

УДК 535.15, 535.233, 536.24, 535.231

## **Расчет теплового излучения колебательно-неравновесного потока газа методом $k$ -распределения**

**А.М. Молчанов, Л.В. Быков, Д.С. Янышев**

*Московский авиационный институт  
(Национальный исследовательский университет)*

E-mail: bykov@mai.ru

Разработана методика расчета инфракрасного излучения колебательно-неравновесного газа на основе метода  $k$ -распределения. Сопоставление данных настоящего расчета неравновесного излучения с результатами других авторов и с экспериментальными данными продемонстрировало удовлетворительное согласование. Показано, что результаты расчета интенсивности излучения с использованием неравновесной и равновесной методик существенно отличаются друг от друга. Расхождение усиливается с ростом высоты (уменьшением давления) и может превышать порядок величины.

**Ключевые слова:** излучение в газах,  $k$ -распределение, неравновесные течения, химические реакции, численное моделирование.

### **Введение**

Газовые смеси, характеризующиеся неравновесным возбуждением колебательных степеней свободы молекул, имеют широкое распространение в различных областях науки и техники. В качестве примеров следует отметить газодинамические лазеры, реагирующие газовые смеси, течения за ударной волной, а также сверхзвуковые струи с большой степенью нерасчетности. В таких течениях проявляется ярко выраженное отклонение от равновесия между колебательными и поступательно-вращательными степенями свободы.

Исследование переноса излучения в колебательно-неравновесном газе представляет собой важную прикладную и научную проблему. Во многих случаях радиационные процессы имеют существенное влияние на энергетический баланс таких систем. Измерение интенсивности излучения колебательно-вращательных линий в сочетании с теоретическим определением этих величин является практически единственным методом диагностики высокотемпературных и высокоскоростных течений колебательно-неравновесного газа. Спектр испускаемой радиации состоит из большого количества отдельных линий. При таком характере спектра высокотемпературных газов расчет излучения молекул оказывается крайне сложной и трудоемкой задачей.

В работе [1] было показано, что метод  $k$ -распределения [2–4] позволяет с высокой эффективностью проводить расчеты узкополосного излучения горячих газов с ярко выраженным линейчатым характером спектра. Результаты проведенных вычислений

оказались сопоставимы с результатами, полученными методом прямого расчета по спектральным линиям (line-by-line, LBL) [5], и хорошо согласовались с экспериментальными данными как для однородных, так и для неоднородных газовых смесей.

Целью настоящей работы является разработка методики расчета теплового излучения колебательно-неравновесного газа на основе метода  $k$ -распределения. Задача состоит из двух взаимосвязанных частей: определение распределений излучающих молекул по колебательным уровням на основе рассмотрения колебательных процессов релаксации и использование полученного распределения для определения излучательных и поглощательных характеристик газа в инфракрасной области спектра.

## 1. Математическая модель течения химически и термически неравновесной газовой смеси

### 1.1. Основная система уравнений

Основная система уравнений включает общее уравнение неразрывности, уравнение количества движения, уравнение полной энергии, уравнения неразрывности для компонентов газовой смеси и уравнения колебательной энергии для всех колебательных энергетических мод.

Уравнение неразрывности:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j) = 0,$$

где  $\rho$  — плотность газовой смеси,  $u_j$  — компонента скорости в  $j$ -ом направлении.

Уравнение количества движения:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j u_i + \delta_{ji} p - \tau_{ij}) = 0,$$

где  $p$  — давление,  $\tau_{ij}$  — тензор вязких напряжений.

Уравнение полной энергии:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \rho u_j \left( E + \frac{p}{\rho} \right) + q_{tr,j} + q_{v,j} + \sum_s V_{s,j} \rho_s h_s - u_i \tau_{ij} \right] = -Q_R,$$

где  $E$  — полная энергия на единицу массы,  $h_s$  — удельная (на единицу массы) энтальпия компонента  $s$ ,  $\rho_s$  — плотность компонента  $s$ ,  $V_{s,j}$  — диффузионная скорость компонента  $s$  в  $j$ -ом направлении,  $q_{v,j}$  — плотность теплового потока колебательной энергии в  $j$ -ом направлении,  $q_{tr,j}$  — плотность теплового потока поступательно-вращательной энергии в  $j$ -ом направлении,  $Q_R$  — потери на излучение, Дж/(м<sup>3</sup>·с).

Уравнение колебательной энергии  $m$ -ой колебательной моды:

$$\frac{\partial}{\partial t} (E_{v,m}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (E_{v,m} u_j + q_{v,m,j} + E_{v,m} V_{m,j}) = S_{v,m}, \quad m = 1, 2, \dots, N_M,$$

где  $E_{v,m}$  — удельная (на единицу объема) колебательная энергия  $m$ -ой колебательной моды,  $q_{v,m,j}$  — плотность теплового потока колебательной энергии  $m$ -ой колебательной моды в  $j$ -ом направлении,  $S_{v,m}$  — источник колебательной энергии, обусловленный  $V$ - $T$ ,  $V$ - $V$  переходами энергии, скоростью образования колебательной энергии в результате химических реакций, а также потерей колебательной энергии в результате спонтанной

излучательной дезактивации,  $N_M$  — число колебательных энергетических мод; под  $V_{m,j}$  подразумевается диффузионная скорость компонента, к которому относится  $m$ -ая колебательная мода.

Уравнение сохранения массы химического компонента  $s$ :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho C_s) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho C_s u_j + \rho C_s V_{s,j}) = \dot{w}_s, \quad s = 1, 2, \dots, N_C - 1,$$

где  $C_s = \rho_s / \rho$  — массовая доля компонента  $s$ ,  $\dot{w}_s$  — скорость образования компонента  $s$  в результате химических реакций,  $N_C$  — количество компонентов газовой смеси.

В этой системе используются следующие предположения:

– вращательные энергетические моды находятся в равновесии с поступательными, и они определяются единой поступательно-вращательной температурой  $T = T_{tr}$ ;

– энергия возбужденных электронных состояний молекул пренебрежимо мала по сравнению с остальными энергетическими модами;

– считается, что потери тепла на излучение в уравнении энергии обусловлены в основном высвечиванием (дезактивацией) колебательных мод;

– не учитываются энергетические переходы электронов и ионов.

Эти допущения не являются критичными и используются только для упрощения записи уравнений. При необходимости система может быть дополнена соответствующими уравнениями и членами уравнений.

Давление газовой смеси  $p$  подчиняется закону Дальтона и равно сумме парциальных давлений компонентов  $p_s$ :

$$p = \sum_{s=1}^{N_C} p_s = \sum_{s=1}^{N_C} \rho_s \frac{R_U}{M_s} T_{tr},$$

где  $R_U$  — универсальная газовая постоянная,  $M_s$  — молекулярная масса компонента  $s$ .

Полная энергия  $E$  складывается из поступательной, вращательной, колебательной, кинетической и химической составляющих:

$$\rho E = \sum_{s=1}^{N_C} \rho_s C_{V_{tr,s}} T_{tr} + \sum_{m=1}^{N_M} E_{v,m} + \frac{1}{2} \rho u_i u_i + \sum_s \rho_s h_s^0,$$

где  $h_s^0$  — теплота образования компонента  $s$ ,  $C_{V_{tr,s}}$  — удельная (на единицу массы) поступательно-вращательная теплоемкость компонента  $s$  при постоянном объеме.

Колебательная энергия существует только у двухатомных и многоатомных молекул и равна нулю для атомов. В настоящей работе используется подход, описывающий колебательное движение молекул на основе модели гармонического осциллятора.

В этом случае среднее число колебательных квантов, приходящихся на  $m$ -й колебательный уровень, определяется формулой [6]

$$\alpha_m = r_m \frac{1}{\exp(\theta_m / T_{v,m}) - 1},$$

соответственно  $E_{v,m} = \frac{\rho C_s}{M_s} R_U \theta_m r_m \frac{1}{\exp(\theta_m / T_{v,m}) - 1}$ , здесь  $T_{v,m}$  — колебательная

температура  $m$ -ой колебательной моды,  $\theta_m$  — характеристическая колебательная температура  $m$ -ой колебательной моды,  $r_m$  — кратность вырождения  $m$ -ой моды молекулы.

Для расчета переносных свойств газовой смеси использовалась методика, описанная в работе [7]. В турбулентных потоках добавляются турбулентные тепловые и диффузионные потоки и напряжения трения. Для их расчета использовалась трехпараметрическая  $K-\varepsilon-V_n$  модель турбулентности [8]. Для расчета горения водорода использовалась система реакций, описанная в работе [9]. Она включает 19 реакций. Кроме того, в некоторых расчетах применялась упрощенная краткая система, состоящая из 7 реакций [10]. Для учета углеродных соединений добавлены реакции с участием CO и CO<sub>2</sub> [10]. Для учета соединений хлора и азота использовались реакции из работы [11].

