

# Thermal Radiation Simulation of Vibrationally Nonequilibrium Gas Using k-Distribution Method

**Molchanov A.M.**

*Moscow Aviation Institute (National Research University), Moscow*  
alexmol\_2000@mail.ru

## **Abstract**

Method of calculating the IR radiation of vibrationally nonequilibrium gas on the basis of k-distribution was developed. Comparison of calculation of nonequilibrium radiation with the results of other authors and with the experimental data showed a satisfactory agreement. It is shown that the calculation results of the intensity of radiation on non-equilibrium methods differ significantly from equilibrium. The discrepancy increases with thre height (decreasing pressure) and can exceed the order.

Keywords: vibrational nonequilibrium, IR radiation, k-distribution

УДК 535.15, 535.233, 536.24, 535.231

# Расчет теплового излучения колебательно неравновесного газа методом k-распределения

**Молчанов А.М.**

*Московский авиационный институт (Национальный исследовательский университет),  
Москва  
alexmol\_2000@mail.ru*

## Аннотация

Разработана методика расчета ИК излучения колебательно неравновесного газа на основе метода k-распределения. Сопоставление расчета неравновесного излучения с результатами других авторов и с экспериментальными данными показало удовлетворительное совпадение. 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.

Ключевые слова: колебательно неравновесность, ИК излучение, k-распределение

## 1. Введение

Газовые смеси, характеризующиеся неравновесным возбуждением колебательных степеней свободы молекул, широко используются 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. Такой характер линий спектра высокотемпературных газов делает расчет излучения молекул крайне сложной и трудоемкой задачей.

В работе [1] показано, что метод k-распределения [2-4] позволяет с высокой эффективностью проводить расчеты узкополосного излучения горячих газов с ярко выраженным линейчатым характером спектра. Полученные результаты сопоставимы с методом прямого расчета по спектральным линиям (line-by-line, LBL) [5] и хорошо согласуются с экспериментальными данными, как для однородных, так и для неоднородных газовых смесей.

Задачей данной работы является разработка методики расчета теплового излучения колебательно неравновесного газа на основе метода k-распределения. Задача состоит из двух взаимосвязанных частей: 1) определение распределений излучающих молекул по колебательным уровням на основе рассмотрения колебательных процессов релаксации; 2) ис-

пользуя полученное распределение, определение излучательных и поглощательных характеристик газа в ИК области спектра.

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

### 2.1. 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.

1) Уравнение неразрывности.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j) = 0, \quad (1)$$

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

2) Уравнение количества движения

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j u_i + \delta_{ji} p - \tau_{ij}) = 0, \quad (2)$$

где  $p$  - давление;  $\tau_{ij}$  - тензор вязких напряжений.

3) Уравнение полной энергии

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \rho u_j \left( E + \frac{p}{\rho} \right) + q_{tr,j} + q_{v,j} + \sum_s V_{s,j} \rho_s h_s - u_i \tau_{ij} \right] = -Q_R, \quad (3)$$

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)].

4) Уравнение колебательной энергии  $m$ -ой колебательной моды

$$\frac{\partial}{\partial t} (E_{v,m}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (E_{v,m} u_j + q_{v,m,j} + E_{v,m} V_{m,j}) = S_{v,m}, \quad m = 1, 2, \dots, N_M, \quad (4)$$

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.

Здесь под  $V_{m,j}$  подразумевается диффузионная скорость компонента, к которому относится  $m$ -ая колебательная мода.

5) Уравнение сохранения массы химического компонента  $s$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho C_s) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho C_s u_j + \rho C_s V_{s,j}) = \dot{w}_s, \quad s = 1, 2, \dots, N_C - 1, \quad (5)$$

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:

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

2) энергия возбужденных электронных состояний молекул пренебрежимо мала по сравнению остальными энергетическими модами;

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

4) 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  $p_s$ :

$$p = \sum_{s=1}^{N_C} p_s = \sum_{s=1}^{N_C} \rho_s \frac{R_U}{M_s} T_{tr} \quad (6)$$

где  $R_U$  - универсальная газовая постоянная;  $M_s$  - молекулярная масса компонента  $s$ .

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

$$\rho E = \sum_{s=1}^{N_C} \rho_s C_{vir,s} T_{tr} + \sum_{m=1}^{N_M} E_{v,m} + \frac{1}{2} \rho u_i u_i + \sum_s \rho_s h_s^0, \quad (7)$$

где  $h_s^0$  - теплота образования компонента  $s$ ;  $C_{vir,s}$  - 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 данной работе используется подход, описывающий колебательное движение молекул на основе модели гармонического осциллятора.

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

$$\alpha_m = r_m \frac{1}{\exp(\theta_m / T_{v,m}) - 1} \quad (8)$$

Соответственно:

$$E_{v,m} = \frac{\rho C_s}{M_s} R_U \theta_m r_m \frac{1}{\exp(\theta_m / T_{v,m}) - 1} \quad (9)$$

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 Коннера и др. [9]. Она включает 19 реакций. Кроме того, в некоторых расчетах использовалась 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].

## 2.2. Колебательные энергетические переходы

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

### *V-T процессы:*

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

### *межмолекулярные V-V' процессы:*

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

**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.  $H_2O(100) + M \rightleftharpoons H_2O(020) + M$
17.  $H_2O(001) + M \rightleftharpoons H_2O(020) + M$
18.  $H_2O(001) + M \rightleftharpoons H_2O(100) + M$

Для расчета скоростей энергетических переходов использовались модели из справочника [15]. Так, например, скорость изменения количества колебательных квантов  $CO_2(01^10)$  в реакции 2 равна:

$$\frac{d\alpha_2}{dt} = \frac{1}{\tau_2}(\alpha_2^0 - \alpha_2) \tag{10}$$

Изменение количества квантов  $H_2O(v_1)$  в реакции 16 равно:

$$\frac{d\alpha_5}{dt} = \frac{1}{\tau_{16}} \left[ (1 + \alpha_5)(\alpha_6)^2 \exp\left(\frac{2\theta_6 - \theta_5}{T}\right) - \alpha_5(1 + \alpha_6)^2 \right] \tag{11}$$

Здесь нижние индексы относятся к следующим модам: 2 -  $CO_2(v_2)$ , 5 -  $H_2O(v_1)$ , 6 -  $H_2O(v_2)$ ;  $\alpha_m^0$  - количество квантов в равновесном состоянии. Формулы для времен релаксации  $\tau_j$  взяты из работ [12-15].

В уравнения энергий входят члены, связанные со спонтанной излучательной дезактивацией колебательных мод. Уменьшение энергии вследствие этих процессов описывается формулой:

$$Q_{R,m} = \frac{E_{v,m}}{\tau_{R,m}} \tag{12}$$

Значения обратных времен  $\tau_{R,m}$  выбраны следующими [12]:

Таблица 1.

<i>m</i>	1	2	3	5	6	7	12
Кол. мода	CO	$CO_2(v_2)$	$CO_2(v_3)$	$H_2O(v_1)$	$H_2O(v_2)$	$H_2O(v_3)$	ОН
$\tau_m^{-1}, c^{-1}$	33.4	2.98	424.6	4.0	22.1	74.7	3.3

Для всех остальных энергетических мод полагаем  $\tau_{R,m}^{-1} = 0$

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

#### 3.1. Уравнение переноса излучения

Каждая линия спектра в инфракрасном (ИК) диапазоне является результатом колебательно-вращательного перехода между двумя энергетическими уровнями: верхним и ниж-

ним. Пусть  $n_u, n_l$  - концентрации молекул (заселенности) с более высоким энергетическим состоянием  $u$  и более низким энергетическим состоянием  $l$  соответственно.

Уравнение переноса излучения (УПИ) для каждого излучающего газа при отсутствии рассеяния имеет вид:

$$\frac{dI_\eta}{ds} = \kappa_\eta N (B_\eta^{ne} - I_\eta) \quad (13)$$

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 УПИ входит не яркость излучения абсолютно черного тела (АЧТ), а функция Планка для термически неравновесного излучения:

$$B_\eta^{ne} = \frac{2hc^2\eta^3}{[(n_l g_u)/(n_u g_l) - 1]} \quad (14)$$

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 уширения линии: лоренцева или доплеровского. Например, для доплеровского уширения:

$$\kappa_\eta = \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \left( \frac{S_\eta}{\gamma_D} \right) \exp \left[ -(\ln 2) \left( \frac{\eta - \eta_0}{\gamma_D} \right)^2 \right], \quad (15)$$

где  $\gamma_D = \eta_0 \sqrt{\frac{2kT}{mc^2} \ln 2}$  - полуширина линии на полувывсоте;  $\eta_0$  - волновое число в центре линии;  $m$  - масса излучающей частицы;  $k$  - постоянная Больцмана. Здесь 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]:

$$S_\eta = \frac{A_{ul}}{8\pi c \eta^2} \frac{n_l g_u}{N g_l} \left( 1 - \frac{n_u g_l}{n_l g_u} \right), \quad (16)$$

где  $A_{ul}$  - коэффициент Эйнштейна для спонтанной эмиссии  $[1/\text{с}]$ .

Таким образом, для решения УПИ (13) необходимо определить заселенности энергетических уровней.

### 3.2. 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, характеризующего колебательным уровнем  $V$  и  $J$ -м вращательным уровнем, справедлива следующая формула [13]:

$$n_{VJ} = NQ_V^{-1}Q_R^{-1}gX_RX_V, \quad (17)$$

где  $g = g_V g_J$ ;  $g_J = 2J + 1$  - 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] показано, что вращательная функция распределения для умеренных и высоких температур зависит от момента инерции молекул и для линейных молекул пропорциональна вращательной температуре  $T_R$ :

$$Q_R(T_R) \propto T_R \quad (18)$$

Для нелинейных молекул:

$$Q_R(T_R) \propto T_R^{3/2} \quad (19)$$

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

$$Q_V(T_V) = \prod_k \left[ 1 - \exp(-hc\eta_k / kT_{v,k}) \right]^{-g_k}, \quad (20)$$

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

Функции  $X_R, X_V$  определяются следующим образом:

$$X_R(V, J, T_R) = \exp\left[-\frac{hc\omega_R(V, J)}{kT_R}\right], \quad X_V(V, T_V) = \exp\left[-\frac{hc\omega_V}{kT_V}\right], \quad (21)$$

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 (21) для  $X_V$  строго справедлива в случае двухатомных молекул. Для трехатомных молекул, которые имеют несколько колебательных степеней свободы, необходимо использовать более сложные формулы.

