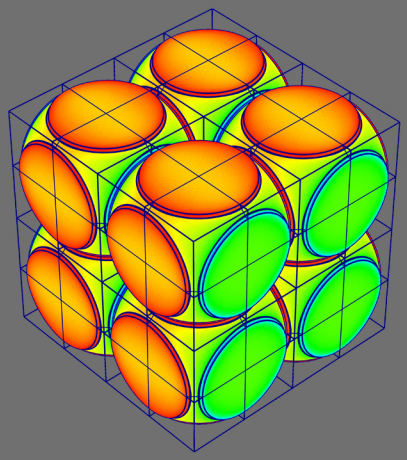
ISSN 2309-3684



Математическое моделирование и численные методы

Молчанов А. М., Фролова Ю. В., Харченко Н. А.
Моделирование эмиссион-ных спектральных свойств термически неравновесного газа CO2 в диапазоне от 2000 до 2500 см-1 в атмосферах планет. Математическое моделирование и численные методы, 2025, № 3, с. 15–31

Источник: https://mmcm.bmstu.ru/articles/380/

Параметры загрузки:
IP: 216.73.216.24
17.11.2026 03:29:22

УДК 535-15+535.233 DOI: 10.18698/2309-3684-2025-3-1531

Моделирование эмиссионных спектральных свойств термически неравновесного газа CO_2 в диапазоне от 2000 до 2500 $см^{-1}$ в атмосферах планет

© А. М. Молчанов, Ю. В. Фролова, Н. А. Харченко

Московский авиационный институт, Москва, 125993, Россия

Представлена методика расчёта поглощательных и излучательных характеристик CO_2 в диапазоне от 2000 до 2500 $см^{-1}$ с учётом влияния термической неравновесности. Проведена серия расчётов с использованием модели line — by — line (LBL) и статистической узкополосной модели (SNB). Расчёты выполнены при различных соотношениях поступательной, вращательной и колебательных температур слоя CO_2. Полученная методика показывает хорошее согласование между собой моделей LBL и SNB, а также удовлетворительно согласовывается с экспериментальными данными при расчёте величины пропускательной способности. В рассматриваемом диапазоне неравновесность по симметричной/деформационной моде практически не оказывает влияния на излучательные характеристики, в отличии от ассиметричной колебательной температуры, которая оказывает существенное влияние на значение неравновесной функции Планка.

Ключевые слова: *мониторинг атмосферы, эмиссионная способность CO2, статистическая узкополосная модель, термическая неравновесность*

Введение. Поглощательные 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 инфракрасный диапазон длин волн приходится 75 % энергии солнечного излучения. Излучение Солнца поглощается поверхностью планеты и её атмосферой и нагревает их. Нагретая поверхность планеты и атмосфера излучают в дальнем инфракрасном диапазоне: так, в случае Земли 75 % теплового излучения приходится на диапазон 400–1300 $см^{-1}$, для Венеры при — на 800–3000 $см^{-1}$, а для Марса на 300–1000 $см^{-1}$

Для освоения ближайших планет (Марса, Венеры) при проектировании космического аппарата необходимо учитывать огромную тепловую нагрузку на поверхность спускаемого аппарата [1-3], возникающую при входе в атмосферы этих планет. 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 расчёте теплового излучения.

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

Целью данной работы является создание методики расчёта излучения углекислого газа с учётом 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).

Основные уравнения математической модели. Вывод уравнения переноса излучения для термически неравновесного газа представлен в работах [4–7]. При отсутствии рассеяния, если среда способна как излучать, так и поглощать излучение, уравнение переноса излучения имеет следующий вид [7]:

$$\frac{dI_\eta}{ds} = N\left(\varepsilon_\eta - \kappa_\eta I_\eta\right), \tag{1}$$

где N — число частиц излучающего компонента в единице объёма, I_η — спектральная энергетическая яркость; ε_η — коэффициент излучения; κ_η — коэффициент поглощения; η — волновое число. Коэффициенты ε_η, κ_η связаны соотношением

$$\varepsilon_\eta = \kappa_\eta B_\eta^{ne}, \tag{2}$$

через функцию Планка для термически неравновесного излучения

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

Здесь: n_u, n_l — концентрации излучающих молекул (заселенности) с более высоким энергетическим состоянием u и более низким энергетическим состоянием l соответственно; g_u, g_l — кратности вырождения, соответствующие состояниям u и l, т. е. количество независимых состояний, соответствующих данному энергетическому уровню; h — постоянная Планка; k — постоянная Больцмана; c — скорость света.