## 1.2. Колебательные энергетические переходы

В расчетах учитывались следующие энергетические переходы [12–15]:

### *V-T процессы:*

1.  $N_2(1) + M \longleftrightarrow N_2(0) + M,$
2.  $CO_2(01^10) + M = CO_2(00^00) + M,$
3.  $CO(1) + M \longleftrightarrow CO(0) + M,$
4.  $H_2O(010) + M \longleftrightarrow H_2O(000) + M,$
5.  $H_2(1) + M \longleftrightarrow H_2(0) + M,$
6.  $HCl(1) + M \longleftrightarrow HCl(0) + M,$
7.  $NO(1) + M \longleftrightarrow NO(0) + M,$
8.  $H_2O(100) + M \longleftrightarrow H_2O(000) + M,$
9.  $H_2O(001) + M \longleftrightarrow H_2O(000) + M,$
10.  $O_2(1) + M \longleftrightarrow O_2(0) + M,$
11.  $OH(1) + M \longleftrightarrow OH(0) + M,$
12.  $CO_2(00^01) + M = CO_2(00^00) + M,$
13.  $Cl_2(1) + M \longleftrightarrow Cl_2(0) + M.$

### *Внутримолекулярные V-V процессы:*

14.  $CO_2(00^01) + M = \begin{cases} CO_2(03^10) + M, \\ CO_2(11^10) + M, \end{cases}$
15.  $CO_2(10^00) + M = CO_2(02^00) + M,$
16.  $H_2O(100) + M \longleftrightarrow H_2O(020) + M,$
17.  $H_2O(001) + M \longleftrightarrow H_2O(020) + M,$
18.  $H_2O(001) + M \longleftrightarrow H_2O(100) + M.$

### *Межмолекулярные V-V' процессы:*

19.  $CO_2(00^01) + N_2(0) = CO_2(00^00) + N_2(1),$
20.  $CO_2(00^01) + CO(0) = CO_2(00^00) + CO(1),$
21.  $CO(1) + N_2(0) = CO(0) + N_2(1),$
22.  $N_2(1) + NO(0) = N_2(0) + NO(1),$
23.  $CO(1) + NO(0) = CO(0) + NO(1),$
24.  $CO_2(00^01) + NO(0) = CO_2(00^00) + NO(1),$
25.  $CO_2(00^00) + N_2(1) = \begin{cases} CO_2(03^10) + N_2(0), \\ CO_2(11^10) + N_2(0), \end{cases}$
26.  $CO_2(00^00) + CO(1) = \begin{cases} CO_2(03^10) + CO(0), \\ CO_2(11^10) + CO(0), \end{cases}$
27.  $N_2(1) + O_2(0) = N_2(0) + O_2(1),$
28.  $CO_2(01^11) + N_2(0) = CO_2(01^10) + N_2(1),$
29.  $CO(1) + O_2(0) = CO(0) + O_2(1),$
30.  $CO_2(01^11) + CO(0) = CO_2(01^10) + CO(1),$
31.  $H_2(1) + H_2O(000) = H_2(0) + H_2O(001),$
32.  $H_2(1) + H_2O(000) = H_2(0) + H_2O(100),$
33.  $H_2(1) + OH(0) = H_2(0) + OH(1),$
34.  $H_2O(001) + OH(0) = H_2O(000) + OH(1),$
35.  $H_2O(100) + OH(0) = H_2O(000) + OH(1).$

Для расчета скоростей энергетических переходов использовались модели из справочника [15]. Общий вид  $V$ - $T$  процессов 1–13:  $A^* + M \longleftrightarrow A + M$ , где  $A^*$  — колебательно возбужденное состояние молекулы  $A^*$ ,  $M$  — “третье тело”, в присутствии которого (но без его участия) происходит реакция. Скорость такого процесса определяется по формуле вида [13]

$$\frac{d\alpha_A}{dt}\Big|_{VT} = \frac{1}{\tau_A} (\alpha_A^0 - \alpha_A),$$

где  $\tau_A$  — время релаксации процесса  $V$ - $T$  для колебательно-возбужденной молекулы  $A^*$ , зависящее от характерных времен релаксации при столкновении со всеми молекулами, входящими в газовую смесь:

$$\frac{1}{\tau_A} = \sum_{s=1}^{N_c} \frac{X_s}{\tau_{A,s}},$$

$\alpha_A$  — среднее число колебательных квантов  $A^*$ , приходящихся на одну молекулу  $A$ ,  $\alpha_A^0$  — равновесное значение  $\alpha_A$  при поступательной температуре газа  $T$ .

Для  $V$ - $V$  процесса, имеющего вид  $A^* + B \longleftrightarrow A + B^*$ , справедливы следующие формулы

$$\frac{d\alpha_A}{dt}\Big|_{VV} = \frac{X_B}{\tau_{AB}} \left[ (1 + \alpha_A) \alpha_B \exp\left(\frac{\theta_B - \theta_A}{T}\right) - (1 + \alpha_B) \alpha_A \right],$$

$$\frac{d\alpha_B}{dt}\Big|_{VV} = \frac{X_A}{\tau_{AB}} \left[ (1 + \alpha_B) \alpha_A - (1 + \alpha_A) \alpha_B \frac{\exp(\theta_B/T)}{\exp(\theta_A/T)} \right].$$

Таким образом, изменение числа колебательных квантов  $A$  и  $B$  связаны соотношением:

$$\frac{1}{X_A} \cdot \frac{d\alpha_B}{dt}\Big|_{VV} = -\frac{1}{X_B} \cdot \frac{d\alpha_A}{dt}\Big|_{VV}.$$

В особом случае внутримолекулярных  $V$ - $V$  процессов 14–18 используются следующие формулы:

$$\tilde{\varphi}_{14} = \frac{1}{\tilde{\tau}_{14}} \left[ (1 + \alpha_3) \left(\frac{\alpha_2}{2}\right)^3 \exp\left(\frac{3\tilde{\theta}_2 - \tilde{\theta}_3}{\tilde{T}}\right) - \alpha_3 \left(1 + \frac{\alpha_2}{2}\right)^3 \right],$$

$$\tilde{\varphi}_{15} = \frac{1}{\tilde{\tau}_{15}} \left[ (1 + \alpha_8) \left(\frac{\alpha_2}{2}\right)^2 \exp\left(\frac{2\tilde{\theta}_2 - \tilde{\theta}_8}{\tilde{T}}\right) - \alpha_8 \left(1 + \frac{\alpha_2}{2}\right)^2 \right],$$

$$\tilde{\varphi}_{16} = \frac{1}{\tilde{\tau}_{16}} \left[ (1 + \alpha_5) (\alpha_6)^2 \exp\left(\frac{2\tilde{\theta}_6 - \tilde{\theta}_5}{\tilde{T}}\right) - \alpha_5 (1 + \alpha_6)^2 \right].$$

Здесь предполагается, что в процессе релаксации симметричная и деформационная моды колебаний молекул  $\text{CO}_2$  находятся в равновесии между собой. Это связано с Ферми-резонансом ( $\theta_8 = 2\theta_2$ ). Нижние индексы относятся к следующим модам: 2 —  $\text{CO}_2(\nu_2)$ , 5 —  $\text{H}_2\text{O}(\nu_1)$ , 6 —  $\text{H}_2\text{O}(\nu_2)$ ,  $\alpha_m^0$  — количество квантов в равновесном состоянии. Формулы для времен релаксации  $\tau_j$  взяты из работ [12–16].

Таблица 1

Значения обратных времен релаксации в соответствии с работой [12]

$m$	1	2	3	5	6	7	12
Колебательная мода	CO	C <sub>2</sub> O ( $\nu_2$ )	C <sub>2</sub> O ( $\nu_3$ )	H <sub>2</sub> O ( $\nu_1$ )	H <sub>2</sub> O ( $\nu_2$ )	H <sub>2</sub> O ( $\nu_3$ )	OH
$\tau_m^{-1}, c^{-1}$	33,4	2,98	424,6	4,0	22,1	74,7	3,3

В уравнения энергии входят члены, связанные со спонтанной излучательной дезактивацией колебательных мод. Уменьшение энергии вследствие этих процессов описывается формулой  $Q_{R,m} = E_{v,m} / \tau_{R,m}$ . Значения обратных времен  $\tau_{R,m}$  выбраны в соответствии с табл. 1. Для всех остальных энергетических мод полагаем  $\tau_{R,m}^{-1} = 0$ .

## 2. Физико-математическая модель оптических характеристик газовых потоков с учетом колебательной неравновесности

### 2.1. Уравнение переноса излучения

Каждая линия спектра в инфракрасном диапазоне является результатом колебательно-вращательного перехода между двумя энергетическими уровнями: верхним и нижним. Пусть  $n_u, n_l$  — концентрации молекул (заселенности) с более высоким энергетическим состоянием  $u$  и более низким энергетическим состоянием  $l$  соответственно. Уравнение переноса излучения для каждого излучающего газа при отсутствии рассеяния имеет вид:

$$dI_\eta/ds = \kappa_\eta N (B_\eta^{ne} - I_\eta), \quad (1)$$

где  $N$  — число частиц излучающего компонента в единице объема,  $1/\text{см}^3$ ,  $\eta$  — волновое число,  $1/\text{см}$ ,  $I_\eta$  — спектральная энергетическая яркость,  $\text{Вт}/(\text{см}^2 \cdot \text{ср} \cdot \text{см}^{-1})$ ,  $\kappa_\eta$  — спектральный коэффициент поглощения,  $\text{см}^2$ . В отличие от равновесного излучения, в последнее уравнение входит не яркость излучения абсолютно черного тела, а функция Планка для

термически неравновесного излучения  $B_\eta^{ne} = \frac{2hc^2\eta^3}{[(n_l g_u)/(n_u g_l) - 1]}$ , где  $g_u$  и  $g_l$  — кратности вырождения, т.е. количество независимых состояний, соответствующих данному энергетическому уровню,  $h$  — постоянная Планка,  $c$  — скорость света,  $\text{см}/\text{с}$ . Каждая спектральная линия характеризуется интенсивностью (силой)  $S_\eta$ . Связь между коэффициентом поглощения и  $S_\eta$  зависит от лоренцева или доплеровского уширения линии. Например, для доплеровского уширения

$$\kappa_\eta = \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \left( \frac{S_\eta}{\gamma_D} \right) \exp \left[ -(\ln 2) \left( \frac{\eta - \eta_0}{\gamma_D} \right)^2 \right],$$

где  $\gamma_D = \eta_0 \sqrt{\frac{2kT}{mc^2}} \ln 2$  — полуширина линии на полувысоте,  $\eta_0$  — волновое число в центре линии,  $m$  — масса излучающей частицы,  $k$  — постоянная Больцмана, для упрощения записи поступательно-вращательная температура обозначается как  $T$ . Очевидно, что уширение Доплера зависит только от волнового числа и от поступательной температуры  $T$  (в отличие от уширения Лоренца, которое зависит от  $T$ , парциального давления излучающего газа и общего давления газовой смеси [2]).

