ПМТФ, № 2, 1972

УДК 536.3;535.338

К РАСЧЕТУ ПОГЛОЩЕНИЯ В КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВРАЩАТЕЛЬНОЙ ПОЛОСЕ СПЕКТРА

С. П. Детков

(Свердловск)

Интегральное поглощение в полосе спектра представлено в виде ряда. Устанавливается монотонное возрастание коэффициентов ряда и их предел. Результаты используются для анализа известных формул поглощения и при составлении приближенных формул.

В камерах сгорания парогенераторов, газовых турбин и других агрегатов теплообмен происходит в основном за счет излучения и поглощения среды с колебательно-вращательным спектром. В расчетах теплообмена излучением необходимо учитывать характеристики полос спектра. Центральную роль приобрела оптико-геометрическая величина A, названная интегральным поглощением в полосе спектра

$$A = \Delta\omega \int\limits_0^\infty [1 - \exp(-\alpha_\omega(y)\, x)]\, dy \tag{1}$$

$$\alpha_\omega = \alpha_0 \psi(y), \qquad \alpha_0 = S / \Delta\omega, \qquad y = |\omega - \omega_0| / \Delta\omega$$

Здесь ω — волновое число ($см^{-1}$), ω_0 — положение центра полосы, $\Delta\omega$ — параметр ширины, S — интегральная интенсивность ($см^{-1}/м \cdot атм$), x — путь луча ($м \cdot атм$), α_ω — спектральный коэффициент поглощения $(м \cdot атм)^{-1}$, ψ — безразмерная функция. Величине A посвящен специальный раздел теории, включающий модели полос.

Далее вместо формулы (1) рассмотрим ряд для безразмерного поглощения, полученный разложением в формуле (1) экспоненциального члена

$$\bar{A} = \frac{A}{\Delta\omega} = \alpha_1 x - \alpha_1\alpha_2 \frac{x^2}{2!} + \ldots + (-1)^{i+1} \frac{x^i}{i!} \prod_{j=1}^{i} \alpha_j \ldots \tag{2}$$

$$\prod_{j=1}^{i} \alpha_j = \int\limits_0^\infty \alpha_\omega{}^i dy \tag{3}$$

Теорема. Последовательность коэффициентов ряда (2) монотонно увеличивается до предела

$$\lim_{i\to\infty} \alpha_i = (\alpha_\omega)_{\max}, \qquad i \geqslant 2 \tag{4}$$

Здесь $(\alpha_\omega)_{\max}$ — максимальный спектральный коэффициент поглощения.

При доказательстве заметим предварительно, что полосу всегда можно перестроить так, чтобы спектральный коэффициент α_ω уменьшался монотонно от максимального значения при $v = 0$ до нуля на бесконечности. Здесь $v = \nu/\Delta\omega$, ν — значение аргумента после перестройки оси волновых чисел.

Контур перестроенной полосы заменим линией

$$\alpha_\omega = (\alpha_\omega)_{\max} (1 - v / v_0)$$

где v_0 — абсцисса, при которой коэффициент $\alpha_\omega (v)$ убывает до нуля. Линейный контур накрывает действительный контур или касается его. Тем самым теорема доказывается в менее благоприятных условиях. Из соотношения (3) следует:

$$\alpha_i = (\alpha_\omega)_{\max} \frac{\int\limits_0^{v_0} (1 - v / v_0)^i dv}{\int\limits_0^{v_0} (1 - v / v_0)^{i-1} dv} = \frac{i}{i+1} (\alpha_\omega)_{\max}$$

Теорема доказана.