В случае термического равновесия справедливо распределение Больцмана [8]:

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

где константа C_2 определяется формулой

$$C_2 = hc / k. \tag{5}$$

Каждая спектральная линия, связанная с переходом между уровнями, имеет некоторое расширение $\Delta\eta$. Основным параметром, характеризующим линию, является интенсивность линии:

$$S_\eta = \int\limits_{\Delta\eta} \kappa_\eta d\eta. \tag{6}$$

Для интенсивности линии справедливо соотношение [8] (если относить к одной молекуле):

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

где A_{ul} — коэффициент Эйнштейна для спонтанной эмиссии [1/с].

Рассмотрим спектральные линии, обусловленные только колебательно — вращательными энергопереходами.

В монографии Ачасова О. В. [4] 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:

$$n_{VJ} = NQ_V^{-1} g_\nu X_V Q_R^{-1} g_J X_R, \tag{8}$$

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

Кратность вырождения, соответствующая каждому состоянию, равна

$$g = g_J g_\nu. \tag{9}$$

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

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

или

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

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 между уровнями с $\nu_1 = 2\nu_2$, можно ввести единую колебательную температуру $T_{V,12}$ для этих уровней. Заселенность колебательного уровня $\nu_1\,\nu_2^{\,l}\,\nu_3$ таким образом задается следующими формулами [4]:

$$n_{\nu_1\nu_2^{\,l}\nu_3} = n_0 Q_V^{-1} g_\nu X_V, \tag{12}$$

$$X_V = X_{12}X_3 = \exp\left[-\frac{hc}{k}\left(\frac{\omega_{\nu_1\nu_2^{\,l}\nu_3}-\omega_{00\nu_3}}{T_{\nu,12}}+\frac{\omega_{00^0\nu_3}}{T_{\nu,3}}\right)\right], \tag{13}$$

где $\omega_{\nu_1\nu_2\nu_3} = \omega_\nu(\nu_1,\nu_2,\nu_3)$ — колебательная энергия, соответствующая колебательному уровню $\nu_1\,\nu_2\,\nu_3$, для расчета которой используется метод Герцберга [12].

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

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

где Θ_i — характеристические колебательные температуры. Для CO_2 рекомендуются следующие значения: $\Theta_1 = 1929\ \text{K}$, $\Theta_2 = 960\ \text{K}$, $\Theta_3 = 3380\ \text{K}$.

Предполагается, что обе вращательные моды молекулы CO_2 описываются единой вращательной температурой T_R. В этом случае

функции Больцмана по вращательной температуре определяется формулой

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

где $\omega_R(J)$ — вращательная энергия молекулы для J-го вращательного уровня, для расчета которой используется метод Герцберга [12]:

$$\omega_R\left(J\right)=BJ\left(J+1\right)-D\left[J\left(J+1\right)\right]^2. \tag{16}$$

В работе [8] показано, что для линейной молекулы CO_2 вращательная функция распределения пропорциональна температуре:

$$Q_R\left(T_R\right)\sim T_R. \tag{17}$$

В справочниках HITRAN [9], HITEMP [10], CDSD [11] для каждой спектральной линии задана интенсивность для стандартной температуры $T_0=\ 296\ K$.

Формула (11) в этом случае принимает вид:

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

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

$$S_\eta=S_\eta\left(T_0\right)\frac{Q_V\left(T_o\right)}{Q_V\left(T_{\nu,1},T_{\nu,2},T_{\nu,3}\right)}\frac{Q_R\left(T_o\right)}{Q_R\left(T_R\right)}\ \frac{X_{V,l}X_{R,l}\left(1-\dfrac{X_{V,u}X_{R,u}}{X_{V,l}X_{R,l}}\right)}{\exp\left(-C_2E_l/T_0\right)\left[1-\exp\left(-C_2\eta/T_0\right)\right]} \tag{19}$$

или с учетом (17):

$$S_\eta=S_\eta\left(T_0\right)\frac{Q_V\left(T_o\right)}{Q_V\left(T_{\nu,1},T_{\nu,2},T_{\nu,3}\right)}\left(\frac{T_o}{T_R}\right)^{3/2}\ \frac{X_{V,l}X_{R,l}\left(1-\dfrac{X_{V,u}X_{R,u}}{X_{V,l}X_{R,l}}\right)}{\exp\left(-C_2E_l/T_0\right)\left[1-\exp\left(-C_2\eta/T_0\right)\right]}. \tag{20}$$

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:

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

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

где $p_{ref} = 1$ 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:

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

Для доплеровского уширения:

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

Для смешанного воздействия используется контур Фойгта:

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

Решение уравнения переноса излучения. Для однородного слоя толщиной L формальное решение уравнения (1) будет иметь вид

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

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

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

Таким образом, на выходе из слоя спектральная яркость равна

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

где пропускательная способность слоя:

$$\tau_\eta = \exp\left(-N\kappa_\eta L\right) \tag{29}$$

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:

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

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

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 [13]. Наиболее точным для профилей линий Лоренца, преобладающих при атмосферном или более высоких давлениях, является распределение интенсивности линий S^{-1} с экспоненциальным хвостом Малкмуса [14]. 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

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

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

$$\bar{k} = \frac{1}{\Delta\eta}\sum_{i}^{N} S_i, \tag{32}$$

$$\bar{\gamma} = \frac{1}{N}\sum_{i}^{N} \gamma_i, \tag{33}$$

$$\bar{\delta} = \frac{\bar{k}\,\bar{\gamma}}{\left[\frac{1}{\Delta\eta}\sum_{i}\sqrt{\gamma_i S_i}\right]^2}. \tag{34}$$

Интенсивности линий S_i и полуширины линий на полувысоте γ_i рассчитываются по формулам из раздела 2.

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 $\overline{W}_V$ набора линий поглощения Фойгта, обычно используются дополнительные аппроксимации, объединяющие эквивалентные ширины лоренцевской $\overline{W}_L$ и доплеровской $\overline{W}_D$ [15].

Используются следующие аппроксимации: Людвига и др. [16]:

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

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

и Роджерса, и Уильямса [15]:

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

Для расчета параметра $\frac{\bar{W}_D}{d}$ использовалась методика из работы [18].

Для среднего значения лоренцевой линии $\bar{\gamma}$ в формуле (31) использовалось следующее соотношение [18]:

$$\bar{\gamma}_{CO_2} = \frac{p}{p_s}\left(\frac{T_s}{T}\right)^{0.7}\left[0.07X_{CO_2} + 0.058\left(1 - X_{CO_2} - X_{H_2O}\right) + 0.1X_{H_2O}\right]. \tag{38}$$

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 случает 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 среднее значение неравновесной функции Планка. Для этого использовалась следующая формула:

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

Параметры SNB были рассчитаны из спектроскопических баз данных HITEMP и CDSD в диапазоне от 400 до 6000 см$^{-1}$ для двух спектральных разрешений: 5 см$^{-1}$ и 25 см$^{-1}$. Рассматривался диапазон поступательной температуры 100–3000 K с шагом 100 K. Колебательные и вращательная температуры выбирались для каждого значения поступательной с отклонением от нее на 1000 K для колебательных и на 500 K для вращательной, также с шагом 100 K.

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.

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 диапазоне 4.3 мкм. Результаты, где возможно, сравнивались с экспериментальными данными из работы [19].

Область 4.3 мкм. $p = 1$ *бар*, $T = 1550$ *K*, $L = 50$ *см*, $X_{CO2} = 0.01$.

На рисунках 1, 2 показаны пропускательная способность и спектральная энергетическая яркость слоя CO_2 толщиной 50 см при атмосферном давлении и температуре $T = 1550$ *K*. Мольная доля CO_2 равна 0.01.

На рисунке 1 результаты расчетов по LBL и SNB хорошо согласуются, как между собой, так с экспериментом [17].

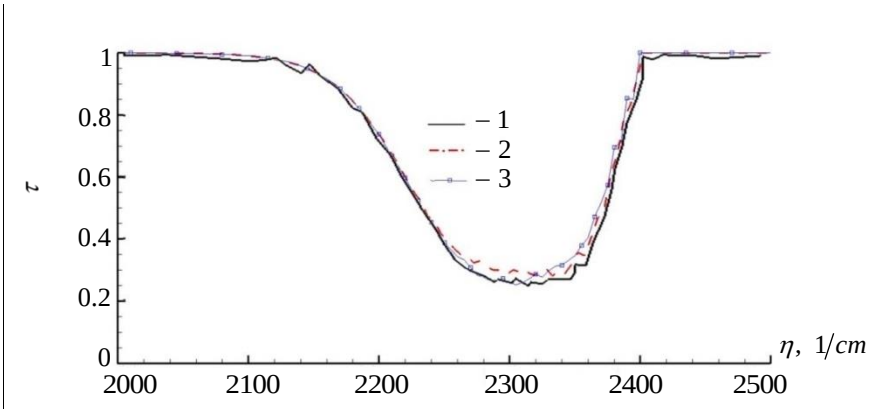
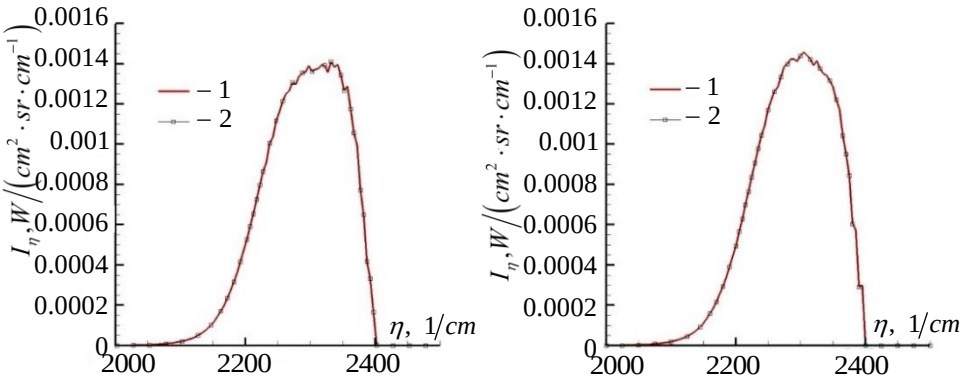


