/\Gamma, \quad \Gamma = (\partial T/\partial z) + (g/c_p).$$

Целью данной работы является построение глобально усредненной аэрономической модели Марса и определение на ее основе приближенно-го вертикального распределения величины K .

В настоящей работе мы предлагаем новую формулу турбулентной вязкости для численного моделирования переноса газовых составляющих атмосферы Марса, в которой вместо формулы (5) используется выражение Линдзена (Lindzen, 1981) для коэффициента турбулентной диффузии (6). В работе проведено численное моделирование на основе уравнения (1) с использованием двух моделей турбулентной диффузии (4) и (6) для атмосферы Марса на высотах 0–200 км. Проведено подробное сравнение результатов моделирования на основе обеих моделей турбулентной диффузии. Построена разностная схема и заданы граничные условия для каждой из рассматриваемых компонент, а именно: CO_2 , CO , O_3 , H_2O , OH , H , HO_2 , H_2O_2 , H_2 , Ar , N_2 .

Уравнения химических реакций берутся из таблицы. Запишем уравнение (1) для двух моделей турбулентной вязкости:

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} n_i + \frac{\partial}{\partial z} \Phi = Q_i \\ \Phi = -(D_i + K(z)) \left[\frac{\partial n_i}{\partial z} + \left(\frac{1}{H_i} + \frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial z} \right) n_i \right] - D_i \frac{\alpha_i}{T} \frac{\partial T}{\partial z} - K(z) \frac{1}{\mu} \frac{\partial \mu}{\partial z}. \end{cases} \quad (7)$$

Нам необходимо найти установившейся средний профиль концентраций химических компонент от высоты, соответственно: $\partial n_i / \partial t = 0$. В итоге запишем уравнение (7) в следующем виде:

$$\begin{aligned} Q_i = & - \left(\frac{\partial D_i}{\partial z} + \frac{\partial K}{\partial z} \right) \left[\frac{\partial n_i}{\partial z} - \left(\frac{1}{H_i} + \frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial z} \right) n_i \right] - \\ & - (K + D_i) \left[\frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + \left(-\frac{1}{H_i^2} \frac{\partial H_i}{\partial z} + \frac{1}{T^2} \left(\frac{\partial T}{\partial z} \right)^2 + \frac{1}{T} \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) n_i + \left(\frac{1}{H_i} + \frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial z} \right) \frac{\partial n_i}{\partial z} \right] - \\ & - \frac{\partial D_i}{\partial z} \frac{\alpha_i}{T} \frac{\partial T}{\partial z} + D_i \frac{\alpha_i}{T^2} \left(\frac{\partial T}{\partial z} \right)^2 - D_i \frac{\alpha_i}{T} \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} - \frac{\partial K}{\partial z} \frac{1}{\mu} \frac{\partial \mu}{\partial z} + D_i \frac{1}{\mu^2} \left(\frac{\partial \mu}{\partial z} \right)^2 - K \frac{1}{\mu} \frac{\partial^2 \mu}{\partial z^2}. \end{aligned} \quad (8)$$

Зависимость коэффициента молекулярной диффузии от температуры и, как следствие, от высоты для каждой компоненты вычисляется по формуле Чепмена–Энскога:

$$D_i = \frac{AT^{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{1}{\mu_0} + \frac{1}{\mu_i}}}{P(z) \sigma_{i,2}^2 \Omega}. \quad (9)$$

Здесь 1, 2 — индексы двух видов молекул, присутствующих в газовой смеси, μ_i — молярные массы компонент (в нашей модели рассматривается диффузия компонент в газе CO_2 ввиду его преобладания в сравнении с остальными газами), коэффициент $A = 1.859 \times 10^{(-3)} \text{ атм} \cdot \text{\AA}^2 \cdot \text{см}^2 \sqrt{(\text{г/моль})} \cdot K^{(-3/2)} / \text{с}$, $P(z)$ — профиль давления (атм), $\sigma_{1,2} = \frac{1}{2}(\sigma_1 + \sigma_2)$ — эффективный диаметр столкновения в $\text{\AA}$ (значения заданы в форме таблицы в [13]), $\Omega \sim 1$ — безразмерное значение интеграла столкновений.

На рис. 2 изображены используемые профили коэффициента молекулярной диффузии для некоторых компонент.

