

## 利用 HITEMP2010 的 Malkmus 窄谱带模型参数库构建研究

陈世国, 陈立海, 莫冬腊, 史径丞, 梅 飞

(空军工程大学 等离子体动力学重点实验室, 陕西 西安 710038)

**摘 要:** 为精确求解发动机高温燃气红外辐射特性, 需要调用描述气体辐射传输特性的谱带参数如光谱吸收系数或光谱透过率, 而谱带参数随气体温度、波数变化而变化。首先采用逐线计算方法, 比较分析了气体分子谱线参数 HITRAN2008 和其高温扩展版本 HITEMP2010 的适用范围; 其次, 针对逐线计算复杂且效率低的问题, 提出了一种基于 Malkmus 统计窄谱带模型的谱带参数库构建方法并开发了计算程序, 在此基础上, 分别计算了 CO<sub>2</sub>、H<sub>2</sub>O 的均匀路径单组分光谱特性、非均匀路径单组分光谱特性, 还计算了 CO<sub>2</sub>、H<sub>2</sub>O、N<sub>2</sub> 组合的非均匀路径多组分光谱特性。研究表明: 计算结果和试验数据吻合较好, 说明所提出的基于 HITEMP2010 的 Malkmus 统计窄谱带模型适用于高温燃气辐射传输特性计算。

**关键词:** 红外辐射特性; 谱带模型参数; 光谱数据库; Malkmus 统计窄谱带模型; HITEMP2010  
**中图分类号:** TK213; TN21 **文献标志码:** A **文章编号:** 1007-2276(2015)08-2327-07

## Construction of Malkmus statistical narrow spectral band model parameters database based on HITEMP2010

Chen Shiguo, Chen Lihai, Mo Dongla, Shi Jingcheng, Mei Fei

(Science and Technology Plasma Dynamics Laboratory, Air Force Engineering University, Xi'an 710038, China)

**Abstract:** In order to make high accuracy predictions of high temperature combustion gases infrared radiation characteristics, the spectral band model parameters such as spectral absorption coefficient or spectral transmittance which changed with gases temperature and wave number must be invoked. A new construction method of spectral band model parameters database based on Malkmus statistical narrow band model was proposed. The HITRAN2008 and HITEMP2010 molecular spectroscopic databases were employed to meet the requirement of normal temperature and high temperature calculations in the mode, and a calculation program for the Malkmus statistical narrow band model with average transmittance had been developed. Then the program was employed to calculate the single component spectral radiation characteristics of CO<sub>2</sub> and H<sub>2</sub>O in both homogeneous path and inhomogeneous path respectively, and the multi-component spectral radiation characteristics of CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O and N<sub>2</sub> in inhomogeneous path. The result shows good agreement with the experimental data from the literature, and the proposed Malkmus statistical narrow band model is suitable for the high temperature gas radiation transfer characteristic calculation.

**Key words:** infrared radiation characteristics; band model parameters; spectroscopic database; Malkmus statistical narrow band model; HITEMP2010

收稿日期: 2014-12-10; 修订日期: 2015-02-26

基金项目: 国防预研项目(51301XX); 横向合作项目(30582011121001)

作者简介: 陈世国(1980-), 男, 讲师, 博士, 主要从事飞行器红外特性与隐身/反隐身技术方面的研究。Email: chenshiguocsg@126.com

## 0 引言

吸收和发射性气体辐射传输建模具有多种应用前景,如发动机热喷流辐射特征评估<sup>[1]</sup>、高超声速飞行器流场辐射研究<sup>[2]</sup>、被动测距技术<sup>[3-4]</sup>、大气透过率计算以及污染研究,环境评估,温室气体研究,臭氧损耗,光谱分析<sup>[5]</sup>等等。

气体分子的吸收和发射主要发生在一系列振-转谱带处,每个谱带由数千条谱线组成,实际分子光谱吸收系数随波数的变化十分剧烈,即所谓选择性吸收,根源就是分子谱线及其分布。因此,气体辐射的精确计算要考虑每条谱线对吸收系数的贡献。

