

MODELO TEORICO DE CONCENTRACION DE CO₂

EN LA BAJA TERMOSFERA

Silvia Duhau¹ y Alejandro de la Torre

Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Universidad de Buenos Aires

Buenos Aires, República Argentina

RESUMEN

Se calcula numericamente el perfil de densidad de CO₂ en la baja termósfera en condiciones de baja actividad solar. Para ello, la condición de contorno superior es cuidadosamente analizada, así como la influencia de la variabilidad de la concentración del O⁺ sobre los perfiles de CO₂. Finalmente, se comparan los resultados obtenidos con los debidos a otros modelos teóricos y con las mediciones actualmente disponibles.

ABSTRACT

Theoretical computations of CO₂ density profiles are made for the low thermosphere during low solar activity conditions. That for, the upper boundary condition is carefully analyzed and the influence of the variability of the O⁺ concentration in the CO₂ profiles is estimated. Results are compared with other theoretical models ones, and with the available experimental results.

¹ Miembro de la Carrera de Investigador del CONICIT

INTRODUCCION

En los últimos años, varios autores han elaborado modelos teóricos de concentración de dióxido de carbono fuera de la conocida zona de equilibrio de mezcla, es decir, en la termósfera (Hays y Olivero, 1970; Wofsy y otros, 1972; Whitten y otros, 1973; Hunt, 1973; Trinks y Fricke, 1978). En esta región recientes mediciones de Offermann y otros (1981) revelan perfiles de densidad inferiores a los correspondientes a una situación de equilibrio difusivo para el CO_2 , lo cual es explicable a partir de la importancia de los procesos fotoquímicos de pérdida de esta especie en la región E.

En todos los trabajos teóricos mencionados, son fijadas dos condiciones de contorno: una inferior, en la base de la región E y otra superior en la baja región F. La primera reproduce el valor de densidad de CO_2 correspondiente a una distribución de equilibrio de mezcla con todos los demás componentes atmosféricos; para fijar la segunda condición de contorno, los distintos autores realizaron diferentes estimaciones del flujo de moléculas de CO_2 a altitudes donde la concentración de esta especie neutra es relativamente despreciable.

En el presente trabajo, esta última condición y los principales procesos de pérdida de CO_2 consistentes en la fotodisociación y las colisiones con átomos de O^+ serán discutidos y analizados. Como lamentablemente la densidad de esta especie iónica es en la actualidad escasamente conocida, se estima además la influencia de su variabilidad en el perfil de densidad de CO_2 calculado.

ALGUNAS CONSIDERACIONES SOBRE MODELOS DE DENSIDAD DE CO_2

Los trabajos teóricos de concentración de CO_2 usualmente consisten en el sistema acoplado de las ecuaciones de difusión y de continuidad. Este sistema es a menudo resuelto simultáneamente para el CO_2 , CO y en algunos casos además para el CH_4 -el CO es un producto de fotodisociación del CO_2 y las moléculas de OH resultantes de la fotodisociación del H_2O se combinan con monóxido de carbono reobteniéndose CO_2 . La ecuación de difusión es resuelta en la direc

ción vertical para la densidad de CO_2 , $n(\text{CO}_2)$, y para el flujo de estas moléculas, $\Phi(\text{CO}_2)$, aunque en algunos casos $n(\text{CO}_2)$ es sustituida por algún cociente adimensional del tipo $n(\text{CO}_2)/n'$, donde n' representa la densidad total o la de algún otro constituyente de referencia, como el N_2 o el Ar. En la sección anterior ya se mencionó el valor de equilibrio de mezcla que se toma para $n(\text{CO}_2)$ en la mesopausa (Offermann y otros, 1981), luego el procedimiento numérico habitual es iterar la integración del sistema de ecuaciones hasta que algún valor estimado a priori de $\Phi(\text{CO}_2)$ en la región F es obtenido.

Como hasta la actualidad no han sido medidos perfiles de $\Phi(\text{CO}_2)$, los modelos disponibles incluyen diversas estimaciones de este parámetro en la región F, como por ejemplo $\Phi(\text{CO}_2)$ igual a cero o al producto de la escala de altura por la velocidad de pérdida de moléculas de CO_2 debido a procesos fotoquímicos. Esta última estimación supone una resolución aproximada de la ecuación de continuidad.