Выражения $H_i(z)$ вычислялись для каждой компоненты отдельно по профилю температуры $T(z)$. Необходимые распределения температуры и давления взяты из (Chaffin и др., 2017; Краснопольский, 1982). Соответствующие профили изображены на рис. 1. Изменением средней молярной массы в (Lindzen, 1981) в первом приближении пренебрегаем, как уже упоминалось, ввиду того факта, что во всей нижней атмосфере Марса концентрация углекислого газа на порядок и больше превышает остальные показатели.

Система дифференциальных уравнений (1), в которой присутствуют быстрые и медленные текущие химические реакции, относится к типу

жестких дифференциальных систем уравнений в форме Коши (Маров, Колесниченко, 1987). Такие системы дифференциальных уравнений сталкиваются с принципиальными трудностями при их численном решении. Прежде всего требуется резкое увеличение числа вычислений. Отметим также резкое возрастание погрешности вычислений при недостаточно малом шаге. Поэтому в качестве метода численного решения мы используем неявные методы, которые обеспечивают результат, несравненно более надежный, чем явные методы (Маров, Колесниченко, 1987). Фактически речь идет об обеспечении устойчивости численного алгоритма при использовании неявных схем. Использование неявных схем в задачах планетной аэронавтики и в химии планетных атмосфер имеет определяющее значение, поскольку одни и те же системы уравнений при разных параметрах могут быть как жесткими, так и нежесткими.

Все производные в (8) аппроксимированы с помощью центральной разностной схемы:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial z}\right)(z_k) = \frac{f_{k+1} - f_{k-1}}{2h}, \quad (10)$$

$$\left(\frac{\partial^2 f}{\partial z^2}\right)(z_k) = \frac{f_{k+1} - 2f_k + f_{k-1}}{h^2}. \quad (11)$$

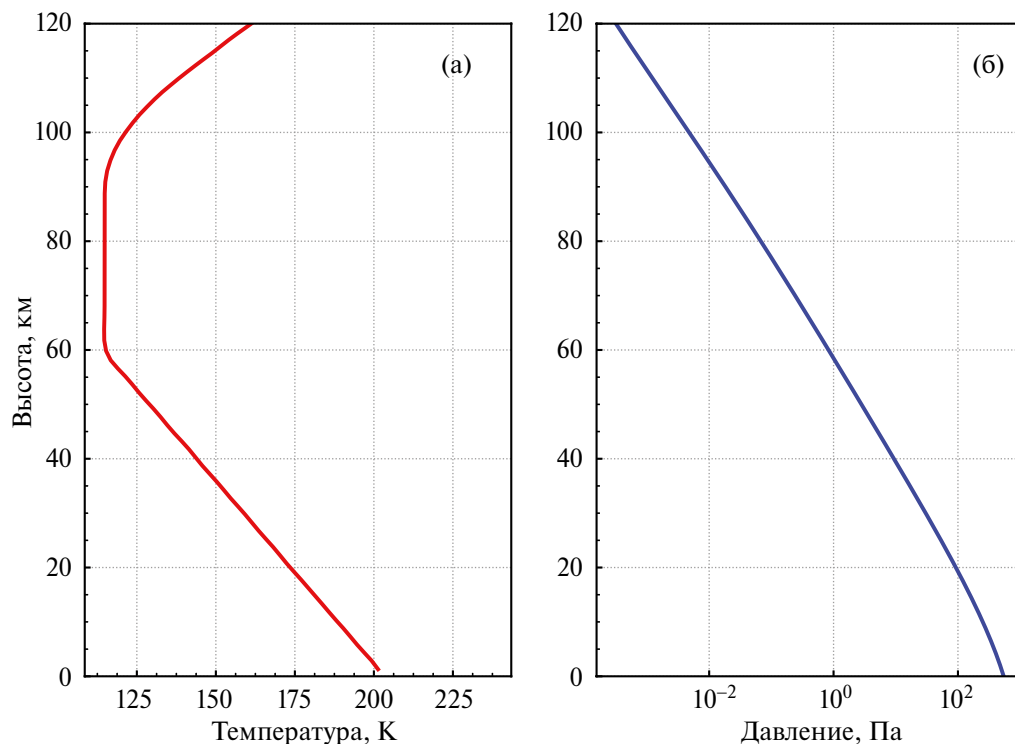


Рис. 1. Усредненные среднесуточные профили температуры (а) и логарифма давления (б) для среднеширотной атмосферы Марса. Данные взяты из статей (Bougher и др., 2015; 2017; Chaffin и др., 2017).