Для интенсивности линии справедлива следующая формула [2]:

$$S_\eta = \frac{A_{ul}}{8\pi c \eta^2} \cdot \frac{n_l}{N} \cdot \frac{g_u}{g_l} \left( 1 - \frac{n_u}{n_l} \frac{g_l}{g_u} \right),$$

где  $A_{ul}$  — коэффициент Эйнштейна для спонтанной эмиссии [1/с]. Таким образом, для решения уравнения переноса излучения необходимо определить заселенности энергетических уровней.

## 2.2. Распределения молекулярных состояний

Быстрый энергообмен в резонансных переходах внутри одной энергетической моды создает квазистационарное распределение Больцмана по соответствующим колебательным и вращательным температурам, поэтому для заселенности колебательно-вращательного уровня, характеризующегося колебательным уровнем  $V$  и  $J$ -м вращательным уровнем, справедлива следующая формула [13]:

$$n_{VJ} = NQ_V^{-1}Q_R^{-1}g_X X_R X_V, \quad (2)$$

где  $g_V g_J$ ,  $g_J = 2J + 1$  — статистический вес  $J$ -го вращательного уровня,  $g_V$  — статистический вес колебательного уровня,  $Q_R$  — вращательная функция распределения (суммирование или совокупность всех вращательных энергетических уровней молекулы),  $Q_V$  — аналогичная колебательная функция распределения,  $X_R$ ,  $X_V$  — определяют функции Больцмана по вращательной и колебательным температурам соответственно.

В работе [2] было показано, что вращательная функция распределения для умеренных и высоких температур зависит от момента инерции молекул и для линейных молекул пропорциональна вращательной температуре  $T_R$ :  $Q_R(T_R) \propto T_R$ . Для нелинейных молекул —  $Q_R(T_R) \propto T_R^{3/2}$ .

Формулу для колебательной функции распределения можно получить, используя модель гармонического осциллятора

$$Q_V(T_V) = \prod_k \left[ 1 - \exp(-hc\eta_k / kT_{v,k}) \right]^{-g_k},$$

где произведение берется по всем колебательным модам с волновым числом гармонического осциллятора [2].

Функции  $X_R$ ,  $X_V$  определяются следующим образом:

$$X_R(V, J, T_R) = \exp\left[-\frac{hc\omega_R(V, J)}{kT_R}\right], \quad X_V(V, T_V) = \exp\left[-\frac{hc\omega_V}{kT_V}\right], \quad (3)$$

где  $\omega_R(V, J)$  — вращательная энергия молекулы для  $J$ -го вращательного уровня, 1/см;  $\omega_V$  — колебательная энергия, соответствующая колебательному уровню  $V$ , 1/см (здесь все энергии нормированы на  $hc$ ). Формула (3) для  $X_V$  строго справедлива в случае двухатомных молекул. Для трехатомных молекул, которые имеют несколько колебательных степеней свободы, необходимо использовать более сложные формулы. Так, для  $\text{CO}_2$  [13]

$$X_V(V, T_V) \equiv X_V(V, T_{v,12}, T_{v,3}) = \exp\left[-\frac{hc}{k} \left( \frac{\omega_{v_1 v_2' v_3} - \omega_{0 0^0 v_3}}{T_{v,12}} + \frac{\omega_{0 0^0 v_3}}{T_{v,3}} \right)\right],$$

где  $T_{v,12}$  — единая колебательная температура симметричной и деформационной моды (резонанс Ферми),  $T_{v,3}$  — колебательная температура асимметричной моды,  $\omega_{v_1 v_2' v_3} = \omega_V(v_1, v_2', v_3)$  — колебательная энергия, соответствующая колебательному

уровню  $V = (v_1, v_2^l, v_3)$ ;  $l$  — дополнительное квантовое число, характеризующее составляющую углового момента по оси молекулы и связанное с изгибным колебанием.

Для  $H_2O$  применимо соотношение

$$X_V(V, T_V) \equiv X_V(V, T_{v,1} T_{v,2} T_{v,3}) = \exp \left[ -\frac{hc}{k} \left( \frac{\omega_{v_1 v_2 v_3} - \omega_0 v_2 v_3}{T_{v,1}} + \frac{\omega_0 v_2 v_3 - \omega_0 0 v_3}{T_{v,2}} + \frac{\omega_0 0 v_3}{T_{v,3}} \right) \right].$$

Для колебательных и вращательных энергий используются формулы Герцберга [13, 17]. Колебательная энергия двухатомной молекулы [13] запишется в виде

$$\begin{aligned} \omega_v^e &= \omega^e(v+0,5) - \omega^e x^e(v+0,5)^2 + \omega^e y^e(v+0,5)^3 - \omega^e z^e(v+0,5)^4 + \\ &+ \omega^e q^e(v+0,5)^5 - \omega^e s^e(v+0,5)^6. \end{aligned} \quad (4)$$

В справочниках (например, [18–20]) отсчет колебательной энергии идет не от минимума потенциальной кривой, как это делается в формуле (4), а от низшего колебательного состояния с  $v = 0$ . В этом случае

$$\omega_v = \omega_v^e(v) - \omega_v^e(0).$$

Для линейной трехатомной молекулы  $CO_2$  справедлива формула [13]:

$$\begin{aligned} \omega_v^e(v_1, v_2^l, v_3) &= \sum_{i=1}^3 \omega_i^e(v_i + 0,5d_i) + \sum_{i=1}^3 \sum_{j \geq i}^3 x_{ij}^e(v_i + 0,5d_i)(v_j + 0,5d_{ji}) + \\ &+ \sum_{i=1}^3 \sum_{j \geq i}^3 \sum_{k \geq j \geq i}^3 y_{ijk}^e(v_i + 0,5d_i)(v_j + 0,5d_j)(v_k + 0,5d_k) + \dots + x_{ll}^e l^2 + \sum_{i=1}^3 y_{ill}^e v_i l^2 + \dots \end{aligned} \quad (5)$$

Здесь степени вырождения молекулы  $CO_2$  составляют  $d_1 = d_3 = 1$ ,  $d_2 = 2$ . Если, как и ранее, отсчитывать колебательную энергию от низшего колебательного состояния, то получим

$$\omega_v(v_1, v_2^l, v_3) = \omega_v^e(v_1, v_2^l, v_3) - \omega_v^e(0, 0^0, 0).$$

Для молекулы  $H_2O$  используется формула (5) с  $d_1 = d_2 = d_3 = 1$ ,  $l = 0$ . Вращательная энергия определяется формулой

$$\begin{aligned} \omega_R(V, J) &= B_V [J(J+1) - l^2] - D_V [J(J+1) - l^2]^2 + \\ &+ H_V [J(J+1) - l^2]^3 - L_V [J(J+1) - l^2]^4 + \dots, \end{aligned}$$

где коэффициенты зависят от набора квантовых чисел  $V$  [13].

Использование формулы (2) позволяет определить соотношение между заселенностями верхнего и нижнего колебательно-вращательных уровней в виде

$$\frac{n_u \cdot g_l}{n_l \cdot g_u} = \frac{X_R(V_u, J_u, T_R) X_V(V_u, T_V)}{X_R(V_l, J_l, T_R) X_V(V_l, T_V)} \quad (6)$$

и получить формулу для силы линии, соответствующей переходу между ними:

$$S_\eta = \frac{A_{ul} g_u}{8\pi c \eta^2} \cdot \frac{X_R(V_l, J_l, T_R) X_V(V_l, T_V)}{Q_V(T_V) Q_R(T_R)} \left[ 1 - \frac{X_R(V_u, J_u, T_R) X_V(V_u, T_V)}{X_R(V_l, J_l, T_R) X_V(V_l, T_V)} \right]. \quad (7)$$



Для СО формула (6) имеет вид

$$\frac{n_u}{n_l} \cdot \frac{g_l}{g_u} = \exp \left[ -\frac{hc}{k} \left( \frac{\omega_R(V_u, J_u) - \omega_R(V_l, J_l)}{T_R} + \frac{\omega_V(V_u) - \omega_V(V_l)}{T_V} \right) \right].$$

В справочниках [18–20] для стандартной температуры  $T_0$  заданы колебательные и вращательные квантовые числа, соответствующие верхнему и нижнему энергетическому уровням, а также энергия нижнего уровня  $E_l = \omega_V(V_l) + \omega_R(J_l)$  и волновое число, соответствующее переходу  $\eta = E_u - E_l$ .

Для стандартной температуры справедливо  $T_V = T_R = T_0$  и интенсивность линии запишется как

$$S_\eta(T_0) = \frac{A_{ul} g_u}{8\pi c \eta^2} \cdot \frac{1}{Q_V(T_0) Q_R(T_0)} \exp \left( -C_2 \frac{E_l}{T_0} \right) \left[ 1 - \exp \left( -C_2 \frac{\eta}{T_0} \right) \right], \quad (8)$$

где  $C_2 = hc/k$ .

Таким образом, используя формулы (7) и (8), можно выразить интенсивность линии через табличное значение  $S_\eta(T_0)$  и через вращательные и колебательные температуры:

$$S_\eta = S_\eta(T_0) \frac{Q_V(T_0) Q_R(T_0)}{Q_V(T_V) Q_R(T_R)} \cdot \frac{X_R(V_l, J_l, T_R) X_V(V_l, T_V)}{e^{-C_2 E_l / T_0}} \cdot \frac{\left[ 1 - \frac{X_R(V_u, J_u, T_R) X_V(V_u, T_V)}{X_R(V_l, J_l, T_R) X_V(V_l, T_V)} \right]}{1 - e^{-C_2 \frac{\eta}{T_0}}}.$$

### 2.3. Использование метода $k$ -распределения

Рассмотрим прямолинейную траекторию в некотором направлении, проходящую через излучающую среду и выходящую из произвольной начальной точки. Пусть  $s$  обозначает положение некоторой точки на данной траектории. Если  $I_\eta(0) = 0$ , то уравнение (1) для этой траектории имеет решение

$$I_\eta(s) = \int_0^s B_\eta^{\text{ne}}(s') \frac{d\tau_\eta(s', s)}{ds'} ds', \quad (9)$$

где функция

$$\tau_\eta(s', s) = \exp \left( -\int_{s'}^s \kappa_\eta(y) N(y) dy \right) \quad (10)$$

является коэффициентом пропускания слоя  $[s', s]$ . Для однородной полосы, имеющей оптическую толщину  $X = NL$ , коэффициент пропускания составляет  $\tau_\eta(X) = e^{-\kappa_\eta X}$ .