Для  $\text{CO}_2$  [13]:

$$X_V(V, T_V) \equiv X_V(V, T_{v,12}, T_{v,3}) = \exp\left[-\frac{hc}{k} \left( \frac{\omega_{v_1 v_2^l v_3} - \omega_{00^0 v_3}}{T_{v,12}} + \frac{\omega_{00^0 v_3}}{T_{v,3}} \right)\right], \quad (22)$$

где  $T_{v,12}$  - единая колебательная температура симметричной и деформационной моды (резонанс Ферми);  $T_{v,3}$  - колебательная температура асимметричной моды;  $\omega_{v_1 v_2^l v_3} = \omega_{v_1, v_2^l, v_3}$  - 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  $\text{H}_2\text{O}$ :



$$X_V(V, T_V) \equiv X_V(V, T_{v,1}, T_{v,2}, T_{v,3}) = \exp \left[ -\frac{hc}{k} \left( \frac{\omega_{v_1 v_2 v_3} - \omega_{0 v_2 v_3}}{T_{v,1}} + \frac{\omega_{0 v_2 v_3} - \omega_{0 0 v_3}}{T_{v,2}} + \frac{\omega_{0 0 v_3}}{T_{v,3}} \right) \right] \quad (23)$$

Для колебательных и вращательных энергий используются формулы Герцберга [13,17].

Колебательная энергия двухатомной молекулы [13]:

$$\begin{aligned} \omega_v^e &= \omega^e (v+0.5) - \omega^e x^e (v+0.5)^2 + \omega^e y^e (v+0.5)^3 - \omega^e z^e (v+0.5)^4 \\ &+ \omega^e q^e (v+0.5)^5 - \omega^e s^e (v+0.5)^6 \end{aligned} \quad (24)$$

В справочниках (например, в [18-20]) отсчет колебательной энергии идет не от минимума потенциальной кривой, как это делается в формуле (24), а от низшего колебательного состояния с  $v = 0$ . В этом случае

$$\omega_v = \omega_v^e (v) - \omega_v^e (0) \quad (25)$$

Для линейной трехатомной молекулы  $\text{CO}_2$  справедлива формула [13]:

$$\begin{aligned} \omega_v^e(v_1, v_2^l, v_3) &= \sum_{i=1}^3 \omega_i^e(v_i + 0.5d_i) + \sum_{i=1}^3 \sum_{j \geq i}^3 x_{ij}^e(v_i + 0.5d_i)(v_j + 0.5d_{ji}) \\ &+ \sum_{i=1}^3 \sum_{j \geq i}^3 \sum_{k \geq j \geq i}^3 y_{ijk}^e(v_i + 0.5d_i)(v_j + 0.5d_j)(v_k + 0.5d_k) + \dots + x_{il}^e l^2 + \sum_{i=1}^3 y_{iil}^e v_i l^2 + \dots \end{aligned} \quad (26)$$

здесь у молекулы  $\text{CO}_2$  степени вырождения равны:  $d_1 = d_3 = 1$ ,  $d_2 = 2$

Если, как и ранее, отсчитывать колебательную энергию от низшего колебательного состояния, то:

$$\omega_v(v_1, v_2^l, v_3) = \omega_v^e(v_1, v_2^l, v_3) - \omega_v^e(0, 0^0, 0) \quad (27)$$

Для молекулы  $\text{H}_2\text{O}$  используется формула (26) с  $d_1 = d_2 = d_3 = 1$ ,  $l = 0$

Вращательная энергия определяется формулой:

$$\begin{aligned} \omega_R(V, J) &= B_V [J(J+1) - l^2] - D_V [J(J+1) - l^2]^2 + H_V [J(J+1) - l^2]^3 \\ &- L_V [J(J+1) - l^2]^4 + \dots \end{aligned} \quad (28)$$

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

Использование формулы (17) позволяет определить соотношение между заселенностями верхнего и нижнего колебательно-вращательных уровней

$$\frac{n_u g_l}{n_l g_u} = \frac{X_R(V_u, J_u, T_R) X_V(V_u, T_V)}{X_R(V_l, J_l, T_R) X_V(V_l, T_V)} \quad (29)$$

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

$$S_\eta = \frac{A_{ul} g_u}{8\pi c \eta^2} \frac{X_R(V_l, J_l, T_R) X_V(V_l, T_V)}{Q_V(T_V) Q_R(T_R)} \left[ 1 - \frac{X_R(V_u, J_u, T_R) X_V(V_u, T_V)}{X_R(V_l, J_l, T_R) X_V(V_l, T_V)} \right] \quad (30)$$

Для  $\text{CO}$  формула (29) имеет вид:

$$\frac{n_u g_l}{n_l g_u} = \exp \left[ -\frac{hc}{k} \left( \frac{\omega_R(V_u, J_u) - \omega_R(V_l, J_l)}{T_R} + \frac{\omega_V(V_u) - \omega_V(V_l)}{T_V} \right) \right] \quad (31)$$

В справочниках HITRAN [18], HITEMP [19], CDSD [20] для стандартной температуры  $T_0$  заданы колебательные и вращательные квантовые числа, соответствующие верхнему и нижнему энергетическому уровням, а также:

$$E_l = \omega_V(V_l) + \omega_R(J_l) \quad (32)$$

- энергия нижнего уровня,

$$\eta = E_u - E_l \quad (33)$$

- волновое число, соответствующее переходу.

Для стандартной температуры  $T_V = T_R = T_0$  и интенсивность линии равна:

$$S_\eta(T_0) = \frac{A_{ul} g_u}{8\pi c \eta^2} \frac{1}{Q_V(T_0) Q_R(T_0)} \exp \left( -C_2 \frac{E_l}{T_0} \right) \left[ 1 - \exp \left( -C_2 \frac{\eta}{T_0} \right) \right], \quad (34)$$

где  $C_2 = hc/k$

Таким образом, используя формулы (30) и (34), можно выразить интенсивность линии через табличное значение  $S_\eta(T_0)$  и через вращательные и колебательные температуры:

$$S_\eta = S_\eta(T_0) \frac{Q_V(T_0) Q_R(T_0)}{Q_V(T_V) Q_R(T_R)} \frac{X_R(V_l, J_l, T_R) X_V(V_l, T_V)}{\exp(-C_2 E_l / T_0)} \frac{\left[ 1 - \frac{X_R(V_u, J_u, T_R) X_V(V_u, T_V)}{X_R(V_l, J_l, T_R) X_V(V_l, T_V)} \right]}{\left[ 1 - \exp \left( -C_2 \frac{\eta}{T_0} \right) \right]} \quad (35)$$

### 3.3. 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 этой траектории. Если  $I_\eta(0) = 0$ , то уравнение (13) для этой траектории имеет решение:

$$I_\eta(s) = \int_0^s B_\eta^{ne}(s') \frac{d\tau_\eta(s', s)}{ds'} ds' \quad (36)$$

где функция

$$\tau_\eta(s', s) = \exp \left( -\int_{s'}^s \kappa_\eta(y) N(y) dy \right) \quad (37)$$

- коэффициент пропускания слоя  $[s', s]$ .

Для однородной полосы, имеющей оптическую толщину  $X = NL$ , коэффициент пропускания равен:

$$\tau_\eta(X) = e^{-\kappa_\eta X} \quad (38)$$

Решение уравнения переноса излучения для каждой спектральной линии представляет серьезную математическую сложность из-за очень большого количества линий и очень сильной зависимости коэффициента поглощения от волнового числа, поэтому будем искать решения для полосы спектра  $\Delta\eta$ , ширина которой является достаточно узкой ( $1...5 \text{ см}^{-1}$ ), но существенно больше ширины отдельной линии. Для однородного слоя среднее значение коэффициента пропускания равно:

$$\bar{\tau} = \frac{1}{\Delta\eta} \int_{\Delta\eta} \exp(-\kappa_\eta X) d\eta \quad , \quad (39)$$

Используем метод k-распределения. Приведем краткое изложение этой методики.

Из-за огромного количества спектральных линий при решении уравнения переноса излучения для каждой линии практически одни и те же вычисления повторяются снова и снова. 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 (39) трансформировалась бы в сумму  $N$  спектральных интервалов в рассматриваемой полосе:

$$\bar{\tau} = \frac{1}{\Delta\eta} \sum_{j=1}^N \exp(-\kappa_j X) \Delta\eta_j \quad , \quad (40)$$

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

Первым шагом создания k-распределения является перегруппирование коэффициентов поглощения в некие 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:

$$f(k_i) = \frac{1}{\Delta\eta} \sum_{j=1}^N \left| \frac{\Delta\eta_j}{\Delta k_i} \right| W(k_i, k_i + \Delta k_i) \quad , \quad (41)$$

где  $W(k_i, k_i + \Delta k_i)$  - "оконная" функция для  $i$ -го субинтервала:

$$W(k_i, k_i + \Delta k_i) = \begin{cases} 1, & k_i < k_j \leq k_i + \Delta k_i \\ 0, & k_j \leq k_i, k_j > k_i + \Delta k_i \end{cases} \quad (42)$$

Введенная таким образом функция  $f(k_i)$  позволяет перейти в формуле (40) от суммирования по интервалам  $\Delta\eta_j$  (по числу интервалов  $N$ ) к суммированию по субинтервалам  $\Delta k_i$ :

$$\bar{\tau} = \sum_{i=1}^M \exp(-k_i X) f(k_i) \Delta k_i \quad , \quad (43)$$

где  $M$  - число субинтервалов  $\Delta k_i$ .