Здесь $h = z_{k+1} - z_k$. Таким образом, по полученным профилям давления и температуры мы находим соответственно зависимость от высоты следующих величин:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial z^2}, \frac{\partial T}{\partial z}, \frac{\partial D_i}{\partial z}, \frac{\partial K}{\partial z}, \frac{\partial H_i}{\partial z}.$$

$$\frac{n_{k+1} - 2n_k + n_{k-1}}{h^2} \underbrace{D_k^0}_{A_k^2} + n_{k+1} - \frac{n_{k-1}}{2h} \underbrace{\left[\left(\frac{1}{H_k} + \frac{T_k'}{T_k} \right) D_k^0 + D_k^{0'} \right]}_{A_k^1} + n_k \underbrace{\left[\left(\frac{1}{H_k} + T_k' T_k \right) D_k^{0'} + D_k^0 \left(-\frac{H_k'}{H_k^2} - \frac{T_k'}{T_k^2} + \frac{T_k''}{T_k} \right) \right]}_{A_k^0} = \frac{Q_k}{B_k},$$

где $D_k^0 = K_k + D_k^i$.

Обозначая соответствующие коэффициенты перед производными концентрациями A_k^0, A_k^1, A_k^2 , получаем следующую систему уравнений:

$$\begin{aligned} n_{k+1} \underbrace{\left(A_k^2 + \frac{h A_k^1}{2} \right)}_{\alpha_1} + n_k \underbrace{\left(-2A_k^2 + h^2 A_k^0 \right)}_{\alpha_2} + \\ + n_{k-1} \underbrace{\left(A_k^2 - \frac{h A_k^1}{2} \right)}_{\alpha_3} + B_k h^2 = 0. \end{aligned} \quad (12)$$

Откуда следует:

$$n_{k+1} = -\frac{1}{\alpha_1} (n_k \alpha_2 + n_{k-1}). \quad (13)$$

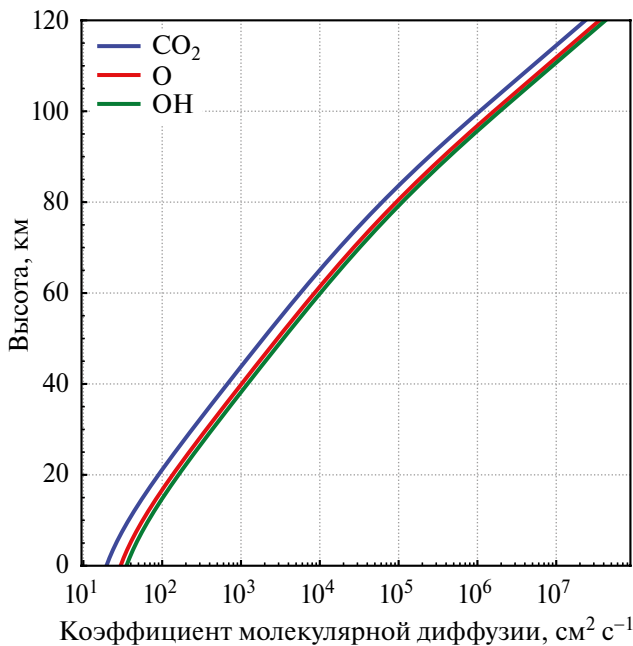


Рис. 2. Коэффициенты диффузии нескольких химических компонент атмосферы Марса, вычисленные по формуле Чепмена–Энскога. Использованные профили температур изображены на рис. 1. Параметры самих газов были взяты из (Hirschfelder и др., 1964).

В дальнейшем для удобства производные функции будем просто обозначать f', f'' . В результате получим уравнение непрерывности для i -й компоненты в разностной форме:

Граничные условия на поток и концентрацию i -й химической компоненты при $z = 0$, брались из (Chaffin и др., 2017). В местах разрывов производной функций температуры, коэффициентов диффузии и других параметров граничные условия выбирались такими, чтобы соблюдалась непрерывность концентраций и потоков.

