

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ПЛАЗМЫ, ПУЧКОВ ЧАСТИЦ И ИЗЛУЧЕНИЯ С ВЕЩЕСТВОМ

УДК 535.233

РАСЧЕТ ЭМИССИОННЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ТЕРМИЧЕСКИ НЕРАВНОВЕСНОГО ГАЗА CO_2 В ДИАПАЗОНЕ ОТ 3200 ДО 5400 см^{-1} С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МОДЕЛЕЙ LBL И SNB

© 2025 г. А. М. Молчанов^а*, Д. С. Янышев^а, Л. В. Быков^а, А. С. Коваленко^а

^аМосковский авиационный институт (национальный исследовательский университет), Москва, 125993 Россия

*E-mail: alexmol@gmail.com

Поступила в редакцию 26.03.2024 г.

После доработки 26.03.2024 г.

Принята к публикации 10.04.2024 г.

Представлена методика расчета поглотительных и излучательных характеристик CO_2 в диапазоне от 3200 до 5400 см^{-1} с учетом влияния термической неравновесности. Проведена серия расчетов с использованием line-by-line (LBL) и статистической узкополосной модели (SNB). Расчеты выполнены при различных давлениях, областях спектра, толщинах слоя, температурах и молярных долях CO_2 . Полученная методика показывает хорошее согласование между собой моделей LBL и SNB, а также удовлетворительно согласовывается с экспериментальными данными при расчете величины пропускательной способности. В рассматриваемом диапазоне неравновесность по вращательной температуре практически не оказывает влияния на излучательные характеристики, в отличие поступательной и колебательной температур, которые оказывают существенное влияние на значение неравновесной функции Планка. Полученная методика может использоваться для расчетов при исследовании проблемы глобального потепления.

Ключевые слова: неравновесное излучение, углекислый газ, метод line-by-line, статистическая модель полосы, парниковый эффект

DOI: 10.56304/S2079562924060228

ВВЕДЕНИЕ

Поглотительные и пропускательные радиационные способности CO_2 играют важную роль в экологических и теплоэнергетических задачах.

Углекислый газ считается одним из главных парниковых газов, и именно с ним связывают основную проблему глобального потепления. Парниковый эффект атмосфер планет обусловлен их различной прозрачностью в видимом и в дальнем инфракрасном диапазонах. На видимый и ближний ИК диапазон длин волн приходится 75% энергии солнечного излучения. Излучение Солнца поглощается поверхностью планеты и ее атмосферой и нагревает их. Нагретая поверхность планеты и атмосфера излучают в дальнем инфракрасном диапазоне: так, в случае Земли 75% теплового излучения приходится на диапазон $400\text{--}1300 \text{ см}^{-1}$, для Венеры на $800\text{--}3000 \text{ см}^{-1}$, а для Марса на $300\text{--}1000 \text{ см}^{-1}$.

Для освоения ближайших планет (Марса, Венеры) при проектировании космического аппарата необходимо учитывать огромную тепловую нагрузку на поверхность спускаемого аппарата, возникающую при входе в атмосферы этих

планет [1, 2]. Наряду с конвективным теплообменом, важнейшую роль играет перенос излучения. Нагревающий газ является существенно термически неравновесным, т.е. наблюдается неравновесность между поступательными, вращательными и колебательными энергетическими модами молекул. Атмосферы Марса и Венеры состоят, в основном, из углекислого газа, и поэтому так важно учитывать термическую неравновесность этого газа при расчете теплового излучения.

Возникновение термической неравновесности CO_2 возможно и в атмосфере Земли при сравнительно низких значениях давления.

Целью данной работы является создание методики расчета излучения углекислого газа с учетом колебательной и вращательной неравновесности и анализ влияния этой неравновесности на пропускательные характеристики газа. Используются и сравниваются две основные модели: модель line-by-line (LBL) и статистическая узкополосная модель (SNB).

1. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Вывод уравнения переноса излучения для термически неравновесного газа подробно описан в работах [3–6].

Каждая линия спектра является результатом перехода между двумя энергетическими уровнями: верхним и нижним. Пусть n_u, n_l — концентрации излучающих молекул (заселенности) с более высоким энергетическим состоянием u и более низким энергетическим состоянием l соответственно.

При отсутствии рассеяния, если среда способна как излучать, так и поглощать излучение, уравнение переноса излучения имеет следующий вид:

$$\frac{dI_\eta}{ds} = N(\epsilon_\eta - \kappa_\eta I_\eta), \quad (1)$$

где N — число частиц излучающего компонента в единице объема [мол. м^{-3}]; I_η — спектральная энергетическая яркость [Вт/($\text{см}^2 \cdot \text{ср} \cdot \text{см}^{-1}$)]; ϵ_η — коэффициент излучения; κ_η — коэффициент поглощения [$\text{см}^2/\text{мол.}$]; η — волновое число [см^{-1}]. Коэффициенты $\epsilon_\eta, \kappa_\eta$ связаны соотношением

$$\epsilon_\eta = \kappa_\eta B_\eta^{ne} \quad (2)$$

через функцию Планка для термически неравновесного излучения

$$B_\eta^{ne} = \frac{2hc^2\eta^3}{\left(\frac{n_l g_u}{n_u g_l} - 1\right)}. \quad (3)$$

Здесь g_u и g_l — кратности вырождения, соответствующие состояниям u и l , т.е. количество независимых состояний, соответствующих каждому энергетическому уровню; h — постоянная Планка; k — постоянная Больцмана; c — скорость света.

В случае термического равновесия справедливо распределение Больцмана [7]:

$$\frac{n_l g_u}{n_u g_l} = \exp(C_2 \eta / T), \quad (4)$$

где константа C_2 определяется формулой

$$C_2 = hc/k. \quad (5)$$

Спектральная линия, связанная с переходом между уровнями, имеет некоторое расширение $\Delta\eta$, поэтому вводится так называемая интенсивность линии:

$$S_\eta = \int_{\Delta\eta} \kappa_\eta d\eta. \quad (6)$$

Для интенсивности линии справедливо соотношение [7] (для одной молекулы):

$$S_\eta = \frac{h\nu}{N}(n_l B_{lu} - n_u B_{ul}) = \frac{hc\eta}{N} \left(n_l \frac{g_u}{g_l} B_{lu} - n_u B_{ul} \right) = \frac{A_{ul}}{8\pi c \eta^2} \frac{1}{N} \left(n_l \frac{g_u}{g_l} - n_u \right) = \frac{A_{ul}}{8\pi c \eta^2} \frac{n_l}{N} \frac{g_u}{g_l} \left(1 - \frac{n_u g_l}{n_l g_u} \right). \quad (7)$$

Здесь A_{ul} — коэффициент Эйнштейна для спонтанной эмиссии [с^{-1}].

Рассмотрим спектральные линии, обусловленные только колебательно — вращательными энергопереходами.

В монографии Ачасова [3] показано, что 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:

$$n_{VJ} = N Q_V^{-1} g_V X_V Q_J^{-1} g_J X_J, \quad (8)$$

где g_J — статистический вес J -го вращательного уровня; Q_J — вращательная функция распределения (суммирование или совокупность всех вращательных энергетических уровней молекулы); Q_V — аналогичная колебательная функция распределения; g_V — статистический вес колебательного уровня V ; X_V, X_J функции Больцмана по колебательным и вращательным температурам.