При $v_0 \to \infty$ возникает особенность. Но в этом случае достаточно рассмотреть прямоугольный контур, перекрывающий все другие. Результат получается простой: все α_j равны, а ряд (2) свертывается точно

$$\bar{A} = 1 - \exp(- \alpha_j x)$$

Теорема легко проверяется на примерах одиночных линий с дисперсионным или допплеровским контурами. Она может быть доказана феноменологически, если коэффициентам α_j придать физический смысл. Так, коэффициент α_1 определяет поглощение черного потока в полосе на начальном участке (при $x = 0$). Коэффициент α_2 определяет поглощение переизлученного потока на начальном участке. Коэффициент α_3 определяет переизлучение описанного поглощенного потока, если в этой, как и в последующих, стадии взаимодействия излучения с газом уже нет перераспределения энергии по волновым числам. Коэффициент α_4 определяет поглощение описанного переизлученного потока на начальном участке и т. д. Число переизлучений в принципе бесконечное. По мере переизлучений составляющие потока с меньшими значениями α_ω исчезают; остается последняя составляющая с максимальным спектральным коэффициентом поглощения.

Исследование известных функций $\bar{A}$ возможно после их дифференцирования и определения последовательности α_j на основании равенства

$$\prod_{j=1}^{i} \alpha_j = (-1)^{i+1} (\partial^i \bar{A} / \partial x^i)_{x=0} = (-1)^{i+1} \bar{A}_0^{(i)} \tag{5}$$

Расхождения с теоремой укажут на некорректность исследуемой формулы $\bar{A}$. По теореме (4) можно найти $(\alpha_\omega)_{\max}$.

Определение производных $A_0^{(i)}$ часто бывает громоздким. Удается найти лишь первые производные. В таком случае выводы можно сделать для малых и средних толщин, когда основную роль играют первые коэффициенты — $\alpha_1, \alpha_2, \ldots$. По мере утолщения слоя газа их роль снижается, хотя и не скоро, поскольку оптическая толщина на кантах полос остается малой при очень больших толщинах слоя.

Рассмотрим класс формул, полученных на основании моделей полос

$$\bar{A} = \int\limits_0^\infty A_\omega dy \tag{6}$$

Здесь A_ω — среднее поглощение в достаточно узком интервале спектра. Величины A_ω описываются узкополосными моделями. В [1] показано, что во всех моделях от регулярных до статистических в качестве аргумента A_ω можно принять

$$z = \frac{sx / d}{\sqrt{1 + axs / \beta d}}, \quad \beta = 2\pi \frac{b}{d}, \quad 2 \geqslant a \geqslant \frac{\pi}{2} \tag{7}$$

Здесь s, b и d — интегральная интенсивность, полуширина линии и среднее расстояние между ними. Число a зависит от принятой модели. Из (5) и (6) следует:

$$\prod_{j=1}^{i} \alpha_j = (-1)^{i+1} \int_0^\infty A_{\omega 0}^{(i)} dy, \quad A_{\omega 0}^{(i)} = (\partial^i A_\omega / \partial x^i)_{x=0} \tag{8}$$

Производная $A_{\omega 0}^{(i)}$ состоит из суммы, в члены которой входят разные производные $z_0^{(k)} = (\partial^k z / \partial x^k)_{x=0}$, включая высшую производную $z_0^{(i)}$. Согласно (7)

$$z_0^{(k)} = (-1)^{k+1} \left(\frac{s}{d}\right)^k \left(\frac{a}{2\beta}\right)^{k-1} k \times 1 \times 3 \times 5 \times \ldots \times (2k-3)$$

После подстановки $z_0^{(k)}$ в (8), если параметр β не зависит от волнового числа, получается

$$\prod_{j=1}^{i} \alpha_j = F_i(\beta) \int_0^\infty \left(\frac{s}{d}\right)^i dy \tag{9}$$

Функция F_i — полином, в члены которого входят множители $(1 / \beta)^{k-1}$ при $k = 1, 2, \ldots, i$.