Выбранные граничные условия для некоторых компонент: распределение концентрации CO_2 определялось из условия гидростатического равновесия; у CO и O_2 потоки равны 0 (диффузионное равновесие). У H_2 и H_2O и других паров начальные потоки вычислялись по методу из (Куликов, Рыхлецкий, 1983). На верхней границе (граница турбопаузы 225 км) принималось, что для всех компонент, кроме водородосодержащих, диффузионные потоки равны 0.

Полученная система уравнений решается с помощью специально построенного решения эволюционных краевых задач для жестких систем квазилинейных параболических уравнений. В основе метода лежит ньютоновский итерационный процесс для решения жестких систем свойствами консервативности, монотонности и быстрого затухания. Решение системы плохо обусловленных разностных уравнений находилось при помощи разложения якобиана системы на произведение левой и правой треугольных матриц. При этом вектор правой части системы вычислялся в режиме накопления, а разложение якобиана сохранялось неизменным для максимально возможного числа итераций при сохранении их сходимости и граничных условий.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

В работе проведено сравнение двух моделей, которые наиболее точно среди всех описывают итоговые распределения. Соответственно, в первой модели коэффициент турбулентной диффузии вычислялся по формуле (4), а во второй — по формуле (6). Профили коэффициентов

диффузии изображены на рис. 3. Соответственно, можно видеть, что на высоте ~ 120 км коэффициент молекулярной диффузии начинает преобладать.

Результаты расчетов изображены на рис. 4 и 5. Главное отличие состоит в высотных профилях распределений водородсодержащих компонент.

Два представленных метода дают довольно разные результаты, особенно для водородсодер-

жащих компонентов на высотах 60–100 км, что требует дальнейших исследований. В частности, для выбора более корректного подхода к описанию турбулентной диффузии необходимо сравнение с данными наблюдений.

Главными недостатками данных подходов является пренебрежение горизонтальным переносом компонент, особенно в турбопаузе, однако данные поправки будут учтены в будущих работах.

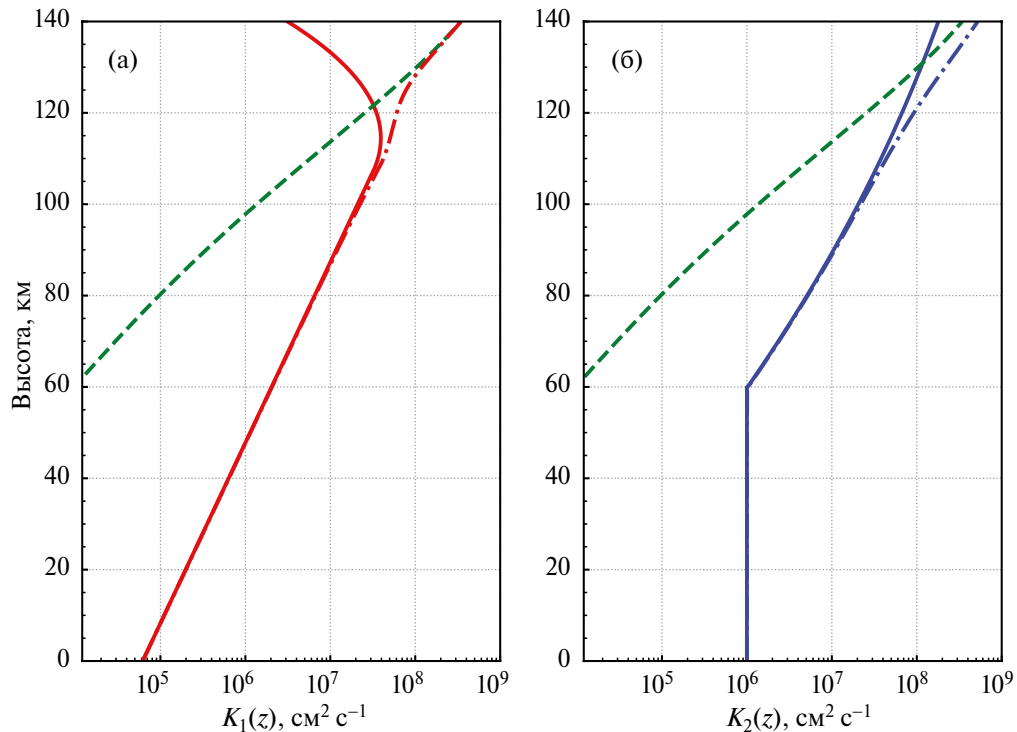


Рис. 3. На графиках сплошной линией изображены коэффициенты турбулентной диффузии, вычисленные по формуле (4) для (а) и по формуле (6) для (б). Пунктирной линией изображены вычисленные ранее коэффициенты молекулярной диффузии для компоненты О. Штрихпунктирной линией обозначен суммарный коэффициент диффузии $D_0 = D + K$.