Устремив к нулю  $\Delta k_i$ , получим из (43) формулу для пропускательной способности:

$$\bar{\tau} = \int_{\kappa_{\min}}^{\kappa_{\max}} \exp(-kX) f(k) dk \quad (44)$$

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

Введем соответствующую монотонную функцию:

$$g(k) = \int_0^k f(k)dk; \quad \sum_{k_i=\kappa_{\min}}^{k_i=k} f(k_i)\Delta k_i \quad (45)$$

Из монотонности следует, что можно ввести обратную функцию:

$$k(g) = g^{-1}(k) \quad (46)$$

Это позволяет перейти в формуле (44) к новой переменной интегрирования:

$$\bar{\tau} = \int_0^1 \exp(-k(g)X) dg, \quad (47)$$

т.к.  $dg = f(k)dk$

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

$$f(k) = \frac{1}{\Delta\eta} \int_{\Delta\eta} \delta(k - \kappa_\eta) d\eta, \quad g(k) = \int_0^k f(k)dk \quad (48)$$

где  $\delta(k)$  - дельта функция Дирака.

Затем определяется обратная функция  $k(g)$  и с помощью формулы (47) получается пропускательная способность всей полосы  $\Delta\eta$ .

Для неоднородного слоя шириной  $[y_1, y_2]$  из формулы (37) следует, что для полосы спектра  $\Delta\eta$  справедливо следующее соотношение:

$$\bar{\tau} = \frac{1}{\Delta\eta} \int_{\Delta\eta} \exp\left[-\int_{y_1}^{y_2} \kappa_\eta(y)N(y)dy\right] d\eta \quad (49)$$

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

$$\kappa(\eta_i, p, T) = \kappa(\eta_j, p, T), \quad \text{если } \kappa_r(\eta_i) = \kappa_r(\eta_j), \quad (50)$$

где индекс  $r$  относится к некоторым базисным (опорным) условиям.

Кроме того, считается, что, если при базисных условиях коэффициент поглощения при  $\eta_i$  больше, чем при  $\eta_j$ , то такое же соотношение будет во всем диапазоне изменения температуры и давления.

При выполнении этих условий формула (49) преобразуется к виду, аналогичному для однородного газа:

$$\bar{\tau} = \int_0^1 \exp\left[-\int_{y_1}^{y_2} k(g, y)N(y)dy\right] dg \quad (51)$$

### 3.4. Метод к-распределения для термически неравновесного газа

Описанный в предыдущем параграфе метод к-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 излучение (13) записывается в следующей форме:

$$\frac{dI_\eta}{ds} = \kappa_\eta(\underline{\phi}) N(B_\eta^{ne}(\underline{\phi}) - I_\eta), \quad (52)$$

где  $\underline{\phi} = (T_{TR}, T_V)$  в случае доплеровского уширения;  $I_\eta = I(\eta)$  - функция волнового числа.

Аналогично тому, как это сделано в [21], переупорядочим уравнение (52) в к-распределение путем умножения его на функцию Дирака  $\delta(k - \kappa_\eta)$  с последующим интегрированием его волновому диапазону  $\Delta\eta$ :

$$\frac{dI_k}{ds} = \frac{1}{\Delta\eta} \int_{\Delta\eta} N\kappa_\eta(\underline{\phi}) B_\eta^{ne}(\underline{\phi}) \delta(k - \kappa_\eta) d\eta - \frac{1}{\Delta\eta} \int_{\Delta\eta} N\kappa_\eta(\underline{\phi}) I_\eta \delta(k - \kappa_\eta) d\eta \quad (53)$$

где

$$I_k = I(k) = \frac{1}{\Delta\eta} \int_{\Delta\eta} I_\eta \delta(k - \kappa_\eta) d\eta - \quad (54)$$

является функцией  $k$ .

Т.к. во всей полосе выбраны только те волновые числа, где  $\kappa_\eta(\underline{\phi}) = k$ , то уравнение (53) можно записать в виде:

$$\frac{dI_k}{ds} = kN(B^{ne}(\underline{\phi}) f(\underline{\phi}, k) - I_k), \quad (55)$$

где

$$f(\underline{\phi}, k) = \frac{1}{\Delta\eta} \frac{1}{B^{ne}(\underline{\phi})} \int_{\Delta\eta} B_\eta^{ne}(\eta, \underline{\phi}) \delta(k - \kappa_\eta) d\eta \quad (56)$$

- функция к-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:

$$g(\underline{\phi}, k) = \int_0^k f(\underline{\phi}, k) dk \quad (57)$$

Входящая в формулу (56) функция Планка  $B^{ne}(\underline{\phi})$  может быть выбрана достаточно произвольно, средней по полосе  $\Delta\eta$ . Полагаем ее равной:

$$B^{ne}(\underline{\phi}) = \frac{\bar{\varepsilon}(\underline{\phi})}{\bar{\kappa}(\underline{\phi})}, \quad (58)$$

где  $\bar{\varepsilon}$ ,  $\bar{\kappa}$  - средние значения на полосе  $\Delta\eta$  коэффициентов излучения и поглощения соответственно.

В этом случае уравнение (55) аналогично уравнению (13), и его решение для однородного слоя имеет вид, аналогичный (36):

$$I_k(s) = \int_0^s B^{ne}(\underline{\phi}) \frac{d\tau_k(s',s)}{ds'} ds' \quad (59)$$

где функция пропускания равна

$$\tau_k(s',s) = \exp(-kNL) f(\underline{\phi}, k) \quad (60)$$

Средний по полосе коэффициент пропускания равен:

$$\bar{\tau} = \int_{\kappa_{\min}}^{\kappa_{\max}} \exp(-kNL) f(\underline{\phi}, k) dk \quad (61)$$

Так же как и в предыдущем параграфе, переходим к функции  $g$ , введенной по формуле (57):

$$\bar{\tau} = \int_0^1 \exp(-k(g)NL) dg \quad , \quad (62)$$

Она полностью совпадает с формулой (47), полученной для равновесного излучения. Единственное отличие заключается в том, что функция  $k$ -распределения теперь содержит в качестве весового множителя неравновесную функцию Планка (см. формулу (56)).

Для неоднородного слоя решение уравнения (55) также определяется формулой (59), в которой

$$\tau_k(s',s) = f(\underline{\phi}, k) \exp\left(-\int_{s'}^s kN(y) dy\right) \quad (63)$$

т.к.

$$\frac{d\tau_k(s',s)}{ds'} = f(\underline{\phi}, k) \exp\left(-\int_{s'}^s kN(y) dy\right) \frac{d}{ds'} \left[ \int_s^{s'} kN(y) dy \right] = \tau_k(s',s) kN(s') \quad (64)$$

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

$$\bar{\tau} = \int_{\kappa_{\min}}^{\kappa_{\max}} \exp\left(-\int_{s'}^s kN(y) dy\right) f(\underline{\phi}, k) dk = \int_0^1 \exp\left(-\int_{s'}^s k(g,y)N(y) dy\right) dg \quad , \quad (65)$$

Формула (65) полностью совпадает с полученной для равновесного излучения формулой (51).

Среднее по полосе значение интенсивности излучения определяется по формуле:

$$I = \frac{1}{\Delta\eta} \int_{\Delta\eta} I_\eta d\eta = \int_0^1 I_k(k(g)) dg = \int_0^s B^{ne}(\underline{\phi}) \frac{d\bar{\tau}}{ds'} ds' \quad , \quad (66)$$

где для  $B^{ne}(\underline{\phi})$  используется формула (58).

Использование метода k-распределения предполагает создание баз данных для каждого компонента, в которой 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 (БД) для каждой полосы должны содержаться зависимости от достаточно большого количества параметров, что приводит большому объему и неудобству использования этой БД. Например, для  $\text{CO}_2$  коэффициент поглощения зависит от поступательной температуры, вращательной температуры, 2-х колебательных температур, общего давления и парциального давления компонента (или мольной доли), т.е. от 6 параметров.

На самом деле, можно существенно упростить задачу. Во-первых, как правило, справедливо допущение о равенстве вращательной и поступательной температур, которое уже использовалось в данной работе:

$$T_R = T \quad (67)$$

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.

Таким образом, достаточно сделать 2 различных базы данных: 1) для высоких и средних давлений - в зависимости от 3-х параметров: температуры, давления и мольной доли компонента (такая база описана в работе [1]); 2) для низких давлений - в зависимости от поступательно-вращательной температуры и колебательных температур (разработана в данной работе).

### 3.5. Смесь газов

Если газ состоит из нескольких компонентов, то коэффициенты излучения и поглощения определяются по формулам:

$$\varepsilon_\eta = \sum_{n,i} N_n \varepsilon_{n,i}(\eta), \quad \kappa_\eta = \sum_{n,i} N_n \kappa_{n,i}(\eta) \quad (68)$$

и уравнение переноса излучения принимает вид [16]:

$$\frac{dI_\eta}{ds} = \sum_{n,i} N_n [\varepsilon_{n,i}(\eta) - \kappa_{n,i}(\eta) I_\eta] \quad (69)$$

где  $\varepsilon_{n,i}(\eta)$ ,  $\kappa_{n,i}(\eta)$  - спектральные коэффициенты излучения и поглощения, индекс  $n$  относится к номеру компонента, индекс  $i$  относится к колебательной моде.