气体辐射计算方法主要有两类:一类是逐线计算方法(Line-by-Line),该方法是从每根分子谱线入手,利用分子光谱参数库给出的标准状态下谱线参数,逐条计算各谱线的贡献以得到单色吸收系数,进而得到高分辨率的光谱吸收系数,但计算复杂,计算量非常大,代表性程序是 FASCODE<sup>[6]</sup>。另一类则是具有较低精度、较低分辨率,但计算速度很快的谱带模型方法,该方法基于谱线位置和强度分布的假设,通过推导谱带模型公式,建立谱带模型参数库,代表性模型是 MODTRAN<sup>[7]</sup>。根据分布假设不同,谱带模型有多种,每种谱带模型的假设均具有一定的合理性,其中在气体辐射特性数值计算中得到广泛应用的是窄谱带模型参数库<sup>[8]</sup>。

窄谱带模型就是将某波数间隔  $\Delta\eta$  内光谱线的排列、重叠性质与单条谱线的性质联系起来,不需要详细了解每条谱线的形状、谱线强度和谱线位置,而是假定谱线形状、强度和位置分布符合一定的规律,从而将平均透过率与谱带平均吸收系数,半宽和线密度等谱带参数联系起来。利用谱带模型计算气体透过率需建立谱带参数随温度、波数变化的数据库即谱带模型参数库,而谱带模型参数库的精度高度依赖于所调用的气体分子谱线参数库。

早期的应用对象主要是大气科学,因此当时的分子谱线参数库主要收集了部分常见气体分子在常温范围内若干重要谱带的谱线参数,例如,1973年美国空军剑桥实验室(AFCRL)发布了大气线参数汇编<sup>[9]</sup>,收录了  $\text{H}_2\text{O}$ 、 $\text{CO}_2$ 、 $\text{O}_3$ 、 $\text{N}_2\text{O}$ 、 $\text{CO}$ 、 $\text{CH}_4$ 、 $\text{O}_2$  等7种分子的谱线参数,后又经过数次增补和更新演化为

HITRAN,其最新版本是 HITRAN2008<sup>[10]</sup>。法国的 GEISA、俄罗斯的 CDS,和 HITRAN 一样,都是目前使用较普遍的常温气体分子谱线参数库。但是,对于包含高温气体辐射计算问题,仅采用上述数据库无法获得精确的计算结果,因此必须对上述数据库加以拓展,而 HITEMP2010<sup>[11]</sup>正是 HITRAN 的高温扩展版本。此外,由于缺乏对气体辐射计算模型的深入研究和深刻理解,在发动机高温燃气红外辐射特性求解时所采用的气体辐射模型较为简单或光谱分辨率过低,导致计算结果可信度较差。

因此,文中首先采用逐线计算方法研究了 HITRAN2008 和 HITEMP2010 的适用范围,并将计算结果与实验数据进行了对比;其次,提出了一种基于 Malkmus 统计窄谱带模型的谱带参数库构建方法;最后,分别计算了  $\text{CO}_2$ 、 $\text{H}_2\text{O}$  的均匀路径单组分光谱特性、非均匀路径单组分光谱特性,并计算了  $\text{CO}_2$ 、 $\text{H}_2\text{O}$ 、 $\text{N}_2$  组合的非均匀路径多组分光谱特性,并将计算结果与实验数据进行了对比,验证了文中的计算方法和程序的可信度。

## 1 气体分子光谱吸收系数的逐线计算

在逐线计算理论研究基础上,开发了气体分子光谱吸收系数逐线计算程序(LBLP:Line By Line Program),具体见参考文献[12]。利用该程序,分别基于 HITRAN08 和 HITEMP2010,计算了不同条件下  $\text{CO}_2$  的光谱透过率,并与文献中的实验数据进行了对比。

### 1.1 逐线计算理论

根据光谱学理论,每种分子都含有大量谱线,它们相互交错在一起。每条谱线对任何波数位置上的发射和吸收均有影响。因此,波数在  $\eta$  处的光谱吸收系数  $\kappa_\eta$  应该等于所有谱线在该波数处的吸收系数之和:

$$\kappa_\eta = \sum_i \kappa_i = \sum_i S_i \cdot F(\eta - \eta_{0i}) \quad (1)$$