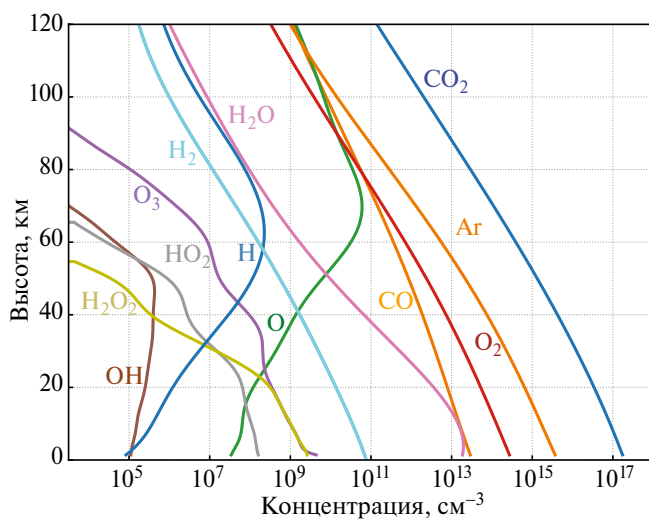


Рис. 4. Полученный по результатам расчетов по первому методу высотный среднесуточный профиль концентраций химических компонент атмосферы Марса для средних широт и условия равновесия.

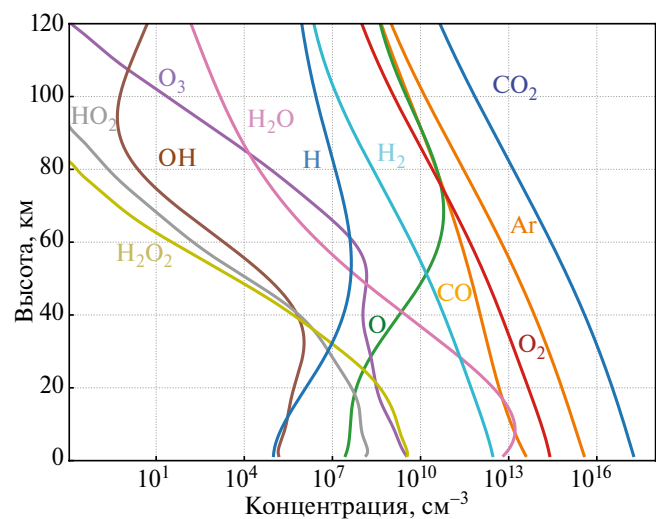


Рис. 5. Полученный по результатам расчетов по второму методу высотный среднесуточный профиль концентраций химических компонент атмосферы Марса для средних широт и условия равновесия.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проанализированы различные модели описания турбулентной диффузии газовых компонент атмосферы Марса. Среди всех вариантов были выбраны две теории, которые в дальнейшем использовались при расчетах.

В качестве исходного использовано уравнение непрерывности для описания модели переноса различных составляющих атмосферы Марса, а также соответствующая разностная схема. Сформулированы граничные условия в соответствии с полученными экспериментальными и теоретическими данными, а также получены необходимые профили температуры и давления.

Осуществлено решение полученной системы уравнений с использованием модернизированного метода Ньютона. Модели показали существенные различия в распределении малых составляющих атмосферы, в частности, водородсодержащих молекул, что указывает на важность выбора модели для описания турбулентной диффузии при построении одномерной фотохимической модели атмосферы.

В дальнейшем планируется продолжить всестороннее исследование газопереноса в атмосфере Марса, используя данные последних миссий. Новой важной задачей в будущем является включение в модель горизонтального движения атмосферных компонент, а также развитие полученных результатов с учетом плазменных слоев в верхней атмосфере.

Авторы признательны Д.А. Климачкову за полезные обсуждения и помощь в работе.