Finalmente, con respecto a la producción y pérdida de moléculas de CO_2 en procesos fotoquímicos, los modelos mencionados han considerado los siguientes procesos:



a los cuales Hunt (1973) agregó la reacción



Trinks y Fricke (1978) estimaron la importancia de estos procesos y hallaron que por encima de una altitud de 90 km las reacciones de producción -(1) y (2)- son irrelevantes y que la fotólisis y la reacción con O^+ -(3) y (4)- parecen explicar la desviación de una distribución de equilibrio difusivo observada en el perfil medido. Por lo tanto, es posible calcular concentraciones de CO_2 independientemente de los otros componentes del carbono. Esto es lo que se ha hecho en el presente trabajo, donde las ecua-

ciones de difusión y continuidad fueron resueltas usando un método de integración numérica de segundo orden (método de Runge-Kutta). Las consideraciones más importantes de los modelos mencionados en función del presente trabajo, han sido sintetizadas en la Tabla 1.

LAS CONDICIONES DE CONTORNO

La evaluación de la concentración de CO_2 fue realizada en un intervalo de altura que comprende el rango medido: 80 a 160 km. Para ello, fue resuelto el sistema usual de ecuaciones de difusión y de continuidad (ver p. e. Trinks y Fricke, 1978).

Las condiciones de contorno fueron tomadas a 80 y 260 km de altura respectivamente. Fue fijada en el límite inferior una densidad igual al valor de equilibrio de mezcla, la cual es una buena suposición de acuerdo a los resultados de Hays y Olivero (1970).

La condición correspondiente al límite superior fue seleccionada de la siguiente manera: fue observado que si se fijaba a priori $n(\text{CO}_2)=0$ a 260 km un único valor de ϕ , llamémoslo $\phi_{260}(n_{260})$ era capaz de ajustar el perfil de densidades de CO_2 al valor de equilibrio de mezcla a 80 km. Análogamente, fijando $\phi(\text{CO}_2)=0$ a 260 km, era necesario un valor específico de densidad a esa altura, $n_{260}(\phi_{260})$, para nuevamente obtener el valor de $n(\text{CO}_2)$ conocido a 80 km. Estos dos casos límites comprenden un infinito número de pares posibles $(n(\text{CO}_2), \phi(\text{CO}_2))$ a 260 km -estando n y ϕ mutuamente correlacionados-, quedando solamente la condición de contorno inferior - n a 80 km- por fijar. La solución obtenida resulta además muy sensible a pequeñas modificaciones en cualquiera de las dos variables a 260 km, cuando se viola la correlación entre ambas antes mencionada. Dicha pequeña modificación produciría un corrimiento de todo el perfil de $n(\text{CO}_2)$ en forma casi independiente con la altura entre 80 y 180 km.

Como cualquiera de los posibles pares $(n(\text{CO}_2), \phi(\text{CO}_2))$ elegido a 260 km produce el mismo perfil de densidad por debajo de 180 km -y lógicamente hasta los 80 km-, resultan todos ellos equivalentes como condición inicial en la integración de las ecuaciones a fin de pretender una solución unívoca entre 80 y 180 km.

DATOS Y PARAMETROS DEL PRESENTE MODELO

Debido a que los procesos de pérdida de CO_2 son el motivo de la desviación de la distribución de esta especie del equilibrio difusivo, éstos han sido cuidadosamente calculados seleccionando todos los datos para las mismas condiciones solares y atmosféricas. La densidad del CO_2 ha sido hasta la actualidad escasamente medida, y los pocos datos disponibles -provenientes de técnicas espectrométricas- corresponden principalmente a condiciones de baja actividad solar, por lo tanto el cálculo fue realizado en condiciones análogas a fin de comparar los resultados. Los perfiles experimentales seleccionados para esta comparación han sido detallados en la Tabla 2 y en la Figura 1. En los tres vuelos las densidades de los constituyentes neutros mayoritarios N_2 , O_2 y O han sido medidos simultáneamente con el CO_2 . Con respecto a los vuelos S75 B y B2-1, el modelo de Jacchia (1977) reproduce adecuadamente los datos de los constituyentes mayoritarios dentro del error experimental, pero dicho modelo difiere considerablemente de los datos de densidades neutras obtenidos en la experiencia de Aladdin (Trinks y otros, 1978), fundamentalmente alrededor de la región E -ver Figura 2-.