Кратность вырождения, соответствующая каждому состоянию, равна

$$g = g_V g_J. \quad (9)$$

После подстановки формулы (8) в (7) получается следующая формула для интенсивности линии:

$$S_\eta = \frac{A_{ul}}{8\pi c \eta^2} \frac{n_l}{N} \frac{g_u}{g_l} \left(1 - \frac{X_{V,u} X_{R,u}}{X_{V,l} X_{R,l}} \right) \quad (10)$$

или

$$S_\eta = \frac{A_{ul} g_u}{8\pi c \eta^2} Q_V^{-1} X_{V,l} Q_J^{-1} X_{R,l} \left(1 - \frac{X_{V,u} X_{R,u}}{X_{V,l} X_{R,l}} \right). \quad (11)$$

2. ФОРМУЛЫ ДЛЯ ФУНКЦИЙ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ И ФУНКЦИЙ БОЛЬЦМАНА

Для молекулы CO_2 достаточно в общем случае ввести три колебательные температуры для симметричных, деформационных и асимметричных форм колебаний. Вследствие сильного взаимодействия симметричных и деформационных мод в молекуле CO_2 в связи с резонансом Ферми меж-

ду уровнями с $v_1 = 2v_2$, можно ввести единую колебательную температуру $T_{v,12}$ для этих уровней. Заселенность колебательного уровня $v_1 v_2 v_3$ таким образом задается следующими формулами [3]:

$$n_{v_1 v_2 v_3} = n_0 Q_V^{-1} g_v X_V, \quad (12)$$

$$X_V = X_{12} X_3 = \exp \left[-\frac{hc}{k} \left(\frac{\omega_{v_1 v_2 v_3} - \omega_{00 v_3}}{T_{v,12}} + \frac{\omega_{00 v_3}}{T_{v,3}} \right) \right], \quad (13)$$

где $\omega_{v_1 v_2 v_3} = \omega_v(v_1, v_2, v_3)$ – колебательная энергия, соответствующая колебательному уровню $v_1 v_2 v_3$, для расчета которой используется метод Герцберга [11].

Используя аппроксимацию гармонического осциллятора, можно получить следующую формулу для функции распределения:

$$Q_V^{-1} = \left[1 - \exp \left(-\frac{\Theta_1}{T_{v,1}} \right) \right] \left[1 - \exp \left(-\frac{\Theta_2}{T_{v,2}} \right) \right]^2 \times \left[1 - \exp \left(-\frac{\Theta_3}{T_{v,3}} \right) \right], \quad (14)$$

где Θ_i – характеристические колебательные температуры. Для CO_2 рекомендуются следующие значения: $\Theta_1 = 1920$ К, $\Theta_2 = 960$ К, $\Theta_3 = 3380$ К.

Предполагается, что обе вращательные моды молекулы CO_2 описываются единой вращательной температурой T_R . В этом случае функции Больцмана по вращательной температуре определяется формулой:

$$X_R(J) = \exp \left[-C_2 \frac{\omega_R(J)}{T_R} \right], \quad (15)$$

где $\omega_R(J)$ – вращательная энергия молекулы для J -го вращательного уровня, для расчета которой используется метод Герцберга [11]:

$$\omega_R(J) = BJ(J+1) - D[J(J+1)]^2. \quad (16)$$

В работе [5] показано, что для линейной молекулы CO_2 вращательная функция распределения пропорциональна температуре:

$$Q_R(T_R) \sim T_R. \quad (17)$$

В справочниках HITRAN [8], HITEMP [9], CDSD [10] для каждой спектральной линии задана интенсивность для стандартной температуры $T_0 = 296$ К.

Формула (11) в этом случае принимает вид:

$$S_\eta(T_0) = \frac{A_{ul} g_u}{8\pi c \eta^2} Q_V^{-1}(T_0) Q_R^{-1}(T_0) \times \exp \left(-C_2 \frac{E_l}{T_0} \right) \left[1 - \exp \left(-C_2 \frac{\eta}{T_0} \right) \right]. \quad (18)$$

Полученное соотношение позволяет выразить интенсивность линии при произвольных температурах (поступательной, вращательной и колебательных) через приведенную в справочнике интенсивность при стандартной температуре T_0 :

$$S_\eta = S_\eta(T_0) \frac{Q_V(T_0)}{Q_V(T_{v,1}, T_{v,2}, T_{v,3})} \frac{Q_R(T_0)}{Q_R(T_R)} \times \frac{X_{V,l} X_{R,l} \left(1 - \frac{X_{V,u} X_{R,u}}{X_{V,l} X_{R,l}} \right)}{\exp(-C_2 E_l / T_0) [1 - \exp(-C_2 \eta / T_0)]} \quad (19)$$

или с учетом (17)

$$S_\eta = S_\eta(T_0) \frac{Q_V(T_0)}{Q_V(T_{v,1}, T_{v,2}, T_{v,3})} \left(\frac{T_0}{T_R} \right) \times \frac{X_{V,l} X_{R,l} \left(1 - \frac{X_{V,u} X_{R,u}}{X_{V,l} X_{R,l}} \right)}{\exp(-C_2 E_l / T_0) [1 - \exp(-C_2 \eta / T_0)]}. \quad (20)$$

Как уже указывалось, каждая спектральная линия имеет расширение (уширение), и в зависимости от типа этого уширения можно определить коэффициенты поглощения и излучения через силу линии.

Полуширины линий на полувысоте, обусловленные лоренцовым и доплеровским уширением, определяются по следующим формулам:

$$\gamma_L = \left(\frac{T_0}{T} \right)^n [\gamma_{\text{air}}(p - p_p) + \gamma_{\text{self}} p_p] / p_{\text{ref}}, \quad (21)$$

$$\gamma_D = \eta_0 \sqrt{\frac{2kT}{mc^2} \ln 2}, \quad (22)$$

где $p_{\text{ref}} = 1$ атм = 1.0132501 бар – стандартное давление, m – масса излучающей частицы, η_0 – волновое число в центре линии, p_p – парциальное давление компонента.

Коэффициенты γ_{air} , γ_{self} и n для каждой линии спектра содержатся в базах данных HITRAN, HITEMP и CDSD.

Профиль коэффициента поглощения определяется через интенсивность линии по следующим формулам.

Для лоренцева уширения:

$$\kappa_{\eta} = \frac{S_{\eta}}{\pi} \frac{\gamma_L}{(\eta - \eta_0)^2 + \gamma_L^2}. \quad (23)$$

Для доплеровского уширения:

$$\kappa_{\eta} = \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \left(\frac{S_{\eta}}{\gamma_D} \right) \exp \left[-(\ln 2) \left(\frac{\eta - \eta_0}{\gamma_D} \right)^2 \right]. \quad (24)$$

Для смешанного воздействия используется контур Фойгта:

$$\kappa_{\eta} = \frac{S_{\eta} \gamma_L}{\pi^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(-x^2) dx}{\gamma_L^2 + \left(\eta - \eta_0 - \frac{x \gamma_D}{\sqrt{\ln 2}} \right)^2}. \quad (25)$$

3. РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ПЕРЕНОСА ИЗЛУЧЕНИЯ

Для однородного слоя толщиной L формальное решение уравнения (1) будет иметь вид:

$$I_{\eta} = B_{\eta}^{ne} + C \exp(-N \kappa_{\eta} s). \quad (26)$$

При заданной в качестве граничного условия на входе в слой яркости $I_{\eta, \text{in}}$ из (26) получаем:

$$I_{\eta}(s) = I_{\eta, \text{in}} \exp(-N \kappa_{\eta} s) + [1 - \exp(-N \kappa_{\eta} s)] B_{\eta}^{ne}. \quad (27)$$

Таким образом, на выходе из слоя спектральная яркость равна:

$$I_{\eta, \text{out}} = I_{\eta}(L) = I_{\eta, \text{in}} \tau_{\eta} + (1 - \tau_{\eta}) B_{\eta}^{ne}, \quad (28)$$

где

$$\tau_{\eta} = \exp(-N \kappa_{\eta} L) - \quad (29)$$

пропускательная способность слоя.