Зависимость параметра s / d от волнового числа определяется в так называемой широкополосной модели [2]

$$s / d = \alpha_0 f(y), \quad \alpha_0 = S / \Delta\omega, \quad \int_0^\infty f(y)\, dy = 1 \tag{10}$$

Функция $f(y)$ — огибающая полосы. Из (9) и (10) следует:

$$\prod_{j=1}^{i} (\alpha_j / \alpha_0) = C_i F_i, \quad C_i = \int_0^\infty f^i(y)\, dy \tag{11}$$

Как видно, последовательность чисел C_i определяется только широкополосной моделью. Теорема выполняется при любой функции $f(y)$, хотя бы отдаленно похожей на огибающую полосы. Последовательность чисел F_i определяется только узкополосной моделью. Она же определяет зависимость поглощения от давления.

Перейдем к конкретным формулам интегрального поглощения, получившим широкое распространение.

Широкополосная модель Эдвардса [2]. Огибающая полосы соответствует модели жесткого ротатора

$$f(y) = y \exp(-y^2) \tag{12}$$

Здесь Q-ветвь отброшена, P- и R-ветви приняты симметричными. Параметр β не зависит от волнового числа. Параметр $\Delta\omega$ характеризует одну ветвь полосы, что несколько меняет часть формул (10) и (11)

$$C_1 = 2\int_0^\infty f(y)\,dy = 1,\quad C_i = 2\int_0^\infty f^i(y)\,dy = \Gamma\left(\frac{i+1}{2}\right) \Big/ i^{(i+1)/2},\qquad i \geqslant 2 \tag{13}$$

Часто используется более простая модель $f(y) = \exp(-y)$, для которой $C_i = 1 / i$.

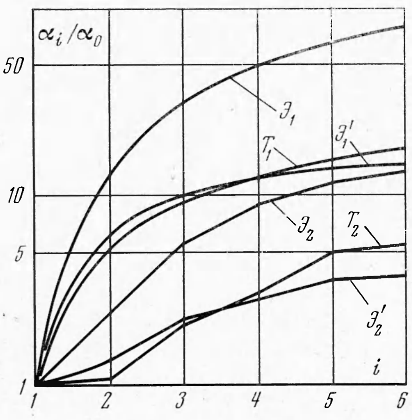
В качестве узкополосной обычно привлекается модель Гуди

$$A_\omega = 1 - e^{-z},\quad z = \frac{sx/d}{\sqrt{1 + 2sx/\beta d}}\qquad (\beta = 2\pi b / d) \tag{14}$$

С использованием (14) ниже представлены шесть величин F_i:

i	F_i
1	1
2	$1 + \frac{2}{\beta}$
3	$1 + \frac{6}{\beta} + \frac{9}{\beta^2}$
4	$1 + \frac{12}{\beta} + \frac{48}{\beta^2} + \frac{60}{\beta^3}$
5	$1 + \frac{20}{\beta} + \frac{150}{\beta^2} + \frac{480}{\beta^3} + \frac{524.8}{\beta^4}$
6	$1 + \frac{30}{\beta} + \frac{360}{\beta^2} + \frac{2100}{\beta^3} + \frac{5760}{\beta^4} + \frac{5670.4}{\beta^5}$

Любопытное совпадение полиномов F_i получается при $A_\omega = 1 + \exp(z)$ и всех положительных производных $z_0^{(i)}$.



На фигуре показаны коэффициенты α_i / α_0, соответствующие ряду (2). Кривые означают: $Э_1$, $Э_2$ — по формулам (11) — (14), полиномы $F_i(\beta)$ представлены ранее; $Э_1'$, $Э_2'$ — по формулам (11), (12) и (15); T_1, T_2 — по формулам (5) и (16). Индексы 1 и 2 в обозначениях кривых соответствуют $\beta = 0.051266$ и $\beta = 0.29$. Как видно, теорема выполняется (см. выражения α_i / α_0).