Los perfiles de temperatura neutra utilizados en el cálculo corresponden al modelo de atmósfera de Jacchia (1977). Los coeficientes de difusión y de difusión turbulenta del CO_2 en la atmósfera han sido obtenidos de la U. S. Standard Atmosphere (1976) y de Banks y Kockarts (1973). Las eficiencias de las secciones eficaces fotoquímicas y los coeficientes de reacciones son los mismos que utilizaron Trinks y Fricke (1978) y los flujos solares corresponden a las mediciones de Manson (1976), Higgins (1976) y Torr y otros (1980).

Las densidades de O^+ han sido tomadas de las mediciones hechas a baja actividad solar por Johnson (1966) para alturas mayores que 140 km. Para completar el perfil por debajo de esta altitud, la densidad de O^+ fue evaluada suponiendo equilibrio fotoquímico (Azpiazu y Duhau, 1982) usando las concentraciones de N_2 , O_2 y O predichas por Jacchia (1977) y medidas por Trinks y otros (1978). Cabe aquí consignar que con los datos de atmósfera neutra de estos últimos autores se obtuvo prácticamente el mismo valor calculado de O^+ a 140 km usando el modelo de Jacchia, y que además coincide dentro

del error experimental con el valor obtenido por Johnson.

DISCUSION DE LOS RESULTADOS

Los resultados obtenidos en condiciones de baja actividad solar -temperatura exosférica=800°K- han sido graficados, para facilitar su comparación, junto a los perfiles experimentales antes mencionados -ver Figura 1-. Estos resultados fueron obtenidos en el presente modelo utilizando alternativamente los datos de atmósfera neutra de Trinks y otros (1978) y los predichos por Jacchia (1977). En condiciones diurnas, aparece una diferencia en los perfiles de $n(\text{CO}_2)$ calculados en ambos casos alrededor de la región E donde el perfil de $n(\text{O}^+)$ estimado con los datos de Trinks es levemente menor que el correspondiente al modelo de Jacchia. Por esta razón es que esta diferencia no se presenta durante la noche, al tomar cualquiera de los dos conjuntos de datos atmosféricos -situación de equilibrio difusivo-. Por último, como los dos conjuntos de datos experimentales en condiciones diurnas -Aladdin y B2-1- corresponden a ángulos cenitales solares suficientemente próximos entre sí, la diferencia entre las respectivas curvas teóricas calculables a partir del presente modelo no sería apreciable en la escala de la Figura 1, considerando además que en dichos vuelos los perfiles medidos de N_2 , O_2 y O -obtenidos con idénticas técnicas de espectrometría- son bastante similares.

Cabe señalar que, debido a que los perfiles experimentales son obtenidos normalizando los datos para ajustar el valor de $n(\text{CO}_2)$ alrededor de la base de la región E de acuerdo a un equilibrio de mezcla, el acuerdo entre resultados teóricos y experimentales a estas alturas no es significativo.

Trinks y Fricke (1978) utilizaron, a fin de determinar los perfiles experimentales de la distribución de densidades de los constituyentes N_2 , O_2 , O , Ar y CO_2 , un perfil de temperatura neutra obtenido con radar de retrodispersión: este hecho podría explicar la diferencia entre resultados teóricos y experimentales alrededor de la región F media, ya que a esas alturas, las mediciones hechas con radar de la temperatura ambiente presenta valores muy diferentes de los obtenidos con otras técnicas experimentales en las que

se basa el modelo de Jacchia. Esto es confirmado por el excelente acuerdo entre nuestro modelo y los valores medidos de CO_2 por encima de la región E, donde todos los resultados experimentales de temperatura neutra coinciden. Finalmente, recientes vuelos -S75 B y B2-1- mejoran visiblemente el acuerdo con nuestros resultados teóricos también en la región E, aunque lamentablemente estos vuelos solamente alcanzan alturas de 110 y 105 km respectivamente.

Por último, en la Figura 1 ha sido graficado el perfil teórico obtenido por Hunt (1973) al mediodía. De todos los trabajos teóricos mencionados en la Tabla 1, este último es el único que incluye valores absolutos de $n(\text{CO}_2)$ por encima de los 90 km. Puede observarse que presenta valores considerablemente mayores que los obtenidos en el presente trabajo, de acuerdo al hecho de que su condición de contorno superior $\phi(\text{CO}_2)=0$ a 160 km- conduce a una sobreestimación de la densidad de CO_2 . Tal como fuera señalado anteriormente, para computar $n(\text{CO}_2)$ por debajo de 180 km es una buena elección tomar la condición de contorno superior a 260 km aproximadamente, y en ese caso es irrelevante tomar $\phi(\text{CO}_2)\geq 0$ ó $n(\text{CO}_2)\geq 0$.