Введем эффективную функцию Планка для неравновесного излучения:

$$B_{ef}^{ne} = \frac{\sum_{n,i} N_n \varepsilon_{n,i}}{\sum_{n,i} N_n \kappa_{n,i}} \quad (70)$$

Тогда:

$$\frac{dI_\eta}{ds} = \kappa_\eta (B_{ef}^{ne} - I_\eta) \quad (71)$$

Решение этого уравнения такое же, как (13):

$$I_\eta(s) = \int_0^s B_{ef}^{ne}(s') \frac{d\tau_\eta(s',s)}{ds'} ds' \quad (72)$$

где

$$\tau_\eta(s',s) = \exp\left(-\sum_{n,i} \int_{s'}^s N_n \kappa_{n,i}(\eta) dy\right) = \prod_{n,i} \exp\left(-\int_{s'}^s N_n \kappa_{n,i}(\eta) dy\right) = \prod_{n,i} \tau_{\eta,n,i}(s',s), \quad (73)$$

$$\tau_{\eta,n,i}(s',s) = \exp\left(-\int_{s'}^s \kappa_{n,i}(\eta) N_n dy\right) \quad (74)$$

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 данной 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

$$\bar{\tau} = \prod_{n,i} \bar{\tau}_{n,i}, \quad (75)$$

где для каждого отдельного компонента используется метод k-распределения и формулы (65), (66).

Для средней по полосе эффективной функции Планка в этом случае получается формула:

$$B^{ne}(\phi) = \sum_{n,i} N_n \bar{\varepsilon}_{n,i} / \sum_{n,i} N_n \bar{\kappa}_{n,i} \quad (76)$$

#### 4. Результаты расчетов

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

Для численного решения основных газодинамических уравнений использовался численный метод, описанный в работе [10], и программа Universe CFD, разработанная в МАИ на кафедре Авиационно-космической теплотехники.



На рис.1 представлены результаты расчетов спектральной энергетической яркости слоя СО толщиной 5 см при давлении 1 атм. Сначала спектры были вычислены при равновесной температуре 1000К, затем поступательно-вращательная и колебательная температуры поочередно в отдельности повышались до 1500К. И, наконец, последний расчет был проведен при равновесной температуре 1500К.

Результаты расчета по представленной методике сравнивались с данными из работы [5], в которой использовался метод LBL. Результаты расчетов хорошо согласуются между собой.

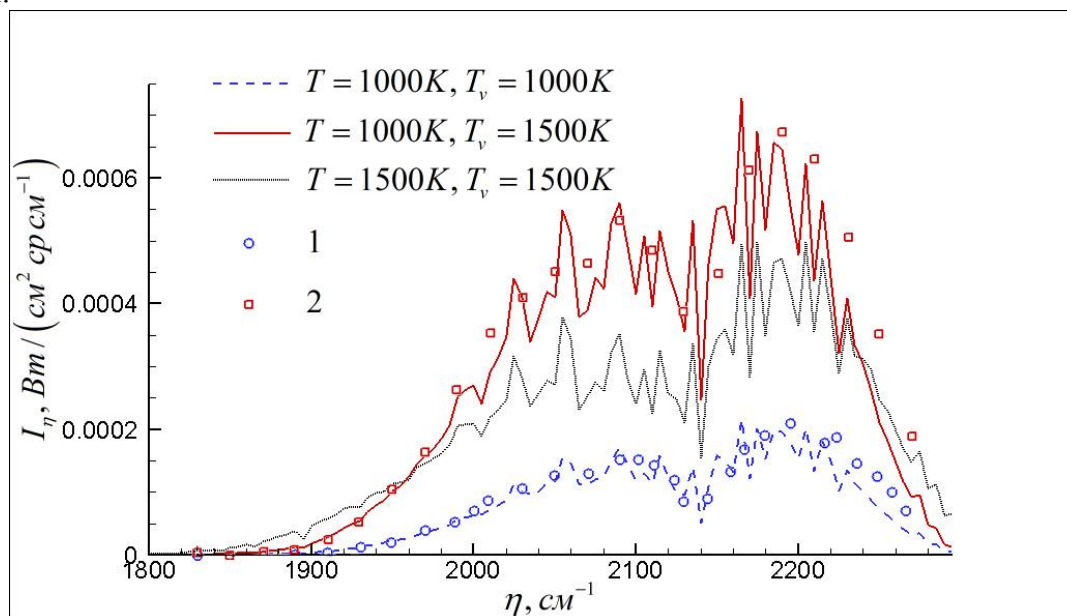


Рис.1. Спектральной энергетической яркости слоя СО толщиной 5 см при давлении 1 атм. Линии - результаты данной работы; значки - результаты работы [5], 1 -  $T=T_v=1500K$ , 2 -  $T=1000K, T_v=1500K$

Интересно, что яркость при равновесной температуре  $T=T_v=1500K$  существенно меньше, чем при неравновесных значениях  $T=1000K, T_v=1500K$ , 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).

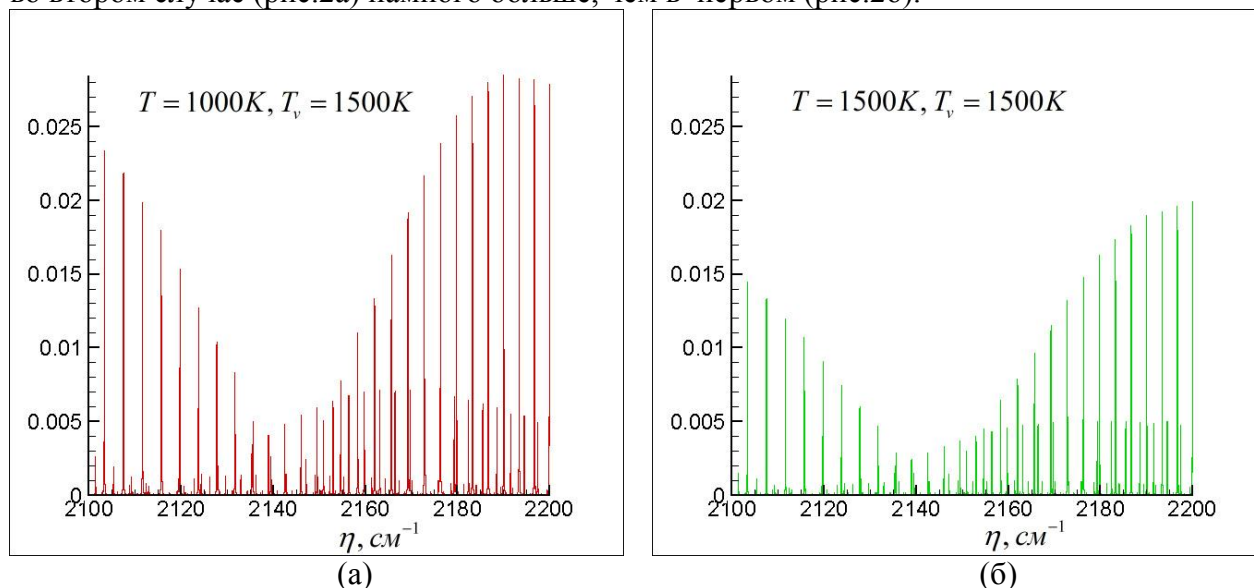


Рис.2. Спектральный коэффициент излучения, рассчитанный полинейно в диапазоне 2100-2200  $cm^{-1}$ , для слоя СО толщиной 5 см при давлении 1 атм при различных соотношениях поступательной и колебательной температур: (а)  $T=1000K, T_v=1500K$ , (б)  $T=T_v=1500K$ .

Это позволяет сделать очень важный вывод, 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 1м при давлении  $10^3\text{ Па}$  при различных соотношениях поступательной и колебательных температур. Результаты расчетов по разработанной методике сравнивались с результатами работы [22], в которой использовалась статистическая модель полосы. Очевидно, что результаты обоих методик хорошо согласуются.

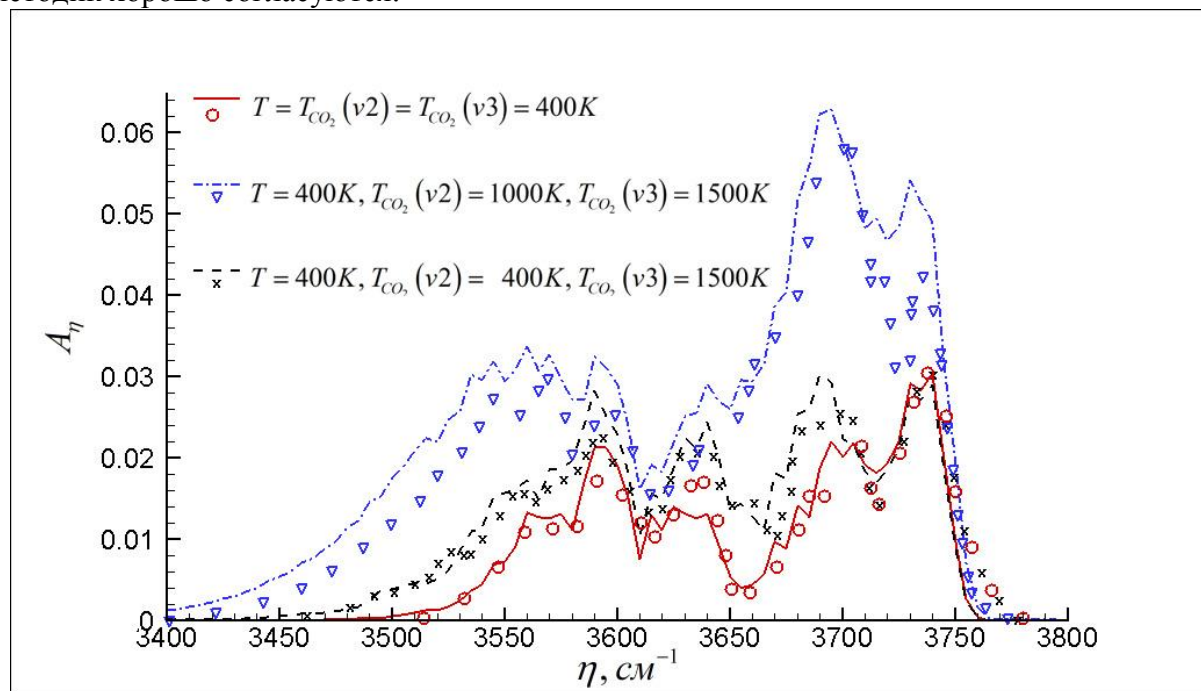


Рис.3. Спектральный коэффициент поглощения слоя  $\text{CO}_2$  (молярная доля 0,2) толщиной 1м при давлении  $10^3\text{ Па}$  при различных соотношениях поступательной и колебательных температур. Линии - результаты данной работы; значки - результаты работы [22] (Fig.4)

Анализ результатов показывает, что в районе длины волны  $\sim 2.7\text{ мкм}$  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 5м при давлении  $10^2\text{ Па}$ . Сначала спектры были вычислены при равновесной температуре 1000К, затем поступательно-вращательная и колебательные температуры поочередно в отдельности повышались до 1500К. И, наконец, последний расчет был проведен при равновесной температуре 1500К.