Рис. 1. Пропускательная способность слоя газа CO_2 в области 4.3 мкм

$T = T_{v1} = T_{v2} = T_{v3} = T_r = 1550\ K$.

1 — эксперимент [17]; 2 — LBL; 3 — SNB

На рисунке 2 показано, как влияет метод расчета функции Планка в решении уравнения переноса излучения (1). Кривая 1 получена при использовании неравновесной функции Планка (формула (3)); кривая с символами 2 — функция Планка рассчитана по поступательной температуре T . Оба метода полностью совпадают как для расчета по LBL (рис. 2a), так и для расчета по SNB (рис. 2b).



а) б)

Рис. 2. Яркость слоя газа CO_2 в области 4.3 мкм.

$T = T_{v1} = T_{v2} = T_{v3} = T_r = 1550\ K$.

а) — LBL, б) — SNB. Неравновесный расчет τ ;

1 — неравновесный расчет; 2 — расчет по T

Также следует отметить, что расчеты по LBL и SNB хорошо согласуются между собой.

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

На рисунках 3, 4 показано влияние неравновесности по первой/второй колебательной моде. Колебательная температура $T_{v1} = T_{v2}$ снижена на 300 K, все остальные температуры — такие же, как в предыдущем расчете: $T = T_{v3} = T_r = 1550K$.

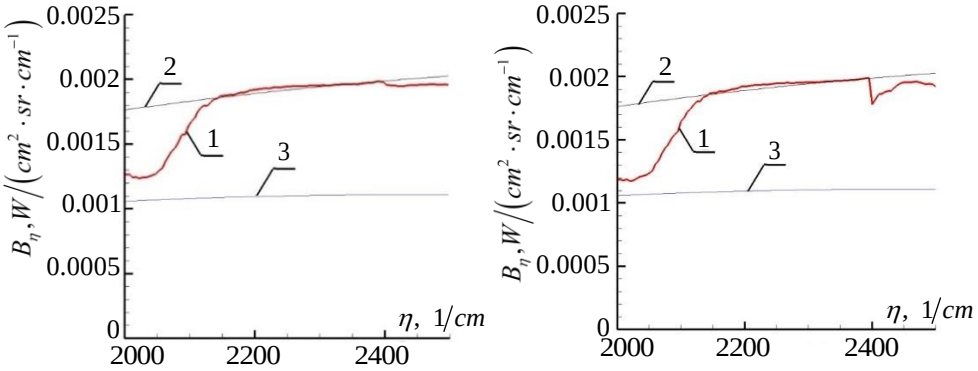


Рис. 3. Функция Планка в слое газа CO_2 в области 4.3 мкм. Анализ воздействия неравновесности по температуре деформационной колебательной моды. $T_{v1} = T_{v2} = 1250K$, $T = T_{v3} = T_r = 1550K$.
а) — LBL, б) — SNB.
1 — неравновесный расчет B_η; 2 — расчет B_η по $T = T_{v3} = T_r$;
3 — расчет B_η по $T_{v1} = T_{v2}$