BIBLIOGRAFIA

- Azpiazu, M. C. , Duhau, S. , 1982; J. Phys. D.: Appl. Phys., 15, 933-40.
- Banks, P.M. , Kockarts, G. , 1973; Aeronomy; Academic Press, New York.
- Hays, P. B. , Olivero, J.J. , 1970; Planet. Space Sci., 18, 1729-33.
- Higgins, J.E. , 1976; J. Geophys. Res., 81, 1301-5.
- Hunt, B.G. , 1973; J. Atmos. Terr. Phys., 35, 1755-98.
- Jacchia, L.G. , 1977; Smithsonian Astrophys. Obs. Spec. Rep. N° 375.
- Johnson, C.Y. , 1966; J. Geophys. Res., 71, 330-2.
- Manson, J. E. , 1976; J. Geophys. Res., 81, 1629-35.
- Offermann, D. , Friedrich, V. , Ross, P. , von Zahn, U. , 1981; Planet. Space Sci., 29, 747-64.
- Torr, M. R. , Torr, D. G. , Hinteregger, H. E. , 1980; J. Geophys. Res., 85A11, 6063-8.
- Trinks, H. , Fricke, H. K. , 1978; J. Geophys. Res., 83A8, 3883-6.

- Trinks, H., Offermann, D., von Zahn, V., Steinhauer, C., 1978; J. Geophys. Res., 83A5, 2169-76.
- Whitten, R. C., Sims, J. S., Turco, R. P., 1973; J. Geophys. Res., 78, 5362-74.
- Wofsy, S. C., Mc Donnell, L., Mc Elroy, M. B., 1972; J. Geophys. Res., 77, 4477-93.

EPIGRAFES DE LAS FIGURAS

- Fig. 1: Comparación de perfiles experimentales y teóricos obtenidos con el presente modelo de la densidad de CO₂ para condiciones diurnas, usando los datos atmosféricos de Trinks y otros (1978)(T) y los debidos al modelo de Jacchia (1977) (J77), así como los correspondientes a condiciones de equilibrio difusivo. El perfil teórico calculado para el mediodía por Hunt (1973), ha sido también incluido.
- Fig. 2: Concentraciones de las especies atmosféricas mayoritarias N₂, O₂ y O medidas por Trinks y otros (1978) y predichas por el modelo de atmósfera neutra de Jacchia (1977).
- Tabla 1: Síntesis comparativa de los principales aspectos de los modelos teóricos de densidad de CO₂, en función del modelo presentado en este trabajo.
- Tabla 2: Principales condiciones solares y atmosféricas en las cuales los perfiles experimentales de densidad de CO₂ seleccionados en este trabajo han sido medidos.