Решение уравнения переноса излучения для каждой спектральной линии сталкиваются с серьезной сложностью математического характера из-за очень большого количества линий и сильной зависимости коэффициента поглощения от волнового числа, поэтому будем искать решения для полосы спектра  $\Delta\eta$  достаточно узкой ширины ( $1 \div 5 \text{ см}^{-1}$ ), которая при этом существенно больше ширины отдельной линии. Для однородного слоя среднее значение коэффициента пропускания составляет

$$\bar{\tau} = \frac{1}{\Delta\eta} \int_{\Delta\eta} \exp(-\kappa_\eta X) d\eta. \quad (11)$$

Далее воспользуемся методом  $k$ -распределения (во многих источниках через  $k$  обозначают коэффициент поглощения, что и дало название методу). Приведем краткое изложение этого метода.

Из-за огромного количества спектральных линий при решении уравнения переноса излучения для каждой линии многократно повторяются практически одни и те же вычисления. Было бы удобнее переупорядочить поле коэффициента поглощения в гладкую, монотонно увеличивающуюся функцию, гарантируя, что каждое вычисление области интенсивности выполнено только однажды. Если бы использовался метод расчета по спектральным линиям, то формула (11) трансформировалась в сумму  $N$  спектральных интервалов в рассматриваемой полосе:

$$\bar{\tau} = \frac{1}{\Delta\eta} \sum_{j=1}^N \exp(-\kappa_j X) \Delta\eta_j, \quad (12)$$

где  $\Delta\eta_j$  — ширина  $j$ -го интервала линий.

В методе  $k$ -распределения переход от интегрирования по волновым числам к интегрированию по  $k$  осуществляется чисто математически, что позволяет увеличить шаг интегрирования, существенно снизив объем вычислений. Первым шагом в алгоритме создания  $k$ -распределения является перегруппирование коэффициентов поглощения в субинтервалы (подинтервалы) шириной  $\Delta k_i$ . Плотность распределения линий спектра создается суммированием частоты встречаемости интервалов волновых чисел, при которых коэффициент поглощения попадает в каждый такой субинтервал:

$$f(k_i) = \frac{1}{\Delta\eta} \sum_{j=1}^N \left| \frac{\Delta\eta_j}{\Delta k_j} \right| W(k_j, k_i, \Delta k_i),$$

где  $W(k_j, k_i, \Delta k_i)$  — «оконная» функция для  $i$ -го субинтервала, определяемая следующим образом:

$$W(k_j, k_i, \Delta k_i) = \begin{cases} 1, & k_i < k_j \leq k_i + \Delta k_i, \\ 0, & k_j \leq k_i \cup k_j > k_i + \Delta k_i. \end{cases}$$

Введенная таким образом функция  $f(k_i)$  позволяет перейти в формуле (12) от суммирования по интервалам  $\Delta\eta_j$  (по числу интервалов  $N$ ) к суммированию по субинтервалам  $\Delta k_i$ :

$$\bar{\tau} = \sum_{i=1}^M \exp(-k_i X) f(k_i) \Delta k_i, \quad (13)$$

где  $M$  — число субинтервалов  $\Delta k_i$ . Устремив к нулю  $\Delta k_i$ , получим из (13) формулу для пропускательной способности:

$$\bar{\tau} = \int_{\kappa_{\min}}^{\kappa_{\max}} \exp(-kX) f(k) dk. \quad (14)$$

Очевидно, что выражение  $\Delta g_i = f(k_i) \Delta k_i$  определяет во всей полосе  $[\Delta\eta]$  долю волновых чисел, для которых коэффициент поглощения находится в субинтервале  $\Delta k_i$ . Введем

соответствующую монотонную функцию  $g(k) = \int_0^k f(k) dk \approx \sum_{k_i=\kappa_{\min}}^{k_i=k} f(k_i) \Delta k_i$ . Из моно-

тонности следует, что можно ввести обратную функцию  $k(g) = g^{-1}(k)$ . С учетом того,

что  $dg = f(k)dk$ , это позволяет перейти в формуле (14) к новой переменной интегрирования

$$\bar{\tau} = \int_0^1 \exp(-k(g)X) dg. \quad (15)$$

Таким образом, для использования узкополосного  $k$ -распределения необходимо для каждой полосы  $\Delta\eta = \eta_{\max} - \eta_{\min}$  получить функции

$$f(k) = \frac{1}{\Delta\eta} \int_{\Delta\eta} \delta(k - \kappa_\eta) d\eta, \quad g(k) = \int_0^k f(k) dk,$$

где  $\delta(k)$  — дельта функция Дирака. Затем требуется определить обратную функцию  $k(g)$  и с помощью формулы (15) получить пропускательную способность всей полосы  $\Delta\eta$ .

Для неоднородного слоя шириной  $[y_1, y_2]$  из формулы (10) следует, что для полосы спектра  $\Delta\eta$  справедливо следующее соотношение:

$$\bar{\tau} = \frac{1}{\Delta\eta} \int_{\Delta\eta} \exp \left[ - \int_{y_1}^{y_2} \kappa_\eta(y) N(y) dy \right] d\eta. \quad (16)$$

Используем коррелированный  $k$ -метод [2], основанный на предположении, что давление и температура воздействуют на все линии рассматриваемой полосы одинаково, т.е.

$$\kappa(\eta_i, p, T) = \kappa(\eta_j, p, T), \quad \text{если} \quad \kappa_r(\eta_i) = \kappa_r(\eta_j),$$

где индекс  $r$  относится к некоторым базисным (опорным) условиям. Кроме того, принимаем, что если при базисных условиях коэффициент поглощения при  $\eta_i$  больше, чем при  $\eta_j$ , то это соотношение сохраняется во всем диапазоне изменения температуры и давления. При выполнении этих условий формула (16) преобразуется к виду, аналогичному для однородного газа:

$$\bar{\tau} = \int_0^1 \exp \left[ - \int_{y_1}^{y_2} k(g, y) N(y) dy \right] dg. \quad (17)$$

#### 2.4. Метод $k$ -распределения для термически неравновесного газа

Описанный в предыдущем параграфе метод  $k$ -распределения строго справедлив для термически равновесного газа, когда радиационные свойства газа определяются одной температурой. В термически неравновесном газе эти свойства зависят от нескольких температур, и уравнение переноса излучения (1) записывается в следующей форме:

$$\frac{dI_\eta}{ds} = \kappa_\eta(\underline{\phi}) N(B_\eta^{\text{ne}}(\underline{\phi}) - I_\eta), \quad (18)$$

где  $\underline{\phi} = (T_{\text{tr}}, T_{\text{v}})$  в случае доплеровского уширения,  $I_\eta = I(\eta)$  — функция волнового числа.

Аналогично тому, как это было сделано в работе [21], переупорядочим уравнение (18) в  $k$ -распределение путем умножения его на функцию Дирака  $\delta(k - \kappa_\eta)$  с последующим интегрированием по волновому диапазону  $\Delta\eta$ :

$$\frac{dI_k}{ds} = \frac{1}{\Delta\eta} \int_{\Delta\eta} N \kappa_\eta(\underline{\phi}) B_\eta^{\text{ne}}(\underline{\phi}) \delta(k - \kappa_\eta) d\eta - \frac{1}{\Delta\eta} \int_{\Delta\eta} N \kappa_\eta(\underline{\phi}) I_\eta \delta(k - \kappa_\eta) d\eta, \quad (19)$$

где  $I_k = I(k) = \frac{1}{\Delta\eta} \int_{\Delta\eta} I_\eta \delta(k - \kappa_\eta) d\eta$  является функцией  $k$ . Так как во всей полосе выбра-

ны только те волновые числа, где  $\kappa_\eta(\underline{\phi}) = k$ , то уравнение (19) можно записать в виде:

$$\frac{dI_k}{ds} = kN \left( B^{\text{ne}}(\underline{\phi}) f(\underline{\phi}, k) - I_k \right), \quad (20)$$

где

$$f(\underline{\phi}, k) = \frac{1}{\Delta\eta} \cdot \frac{1}{B^{\text{ne}}(\underline{\phi})} \int_{\Delta\eta} B_\eta^{\text{ne}}(\eta, \underline{\phi}) \delta(k - \kappa_\eta) d\eta \quad (21)$$

функция  $k$ -распределения с функцией Планка в качестве весового множителя. Функция  $f(\underline{\phi}, k)$  носит весьма неупорядоченный (беспорядочный) характер, поэтому, как и в предыдущем параграфе, имеет смысл перейти к монотонной функции:

$$g(\underline{\phi}, k) = \int_0^k f(\underline{\phi}, k) dk. \quad (22)$$

Входящая в формулу (21) функция Планка  $B^{\text{ne}}(\underline{\phi})$  может быть выбрана достаточно произвольно, равной средней в полосе  $\Delta\eta$ :

$$B^{\text{ne}}(\underline{\phi}) = \bar{\varepsilon}(\underline{\phi}) / \bar{\kappa}(\underline{\phi}), \quad (23)$$

где  $\bar{\varepsilon}$ ,  $\bar{\kappa}$  — средние значения в полосе  $\Delta\eta$  коэффициентов излучения и поглощения соответственно. В этом случае уравнение (20) имеет вид, сходный с уравнением (1), и его решение для однородного слоя аналогично решению уравнения (9):

$$I_k(s) = \int_0^s B^{\text{ne}}(\underline{\phi}) \frac{d\tau_k(s', s)}{ds'} ds', \quad (24)$$

где функция пропускания  $\tau_k(s', s) = \exp(-kNL) f(\underline{\phi}, k)$ . Средний по полосе коэффициент пропускания имеет вид:

$$\bar{\tau} = \int_{\kappa_{\min}}^{\kappa_{\max}} \exp(-kNL) f(\underline{\phi}, k) dk.$$

Так же, как и в предыдущем параграфе, переходим к функции  $g$ , введенной по формуле (22):  $\bar{\tau} = \int_0^1 \exp(-k(g)NL) dg$ . Она полностью совпадает с формулой (15), получен-

ной для равновесного излучения. Единственное отличие заключается в том, что функция  $k$ -распределения теперь содержит в качестве весового множителя неравновесную функцию Планка (см. формулу (21)).