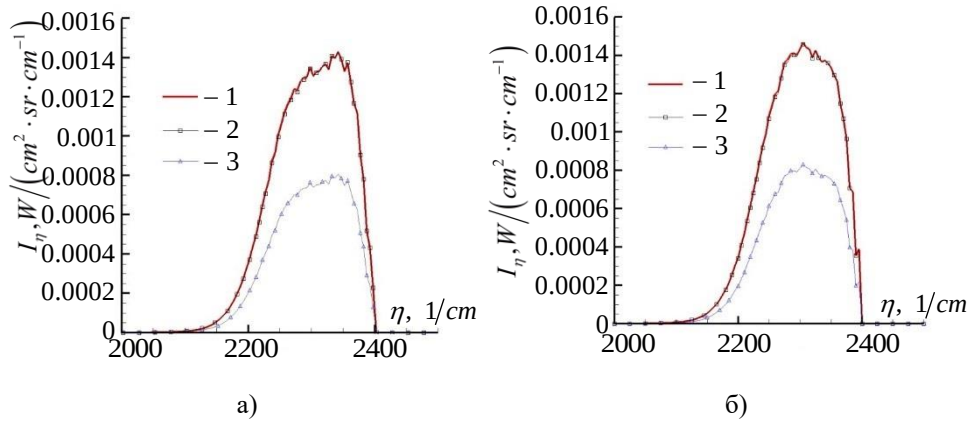


Рис. 4. Яркость слоя газа CO_2 в области 4.3 мкм. Анализ воздействия неравновесности по температуре деформационной колебательной моды.
$T_{v1} = T_{v2} = 1250K$, $T = T_{v3} = T_r = 1550K$.
а) — LBL, б) — SNB. Неравновесный расчет τ;
1 — неравновесный расчет B_η; 2 — расчет B_η по $T = T_{v3} = T_r$;
3 — расчет B_η по $T_{v1} = T_{v2}$

Из анализа этих результатов можно сделать вывод, что вторая, т. е. деформационная, колебательная температура практически не оказывает никакого воздействия на излучательные характеристики в области 4.3 мкм

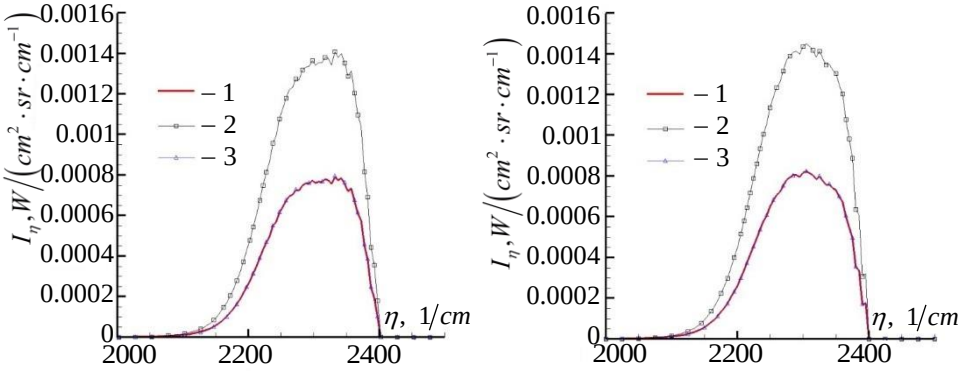


Рис. 5. Яркость слоя газа CO_2 в области 4.3 мкм. Анализ воздействия неравновесности по температуре ассиметричной колебательной моды. $T_{v1} = T_{v2} = 1250K$, $T = T_{v3} = T_r = 1550K$.
а) — LBL, б) — SNB. Неравновесный расчет τ ;
1 — неравновесный расчет B_η ; 2 — расчет B_η по $T = T_{v1} = T_{v2} = T_r$;
3 — расчет B_η по T_{v3}

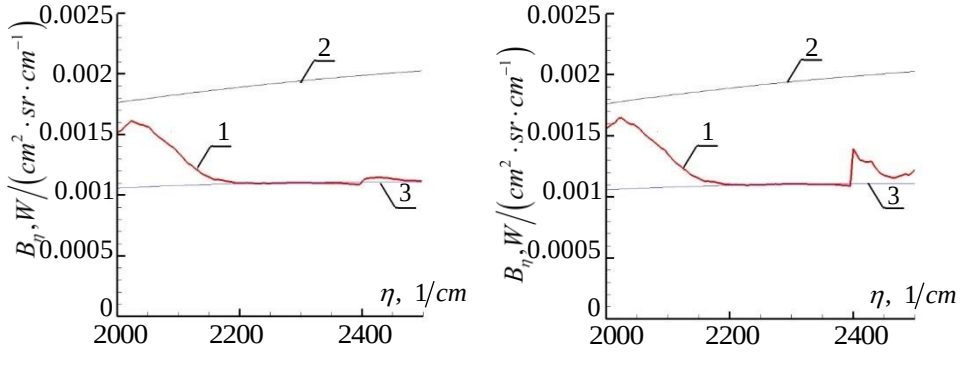


Рис. 6. Функция Планка в слое газа CO_2 в области 4.3 мкм. Анализ воздействия неравновесности по температуре ассиметричной колебательной моды. $T_{v1} = T_{v2} = 1250K$, $T = T_{v3} = T_r = 1550K$.
а) — LBL, б) — SNB.
1 — неравновесный расчет B_η ; 2 — расчет B_η по $T = T_{v2} = T_r$;
3 — расчет B_η по T_{v3}

Основное влияние связано с термической неравновесностью ассиметричной моды. Неравновесная функция Планка совпадает с посчитанной по температуре T_{v3} (см. рис. 6). Соответственно ведет себя и энергетическая яркость на рисунке 5. Этот факт позволяет существенно упростить методику расчета излучения термически неравновесного газа в данном диапазоне.