В случае неоднородного слоя, согласно принципу аппроксимации Куртиса—Годсона, вычисляются значения $S_{\eta, e}, \gamma_{L, e}, \gamma_{D, e}, B_{\eta, e}^{ne}$ однородного слоя эквивалентного с точки зрения оптических свойств рассматриваемому неоднородному слою по формулам:

$$\begin{aligned} S_{\eta, e} &= \frac{1}{L} \int_0^L S_{\eta}(l) dl, \\ \gamma_{L, e} &= \frac{\int_0^L S_{\eta}(l) \gamma_L(l) dl}{\int_0^L S_{\eta}(l) dl}, \\ \gamma_{D, e} &= \frac{\int_0^L S_{\eta}(l) \gamma_D(l) dl}{\int_0^L S_{\eta}(l) dl}, \\ B_{\eta, e}^{ne} &= \frac{1}{L} \int_0^L B_{\eta}^{ne}(l) dl. \end{aligned} \quad (30)$$

Индекс e в формулах (30) соответствует значениям параметров $S_{\eta}, \gamma_L, \gamma_D, B_{\eta}^{ne}$ эквивалентного однородного слоя.

4. СТАТИСТИЧЕСКАЯ УЗКОПОЛОСНАЯ МОДЕЛЬ

Решение уравнения переноса излучения для каждой спектральной линии представляет большую математическую сложность из-за огромного количества линий (до нескольких сот миллионов и больше) и очень сильной зависимости коэффициента поглощения от волнового числа. Поэтому желательно перейти к более эффективным и быстрым приближенным методам, используя LBL для верификации полученных результатов.

Очень удобной для практического использования является статистическая узкополосная модель (SNB), основанная на подходе Майера и Гуди [12]. Наиболее точным для профилей линий Лоренца, преобладающих при атмосферном или более высоких давлениях, является распределение интенсивности линий S^{-1} с экспоненциальным хвостом Малкмуса [13]. Средняя пропускательная способность однородного слоя толщиной L при давлении p и молярной доле X поглощающих частиц, усредненная по узкой полосе $[\eta - \Delta\eta/2, \eta - \Delta\eta/2]$ шириной $\Delta\eta$, определяется выражением:

$$\bar{\tau}_{\eta} = \exp\left(-\frac{\bar{W}_L}{d}\right) = \exp\left[-\frac{2\bar{\gamma}}{\bar{\delta}} \left(\sqrt{1 + \frac{XpLk\bar{\delta}}{\bar{\gamma}}} - 1 \right)\right], \quad (31)$$

где $\bar{W}$ — средняя эквивалентная толщина; d — среднее расстояние между линиями; средние параметры для полосы, содержащей N линий, определяются формулами:

$$\bar{k} = \frac{1}{\Delta\eta} \sum_i^N S_i, \quad \bar{\gamma} = \frac{1}{N} \sum_i^N \gamma_i, \quad \bar{\delta} = \frac{\bar{k} \bar{\gamma}}{\left[\frac{1}{\Delta\eta} \sum_i^N \sqrt{\gamma_i S_i} \right]^2}. \quad (32)$$

Интенсивности линий S_i и полуширины линий на полувывсоте γ_i рассчитываются по формулам из раздела 3.

Уравнение (31) учитывает только столкновительное уширение спектральных линий. Для правильного учета комбинированных эффектов столкновения и доплеровского уширения необходимо использовать смешанную форму линии (профиль Фойгта). Поскольку не существует аналитического выражения для средней эквивалентной ширины $\bar{W}_V$ набора линий поглощения Фойгта, обычно используются дополнительные аппрок-

симации, объединяющие эквивалентные ширины лоренцевской $\bar{W}_L$ и доплеровской $\bar{W}_D$ [14].

Используются следующие аппроксимации: Людвига и др. [15]:

$$\frac{\bar{W}_V}{d} = XpL\bar{k}\sqrt{1 - Y^{-1/2}}, \quad (35)$$

$$Y = \left[1 - \left(\frac{1}{XpL\bar{k}} \frac{\bar{W}_L}{d} \right)^2 \right]^{-2} + \left[1 - \left(\frac{1}{XpL\bar{k}} \frac{\bar{W}_D}{d} \right)^2 \right]^{-2} - 1, \quad (36)$$

а также Рождеса и Ульямса [16]:

$$\frac{\bar{W}_V}{d} = \left[\left(\frac{\bar{W}_L}{d} \right)^2 + \left(\frac{\bar{W}_D}{d} \right)^2 - \left(\frac{1}{XpL\bar{k}} \frac{\bar{W}_L}{d} \frac{\bar{W}_D}{d} \right)^2 \right]^{1/2}. \quad (37)$$

Для расчета параметра $\frac{\bar{W}_D}{d}$ использовалась методика из работы [17].

Для среднего значения лоренцевой линии $\bar{\gamma}$ в формуле (31) использовалось следующее соотношение:

$$\bar{\gamma}_{\text{CO}_2} = \frac{p}{p_s} \left(\frac{T_s}{T} \right)^{0.7} \times [0.07X_{\text{CO}_2} + 0.058(1 - X_{\text{CO}_2} - X_{\text{H}_2\text{O}}) + 0.1X_{\text{H}_2\text{O}}]. \quad (38)$$

В уравнение переноса излучения (1) входит функция Планка, которая, как это видно из формулы (3), является сложной функцией заселенностей колебательно – вращательных энергетических уровней. В случае термической неравновесности функция Планка в общем случае не зависит от какой-либо конкретной температуры (поступательной, колебательных или вращательной) и должна определяться особо.

Поэтому в статистической модели необходимо определять не только средние значения интенсивности линий и среднего расстояния между линиями по формулам (32)–(34), но и среднее значение неравновесной функции Планка. Для этого использовалась следующая формула:

$$\bar{B}_\eta^{\text{ne}} = \frac{\sum_{i=1}^N B_{\eta,i}^{\text{ne}} S_i}{\sum_{i=1}^N S_i}. \quad (39)$$

Параметры SNB были рассчитаны из спектроскопических баз данных HITEMP и CDSD в диапазоне от 400 до 6000 см^{-1} для двух спектральных разрешений: 5 и 25 см^{-1} . Рассматривался диапазон

поступательной температуры 100–3000 К с шагом 100 К. Колебательные и вращательная температуры выбирались для каждого значения поступательной с отклонением от нее на 1000 К для колебательных и на 500 К для вращательной, также с шагом 100 К.

Предполагалось термическое равновесие между симметричной и деформационной колебательными модами вследствие резонанса Ферми.

Таким образом, все параметры базы данных для работы SNB являются функциями 5 параметров: среднего волнового числа полосы η , поступательной температуры T , колебательных температур T_{v2} , T_{v3} и вращательной температуры T_r .

5. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

Для оценки влияния термической неравновесности и для сравнения двух методик – LBL и SNB, проведен ряд расчетов излучательных характеристик однородных слоев CO_2 в инфракрасном диапазоне. Результаты, где возможно, сравнивались с экспериментальными данными из работы [18], в которой были проведены узкополосные измерения пропускания для полос 2.7 и 2.0 $\mu\text{м}$ при температурах до 1550 К.