Для неоднородного слоя решение уравнения (20) также определяется формулой (24), в которой

$$\tau_k(s', s) = f(\underline{\phi}, k) \exp\left(-\int_{s'}^s kN(y) dy\right),$$

т.к.

$$\frac{d\tau_k(s', s)}{ds'} = f(\underline{\phi}, k) \exp\left(-\int_{s'}^s kN(y) dy\right) \frac{d}{ds'} \left[ \int_s^{s'} kN(y) dy \right] = \tau_k(s', s) kN(s').$$

Это позволяет использовать для среднего коэффициента пропускания коррелированный  $k$ -метод при условиях, описанных в предыдущем параграфе:

$$\bar{\tau} = \int_{\kappa_{\min}}^{\kappa_{\max}} \exp\left(-\int_{s'}^s kN(y) dy\right) f(\underline{\phi}, k) dk = \int_0^1 \exp\left(-\int_{s'}^s k(g, y) N(y) dy\right) dg. \quad (25)$$

Формула (25) полностью совпадает с полученной для равновесного излучения формулой (17). Среднее по полосе значение интенсивности излучения определяется по формуле:

$$I = \frac{1}{\Delta\eta} \int_{\Delta\eta} I_\eta d\eta = \int_0^1 I_k(k(g)) dg = \int_0^s B^{\text{ne}}(\underline{\phi}) \frac{d\bar{\tau}}{ds'} ds', \quad (26)$$

где для  $B^{\text{ne}}(\underline{\phi})$  используется формула (23).

Использование метода  $k$ -распределения предполагает создание баз данных для каждого компонента, в котором зависимость коэффициента поглощения  $k(g)$  получена для различных значений волновых чисел, температур и парциальных давлений газовых компонентов. Очевидно, что для каждого компонента функция  $k(g)$  зависит от распределения коэффициента поглощения внутри рассматриваемой полосы, который, в свою очередь, зависит от многих параметров: поступательной, вращательной и колебательных температур, общего давления, парциального давления компонента, а также от волнового числа и ширины полосы. Таким образом, в базе данных для каждой полосы должны содержаться зависимости от достаточно большого количества параметров, что приводит к большому объему и неудобству использования этой базы данных. Например, для  $\text{CO}_2$  коэффициент поглощения зависит от поступательной, вращательной, двух колебательных температур, общего и парциального давлений компонента (или мольной доли), т.е. от шести параметров. На самом деле, можно существенно упростить задачу. Во-первых, как правило, справедливо допущение о равенстве вращательной и поступательной температур, которое уже использовалось в настоящей работе:  $T_{\text{tr}} = T$ . Во-вторых, колебательная неравновесность обычно проявляется только при достаточно низких давлениях, когда преобладает доплеровское уширение линий, которое зависит только от поступательной температуры. В этом случае значение коэффициента поглощения не зависит от общего давления и парциального давления, которые влияют на лоренцево уширение. Следовательно, достаточно сделать две различных базы данных: одну — для высоких и средних давлений, зависящую от трех параметров: температуры, давления и мольной доли компонента (такая база описана в работе [1]), другую — для низких давлений, зависящую от поступательно-вращательной и колебательных температур (разработана в настоящей работе).

## 2.5. Смесь газов

Если газ состоит из нескольких компонентов, то коэффициенты излучения и поглощения определяются по формулам  $\varepsilon_\eta = \sum_{n,i} N_n \varepsilon_{n,i}(\eta)$ ,  $\kappa_\eta = \sum_{n,i} N_n \kappa_{n,i}(\eta)$ , тогда уравнение переноса излучения принимает вид [16]:

$$\frac{dI_\eta}{ds} = \sum_{n,i} N_n [\varepsilon_{n,i}(\eta) - \kappa_{n,i}(\eta) I_\eta],$$

где  $\varepsilon_{n,i}(\eta)$ ,  $\kappa_{n,i}(\eta)$  — спектральные коэффициенты излучения и поглощения, а индексы  $n$  и  $i$  относятся к номеру компонента и к колебательной моде соответственно.

Введем эффективную функцию Планка для неравновесного излучения:

$$B_{\text{ef}}^{\text{ne}} = \sum_{n,i} N_n \varepsilon_{n,i} / \sum_{n,i} N_n \kappa_{n,i},$$

тогда  $dI_\eta/ds = \kappa_\eta (B_{\text{ef}}^{\text{ne}} - I_\eta)$ .

Решение этого уравнения будет таким же, как для (1):

$$I_\eta(s) = \int_0^s B_{\text{ef}}^{\text{ne}}(s') \frac{d\tau_\eta(s',s)}{ds'} ds',$$

где  $\tau_\eta(s',s) = \exp\left(-\sum_{n,i} \int_{s'}^s N_n \kappa_{n,i}(\eta) dy\right) = \prod_{n,i} \exp\left(-\int_{s'}^s N_n \kappa_{n,i}(\eta) dy\right) = \prod_{n,i} \tau_{\eta,n,i}(s',s)$ ,

$$\tau_{\eta,n,i}(s',s) = \exp\left(-\int_{s'}^s \kappa_{n,i}(\eta) N_n dy\right),$$

здесь  $\tau_{\eta,n,i}$  — коэффициент пропускания вследствие отдельного колебательного перехода,  $\tau_\eta$  — коэффициент пропускания вследствие всех колебательных переходов.

При получении решения для полосы спектра  $\Delta\eta$  необходимо учитывать взаимное наложение спектральных линий различных компонентов, однако в представленной работе рассматривается излучение при достаточно низком давлении:  $p < 10^{-3}$  атм. Анализ спектра показывает, что в этом случае расстояние между сильными линиями существенно больше ширины линий, и пересечение (наложение) таких линий маловероятно. Это дает основание рассматривать расчет коэффициента пропускания для каждого компонента отдельно и с достаточно большой точностью использовать формулу  $\bar{\tau} = \prod_{n,i} \bar{\tau}_{n,i}$ , где для

каждого отдельного компонента используется метод  $k$ -распределения и выражения (25), (26).

Для средней по полосе эффективной функции Планка в этом случае получим формулу  $B^{\text{ne}}(\phi) = \sum_{n,i} N_n \bar{\varepsilon}_{n,i} / \sum_{n,i} N_n \bar{\kappa}_{n,i}$ .

### 3. Результаты расчетов

Для тестирования описанной выше методики проведено сопоставление результатов расчетов характеристик неравновесного излучения с экспериментальными данными и модельными результатами работ других авторов.

Для решения основных газодинамических уравнений использовался численный метод, описанный в работе [10], и программа Universe CFD, разработанная в МАИ на кафедре «Авиационно-космическая теплотехника». На рис. 1 представлены результаты расчетов спектральной энергетической яркости слоя СО толщиной 5 см при давлении 1 атм. Сначала спектры вычислялись при равновесной температуре 1000 К, затем поступательно-вращательная и колебательная температуры поочередно повышались до 1500 К. И наконец, последний расчет проводился при равновесной температуре 1500 К. Результаты расчета по представленной методике сравнивались с данными работы [5], в которой использовался метод LBL. Результаты расчетов хорошо согласуются между собой.

Интересно, что яркость при равновесной температуре  $T = T_v = 1500$  К существенно меньше, чем при неравновесных значениях  $T = 1000$  К,  $T_v = 1500$  К, т.е. при меньшем значении поступательной температуры. Это обусловлено тем, что значение коэффициента излучения во втором случае (рис. 2а) намного больше, чем в первом (рис. 2б).

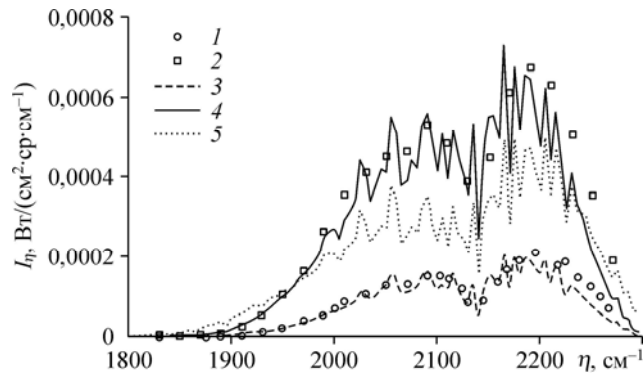


Рис. 1. Спектральная энергетическая яркость слоя CO толщиной 5 см при давлении 1 атм.

Линии — результаты настоящей работы, символы — результаты работы [5];  
 1 —  $T = T_v = 1500$  К, 2 —  $T = 1000$  К,  $T_v = 1500$  К, 3 —  $T = 1000$  К,  $T_v = 1000$  К,  
 4 —  $T = 1000$  К,  $T_v = 1500$  К, 5 —  $T = 1500$  К,  $T_v = 1500$  К.

Это позволяет сделать важный вывод о том, что подход, основанный на равновесной методике расчета излучения с использованием колебательной температуры в качестве определяющей вместо поступательной (равновесной), может приводить к грубым ошибкам.

На рис. 3 представлены результаты расчетов в диапазоне  $3400\text{--}3800\text{ см}^{-1}$  спектрального коэффициента поглощения слоя  $\text{CO}_2$  (молярная доля равна 0,2) толщиной 1 м при давлении  $10^3$  Па при различных соотношениях поступательной и колебательных температур. Результаты расчетов по разработанной методике сравнивались с результатами работы [22], в которой использовалась статистическая модель полосы. Видно, что результаты обеих методик хорошо согласуются. Анализ результатов показывает, что при длине волны, близкой 2,7 мкм, более сильное влияние на излучение оказывают первая (симметричная) и вторая (деформационная) колебательные моды по сравнению с третьей (асимметричной). Напомним, что предполагается равновесие между первой и второй модами вследствие резонанса Ферми.