Анализ результатов показывает, что увеличение поступательной температуры практически не влияет на интенсивность излучения (даже несколько снижает его).

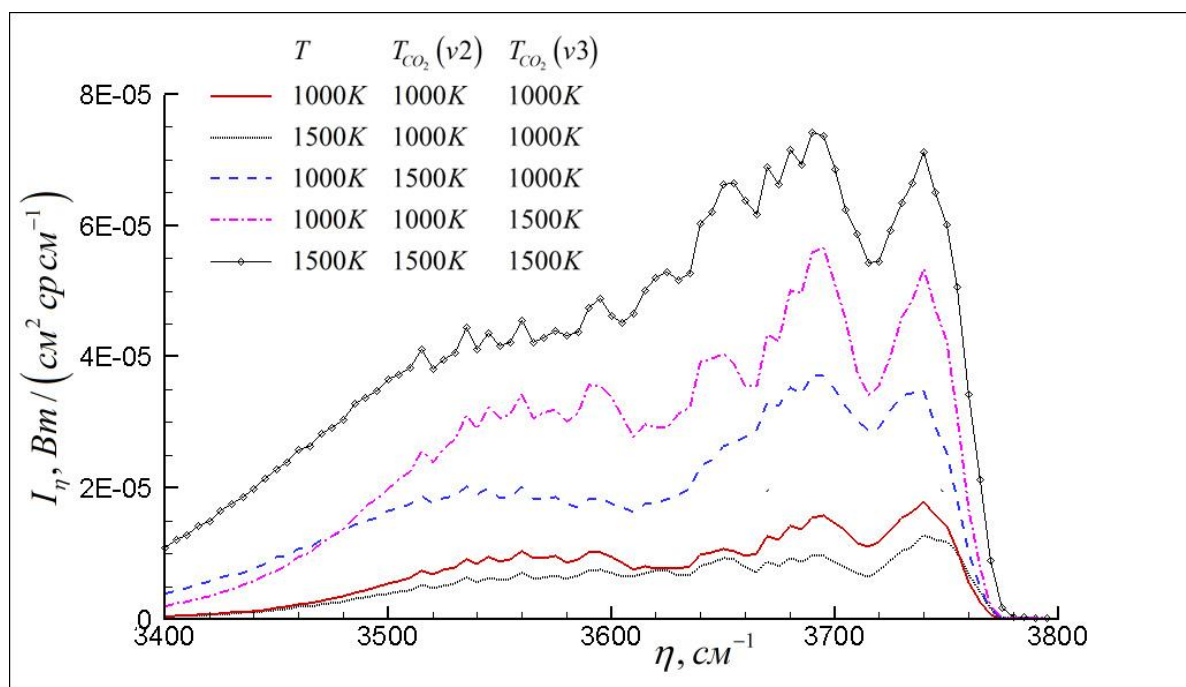


Рис.4. Спектральная энергетическая яркость слоя  $\text{CO}_2$  толщиной 5м при давлении  $10^2$  Па в диапазоне  $3400\text{-}3800\text{ см}^{-1}$  при различных соотношениях поступательной и колебательных температур.

В районе  $4.3\text{ мкм}$  температура симметричной и деформационной моды  $T_{\text{CO}_2(v_2)}$  слабо влияет на излучение. Это объясняется тем, что в этом диапазоне определяющее влияние имеет дезактивация асимметричной моды ( $v_3$ ).

В районе  $2.7\text{ мкм}$  ( $3400\text{-}3800\text{ см}^{-1}$ ) 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  $1500\text{K}$  завышает излучение по сравнению неравновесными расчетами (особенно для диапазона  $3400\text{-}3800\text{ см}^{-1}$ ). Это подтверждает, что для  $\text{CO}_2$ , также как и для  $\text{CO}$ , не рекомендуется применять подход, основанный на применении равновесной методики расчета излучения с использованием колебательной температуры в качестве определяющей вместо поступательной (равновесной), т.к. это может приводить к грубым ошибкам.

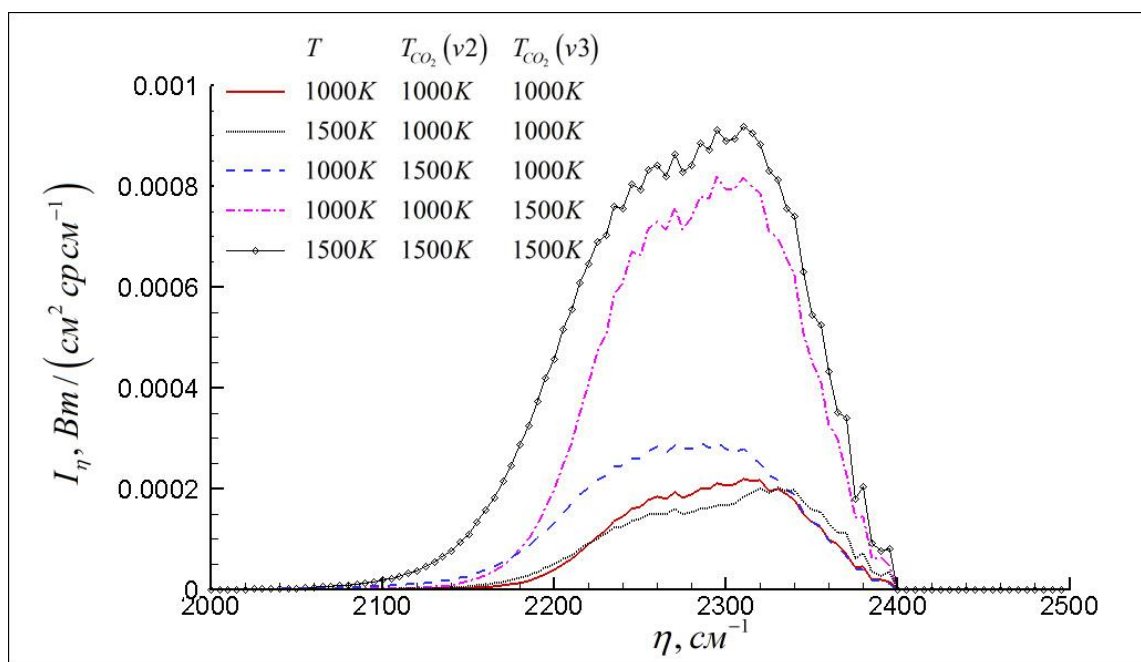


Рис.5. Спектральная энергетическая яркость слоя CO<sub>2</sub> толщиной 5м при давлении 10<sup>2</sup> Па в диапазоне 2000-2500 см<sup>-1</sup> при различных соотношениях поступательной и колебательной температур.

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.

На рисунках 6, 7 представлены спектральная интенсивность излучения  $F$  [Вт/(см<sup>2</sup> мкм)] и яркость факела в диапазоне 4.372-4.516 мкм для струи со следующими параметрами на срезе сопла.

Давление, Па		Температура, К		Скорость, м/с		Угол полуконуса, рад		Радиус сопла, мм	
288.e3		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>	
0.055		0.		0.404		0.111		0.136	
HCl		N <sub>2</sub>							
0.194		0.1							

Параметры внешнего потока:

Давление, Па	Температура, К	Скорость, м/с
101.e3	288.	68.

Как указывалось выше, при таком давлении уже проявляются эффекты колебательной неравновесности.

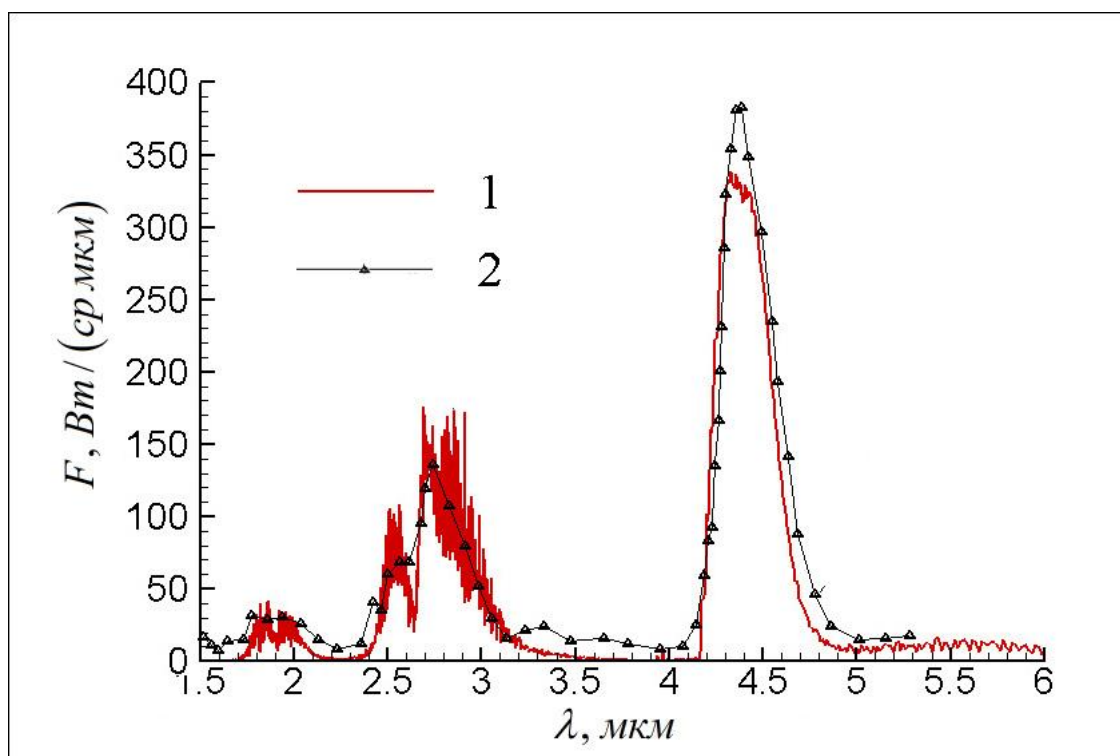


Рис.6. Спектральная интенсивность излучения, проинтегрированная по длине факела 1 м. 1 - результаты расчета данной работы; 2 - экспериментальные измерения работы [23].