Отметим, что яркостные температуры для различных разрядов были получены во многих научных работах и для разных технических установок, например, в статьях для капиллярного и поверхностного разрядов, разряда магнито-плазменного компрессора и других [19–29].

$$\text{Область } 2.7 \mu\text{м. } p = 1 \text{ бар, } T = 1550 \text{ К,} \\ L = 20 \text{ см, } X_{\text{CO}_2} = 1.0$$

На рис. 1 показана пропускательная способность слоя CO_2 толщиной 20 см при атмосферном давлении и температуре $T = 1550$ К. Результаты расчетов по LBL и SNB хорошо согласуются, как между собой, так с экспериментом [18].

Расчет функции Планка в решении уравнения переноса излучения (1) осуществлялся двумя способами: при использовании неравновесной функции Планка (формула (3)); и по равновесной функции Планка с использованием поступательной температуры T . Оба метода практически совпадают как для расчета по LBL, так и для расчета по SNB.

Из этого следует, что для термически равновесного течения функция Планка может рассчитываться через равновесную температуру T .

На рис. 2 показано влияние неравновесности по первой/второй колебательной моде. Колебательная температура $T_{v1} = T_{v2}$ снижена на 300 К, все остальные температуры – такие же, как в предыдущем расчете: $T = T_{v3} = T_r = 1550$ К.

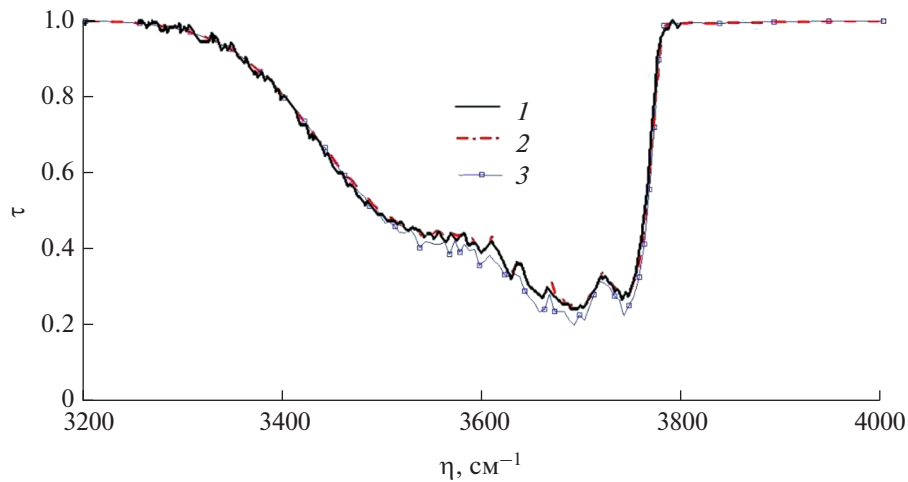


Рис. 1. Пропускательная способность слоя газа CO_2 в области 2.7 мкм. $T = T_{v1} = T_{v2} = T_{v3} = T_r = 1550$ К: 1 – эксперимент [18]; 2 – LBL; 3 – SNB.

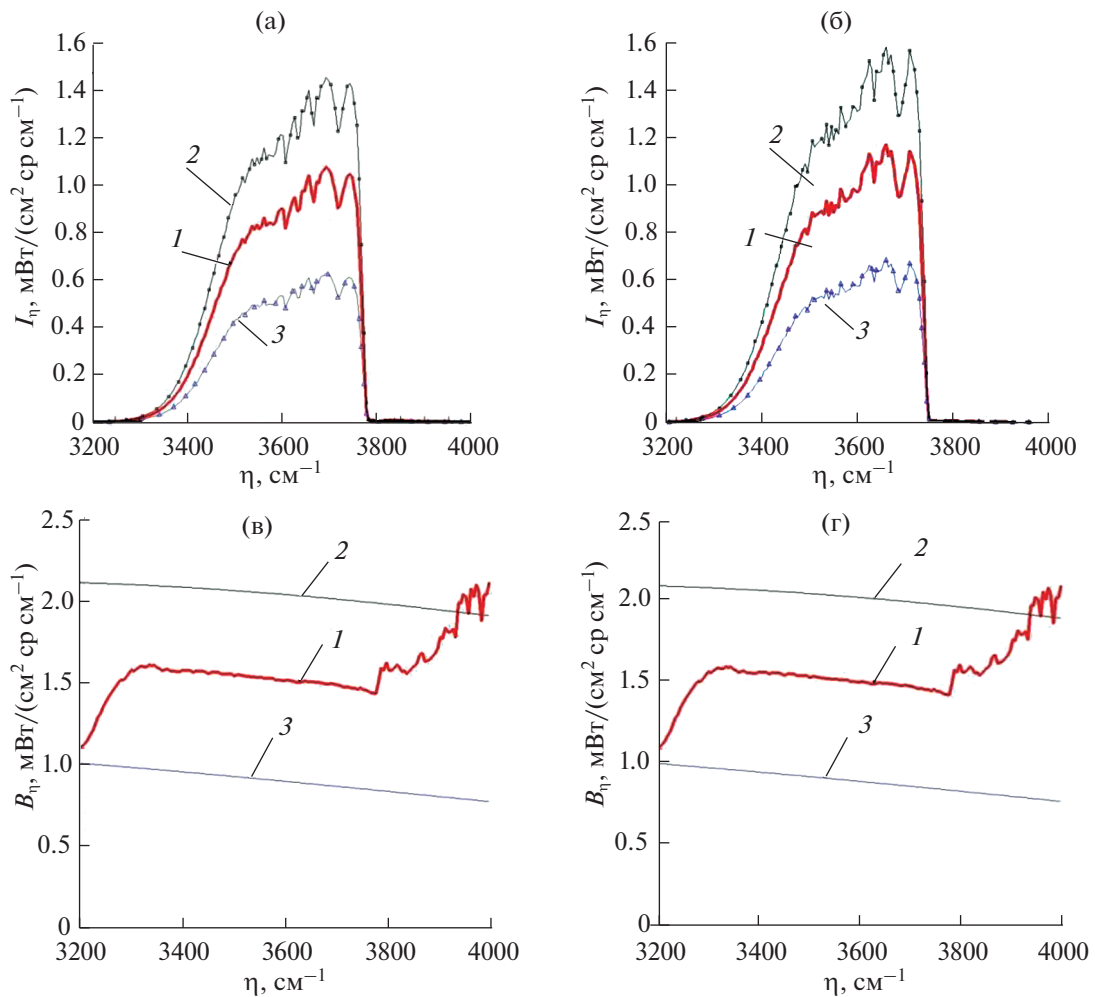


Рис. 2. Яркость слоя газа (а, б) и функция Планка (в, г) в слое газа CO_2 в области 2.7 мкм. Анализ воздействия неравновесности по температуре деформационной колебательной моды. $T_{v1} = T_{v2} = 1250$ К, $T = T_{v3} = T_r = 1550$ К. (а, в) LBL, (б, г) SNB. Неравновесный расчет: 1 – неравновесный расчет; 2 – расчет B_η по $T = T_{v3} = T_r$; 3 – расчет B_η по $T_{v1} = T_{v2}$.