Более подробный анализ влияния температур различных энергетических мод  $\text{CO}_2$  на интенсивность излучения показан на рис. 4 (диапазон  $3400\text{--}3800\text{ см}^{-1}$ ) и на рис. 5 (диапазон  $2000\text{--}2500\text{ см}^{-1}$ ). Рассматривался слой  $\text{CO}_2$  толщиной 5 м при давлении  $10^2$  Па.

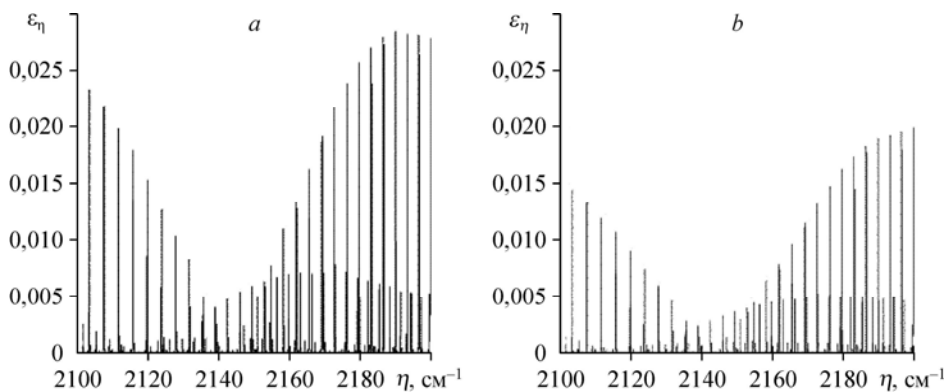


Рис. 2. Спектральный коэффициент излучения, рассчитанный полинейно в диапазоне  $2100\text{--}2200\text{ см}^{-1}$ , для слоя CO толщиной 5 см при давлении 1 атм при различных соотношениях поступательной и колебательной температур.

a —  $T = 1000$  К,  $T_v = 1500$  К, b —  $T = T_v = 1500$  К.

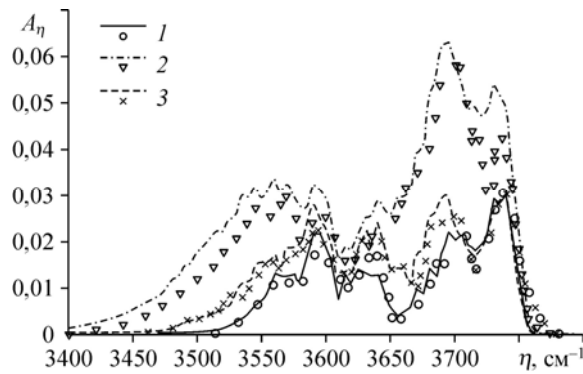


Рис. 3. Спектральный коэффициент поглощения слоя  $\text{CO}_2$  (мольная доля 0,2) толщиной 1 м при давлении 1 кПа при различных соотношениях поступательной и колебательных температур.

Линии — результаты настоящей работы, символы — результаты работы [22] (см. Fig. 4 в [22]);  
 1 —  $T = T_{\text{CO}_2}(v_2) = T_{\text{CO}_2}(v_3) = 400 \text{ K}$ , 2 —  $T = 400 \text{ K}$ ,  $T_{\text{CO}_2}(v_2) = 10000 \text{ K}$ ,  $T_{\text{CO}_2}(v_3) = 1500 \text{ K}$ ,  
 3 —  $T = 400 \text{ K}$ ,  $T_{\text{CO}_2}(v_2) = 400 \text{ K}$ ,  $T_{\text{CO}_2}(v_3) = 1500 \text{ K}$ .

Сначала спектры вычислялись при равновесной температуре 1000 К, затем поступательно-вращательная и колебательные температуры поочередно повышались до 1500 К. Последний расчет был проведен при равновесной температуре 1500 К. Анализ результатов показывает, что увеличение поступательной температуры практически не влияет на интенсивность излучения (даже несколько снижает его). Вблизи 4,3 мкм температура симметричной и деформационной моды  $T_{\text{CO}_2}(v_2)$  слабо влияет на излучение. Данный факт объясняется тем, что в этом диапазоне определяющее влияние имеет дезактивация асимметричной моды ( $v_3$ ). В районе 2,7 мкм ( $3400\text{--}3800 \text{ cm}^{-1}$ ) излучение связано с переходами с верхних уровней  $2v_2 + v_3$ ,  $v_1 + v_3$ , поэтому увеличение обеих колебательных температур приводит к росту излучения. На первый взгляд, такой результат противоречит представленному в предыдущем тесте (рис. 3). Однако на рис. 3 показан лишь коэффициент поглощения, а интенсивность излучения зависит как от коэффициента поглощения, так и от неравновесной функции Планка, которая резко растет с увеличением колебательной температуры.

Расчет с использованием равновесной температуры, равной 1500 К, завышает значения интенсивности излучения по сравнению неравновесными расчетами (особенно для диапазона  $3400\text{--}3800 \text{ cm}^{-1}$ ). Это подтверждает, что для  $\text{CO}_2$ , так же как и для  $\text{CO}$ , не рекомендуется применять подход, основанный на равновесной методике расчета излучения

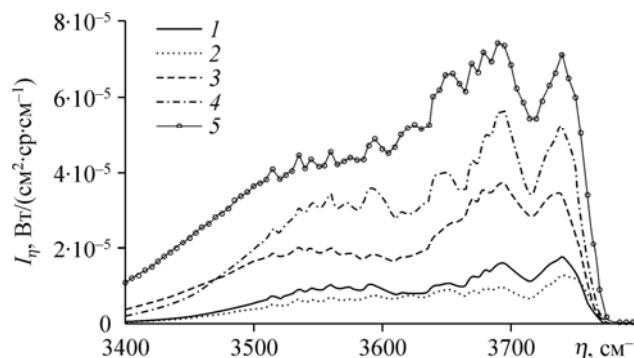


Рис. 4. Спектральная энергетическая яркость слоя  $\text{CO}_2$  толщиной 5 м при давлении  $10^2 \text{ Па}$  в диапазоне  $3400\text{--}3800 \text{ cm}^{-1}$  при различных соотношениях поступательной и колебательных температур.

$T = 1000$  (1), 1500 (2), 1000 (3), 1000 (4), 1500 (5) К;  $T_{\text{CO}_2}(v_2) = 1000$  (1), 1000 (2), 1500 (3), 1000 (4), 1500 (5) К;  
 $T_{\text{CO}_2}(v_3) = 1000$  (1), 1000 (2), 1000 (3), 1500 (4), 1500 (5) К.



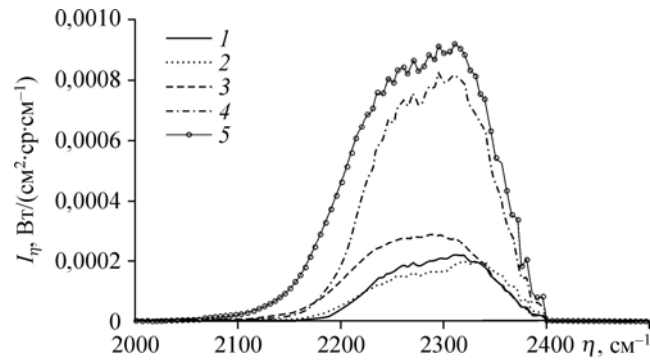


Рис. 5. Спектральная энергетическая яркость слоя  $\text{CO}_2$  толщиной 5 м при давлении  $10^2$  Па в диапазоне  $2000\text{--}2500\text{ см}^{-1}$  при различных соотношениях поступательной и колебательных температур. Обозначения см. на рис. 4.

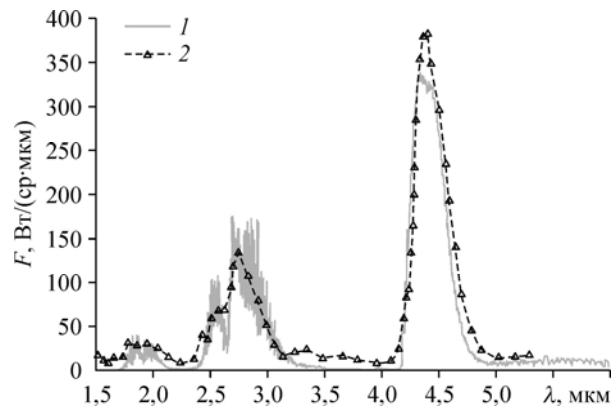


Рис. 6. Спектральная интенсивность излучения, проинтегрированная по длине факела 1 м. 1 — результаты расчета настоящей работы, 2 — экспериментальные данные работы [23].

с использованием колебательной температуры в качестве определяющей вместо поступательной (равновесной), т.к. это может приводить к грубым ошибкам.

Описанные выше тесты связаны с неравновесным излучением однородных слоев горячего газа и носят в большей мере методический характер. Гораздо больший интерес представляет излучение неоднородных газовых смесей, в особенности, таких сложных объектов, как сверхзвуковые струи высокотемпературных продуктов сгорания с большими перепадами давления и сложной волновой структурой.

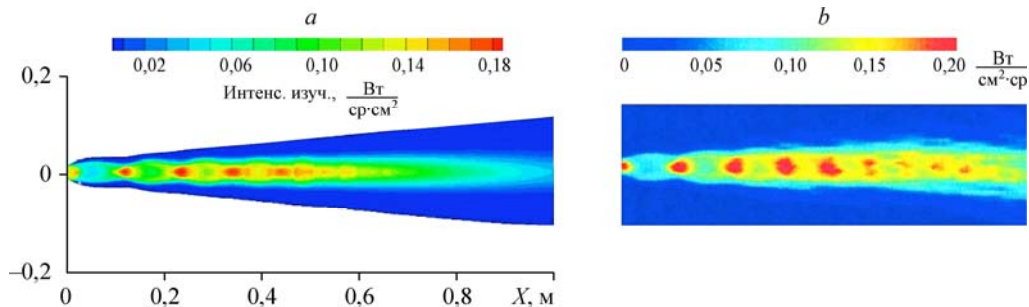


Рис. 7. Яркость факела в диапазоне  $4,372\text{--}4,516\text{ мкм}$ . *a* — результаты расчета настоящей работы, *b* — экспериментальные данные работы [23].