Результаты расчетов сопоставлялись с экспериментальными данными из работы [23], в которой измерение спектральной интенсивности излучения производилось с разрешением  $\sim 20 \text{ см}^{-1}$ . Получено удовлетворительное совпадение.

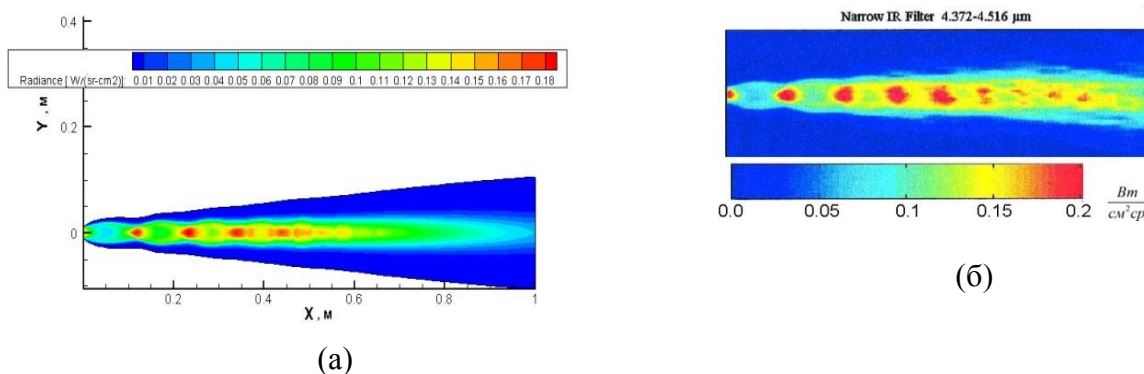


Рис.7. Яркость факела в диапазоне 4.372-4.516 мкм. а - результаты расчета данной работы; б - экспериментальные измерения работы [23].

Гораздо более сильно термическая неравновесность 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 таблице 2.

Таблица 2.

Начальные данные из работы [14]

T, K	$U_a$ , 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

Концентрации компонентов указаны в мольных долях.

Результаты расчета сравниваются с данными из работы [14].

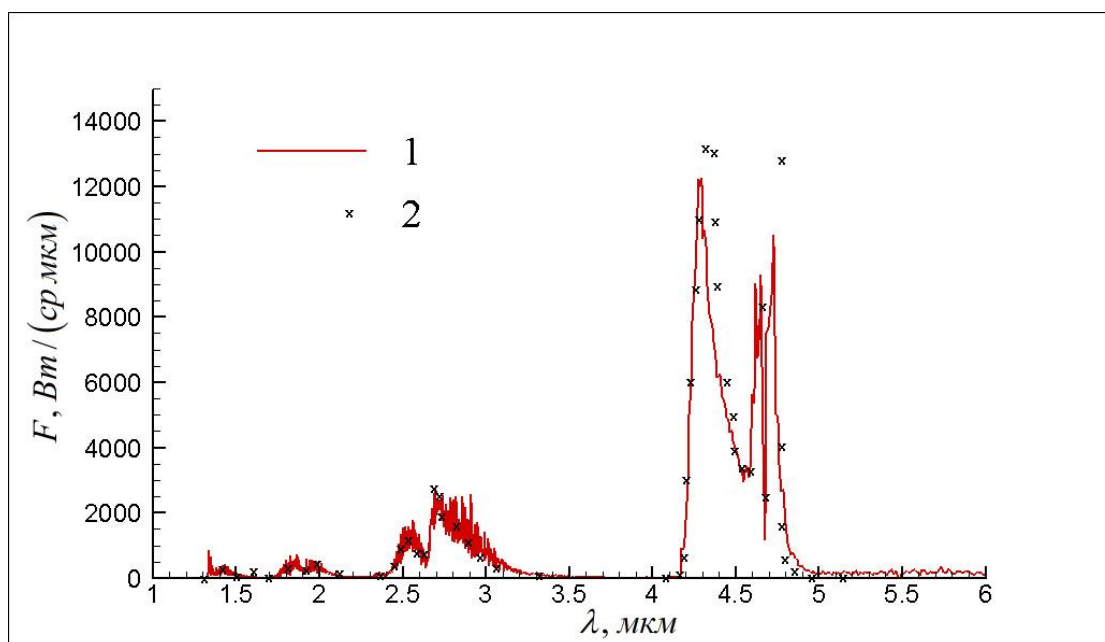


Рис.8. Спектральная интенсивность излучения, проинтегрированная по длине факела 2 см. 1 - результаты расчета данной работы; 2 - данные из работы [14].

Сопоставление результатов расчета с данными из работы [14] показывает, в целом, удовлетворительное согласование, хотя имеет место и некоторое расхождение, например, в области излучения CO (~4.7 мкм).

Для анализа причин этого расхождения проведено сравнение осевого распределения температур различных энергетических мод в струе с параметрами близкими к указанным в таблице 2 (см. рис.9). Используются исходные данные работы [24].

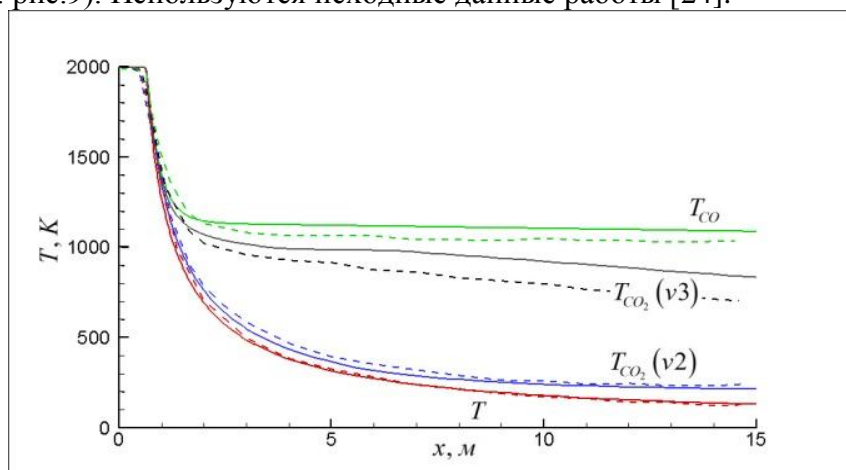


Рис.9. Распределение колебательных и поступательной температур вдоль оси струи при истечении в вакуум. Сплошные линии - результаты расчета данной работы; пунктиры - данные из работы [24].

Расчетные значения поступательной температуры и колебательной температуры деформационной моды  $T_{CO_2(v2)}$  удовлетворительно согласуются с данными из [24]. Наблюдаемое расхождение колебательных температур  $T_{CO}$  и  $T_{CO_2(v3)}$ , по всей видимости, обусловлено различием констант кинетики  $VV$  и  $VT$  энергетических переходов.

Для анализа влияния параметров внешнего потока на неравновесное излучение проведен расчет сверхзвуковой струи горячих продуктов сгорания, истекающей из сопла с пара-

метрами на срезе, совпадающими с указанными в таблице 2, за исключением:  $R_a=0.5\text{м}$ ,  $p_a=0.3\text{атм}$ . Используются исходные данные из работы [14].

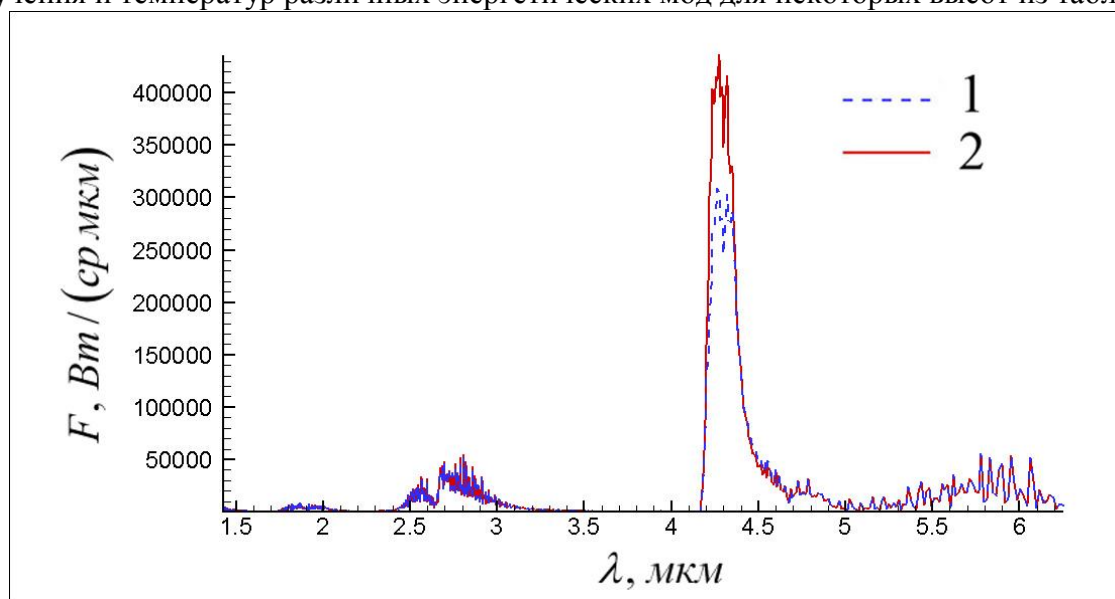
Параметры внешнего спутного потока указаны для нескольких случаев, соответствующих состоянию атмосферы на различных высотах:

Таблица 3

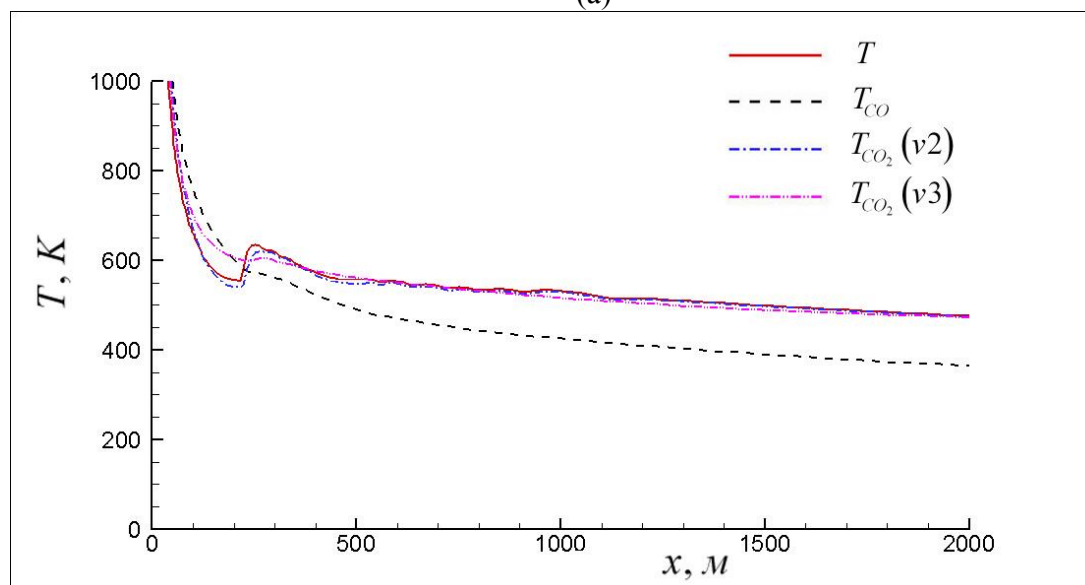
Н, км	50	60	70	80	90	100	110	120
$U_e$ , м/с	2000	2800	3500	4000	4300	4600	5000	5400

Очевидно, что с ростом высоты и соответствующим уменьшением давления, эффекты колебательной неравновесности усиливаются.

На рисунках 10-12 представлены результаты расчетов спектральной интенсивности излучения и температур различных энергетических мод для некоторых высот из таблицы 3.



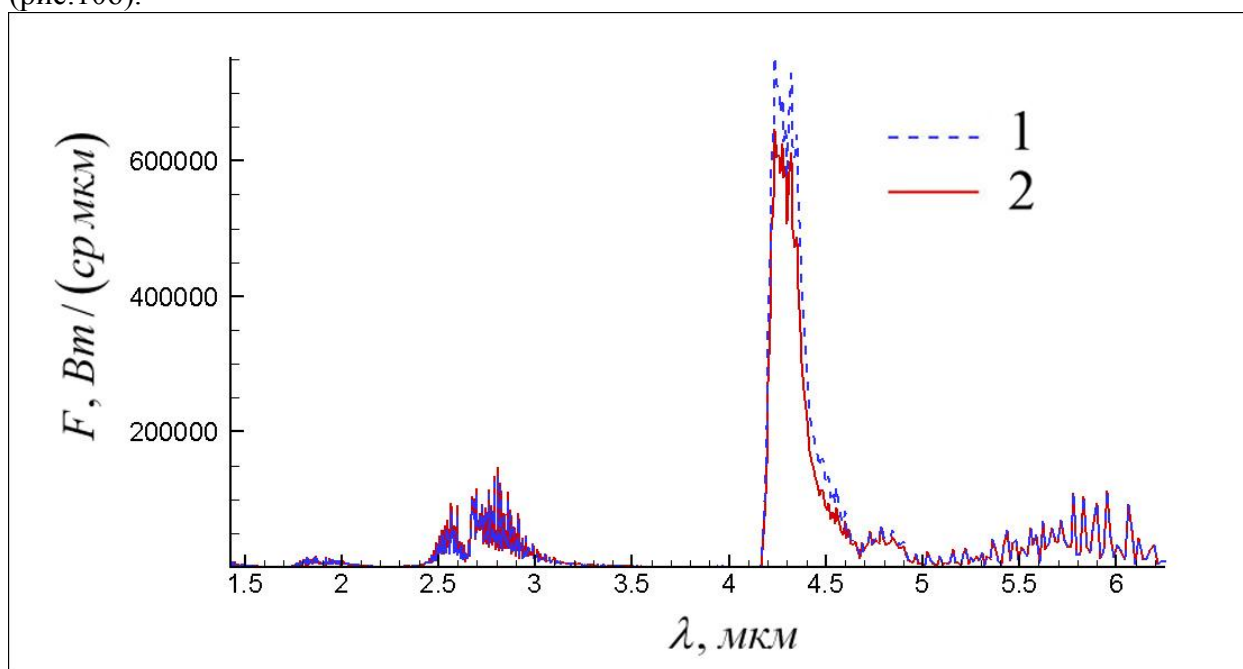
(а)



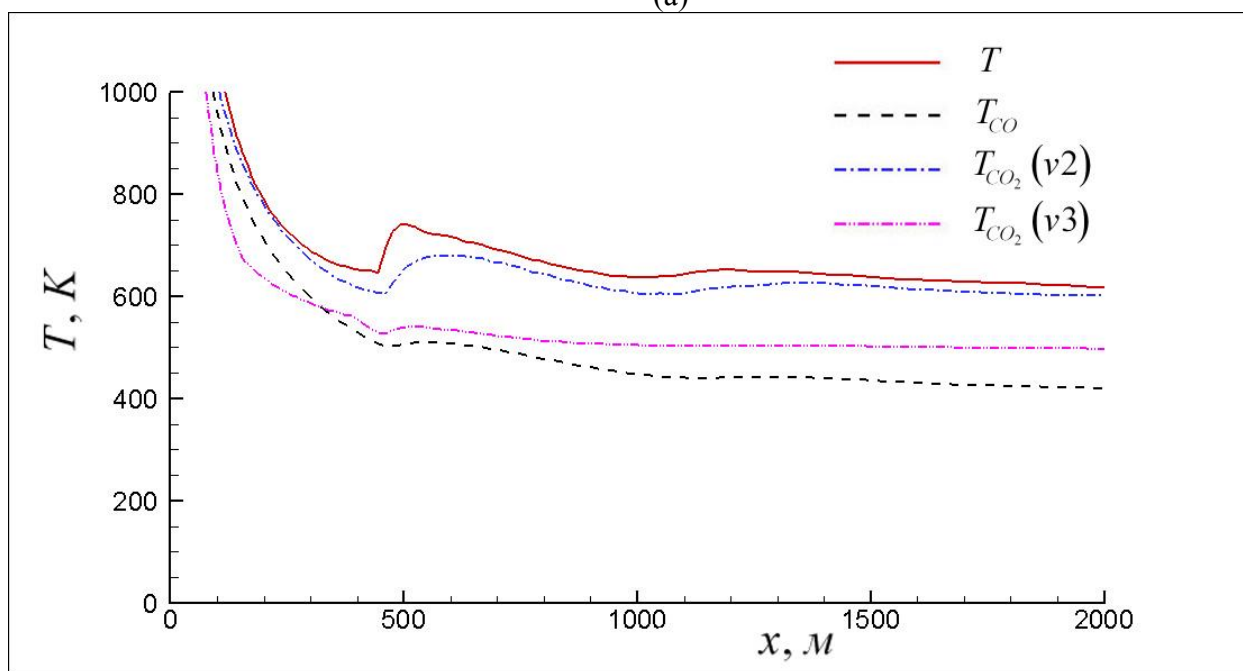
(б)

Рис.10. Высота 70км. (а) - спектральная интенсивность излучения, проинтегрированная по длине факела 2 км (1 - расчет равновесного излучения с использованием поступательной температуры; 2 - расчет неравновесного излучения). (б) - распределение по длине струи максимальных значений температур в слое смешения.

На высоте 70 км равновесное излучение в районе 4.3 мкм несколько меньше неравновесного. Вероятно, это обусловлено тем, что максимальная по поперечному сечению колебательная температура  $T_{CO_2}(v3)$  на начальном участке струи намного выше поступательной (рис.10б).