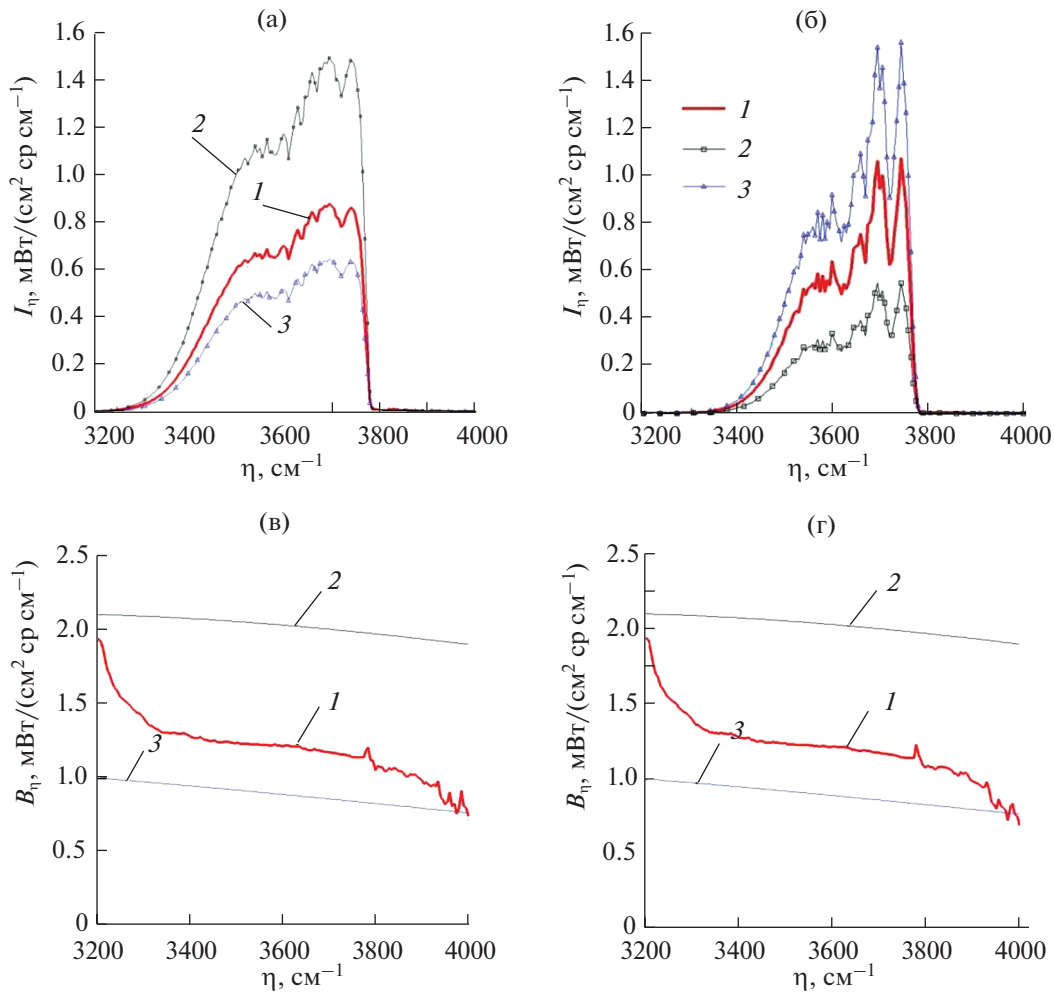


Рис. 3. Яркость слоя газа (а, б) и функция Планка (в, г) в слое газа CO_2 в области 2.7 мкм. Анализ воздействия неравновесности по температуре асимметричной колебательной моды. $T_{v3} = 1250$ К, $T = T_{v1} = T_{v2} = T_r = 1550$ К. (а, в) LBL, (б, г) SNB. Неравновесный расчет т: 1 – неравновесный расчет B_η ; 2 – расчет B_η по $T = T_{v1} = T_{v2} = T_r$; 3 – расчет B_η по T_{v3} .

Очевидно, что для расчета функции Планка нельзя использовать никакую из температур, ни поступательную, ни колебательные, ни вращательную. Функция Планка и яркость занимают некое промежуточное положение между посчитанными по этим температурам.

Аналогичный результат наблюдается при оценке влияния неравновесности по третьей колебательной моде. На рис. 3, показаны результаты расчетов с пониженной температурой $T_{v3} = 1250$ К. Все остальные температуры – такие же, как в равновесном расчете: $T = T_{v1} = T_{v2} = T_r = 1550$ К. Функция Планка и яркость снова занимают некое промежуточное положение между посчитанными по температурам. T_{v3} и $T = T_{v1} = T_{v2} = T_r$. Такой результат был предсказуем, т. к. в районе 2.7 мкм излучение связано с переходами с верхних уровней

$2_2 + v_3$ и $v_1 + v_3$, и поэтому изменение обеих колебательных температур приводит к изменению излучения.

Влияние вращательной температуры в этом диапазоне не проявляется практически никак. Неравновесная функция Планка и яркость совпадают с посчитанными по поступательной температуре. (Рисунки результатов расчетов здесь не приводятся в целях экономии объема статьи).

Сравнение пропускательной способности при разных режимах представлено на рис. 4. Расчеты проводились по модели LBL. Очевидно, что влияние термической неравновесности на пропускательную способность не столь велико, как на функцию Планка и энергетическую яркость. Особенно это проявляется в области минимума τ , т.е. максимума интенсивности излучения.

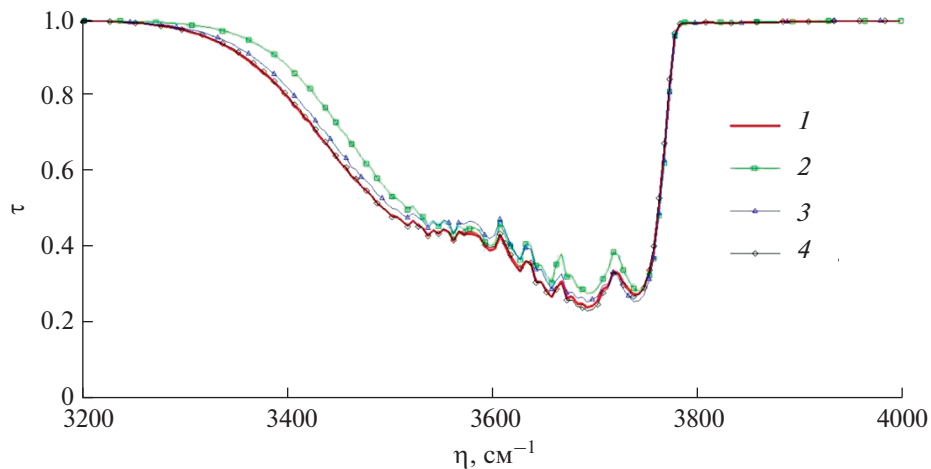


Рис. 4. Пропускательная способность слоя газа CO_2 в области 2.7 мкм: 1 – $T = T_{v1} = T_{v2} = T_{v3} = T_r = 1550$ К; 2 – $T_{v1} = T_{v2} = 1250$ К; 3 – $T_{v3} = 1250$ К; 4 – $T_r = 1450$ К.