Величина $(\alpha_\omega)_{\max}$ по (14) оказывается бесконечно большой. Это следует из того, что статистическая модель (14) включает линии с бесконечной интенсивностью при фиксированной ширине. Если в той же модели принять линии с одинаковой интенсивностью, то

$$z = \beta L\,(sx / \beta d) \tag{15}$$

где L — функция Ланденбурга и Райхе. Теперь $(\alpha_\omega)_{\max}$ — некоторая конечная величина. При $\beta \to 0$, когда линии не перекрываются, величина $(\alpha_\omega)_{\max} = s / \pi b$, как для одиночной линии.

Величины α_i / α_0 с использованием (15) при тех же β_1 и β_2 показаны на фигуре. Полиномы F_i отличаются от представленных ранее только числами в числителях.

Вместо (14) используем приближение в рамках эльзассеровской модели

$$A_\omega = \operatorname{erf}(z\sqrt{\pi}\,/\,2)$$

Аргумент z записан в (7) при $a = \pi / 2$. Согласно [1] в случае слабой линии приближение имеет наибольшую ошибку $< 3\%$ при $\beta = 1$. Она увеличивается до 7—7.5% с уменьшением β. Максимальное абсолютное отклонение не превышает 0.03—0.035. С дополнительной погрешностью $< 0.7\%$ используем упрощение [1]

$$\operatorname{erf}(z\sqrt{\pi}\,/\,2) \approx \sqrt{1 - \exp(-z^2)}$$

Тогда уже четвертая производная $A_{\omega 0}^{(4)}$ становится бесконечно большой. Теорема (4) не выполняется вследствие введенных приближений.

Рассмотрим эмпирическую формулу, предложенную в [3] и с тех пор широко используемую в литературе

$$\bar{A} = \ln\left(1 + uf\,\frac{u+2}{u+2f}\right) \tag{16}$$

$$u = \alpha_0 x, \quad \alpha_0 = \frac{S}{\Delta\omega}, \quad f = 2.94\,[1 - \exp(-1.3\beta)], \quad \beta = 2\pi\frac{b}{d}$$

Первые отношения α_i/α_0 в общем виде представлены ниже:

i	$\prod\limits_{j=1}^{i}(\alpha_i\,/\,\alpha_0)$
1	1
2	$1\,/\,f$
3	$\frac{3}{2f^2} + \frac{3}{2f} - 1$
4	$3\left(\frac{1}{f^3} + \frac{2}{f^2} - 1\right)$
5	$\frac{15}{2}\left(\frac{1}{f^4} + \frac{3}{f^3} + \frac{2}{f^2} - \frac{2}{f} - \frac{4}{5}\right)$
6	$\frac{45}{2}\left(\frac{1}{f^5} + \frac{4}{f^4} + \frac{44}{9f^3} + \frac{1}{3f^2} - \frac{16}{3f} + \frac{4}{9}\right)$

На фигуре приведены отношения $\alpha_i\,/\,\alpha_0$ при $\beta = \beta_1$ и $\beta = \beta_2$. При $\beta \leqslant \beta_1 = 0.051266$ можно принять $f = 3.82\,\beta$ с погрешностью $< 3\%$.

При определенных условиях формула (16) упрощается

$$\bar{A} = \ln(1 + uf), \quad \alpha_i\,/\,\alpha_0 = (i-1)\,f, \quad f \geqslant 2$$

По (2) получается

$$\bar{A} = uf - \frac{(uf)^2}{2} + \frac{(uf)^3}{3} - \ldots$$

Ряд расходится при $uf > 1$. Следовательно, формула (16) не вполне корректная. Например, она ограничена по параметру β снизу. При $u \gg 2f$ коэффициент α_1 получается неверным, так как зависит от давления. В [4] эмпирическая формула $\bar{A} = \ln(2 - \beta + u\beta)$ рекомендуется при $\bar{A} > 2$. Тем самым очень малые значения $u\beta$ исключаются. Далее величина $(\alpha_\omega)_{max}$ по (16), если она имеет смысл, получается бесконечно большой. И, наконец, отметим, что контур перестроенной полосы $f(v)$, соответствующий формуле (16), имеется, по-видимому, только при $x \to 0$, $f(v) = v\exp(-v)$.