Отклонения колебательных и вращательной температур на пропускательную способность слоя воздействует слабо (см. рис. 7). Влияние вращательной неравновесности практически незаметно.

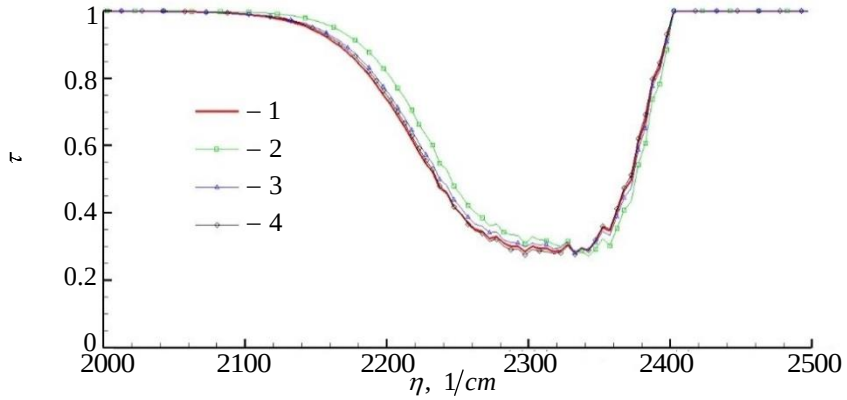


Рис. 7. Пропускательная способность слоя газа CO_2 в области 4.3 мкм.
1 — $T = T_{v1} = T_{v2} = T_{v3} = T_r = 1550\ K$. 2 — $T_{v1} = T_{v2} = 1250\ K$;
3 — $T_{v3} = 1250\ K$; 4 — $T_r = 1450\ K$

Заключение. На основе представленной методики расчёта поглощательных и излучательных характеристик CO_2 в диапазоне от 2000 до 2500 см$^{-1}$ с учётом влияния термической неравновесности была проведена серия расчётов с использованием модели line — by — line (LBL) и статистической узкополосной модели (SNB). Данные расчёты выполнены при различных соотношениях поступательной, вращательной и колебательных температур слоя CO_2. Представленная в работе методика показывает хорошее согласование между собой моделей LBL и SNB, а также удовлетворительно согласовывается с экспериментальными данными при расчёте величины пропускательной способности. Также стоит отметить, что в рассматриваемом диапазоне волновых чисел неравновесность по симметричной/деформационной моде практически не оказывает влияния на излучательные характеристики, в отличии от ассиметричной колебательной температуры, которая оказывает существенное влияние на значение неравновесной функции Планка.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Харченко Н.А. *Численное моделирование аэротермодинамики высокоскоростных летательных аппаратов*. Дисс. канд. физ.-мат. наук. Москва, 2021, 112 с.

[2] Харченко Н.А., Никонов А.М. Определение распределенных аэродинамических характеристик осесимметричного тела конфигурации SOCBT при турбулентном обтекании трансзвуковым потоком. *Математическое моделирование и численные методы*, 2023, № 2, с. 100–128.

[3] Носенко Н.А., Харченко Н.А. Определение газодинамических параметров сверхзвуковой горячей струи в ходе процедуры валидации вычислительной схемы с использованием RANS подход. *Математическое моделирование и численные методы*, 2025, № 2 (46), с. 102–129.

[4] Ачасов О. В. *Диагностика неравновесных состояний в молекулярных лазерах*. Минск, Наука и техника, 1985, 208 с.

[5] Kudryavtsev N. N., Novikov S. S. Theoretical and experimental investigations of I.R. radiation transfer in vibrationally nonequilibrated molecular gas containing CO_2 and CO. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 1982, vol. 25, pp. 1541-1558.

[6] Кудрявцев Н. Н., Новиков С. С. Излучение и поглощательная способность молекул CO в полосе 4,7 мкм и CO_2 в полосах 4,3 и 2,7 мкм при отсутствии равновесия между колебательными и поступательно-вращательными степенями свободы. *Теплофизические свойства веществ*, 1980, т. 18, № 6, с. 1161–1167.

[7] Молчанов А. М., Быков Л. В., Янышев Д. С. Расчет теплового излучения колебательно-неравновесного потока газа методом k-распределения. *Теплофизика и аэромеханика*, 2017, т. 24, № 3, с. 411-432.

[8] Modest M. F. *Radiative Heat Transfer*. London, New York, Elsevier Science, 2003, 842 p.

[9] Rothman L. S., Gordon I. E., Hargreaves R. J., et.al. The HITRAN2020 molecular spectroscopic database. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 2022, vol. 277, art. 107949, 82 p.