Таблица 2

Исходные данные для расчета излучения факела

Давление, кПа		Температура, К		Скорость, м/с		Угол полукуноса, рад		Радиус сопла, мм	
288		1963		2125		0,131		11,25	
Мольные доли компонентов									
H <sub>2</sub>	O <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> O	CO	CO <sub>2</sub>	HCl		N <sub>2</sub>		
0,055	0	0,404	0,111	0,136	0,194		0,1		

Таблица 3

Параметры внешнего потока при расчете излучения факела

Давление, Па	Температура, К	Скорость, м/с
101·10 <sup>3</sup>	288	68

На рис. 6, 7 представлены спектральная интенсивность излучения  $F$  и яркость факела в диапазоне 4,372–4,516 мкм для струи с параметрами на срезе сопла, представленными в табл. 2 и 3. При давлении, указанном в этих таблицах, уже проявляются эффекты колебательной неравновесности. Результаты расчетов сопоставлялись с экспериментальными данными из работы [23], в которой измерение спектральной интенсивности излучения выполнялось с разрешением  $\sim 20 \text{ см}^{-1}$ . Получено удовлетворительное совпадение.

Термическая неравновесность гораздо сильнее проявляется при истечении горячих продуктов сгорания в вакуум. На рис. 8 показано распределение спектральной интенсивности излучения сверхзвуковой струи, истекающей в вакуум из сопла с параметрами на срезе, указанными в табл. 4. Результаты расчета сравниваются с данными работы [14]. Сопоставление результатов расчета с данными работы [14] показывает в целом удовлетворительное согласование, хотя имеет место и некоторое расхождение, например, в области излучения CO ( $\sim 4,7 \text{ мкм}$ ). Для анализа причин этого расхождения было проведено сравнение осевого распределения температур различных энергетических мод в струе с параметрами, близкими к указанным в табл. 4 (см. рис. 9). Использовались исходные данные работы [24]. Расчетные значения поступательной и колебательной температур деформационной моды  $T_{\text{CO}_2}(\nu_2)$  удовлетворительно согласуются с данными работы [24]. Наблюдаемое расхождение колебательных температур  $T_{\text{CO}}$  и  $T_{\text{CO}_2}(\nu_3)$ , по всей видимости, обусловлено различием констант кинетики  $VV$  и  $VT$  энергетических переходов.

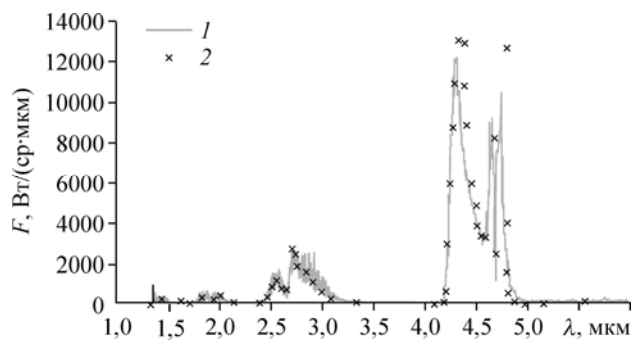


Рис. 8. Спектральная интенсивность излучения, проинтегрированная по длине факела 2 км. 1 — результаты расчета настоящей работы, 2 — данные работы [14].

Таблица 4

Начальные данные из работы [14] (концентрации компонентов указаны в мольных долях)

$T$ , К	$U_a$ , м/с	$R_a$ , м	$P_a$ , атм	H <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> O	CO	CO <sub>2</sub>	N <sub>2</sub>
2000	2500	0,3	0,1	0,05	0,4	0,05	0,15	0,35

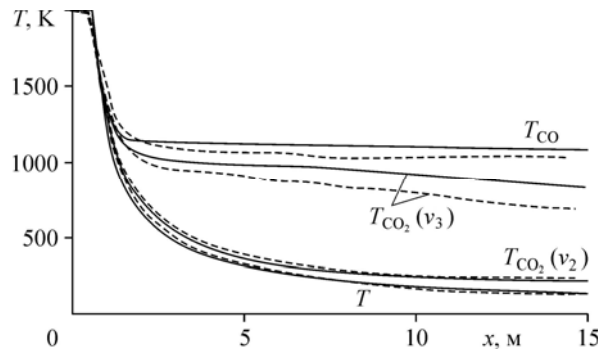


Рис. 9. Распределение колебательной и поступательной температур вдоль оси струи при истечении в вакуум.

Сплошные линии — результаты расчета настоящей работы, штриховые — данные работы [24].

Таблица 5

Параметры внешнего спутного потока в зависимости от высоты полета

Высота полета $H$ , км	50	60	70	80	90	100	110	120
Скорость внешнего спутного потока $U_e$ , м/с	2000	2800	3500	4000	4300	4600	5000	5400

Для анализа влияния параметров внешнего потока на неравновесное излучение проведен расчет сверхзвуковой струи горячих продуктов сгорания, истекающей из сопла, с параметрами на срезе, совпадающими с указанными в табл. 4, за исключением  $R_a = 0,5$  м,  $p_a = 0,3$  атм. Используются исходные данные работы [14]. Параметры внешнего спутного потока указаны для нескольких случаев, соответствующих состоянию атмосферы на различных высотах (см. табл. 5). Очевидно, что с ростом высоты и соответствующим уменьшением давления эффекты колебательной неравновесности усиливаются.

На рис. 10–12 представлены результаты расчетов спектральной интенсивности излучения и температур различных энергетических мод для некоторых высот из табл. 5. На высоте  $H = 70$  км равновесное излучение в районе 4,3 мкм несколько меньше неравновесного. Вероятно, это обусловлено тем, что максимальная по поперечному сечению колебательная температура  $T_{CO_2}(v_3)$  на начальном участке струи намного выше поступательной (рис. 10b). На высоте 80 км проявляется обратный эффект: максимальная поступательная температура выше колебательных температур CO и CO<sub>2</sub>. Это приводит к завышенному равновесному излучению по сравнению с неравновесным в соответствующих

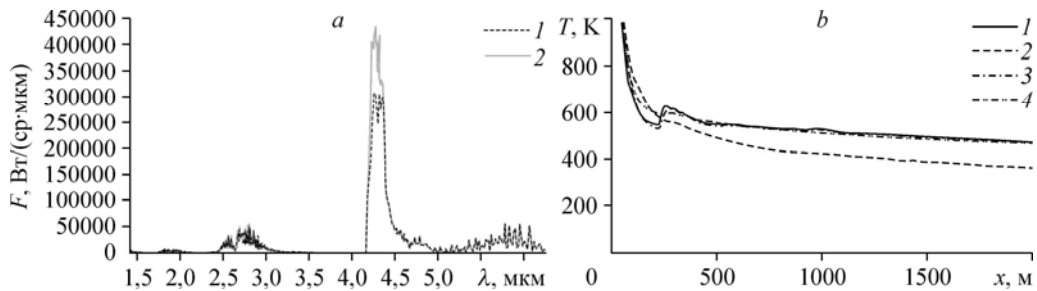


Рис. 10. Результаты расчетов спектральной интенсивности излучения (проинтегрировано по длине факела 2 км) и температур различных энергетических мод для высоты 70 км.

*a* — спектральная интенсивность излучения, проинтегрированная по длине факела 2 км: расчет равновесного излучения с использованием поступательной температуры (1), расчет неравновесного излучения (2);

*b* — распределение по длине струи максимальных значений температур в слое смешения:  $T$  (1),  $T_{CO}$  (2),  $T_{CO_2}(v_2)$  (3),  $T_{CO_2}(v_3)$  (4).

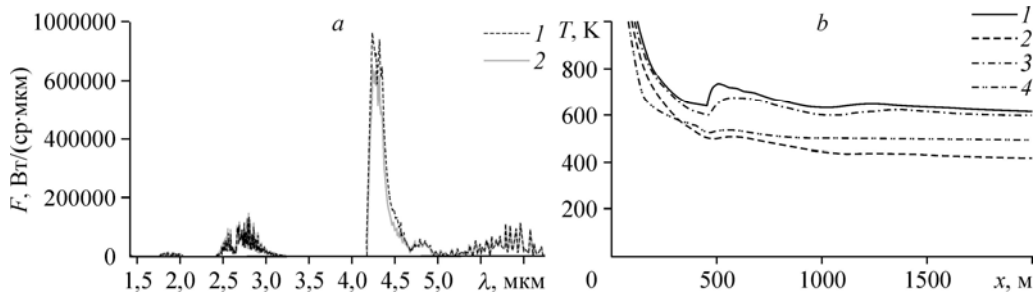


Рис. 11. Результаты расчетов спектральной интенсивности излучения (проинтегрировано по длине факела 2 км) и температур различных энергетических мод для высоты 80 км. Обозначения см. на рис. 10.

диапазонах. На высотах 70, 80 и 90 км колебательные температуры воды практически совпадают с поступательной и поэтому их графики не приводятся. На больших высотах расхождение расчета излучения по неравновесной и равновесной методике проявляется очень сильно. Так, на высоте 110 км результаты расчеты интенсивности излучения в районе 4,3 мкм (линии  $\text{CO}_2(\nu_3)$ ) отличаются более чем на порядок. Намного меньше неравновесное излучение по сравнению с равновесным и для  $\text{H}_2\text{O}$  в районе 2,7 мкм, т.к. колебательная температура  $T_{\text{H}_2\text{O}(\nu_3)}$  существенно ниже поступательной (см. рис. 12с) (в районе 2,7 мкм излучение воды связано с переходами с верхнего уровня третьей моды  $\nu_3$ ). Колебательная температура  $T_{\text{H}_2\text{O}(\nu_2)}$  близка к поступательной, и поэтому расчеты по равновесной и неравновесной методикам в районе 6 мкм практически совпадают.