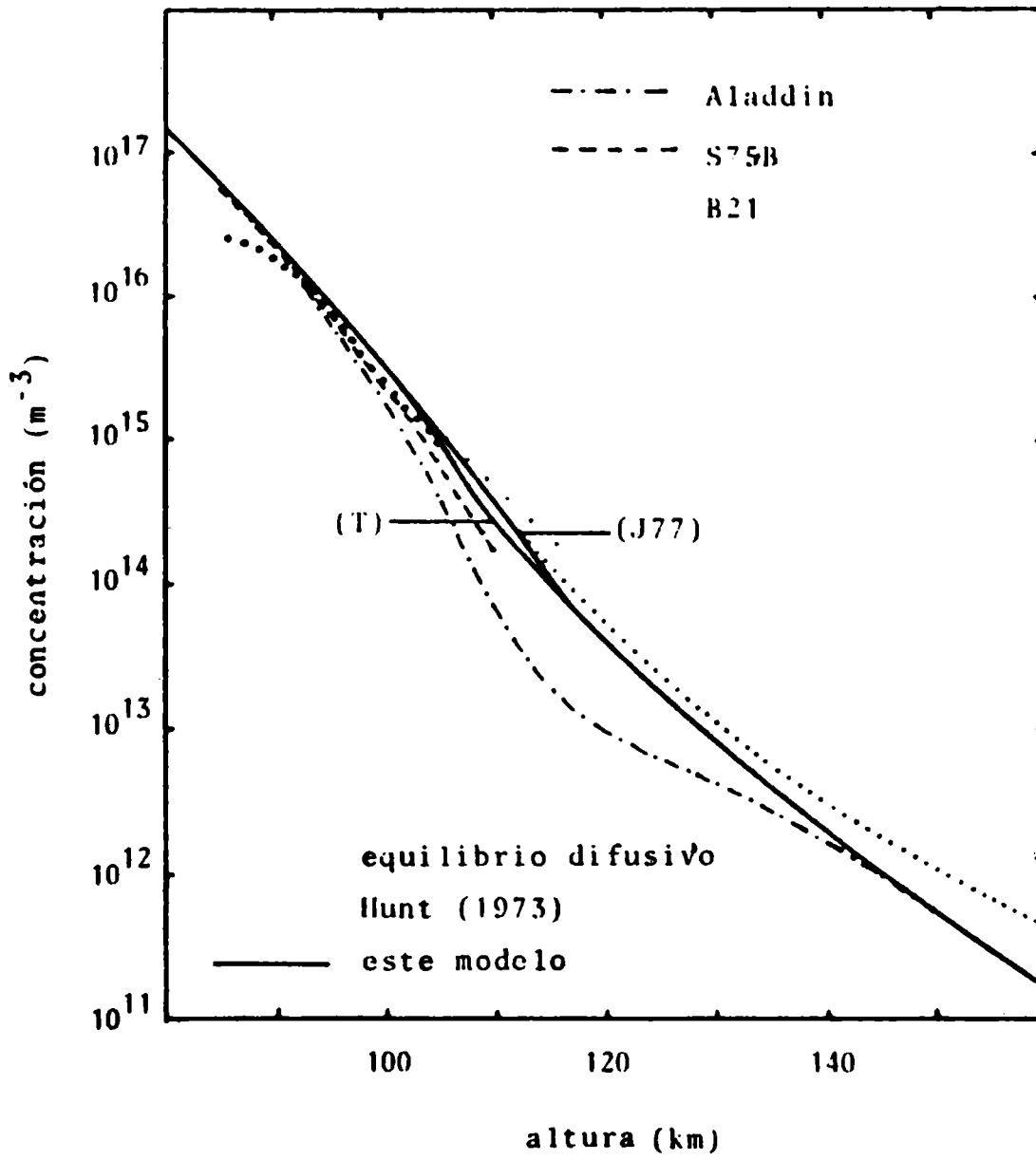


Figura 1

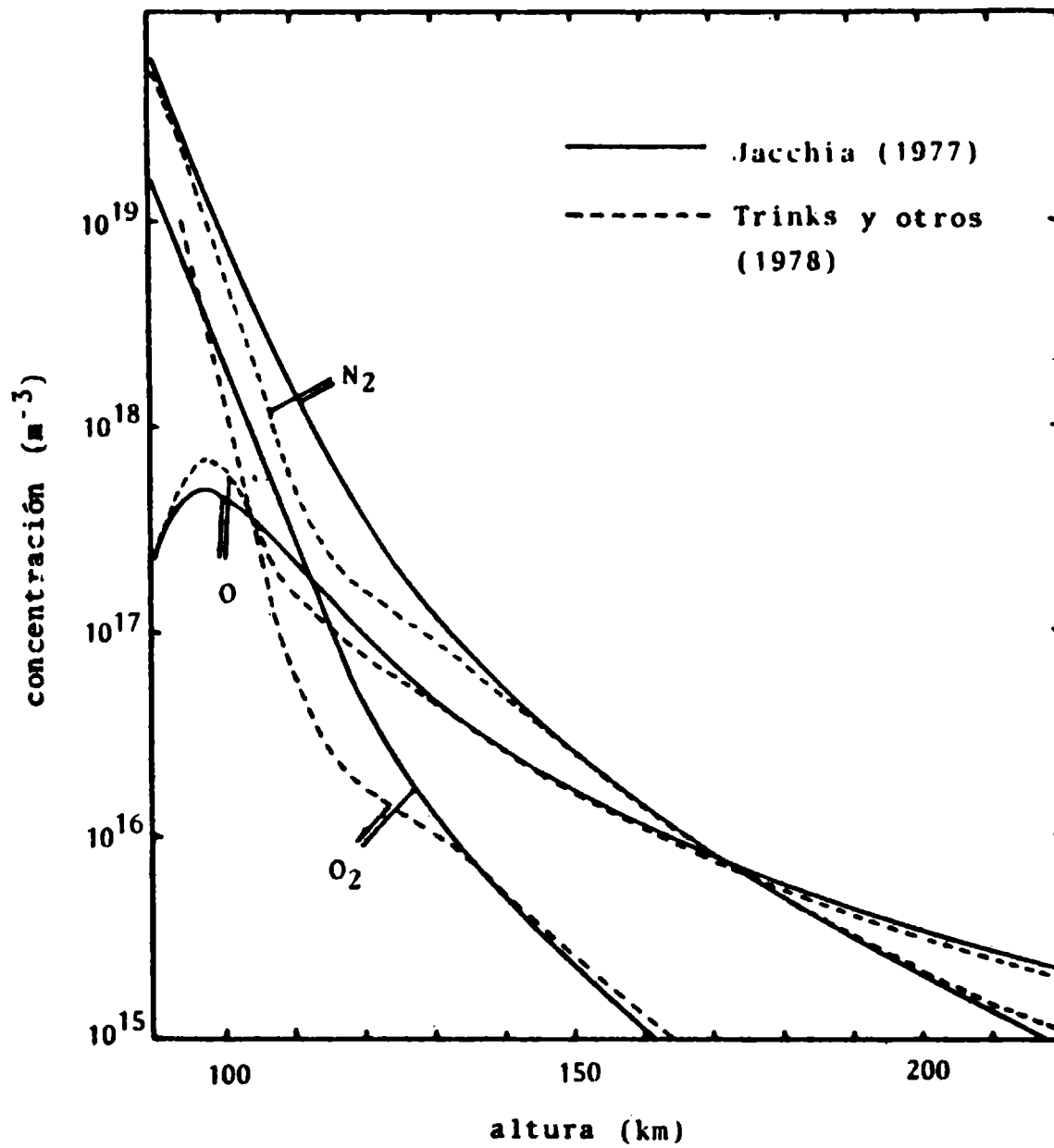


Figura 2

	Hays y Olivero (1970)	Wofsy (1972)	Whitten y otros (1973)	Hunt (1973)	Trinks y Fricke (1978)
Componentes calculados simultáneamente	CO ₂ y CO	CO ₂ , CO y CH ₄	CO ₂ , CO, CH ₄ y otros compuestos del carbono	varios constituyentes atmosféricos e ionosféricos, incluyendo CO, CO ₂ y CH ₄	CO ₂ y Ar
Rango de integración (km)	12 a 200	0 a 120	10 a 90	60 a 160	80 a 180
Parámetro calculado	$n(\text{CO}_2)/n_{\text{total}}$	$n(\text{CO}_2)/n_{\text{total}}$	$n(\text{CO}_2)$	$n(\text{CO}_2)$	$n(\text{CO}_2)/n(\text{Ar})$
Condiciones de contorno para el CO ₂ a la altura z (km)	$n(\text{CO}_2)/n_{\text{total}} = 3.145 \cdot 10^{-4}$, a $z=12$ (*)	$\phi = \text{esc. de alt. atmosf. por la veloc. de pérdida en procesos fotoquím.