Работа поддержана темой “Планета” госзадания Минобрнауки РФ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Изаков М.Н. Структура и динамика верхних атмосфер Венеры и Марса // Успехи физ. наук. 1976. Т. 119. № 2. С. 295–342.
- Краснопольский В.А. Фотохимия атмосфер Марса и Венеры. М.: Наука, 1982. 293 с.
- Куликов Ю.Н., Рыхлецкий М.В. Моделирование вертикального распределения воды в атмосфере Марса // Астрон. вестн. 1983. Т. 17. № 3. С. 144–152. (Kulikov Yu N., Rykhletsckii M.V. Modeling of the vertical distribution of water in the atmosphere of Mars // Sol. Syst. Res. 1984. V. 17. № 3. P. 112–118).
- Куликов Ю.Н. Моделирование химического состава атмосферы Марса. Предварительные результаты сравнения высотного профиля атомарного кислорода с данными измерений спектрометра SPICAM // Тр. Кольского научн. центра РАН. Гелиогеофизика. 2018. Вып. 4. № 5 (9). С. 202–216.
- Маров М.Я., Колесниченко А.В. Введение в планетарную аэронию. М.: Наука, 1987. 457 с.
- Микрин Е.А., Михайлов М.В., Рожков С.Н., Семенов А.С., Краснопольский И.А., Почукаев В.Н., Марков Ю.Г., Перепелкин В.В. Высокоточный прогноз орбит космических аппаратов, анализ влияния различных возмущающих факторов на движение низкоорбитальных и высокоорбитальных КА // XXI Санкт-Петербургская международная конференция по интегрированным навигационным системам. 2014. С. 77–88.
- Хайпер Э., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений (анонс) // Математич. моделир. 1999. Т. 11. № 8. С. 127.
- Bougher S., Jakosky B., Halekas J., Grebowsky J., Luhmann J., Mahaffy P., Connerney J., Eparvier F., Ergun R., Larson D., and 74 co-authors. Early MAVEN Deep Dip campaign reveals thermosphere and ionosphere variability // Science. 2015. V. 350. № 6261. id. aad0459.
- Bougher S., Roeten K., Olsen K., Mahaffy P., Benna M., Elrod M., Jain S., Schneider N.M., Deighan J., Thiemann E., and 3 co-authors. The structure and variability of Mars dayside thermosphere from MAVEN NGIMS and IUVS measurements: Seasonal and solar activity trends in scale heights and temperatures // J. Geophys. Res.: Space Physics. 2017. V. 122. № 1. P. 1296–1313.
- Chaffin M.S., Deighan J., Schneider N.M., Stewart A.I.F. Elevated atmospheric escape of atomic hydrogen from Mars induced by high-altitude water // Nature geosci. 2017. V. 10. № 3. P. 174–178.
- Courtney W.G. Kinetics of condensation of water vapor // J. Chem. Phys. 1962. V. 36. № 8. P. 2018–2025.
- Fedorova A.A., Montmessin F., Rodin A.V., Korablev O.I., Määttänen A., Maltagliati L., Bertaux J.L. Evidence for a bimodal size distribution for the suspended aerosol particles on Mars // Icarus. 2014. V. 231. P. 239–260.
- Hirschfelder J.O., Curtiss C.F., Bird R.B. The molecular theory of gases and liquids. John Wiley & Sons, Hoboken, NJ: 1964. 1283 p.
- Hunten D.M. Aeronomy of the lower atmosphere of Mars // Rev. Geophys. 1974. V. 12. № 3. P. 529–535.
- Lindzen R.S. Turbulence and stress owing to gravity wave and tidal breakdown // J. Geophys. Res.: Oceans. 1981. V. 86. № C10. P. 9707–9714.
- Shaposhnikov D.S., Rodin A.V., Medvedev A.S., Fedorova A.A., Kuroda T., Hartogh P. Modeling the hydrological cycle in the atmosphere of Mars: Influence of a bimodal size distribution of aerosol nucleation par-

- ticles // J. Geophys. Res.: Planets. 2018. V. 123. № 2. P. 508–526.
- Shimazaki T., Shimizu M.* The seasonal variation of ozone density in the Martian atmosphere // J. Geophys. Res.: Space Phys. 1979. V. 84. № A4. P. 1269–1276.
- Uddin A.F., Numata K., Shimasaki J., Shigeishi M., Ohtsu M.* Mechanisms of crack propagation due to corrosion of reinforcement in concrete by AE-SiGMA and BEM // Construction and Building Materials. 2004. V. 18. № 3. P. 181–188.