式中: $\kappa_i$  为谱线  $i$  在波数  $\eta$  处的吸收系数; $F(\eta - \eta_{0i})$  为谱线  $i$  的归一化线型函数; $\eta_{0i}$  为第  $i$  条谱线中心处的波数; $S_i$  为谱线  $i$  的线强。

但由于气体分子谱线数量众多且分布在不同位置,如果全部考虑的话,计算量会相当大。随着谱线

线翼向两侧延伸,其吸收能力会迅速衰减,当延伸至足够远时,其影响可忽略不计,在实际计算中,常采用线翼截断方法来提高计算效率,即仅考虑位于计算波数一定范围内的谱线的贡献。因此,逐线计算的基础是谱线位置、线强和半宽等分子谱线参数。

## 1.2 HITRAN 的局限性

利用逐线计算程序 LBLP, 计算了不同条件下  $\text{CO}_2$  的光谱透过率, 计算中对波数域采用等间隔取样, 间隔为  $\Delta\eta=0.01 \text{ cm}^{-1}$ 。采用等波数线翼截断, 截断波数为  $10 \text{ cm}^{-1}$ , 即仅考虑位于取样点  $10 \text{ cm}^{-1}$  范围内谱线对取样点的贡献。

图 1~4 给出了  $\text{CO}_2$  气体在不同条件下  $2.7 \mu\text{m}$  和  $4.3 \mu\text{m}$  吸收带的光谱透过率的逐线计算结果, 计算时分别调用了 HITRAN2008 和 HITEMP2010 数据库。同时, 为便于同参考文献[13-14]的低分辨率( $4 \text{ cm}^{-1}$ ) 实验数据进行对比, 对逐线计算结果进行降分辨率处理, 使二者的分辨率均为  $4 \text{ cm}^{-1}$ , 其中图 1 是与参考文献[13]的实验数据进行对比, 计算条件:  $P=101\ 325 \text{ Pa}$ ,  $T=300 \text{ K}$ ,  $L=10 \text{ cm}$ ,  $X_{\text{CO}_2}=50\%$ 。而图 2~4 则是与参考文献[14]的实验数据进行对比, 计算条件依次为  $P=101\ 325 \text{ Pa}$ ,  $T=1\ 550 \text{ K}$ ,  $L=20 \text{ cm}$ ,  $X_{\text{CO}_2}=100\%$ ;  $P=101\ 325 \text{ Pa}$ ,  $T=600 \text{ K}$ ,  $L=10 \text{ cm}$ ,  $X_{\text{CO}_2}=50\%$ ;  $P=101\ 325 \text{ Pa}$ ,  $T=1\ 000 \text{ K}$ ,  $L=50 \text{ cm}$ ,  $X_{\text{CO}_2}=100\%$ 。

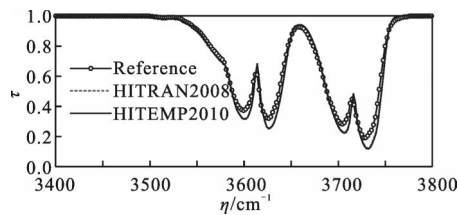


图 1  $\text{CO}_2$  在  $2.7 \mu\text{m}$  吸收带处光谱透过率计算与实验对比  
Fig.1 Comparison of spectral transmittance of  $\text{CO}_2$  at  $2.7 \mu\text{m}$  simulated by LBLP to the experiment

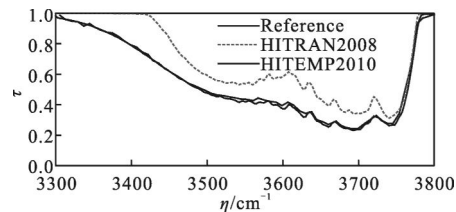


图 2  $\text{CO}_2$  在  $2.7 \mu\text{m}$  吸收带处光谱透过率计算与实验对比  
Fig.2 Comparison of spectral transmittance of  $\text{CO}_2$  at  $2.7 \mu\text{m}$  simulated by LBLP to the experiment