Действительно, при малых толщинах в соответствии с формулой (16)

$$f(v) = ve^{-v} \approx -\frac{1}{u}\ln[1 - e^{-v}h(vu)]$$

$$\bar{A} = \int_0^\infty [1 - \exp(-uf(v))]\,dv = \int_0^\infty e^{-v}h(uv)\,dv = \ln(1+u)$$

Здесь $h(vu) = \ln(\gamma vu) + E_1(vu)$, $\ln\gamma = 0.57722$, E_1 — интегральная показательная функция, $h(vu) \approx vu$ при $vu \ll 1$.

Сравнение приведенных ранее выражений для полиномов показывает существенные различия в зависимости коэффициентов α_j от параметра β.

Перейдем к важным примерам приближенных формул, при создании которых используются свойства ряда (2). Если известны хотя бы первые коэффициенты α_j, ряд (2) дает формулу, пригодную для малых толщин. Ее предел можно расширить после оценки остатка ряда. Часто удается приближенное свертывание всего ряда.

Функция Ланденбурга и Райхе. Функция $L(u)$ определяет поглощение в одиночной линии с дисперсионным контуром. Интерес к функции возрос после того, как Гуди использовал ее при описании поглощения в узкой полосе (см. формулу (15)). В соответствии с рядом (2)

$$L(u) = \frac{A}{2\pi b} = u_1 - \frac{u_1u_2}{2!} + \ldots + (-1)^{i+1}\frac{1}{i!}\prod_{j=1}^{i} u_j + \ldots \tag{17}$$

$$u = \frac{sx}{2\pi b}, \quad u_j = \frac{sx}{2\pi b}m_j, \quad m_1 = 1, \quad m_j = 2 - \frac{1}{j-1}, \quad j \geqslant 2$$

Здесь A — интегральное поглощение в линии ($см^{-1}$).

Последовательность чисел m_j позволила сделать выбор функции пригодной для всех толщин

$$L = \sqrt{\frac{2}{\pi}u}\,\mathrm{erf}\left(\frac{\pi}{2}\sqrt{\frac{u}{2}}\right)$$

С использованием приведенного выше приближения интеграла вероятностей получается

$$L_0 = \sqrt{\frac{2}{\pi}u\left[1 - \exp\left(-\frac{\pi}{2}u\right)\right]}$$

с максимальной погрешностью 5.7% при $u = 1.2$—1.6.

В работе [1] приведена формула

$$L = u\left[1 + \left(\frac{\pi}{2}u\right)^{1.25}\right]^{-0.4} \tag{18}$$

с погрешностью $\lesssim 1\%$. Ее упрощение дает

$$L_* = u / \sqrt{1 + \pi u / 2}$$

с наибольшей погрешностью 7.5% при $u \approx 1$.

Благодаря тому что отклонения L_0 и L_* противоположные, получаем интерполяционную формулу

$$L = 0.57L_0 + 0.43L_* \tag{19}$$

с погрешностью $< 1\%$ (как правило, значительно меньше 1%). Формула (19) более удобная, чем (18).

При малых толщинах очень точные приближения можно получить путем отдельного учета первых членов ряда (17). Благодаря тому, что последовательность чисел m_j быстро сходится, остаток ряда можно свернуть с помощью экспоненциальной функции

$$L = 0.2u + 0.14\,u^2 - 0.065u^3 + [1 - \exp(-1.6u)] / 2 \tag{20}$$

Коэффициент при u^3 исправлен так, чтобы функция была точной при $u = 1.2$. В таком случае формула (20) хорошо описывает функцию до $u = 1.4$.

Конструкции формул с отдельным учетом первых членов ряда могут быть другими.