}$, a $z=120$, y $n(\text{CO}_2)/n_{\text{total}} = \text{eq. mez. a } z=0$	$\phi=0$ a $z=120$, y $n(\text{CO}_2) = 3 \cdot 10^{-15} \text{ cm}^{-3}$, a $z=10$	$\phi=0$ a $z=160$, y $n(\text{CO}_2)/n_{\text{tot.}} = 3.14 \cdot 10^{-4}$ a $z=58$	$\phi = \text{esc. de alt. del CO}_2 \text{ por la veloc. de pérdida en procesos fotoquím.}$ a $z=180$, y $n(\text{CO}_2)/n_{\text{total}} = 0.0335$ a $z=80$

(*) En este caso, el flujo fue calculado integrando a priori la ecuación de continuidad suponiendo una distribución de equilibrio para el CO₂.

Tabla 1

Satélite	Referencia	F _{10.7}	K _p	A _p	Rango de altura	Hora (UT)	Angulo cenital solar
ALADDIN 74	Trinks y Fricke (1978)	89	3 ⁺	19	92.5-150	2016	43°
B2-1	Offermann y otros (1981)	72	2 ⁺	20	86.5-105	1530	17°
S75 B	Offermann y otros (1981)	98	4	27	85-110	0125	condic. noct.

Tabla 2