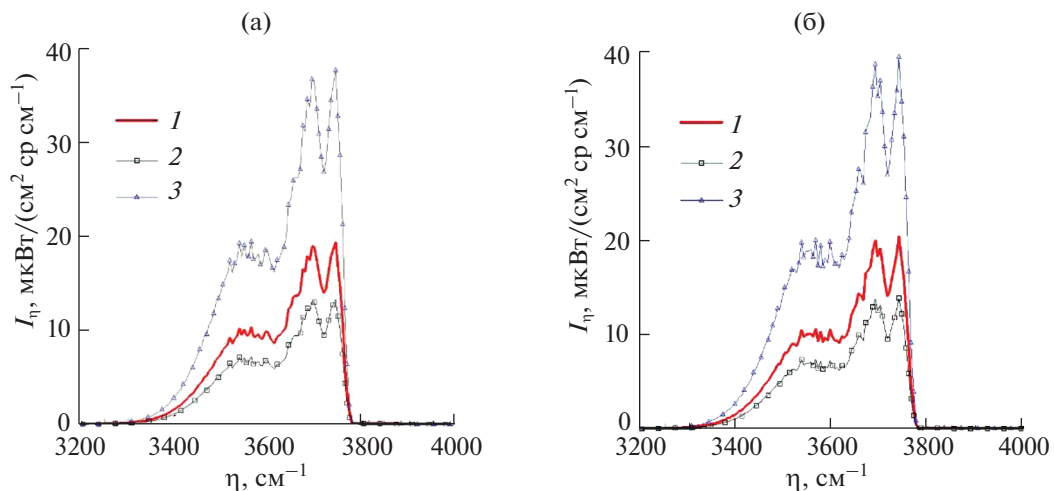


Рис. 5. Яркость слоя газа CO_2 в области 2.7 мкм. Анализ воздействия неравновесности по температуре деформационной колебательной моды. $T_{v1} = T_{v2} = 1450$ К, $T = T_{v3} = 1135$ К. (а) LBL, (б) SNB. Неравновесный расчет τ : 1 – неравновесный расчет B_η ; 2 – расчет B_η по $T = T_{v3} = T_r$; 3 – расчет по $T_{v1} = T_{v2}$.

Область 2.7 мкм. $p = 0.002$ бар, $T = 1135$ К,
 $L = 10$ м, $X_{\text{CO}_2} = 0.1$

При давлениях близких к атмосферному основному механизму уширению спектральных линий является уширение Лоренца. Было бы интересно провести подобное тестирование для более низкого давления, когда необходимо учитывать совместное воздействие лоренцева и доплеровского уширения.

Из анализа результатов расчета следуют выводы аналогичные полученным в предыдущем разделе. Результаты расчетов по LBL и SNB хорошо согласуются между собой. Воздействие термической неравновесности на пропускательную способность невелико (некоторое исключение представляет $T_{v1} = T_{v2}$, но тоже не очень значительно). Главное влияние проявляется на неравновесную функцию Планка, которая не может быть выра-

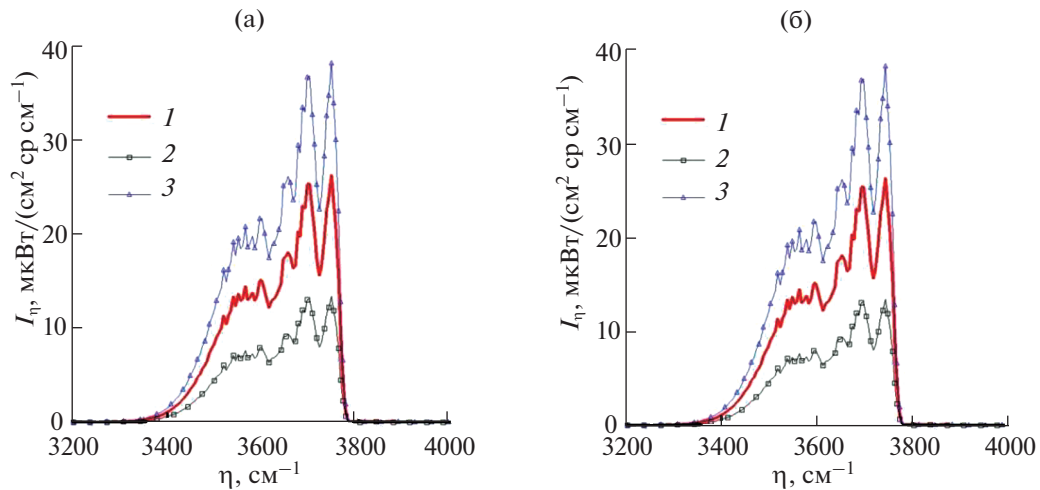


Рис. 6. Яркость слоя газа CO_2 в области 2.7 мкм. Анализ воздействия неравновесности по температуре асимметричной колебательной моды. $T_{v3} = 1450$ К, $T = T_{v1} = T_{v2} = T_r = 1135$ К. (а) LBL, (б) SNB. Неравновесный расчет τ : 1 – неравновесный расчет B_η ; 2 – расчет B_η по $T = T_{v1} = T_{v2} = T_r$; 3 – расчет B_η по T_{v3} .

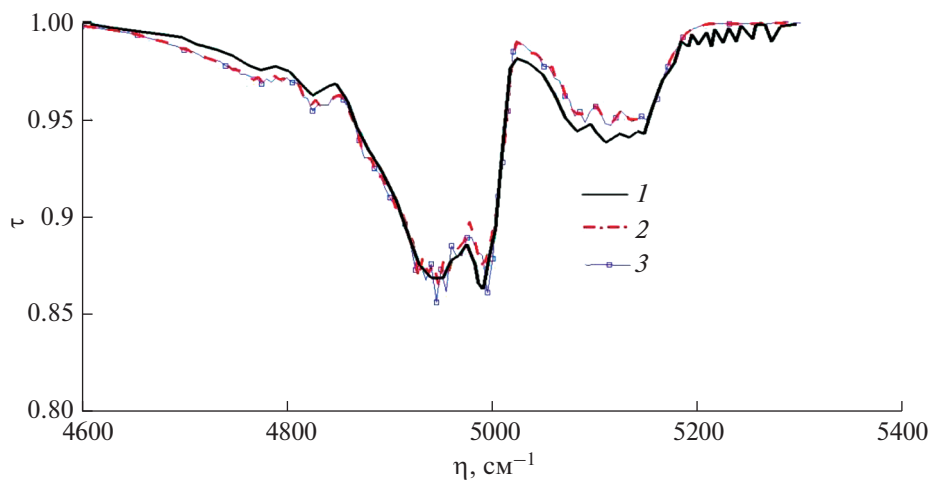


Рис. 7. Пропускательная способность слоя газа CO_2 в области 2.0 мкм. $T = T_{v1} = T_{v2} = T_{v3} = T_r = 1000$ К. 1 – Эксперимент [18]; 2 – LBL; 3 – SNB.

жена ни через одну из температур рассматриваемых энергетических мод (см. рис. 5, 6).

Неравновесность по вращательной температуре практически никак не проявляется.

Область 2.0 мкм. $p = 1$ бар, $T = 1000$ К,
 $L = 50$ см, $X_{\text{CO}_2} = 1.0$

Поведение излучения CO_2 в этой области, в целом, похоже на область 2.7 мкм. Снова основ-

ное воздействие термической неравновесности проявляется через неравновесную функцию Планка, которая не может быть выражена ни через одну из температур рассматриваемых энергетических мод (см. рис. 7–9). Неравновесность по вращательной температуре практически никак не проявляется.