[10] Rothman L. S., Gordon I. E., Barber R. J., et.al. HITEMP, the high-temperature molecular spectroscopic database. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 2010, vol. 111, pp. 2139-2150.

[11] Tashkun S. A., Perevalov V. I., Teffo J-L., Bykov A. D., Lavrentieva N. N.. CDSD-1000, the high-temperature carbon dioxide spectroscopic databank. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 2003, vol. 82, iss. 1–4, pp. 165–196.

[12] Herzberg G. *Molecular spectra and molecular structure. Vol. 2: Infrared and raman spectra of polyatomic molecules, 9th ed*. NJ, Van Nostrand Comp., 1945.

[13] Герцберг Г. *Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул*. Москва, Изд-во иностранной литературы, 1949, 648 с.

[14] Goody R., Yung Y. *Atmospheric radiation: theoretical basis*. Oxford, Oxford University Press (OUP), 1989, 54 p.

[15] Malkmus W. Random Lorentz band model with exponential-tailed S 1 line intensity distribution function. *Journal of the Optical Society of America (JOSA)*, 1967, vol. 57, iss. 3, pp. 323–329.

[16] Taine J., Soufiani A. Gas IR radiative properties: From spectroscopic data to approximate models. *Advances in Heat Transfer*, 1999, vol. 33, pp. 295–414.

[17] Ludwig C. B., Malkmus W., Reardon J. E., Thomson J. A. L. *Handbook of infrared radiation from combustion gases*. Washington, NASA, 1973, 496 p.

[18] Rodgers C. D., Williams A. P. Integrated absorption of a spectral line with the Voigt profile. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 1974, vol. 14, iss. 4, pp. 319–323.

[19] Riviere Ph., Soufiani A.. Generalized Malkmus line intensity distribution for CO2 infrared radiation in Doppler broadening regime. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 2011, vol. 112, iss. 3, pp. 475–485.

[20] Bharadwaj S. P., Modest M.F. Medium resolution transmission measurements of CO2 at high temperature — an update. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 2007, vol. 103, pp.146–155.

Статья поступила в редакцию 22.03.2025

Ссылку на эту статью просим оформлять следующим образом:

Молчанов А. М., Фролова Ю. В., Харченко Н. А. Моделирование эмиссионных спектральных свойств термически неравновесного газа CO_2 в диапазоне от 2000 до 2500 см$^{-1}$ в атмосферах планет. *Математическое моделирование и численные методы*, 2025, № 3, с. 15–31.

Молчанов Александр Михайлович — д-р техн. наук, профессор кафедры «Авиационно — космическая теплотехника» МАИ. e-mail: alexmol_2000@mail.ru

Фролова Юлия Владимировна — аспирант кафедры «Вычислительная математика и программирование» МАИ. e-mail: yuliu-281000@mail.ru

Харченко Николай Анатольевич — канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры «Вычислительная математика и программирование» МАИ. e-mail: kharchenko.na@phystech.edu

Modeling of emission spectral properties of thermally nonequilibrium CO_2 gas in the range from 2000 to 2500 cm^{-1} in planetary atmospheres

© A. M. Molchanov, Y. V. Frolova, N. A. Kharchenko

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

The paper presents a calculation technique for the absorption and emission characteristics of CO_2 in the range from 2000 to 2500 cm^{-1} taking into account the effect of thermal nonequilibrium. A series of calculations were performed using the line — by — line (LBL) model and the statistical narrow-band model (SNB). The calculations were performed at different ratios of the translational, rotational and vibrational temperatures of the CO_2 layer. The resulting technique shows good agreement between the LBL and SNB models, and agrees satisfactorily with the experimental data when calculating the transmittance value. In the range under consideration, the nonequilibrium in the symmetric/deformation mode has virtually no effect on the emission characteristics, unlike the asymmetric vibrational temperature, which has a significant effect on the value of the nonequilibrium Planck function.

***Keywords**: atmospheric monitoring, CO_2 emissivity, statistical narrowband model, thermal nonequilibrium*

REFERENCES

[1] Kharchenko N.A. *Chislennoe modelirovanie aerotermodinamiki vysokoskorostnyh letatel'nyh apparatov* [Numerical simulation of aerothermodynamics of high-speed aircraft]. Diss. Cand. Sci. (Phys. — Math.). Moscow, 2021, 112 p.

[2] Kharchenko N. A., Nikonov A. M. Determination of distributed aerodynamic characteristics of an axisymmetric body of the SOCBT configuration under turbulent flow by a transonic flow. *Mathematical Modeling and Computational Methods*, *2*023, no. 2, pp. 100–128.