Приведем также экстраполяционную формулу, пригодную для больших аргументов

$$L(u_*) = \sqrt{u_* / u}\, L(u)$$

При $u = 5$, $0.7 \leqslant u_* / u \leqslant 1.56$ погрешность формулы равна 1.2 —1%. По мере увеличения u и сближения аргументов u_*, u погрешность быстро уменьшается.

Поглощение в полосе по модели (12) с перекрывающимися линиями.

$$A_\omega = 1 - \exp(-sx / d), \quad \bar{A} = 2I(u_0)$$

$$2I = u_0 - C_2 \frac{u_0^2}{2!} + C_3 \frac{u_0^3}{3!} - \ldots \quad (u_0 = \alpha_0 x,\ \alpha_0 = S / \Delta\omega) \tag{21}$$

Здесь C_j определяется по (13), $C_2 = 0.3133$. Далее C_j / C_{j-1} стремится к пределу $1 / \sqrt{2e} \approx 0.43$. Близкие значения чисел C_j / C_{j-1} позволили использовать для свертывания ряда (21) экспоненциальную функцию

$$I = 1.6\,[1 - \exp(-\,0.625\,u_0 / 2)]$$

Максимальная погрешность формулы в интервале $0 \leqslant u_0 \leqslant 4$ равна 1.7% при $u_0 = 4$. Далее она быстро увеличивается. При $u_0 \geqslant 20$ [5]

$$I = 1.11 \sqrt{\ln(1.21 u_0)}$$

с погрешностью < 3%.

Для промежуточных значений $4 \leqslant u_0 \leqslant 20$ нашли формулу

$$I = \sqrt{1.7\,[1 + \exp(-\,0.43u_0)]\,\ln(u_0 / 2)}$$

с максимальной погрешностью < 1.5% при $u_0 = 8$.

Теперь имеются достаточно простые и точные формулы I для всех u_0. Они значительно точнее приближения в [6] для всех u_0

$$I = \sqrt{[1 - \exp(-\,u_0 / 2)]\,[0.5772 + \ln(u_0 / 2)] + E_1(u_0/2)}$$

Наконец, приведем другую формулу с отдельным учетом первых членов ряда (21)

$$I = \frac{u_0}{2}\left\{1 - \frac{C_2 u_0}{2}\left[1 - \frac{C_3^2}{C_2 C_4}\left(1 - \frac{2C_3 \varphi}{C_4 u_0}\right)\right]\right\}$$

$$\varphi = 1 - \left[1 - \exp\left(-\frac{C_4 u_0}{C_3}\right)\right]\frac{C_3}{C_4 u_0}$$

$$(C_2 = 0.3133, \quad C_3 = 0.1111, \quad C_4 = 0.04158)$$

Погрешность формулы ничтожная, вплоть до $u_0 = 6$. Далее она увеличивается и при $u_0 = 10$ равна 0.25%. Для сравнения были привлечены графики функции $I(u_0)$ в [5], более подробные, чем в [6].

Поступила 7 IX 1971

ЛИТЕРАТУРА

1. Матвеев В. С. Приближенные представления функции поглощения эльзассеровой и статистической моделей полос. Ж. прикл. спектроскопии, 1970, т. 12, вып. 3.
2. Эдвардс Д. Излучательные характеристики материалов. Теплопередача, 1969, т. 91, № 2.
3. Tien C. L., Lowder J. E. A correlation for total band absorptance of radiating gases. Internat. J. Heat and Mass Trans., 1966, vol. 9, No. 7.
4. Эдвардс, Глэссен, Хаузер, Ташер. Лучистый теплообмен в неизотермических несерых газах. Теплопередача, 1967, т. 89, № 3.
5. Лукаш В. П. Расчет излучательной способности продуктов сгорания углеводородных топлив (CO_2 и H_2O) при высоких температурах и давлениях. Теплофизика высоких температур, 1971, т. 9, № 4.
6. Пеннер С. С. Количественная молекулярная спектроскопия и излучательная способность газов. М., Изд-во иностр. лит., 1963.