Пожалуй, единственное отличие состоит в том, что пропускательная способность слоя до-

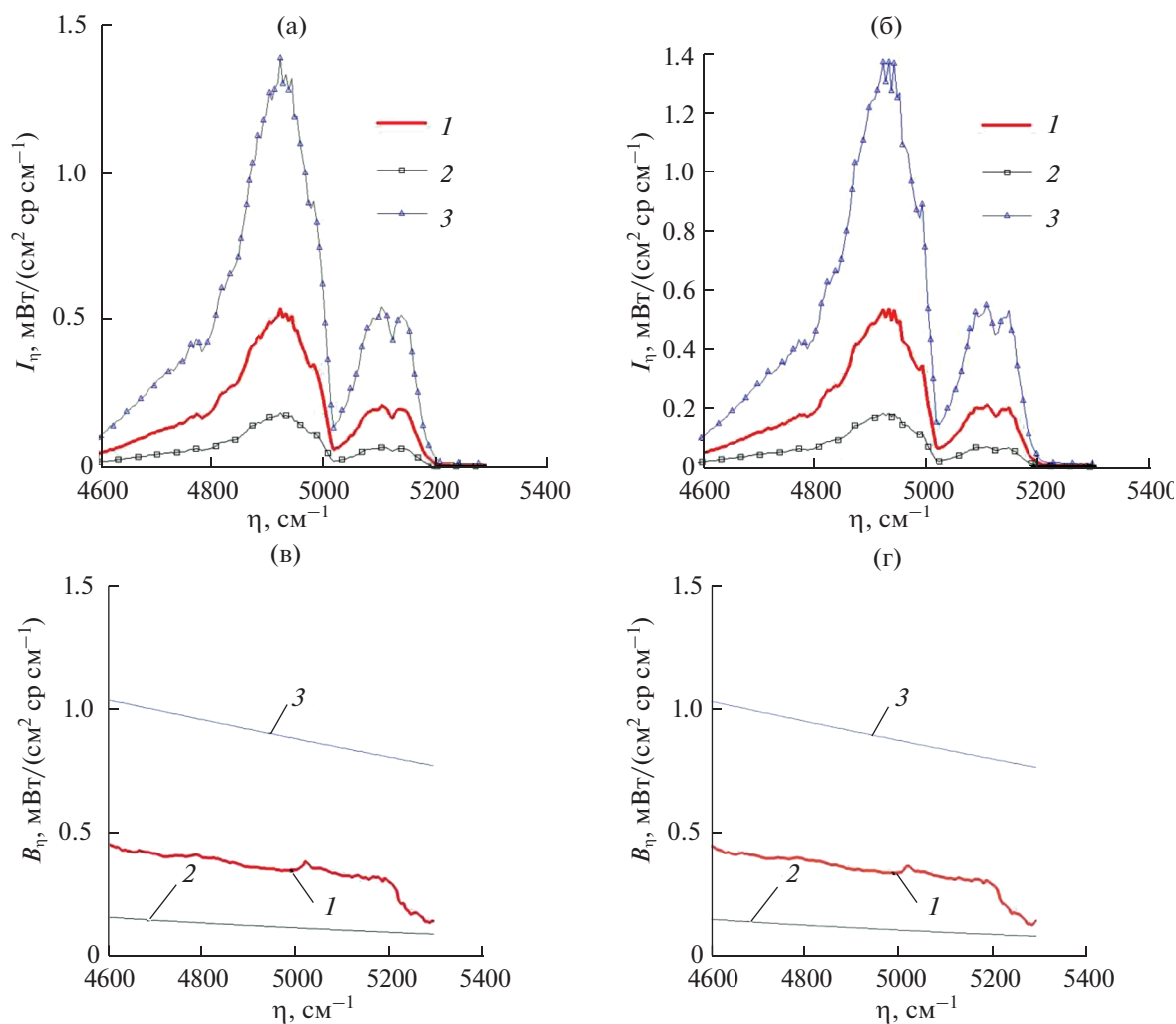


Рис. 8. Яркость слоя газа (а, б) и функция Планка (в, г) в слое газа CO_2 в области 2.0 мкм. Анализ воздействия неравновесности по температуре деформационной колебательной моды. $T_{v1} = T_{v2} = 1400 \text{ K}$, $T = T_{v3} = T_r = 1000 \text{ K}$. (а, в) LBL, (б, г) SNB. Неравновесный расчет τ : 1 – неравновесный расчет B_η ; 2 – расчет B_η по $T = T_{v3} = T_r$; 3 – расчет B_η по $T_{v1} = T_{v2}$.

статочны сильно зависит от колебательной температуры T_{v2} .

6. ВЫВОДЫ

В данной работе была разработана методика расчета излучения термически неравновесного газа CO_2 для полос 2.7 и 2.0 мкм для оценки влияния неравновесности на его пропускательные свойства. Были использованы LBL и SNB модели. Проведен сравнительный анализ полученных результатов с использованием обеих моделей, который показал их хорошее согласование между собой. Была выполнена валидация получившихся

в результате расчетов данных, которая показала удовлетворительное соответствие с экспериментальными значениями [18].

Показано, что термическая неравновесность в рассмотренных условиях оказывает слабое воздействие на пропускательную способность слоя газа.

В диапазонах 2.7 и 2.0 мкм для расчета функции Планка нельзя использовать никакую из температур – ни поступательную, ни колебательные, ни вращательную. Неравновесная функция Планка и яркость занимают некое промежуточное положение между посчитанными по температурам T_{v2} и T_{v3} .