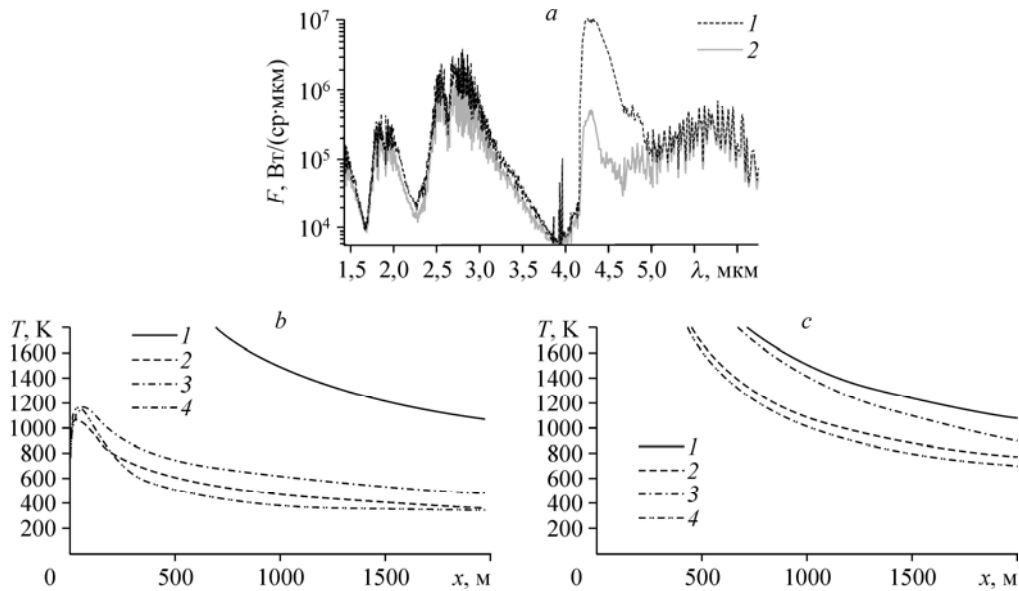


Рис. 12. Результаты расчетов спектральной интенсивности излучения (проинтегрировано по длине факела 2 км) и температур различных энергетических мод для высоты 110 км.

- a* — спектральная интенсивность излучения, проинтегрированная по длине факела 2 км: расчет равновесного излучения с использованием поступательной температуры (1), расчет неравновесного излучения (2),  
*b, c* — распределение по длине струи максимальных значений температур в слое смешения:  
*b* —  $T$  (1),  $T_{\text{CO}}$  (2),  $T_{\text{CO}_2(\nu_2)}$  (3),  $T_{\text{CO}_2(\nu_3)}$  (4), *c* —  $T$  (1),  $T_{\text{H}_2\text{O}}$  (2),  $T_{\text{H}_2\text{O}(\nu_2)}$  (3),  $T_{\text{H}_2\text{O}(\nu_3)}$  (4).

## Выводы

В настоящей работе разработана методика расчета теплового излучения колебательно неравновесного газа на основе метода  $k$ -распределения. Предложены формулы для расчета средних по полосе пропускательной способности и эффективной функции Планка для колебательно неравновесной газовой смеси. Проведено сопоставление расчета неравновесного излучения с результатами работ других авторов и с экспериментальными данными, продемонстрировано удовлетворительное совпадение. Показано, что результаты расчета интенсивности излучения по неравновесной методике существенно отличаются от результатов расчета по равновесной методике (расхождение может превышать порядок величины). Также показано, что подход, основанный на равновесной методике расчета излучения с использованием колебательной температуры в качестве определяющей вместо поступательной (равновесной), может приводить к грубым ошибкам. Обнаружено, что с уменьшением давления эффекты колебательной неравновесности усиливаются. Причем в первую очередь это проявляется для CO и CO<sub>2</sub>, и только на больших высотах начинает проявляться для H<sub>2</sub>O. Показано, что колебательные температуры симметричной и асимметричной мод воды  $T_{\text{H}_2\text{O}}(v_1)$  и  $T_{\text{H}_2\text{O}}(v_3)$  очень близки друг к другу даже при сильной колебательной неравновесности, что свидетельствует о равновесии между этими модами. Константы скоростей энергетических переходов существенно влияют на колебательные температуры, поэтому в дальнейшем желательно их уточнение.

## Список литературы

1. Молчанов А.М., Никитин П.В. Узкополосная база данных для расчета излучения продуктов сгорания с использованием  $k$ -распределения // Тепловые процессы в технике. 2014. № 10. С. 448–455.
2. Modest M.F. Radiative heat transfer. Second ed. ACADEMIC PRESS, 2003. 860 p.
3. Zhang H., Modest M.F. Multi-group full-spectrum  $k$ -distribution database for water vapor mixtures in radiative transfer calculations // Int. J. Heat Mass Transfer. 2003. Vol. 46. P. 3593–3603.
4. Wang A., Modest M.F. High-Accuracy. Compact database of narrow-band  $k$ -distributions for water vapor and carbon dioxide // J. of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. 2005. Vol. 93. P. 245–261.
5. Ozawa T., Garrison M.B., Levin D.A. Accurate molecular and soot infrared radiation model for high-temperature flows // J. of Thermophysics and Heat Transfer. 2007. Vol. 21, No. 1. P. 19–27.
6. Лосев С. Газодинамические лазеры. М.: Наука, 1977. 336 с.
7. Scalabrini L.C. Numerical simulation of weakly ionized hypersonic flow over reentry capsules // A dissertation submitted in partial fulfillment of the requirements for the degree of doctor of philosophy (Aerospace Engng) in the University of Michigan. 2007. 182 p.
8. Molchanov A.M., Bykov L.V. Three-equation  $k$ - $\epsilon$ - $V_n$  turbulence model for high-speed flows // AIAA Paper, 2013. No. 2013–3181. 30 p.
9. Connaire M.O., Curran H.J., Simmie J.M., Pitz W.J., Westbrook C.K. A comprehensive modeling study of hydrogen oxidation // Intern. J. of Chemical Kinetics. 2004. Vol. 36. P. 603–622.
10. Molchanov A.M. Numerical simulation of supersonic chemically reacting turbulent jets. AIAA Paper. 2011. No. 2011–3211. 37 p.
11. Denison M.R., Lamb J.J., Bjordahl W.D., Wong E.Y., Lohn P.D. Solid rocket exhaust in the stratosphere: plume diffusion and chemical reactions // J. of Spacecraft and Rockets. 1994. Vol. 31. P. 435–442.
12. Blauer J.A., Nickerson G.R. A survey of vibrational relaxation rate data for processes important to CO<sub>2</sub>-N<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O infrared plume radiation // Ultrasystems, Incorporated, Technical rept. Report Number 0455177. 1973. 72 p.
13. Ачасов О.В. Диагностика неравновесных состояний в молекулярных лазерах. Минск: Наука и техника. 1985. 208 с.
14. Vitkin E.I., Karelin V.G., Kirillov A.A., Suprun A.S., Khadyka Ju.V. A physico-mathematical model of rocket exhaust plumes // Int. J. Heat Mass Transfer. 1997. Vol. 40, No. 5. P. 1227–1241.
15. Физико-химические процессы в газовой динамике. Справочник. Т. 2: Физико-химическая кинетика и термодинамика // Под ред. Г.Г.Черного и С.А.Лосева. М.: Научно-изд. центр механики, 2002. 368 с.
16. Kudryavtsev N.N., Novikov S.S. Theoretical and experimental investigations of I.R. radiation transfer in vibrationally nonequibrated molecular gas containing CO<sub>2</sub> and CO // Int. J. Heat Mass Transfer. 1982. Vol. 25, No. 10. P. 1541–1558.

17. Герцберг Г. Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул. М.: Изд-во иностранной литературы, 1949. 648 с.
18. Rothman L.S., Gordon I.E., Babikov, et. al. The HITRAN 2012 molecular spectroscopic database // J. of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. 2013. Vol. 130. P. 4–50.
19. Rothman L.S., Gordon I.E., Barber R.J., Dothe H., Gamache R.R., Goldman A., Perevalov V., Tashkun S.A., Tennyson J. HITEMP, the high-temperature molecular spectroscopic database // J. Quant. Spectrosc. and Rad. Transfer. 2010. Vol. 111, No. 15. P. 2139–2150.
20. Tashkun S.A., Perevalov V.I., Teffo J-L., Bykov A.D., Lavrentieva N.N. CDSD-1000, the high-temperature carbon dioxide spectroscopic databank // J. of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. 2003. Vol. 82, Iss. 1–4. P. 165–196.
21. Bansal A., Modest M., Levin D. Application of k-distribution method to molecular radiation in hypersonic nonequilibrium flows. AIAA Paper. 2009. No. 2009–3922. 13 p.
22. Vitkin E.I., Shuralyov S.L., Tamanovich V.V. Radiation transfer in vibrationally nonequilibrium gases // Int. J. Heat Mass Transfer. 1995. Vol. 38, No. 1. P. 163–173.
23. Avital G., Cohen Y., Gamss L., Kanelbaum Y., Macales J., Trieman B., Yaniv S., Lev M., Stricker J., Sternlieb A. Experimental and computational study of infrared emission from underexpanded rocket exhaust plumes // J. of Thermophysics and Heat Transfer. 2001. Vol. 15, No. 4. P. 377–383.
24. Виткин Э.И., Кириллов А.А. Радиационный перенос в движущихся объемах неравновесных молекулярных газов // IV Минский междунар. форум по теплообмену, 2000. Vol. 2. С. 144–153.

*Статья поступила в редакцию 16 февраля 2016 г.,  
после доработки — 7 июля 2016 г.*