[3] Nosenko N. A. Kharchenko N. A. Determination of gas dynamic parameters of the supersonic hot jet during the computational scheme validation procedure using the RANS approach. *Mathematical Modeling and Computational Methods.* 2025, no. 2(46), pp. 102–129.

[4] Achasov O. V. *Diagnostika neravnovesnyh sostoyanij v molekulyarnyh lazerah* [Diagnostics of nonequilibrium states in molecular lasers]. Minsk, Science and Technology Publishing House, 1985, 208 p.

[5] Kudryavtsev N. N., Novikov S. S. Theoretical and experimental investigations of I.R. radiation transfer in vibrationally nonequilibrated molecular gas containing CO_2 and CO. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 1982, vol. 25, pp. 1541-1558.

[6] Kudryavcev N. N., Novikov S. S. *Izluchenie i pogloshchatel'naya sposobnost' molekul CO v polose 4,7 mkm i CO2 v polosah 4,3 i 2,7 mkm pri otsutstvii ravnovesiya mezhdu kolebatel'nymi i postupatel'no-vrashchatel'nymi stepenyami svobody* [Emission and absorption capacity of CO molecules in the 4.7 μm band and CO2 in the 4.3 and 2.7 μm bands in the absence of equilibrium between vibrational and translational-rotational degrees of freedom]. *High Temperature*, 1980, vol. 18, no. 6, pp. 1161–1167.

[7] Molchanov A.M., Bykov L.V., Yanyshev D.S. Calculation of thermal radiation of vibrational-nonequilibrium gas flow by the k-distribution method. *Thermophysics and Aeromechanics*, 2017, vol. 24, no. 3, pp. 399-419.

[8] Modest M. F. *Radiative Heat Transfer*. London, New York, Elsevier Science, 2003, 842 p.

[9] Rothman L. S., Gordon I. E., Hargreaves R. J., et.al. The HITRAN2020 molecular spectroscopic database. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 2022, vol. 277, art. 107949, 82 p.

[10] Rothman L. S., Gordon I. E., Barber R. J., et.al. HITEMP, the high-temperature molecular spectroscopic database. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 2010, vol. 111, pp. 2139-2150.

[11] Tashkun S. A., Perevalov V. I., Teffo J-L., Bykov A. D., Lavrentieva N. N.. CDSD-1000, the high-temperature carbon dioxide spectroscopic databank. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 2003, vol. 82, iss. 1–4, pp. 165–196.

[12] Herzberg G. *Molecular spectra and molecular structure. Vol. 2: Infrared and raman spectra of polyatomic molecules*, *9th ed*. NJ, Van Nostrand Comp., 1945.

[13] Gercberg G. *Kolebatel'nye i vrashchatel'nye spektry mnogoatomnyh molekul* [Vibrational and rotational spectra of polyatomic molecules]. Moscow, Izd-vo inostrannoj literatury [Foreign Literature Publishing House], 1949, 648 p.

[14] Goody R., Yung Y. *Atmospheric radiation: theoretical basis*. Oxford, Oxford University Press (OUP), 1989, 54 p.

[15] Malkmus W. Random Lorentz band model with exponential-tailed S 1 line intensity distribution function. *Journal of the Optical Society of America (JOSA)*,

1967, vol. 57, iss. 3, pp. 323–329.

[16] Taine J., Soufiani A. Gas IR radiative properties: From spectroscopic data to approximate models. *Advances in Heat Transfer*, 1999, vol. 33, pp. 295–414.

[17] Ludwig C. B., Malkmus W., Reardon J. E., Thomson J. A. L. *Handbook of infrared radiation from combustion gases*. Washington, NASA, 1973, 496 p.

[18] Rodgers C. D., Williams A. P. Integrated absorption of a spectral line with the Voigt profile. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 1974, vol. 14, iss. 4, pp. 319–323.

[19] Riviere Ph., Soufiani A. Generalized Malkmus line intensity distribution for CO2 infrared radiation in Doppler broadening regime. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 2011, vol. 112, iss. 3, pp. 475–485.

[20] Bharadwaj S. P., Modest M.F. Medium resolution transmission measurements of CO2 at high temperature — an update. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 2007, vol. 103, pp.146–155.

Molchanov A.M., Dr. Sc. (Eng.), Professor, Department of Aerospace thermal engineering Moscow Aviation Institute (National Research University). e-mail: alexmol_2000@mail.ru

Frolova Y.V., Postgraduate Student of Department of Computational Mathematics and Programming Moscow Aviation Institute (National Research University). e-mail: yuliu-281000@mail.ru

Kharchenko N.A., Cand. Sc. (Phys. — Math.), Assoc. Professor, Department of Computational Mathematics and Programming, Moscow Aviation Institute (National Research University). e-mail: kharchenko.na@phystech.edu