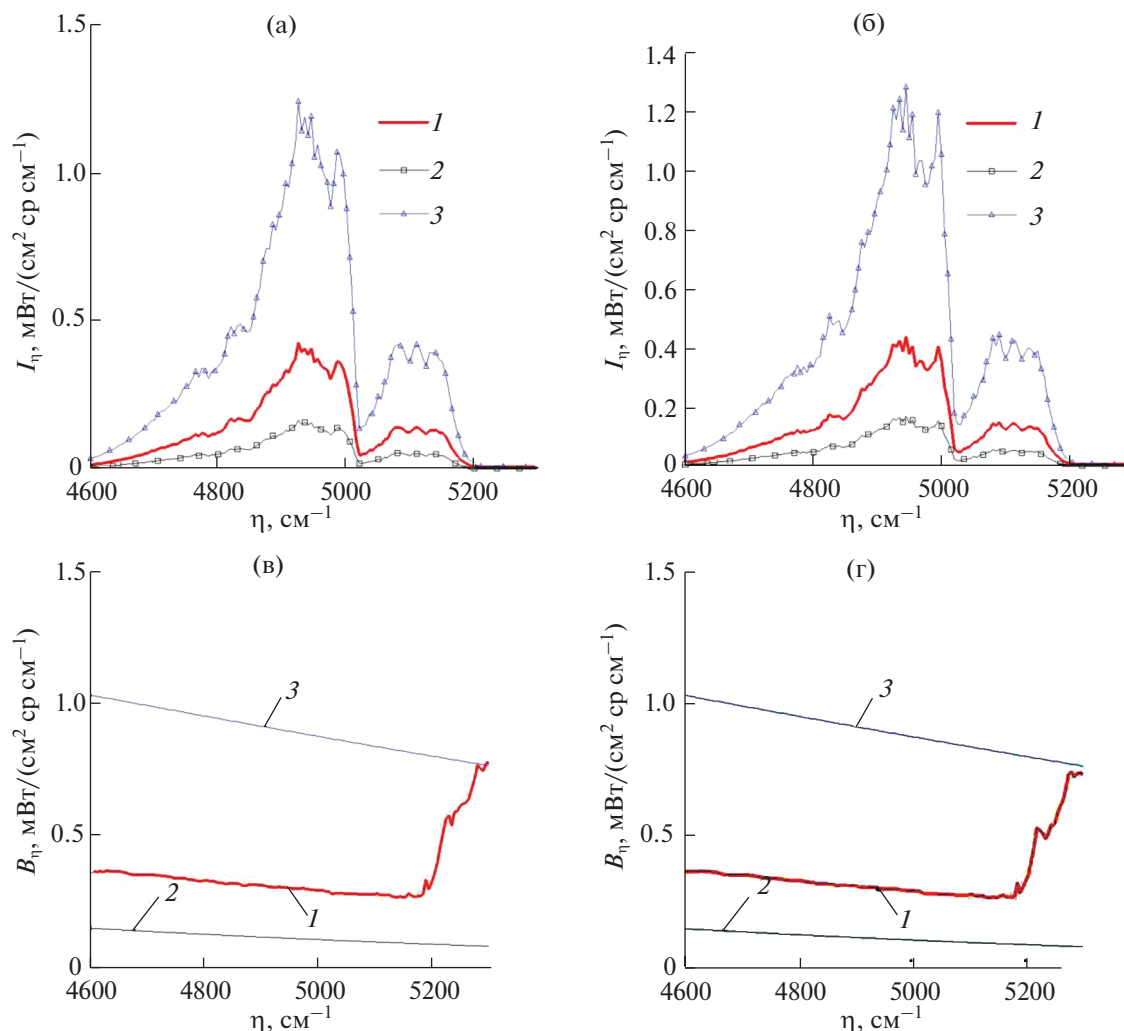


Рис. 9. Яркость слоя газа (а, б) и функция Планка (в, г) в слое газа CO_2 в области 2.7 мкм. Анализ воздействия неравновесности по температуре ассиметричной колебательной моды. $T_{v3} = 1400$ К, $T = T_{v1} = T_{v2} = T_r = 1000$ К. (а) LBL, (б) SNB. Неравновесный расчет τ : 1 – неравновесный расчет B_η ; 2 – расчет B_η по $T = T_{v1} = T_{v2} = T_r$; 3 – расчет B_η по T_{v3} .

Во всех рассматриваемых случаях влияние вращательной неравновесности не является существенным.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ/REFERENCES

1. Kuzenov V.V., Ryzhkov S.V., Varaksin A.Yu. // Mathematics. 2022. V. 10. P. 2130.
2. Kuzenov V.V., Ryzhkov S.V., Varaksin A.Yu. // Aerospace. 2023. V. 10. P. 662.
3. Ачасов О.В. и др. Диагностика неравновесных состояний в молекулярных лазерах. 1985. Минск: Наука и техника.
4. Kudryavtsev N.N., Novikov S.S. // Int. J. Heat Mass Transfer. 1982. V. 25. P. 1541–1558.
5. Кудрявцев Н.Н., Новиков С.С. // Теплофизические свойства веществ. 1980. Т. 18 (6). С. 1161–1167.
6. Молчанов А.М., Быков Л.В., Янышев Д.С. // Теплофизика и аэромеханика. 2017. Т. 24 (3). С. 413–434.
7. Modest M.F. Radiative Heat Transfer (2nd Ed.). 2003. Hardbound: Academic.
8. Rothman L.S., Gordon I.E., Hargreaves R.J., et al. J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2022. V. 277. P. 107949.
9. Rothman L.S., Gordon I.E., Barber R.J., Dothe H., Gamache R.R., Goldman A., Perevalov V., Tashkun S.A., Tennyson J. // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2010. V. 111. P. 2139–2150.
10. Tashkun S.A., Perevalov V.I., Teffo J.-L., Bykov A.D., Lavrentieva N.N. // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2003. V. 82. P. 165–196.
11. Герцберг Г. Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул. 1949. Москва: Изд-во ин. лит-ры. [Herzberg G. Molecular Spectra and Molecular Structure II: Infrared and Raman Spectra of

- Polyatomic Molecules (9th Ed.). 1945. Princeton: D. Van Nostrand Comp.].
12. Goody R., Yung Y. Atmospheric Radiation (2nd. Ed.). 1989. Oxford: Oxford Univ.
 13. Malkmus W. // J. Opt. Soc. Am. 1967. V. 57. P. 323–329.
 14. Taine J., Soufiani A. // Adv. Heat Transfer. 1999. V. 33. P. 295–414.
 15. Ludwig C.B., Malkmus W., Reardon J.E., Thomson J.A.L. Handbook of Infrared Radiation From Combustion Gases. SP-3080. 1973. NASA.
 16. Rodgers C.D., Williams A.P. // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 1974. V. 14. P. 319–323.
 17. Riviere Ph., Soufiani A. // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2011. V. 112. P. 475–485.
 18. Bharadwaj S.P., Modest M.F. // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2007. V. 103. P. 146–155.
 19. Ryzhkov S.V. // Probl. At. Sci. Technol. 2010. No. 4 (7). P. 105–110.
 20. Kuzenov V.V., Ryzhkov S.V., Varaksin A.Yu. // Appl. Sci. 2023. V. 13. P. 5538.
 21. Kuzenov V.V., Ryzhkov S.V. // Comput. Therm. Sci. 2021. V. 13. P. 45–56.
 22. Kuzenov V.V., Ryzhkov S.V., Varaksin A.Yu. // Appl. Sci. 2022. V. 12. P. 3610.
 23. Kuzenov V.V., Ryzhkov S.V. // Probl. At. Sci. Technol. 2013. No. 1 (83). P. 12–14.
 24. Кузенов В.В., Рыжков С.В. // Ядерная физика и инжиниринг. 2019. Т. 10. С. 263–270. [Kuzenov V.V., Ryzhkov S.V. // Phys. At. Nucl. 2019. V. 82. P. 1341–1347].
 25. Kuzenov V.V., Ryzhkov S.V. // Probl. At. Sci. Technol. 2013. No. 4 (86). P. 103–107.
 26. Кузенов В.В., Рыжков С.В. // Теплофиз. выс. темп. 2021. Т. 59. № 4. С. 492–501. [Kuzenov V.V., Ryzhkov S.V. // High Temp. 2022. V. 60. P. S7].
 27. Клименко Г.К., Кузенов В.В., Ляпин А.А., Рыжков С.В. Расчет, моделирование и проектирование генераторов низкотемпературной плазмы. Уч. 2021. Москва: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана.
 28. Кузнецов В.А. // Теплоэнергетика. 2022. № 9. С. 78–88. [Kuznetsov V.A. // Therm. Eng. 2022. V. 69. P. 702–710].
 29. Клименко В.В., Клименко А.В., Терешин А.Г., Мукушина О.В. // Теплоэнергетика. 2022. № 3. С. 5–19. [Klimenko V.V., Klimenko A.V., Tereshin A.G., et al. Therm. Eng. 2022. V. 69. P. 149–162].

Calculation of the Emission Characteristics of Thermally Nonequilibrium CO₂ Gas in the Range 3200–5400 cm^{−1} Using the Line-by-Line and Statistical Narrow-Band Models

A. M. Molchanov¹, *, D. S. Yanyshchev¹, L. V. Bykov¹, and A. S. Kovalenko¹

¹ Moscow Aviation Institute (National Research University), Moscow, 125993 Russia

*e-mail: alexmol_2000@mail.ru

Received March 26, 2024; revised March 26, 2024; accepted April 10, 2024

Abstract—A method for calculating the absorption and emission characteristics of CO₂ in the range from 3200 to 5400 cm^{−1} taking into account the influence of thermal disequilibrium is presented. A series of calculations using line-by-line (LBL) and statistical narrow-band (SNB) models have been performed at various pressures, spectral regions, layer thicknesses, temperatures, and molar fractions of CO₂. The obtained technique shows good agreement between the LBL and SNB models and satisfactorily agrees with experimental data when calculating the transmission capacity. In the considered range, the nonequilibrium in rotational temperature hardly affects the radiative characteristics, unlike translational and vibrational temperatures, which significantly affect the nonequilibrium Planck function. The resulting technique can be used for calculations concerning the problem of global warming.

Keywords: nonequilibrium radiation, carbonic acid gas, line-by-line method, statistical narrow-band model, greenhouse effect