(a)

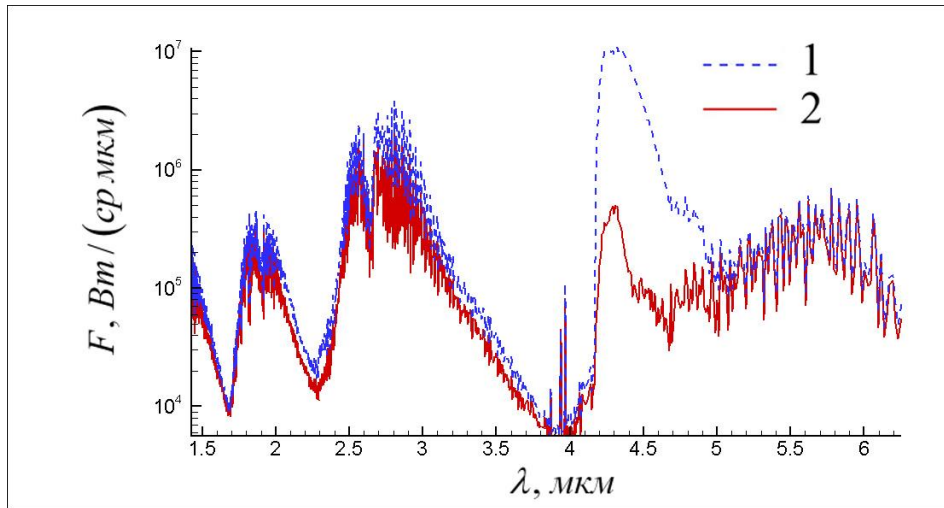


(б)

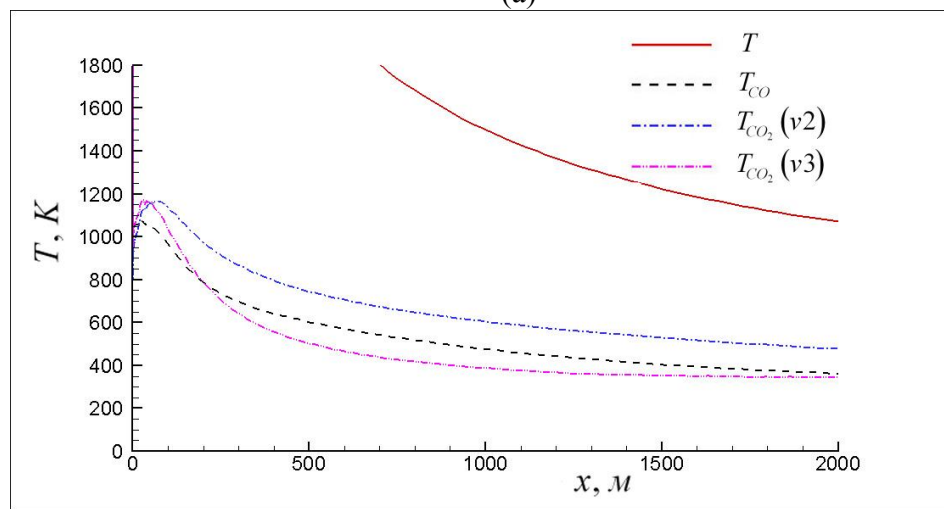
Рис.11. Высота 80км. (а) - спектральная интенсивность излучения, проинтегрированная по длине факела 2 км (1 - расчет равновесного излучения с использованием поступательной температуры; 2 - расчет неравновесного излучения); (б) - распределение по длине струи максимальных значений температур в слое смешения.

На высоте 80 км начинает проявляться 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 диапазонах.

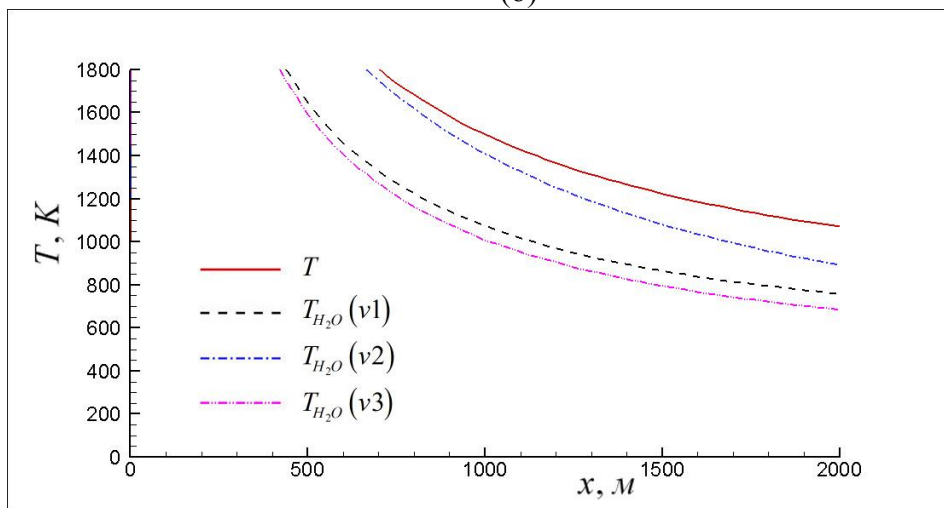




(а)



(б)



(в)

Рис.12. Высота 110км.

(а) - спектральная интенсивность излучения, проинтегрированная по длине факела 2 км (1 - расчет равновесного излучения с использованием поступательной температуры; 2 - расчет неравновесного излучения); (б), (в) - распределение по длине струи максимальных значений температур в слое смешения.

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.12в). (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 методике в районе 6 мкм практически совпадают.

## Выводы

1. Разработана методика расчета теплового излучения колебательно неравновесного газа на основе метода k-распределения.

2. Предложены формулы для расчета средних по полосе пропускательной способности и эффективной функции Планка для колебательно неравновесной газовой смеси.

3. Проведено сопоставление расчета неравновесного излучения с результатами других авторов и с экспериментальными данными, которое показало удовлетворительное совпадение.

4. Показано, что результаты расчета интенсивности излучения по неравновесной методике существенно отличаются от равновесной (расхождение может превышать порядок).

5. Показано, что подход, основанный на равновесной методике расчета излучения с использованием колебательной температуры в качестве определяющей вместо поступательной (равновесной), может приводить к грубым ошибкам.

6. Показано, что с уменьшением давления эффекты колебательной неравновесности усиливаются. Причем, в первую очередь это проявляется для  $\text{CO}$  и  $\text{CO}_2$ , и только на больших высотах начинает проявляться для  $\text{H}_2\text{O}$ .

7. Показано, что колебательные температуры симметричной и асимметричной моды  $T_{\text{H}_2\text{O}(\nu_1)}$  и  $T_{\text{H}_2\text{O}(\nu_3)}$  очень близки друг к другу даже при сильной колебательной неравновесности, что говорит о равновесии между этими модами.

8. Константы скоростей энергетических переходов существенно влияют на колебательные температуры, поэтому в дальнейшем желательно их уточнение.

## Литература

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*. ACADEMIC PRESS, Second Edition, Hardbound, 2003, 860p.
3. Hongmei Zhang, Modest M.F. Multi-group full-spectrum k-distribution database for water vapor mixtures in radiative transfer calculations. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2003, v.46, pp.3593–3603.
4. Wang A, Modest M.F. High-Accuracy. Compact Database of Narrow-Band k-Distributions for Water Vapor and Carbon Dioxide. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*. 2005, v.93, pp.245–26.
5. Ozawa T., Garrison M.B. and Levin D.A. Accurate Molecular and Soot Infrared Radiation Model for High-Temperature Flows, *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 2007, Vol. 21, No.1, pp.19-27.
6. Лосев С. Газодинамические лазеры. — Наука Москва, 1977, 336с.

7. Scalabrin 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 Engineering) in The University of Michigan. 2007. 182p.
8. Molchanov A.M. and Bykov L.V. Three-Equation K-e-Vn Turbulence Model for High-Speed Flows. AIAA Paper 2013-3181, 2013, 30p.
9. Connaire M.O., Curran H.J., Simmie J.M., Pitz W.J., Westbrook C.K. A Comprehensive Modeling Study of Hydrogen Oxidation. International Journal of Chemical Kinetics. 2004. Vol. 36. P.603-622.
10. Molchanov A.M. Numerical Simulation of Supersonic Chemically Reacting Turbulent Jets. 2011. AIAA Paper 2011-3211, 37p.
11. Denison J.J., Lamb W.D., Bjordahl E.Y., Wong and Lohn P.D. Solid Rocket Exhaust in the Stratosphere: Plume Diffusion and Chemical Reactions. Journal of Spacecraft and Rockets, Vol. 31, 1994, 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. 72p.
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. and Khadyka Ju. V. A Physico-Mathematical Model of Rocket Exhaust Plumes. Int. J. Heat Mass Transfer. Vol.40, No 5. Pp.1227-1241. 1997
15. Физико-химические процессы в газовой динамике. Справочник. Том 2: Физико-химическая кинетика и термодинамика//Под ред. Г.Г.Черного и С.А.Лосева - М.: Научно-издательский центр механики. 2002. 368 с.
16. Kudryavtsev N.N., Novikov S.S. "Theoretical and Experimental Investigations of I.R. Radiation Transfer in Vibrationally Nonequilibrated Molecular Gas Containing CO<sub>2</sub> and CO", Int. J. Heat Mass Transfer. Vol. 25, No. 10. pp. 1541-1558, 1982.
17. Герцберг Г. Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул. Издательство иностранной литературы, Москва, 1949, 648с.
18. Rothman, L.S. and Gordon, I.E. and Babikov, et.al. The HITRAN 2012 Molecular Spectroscopic Database. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 130, 2013, pp. 4-50.
19. L.S. Rothman, I.E. Gordon, R.J. Barber, H. Dothe, R.R. Gamache, A. Goldman, V. Perevalov, S.A. Tashkun, and J. Tennyson. "HITEMP, the high-temperature molecular spectroscopic database," // J. Quant. Spectrosc. and Rad. Transfer 111, 2139-2150 (2010).
20. S.A. Tashkun, V.I. Perevalov, J-L. Teffo, A.D. Bykov, N.N. Lavrentieva. CDSD-1000, the high-temperature carbon dioxide spectroscopic databank. // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, Volume 82, Issues 1–4, 15 November–15 December 2003, Pages 165–196
21. Bansal A, Modest M, Levin D. Application of k-distribution Method to Molecular Radiation in Hypersonic Nonequilibrium Flows. 2009, AIAA Paper 2009-3922, 13p.
22. Vitkin E.I., Shuralyov S. L., Tamanovich V. V. Radiation transfer in vibrationally nonequilibrium gases. International Journal of Heat and Mass Transfer. Vol. 38, No. 1, pp. 163-173, 1995
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. Journal of Thermophysics and Heat Transfer. Vol. 15, No. 4, October–December 2001.
24. Виткин Э.И., Кириллов А.А. Радиационный перенос в движущихся объемах неравновесных молекулярных газов // 4-th Minsk International Heat and Mass Transfer Forum, 2000, Volume 2. С.144-153.

Статья поступила в редакцию 24 марта 2015 г.