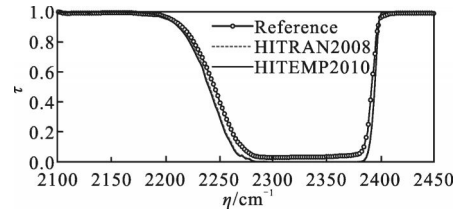


图 3  $\text{CO}_2$  在  $4.3 \mu\text{m}$  吸收带处光谱透过率计算与实验对比  
Fig.3 Comparison of spectral transmittance of  $\text{CO}_2$  at  $4.3 \mu\text{m}$  simulated by LBLP to the experiment

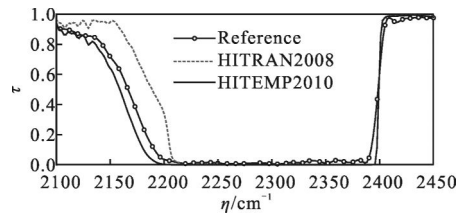


图 4  $\text{CO}_2$  在  $4.3 \mu\text{m}$  吸收带处光谱透过率计算与实验对比  
Fig.4 Comparison of spectral transmittance of  $\text{CO}_2$  at  $4.3 \mu\text{m}$  simulated by LBLP to the experiment

可以看出:(1) 温度较低 ( $T < 800 \text{ K}$ ) 时, 采用 HITRAN2008 和 HITEMP2010 的计算结果基本相同, 且与实验数据吻合较好。这主要是由于 HITEMP 与 HITRAN 收录的基频谱线完全相同, 因此二者均适用于常温或中低温气体辐射计算。(2) 温度较高时 ( $T \geq 800 \text{ K}$ ), 采用 HITRAN2008 和 HITEMP2010 的计算结果存在较大差异, 而且采用 HITEMP2010 计算的气体透过率与实验结果吻合较好, 这主要是因为 HITEMP2010 收录了许多 HITRAN2008 中没有的气体分子高能激发态跃迁形成的“热带”谱线。在进行高温计算时, 高能态分子所占比例急剧增加, “热带”谱线对辐射贡献的影响将迅速增大。(3) 采用 HITEMP2010 的计算结果与实验结果之间的相对误差较小且处于合理范围内, 误差主要源于对计算结果的降分辨率处理以及分子谱线库不可能收录所有的分子谱线数据等。

## 2 Malkmus 统计窄谱带模型参数库构建

该节以 HITEMP2010 数据库为基础, 提出了一种满足高温燃气红外辐射特性计算需求的 Malkmus 统计窄谱带模型参数库构建方法。数据库的波数区间、波数间隔、温度区间、温度间隔等参数可任意设置, 从而可满足不同场合和精度的需求。

## 2.1 谱带模型理论

尽管逐线方法是计算气体辐射特性最精确的方法,但该方法计算过程复杂、计算效率极低,因此在工程中常用的是较简单、计算效率很高的谱带模型方法。谱带模型是基于谱线形状、强度和位置分布假设发展而来的,通过推导谱带模型公式,建立谱带模型参数库以代替分子谱线参数库。谱带模型按波数间隔的大小分为窄谱带模型(波数间隔  $5\sim 50\text{ cm}^{-1}$ )和宽谱带模型(波数间隔  $100\sim 1\ 000\text{ cm}^{-1}$ ),工程中大多采用分辨率更高的窄谱带模型。

窄谱带模型基于谱线分布假设和谱线强度分布假设,该假设是在物理本质严格表述和方便数学处理之间的折衷和妥协。根据谱线分布假设的不同,可将窄谱带模型分成爱尔沙色模型(Elsasser Model)和统计窄谱带模型(Statistical Narrow Band Models)两大类;按照谱线强度分布假设的不同,可分为等线强度分布(Uniform),指数线强度分布(Goody),指数尾倒数线强分布(Malkmus)等。目前,Malkmus 模型被认为是精度最高的谱带模型<sup>[15]</sup>,早期在大气科学中应用较多,后来逐渐被传热学界所重视。

## 2.2 Malkmus 统计窄谱带模型参数的计算方法

Malkmus 统计窄谱带模型计算某一中心波数为  $\eta$  的谱带平均透过率  $\bar{\tau}_n$  公式为:

$$\bar{\tau}_n(X) = \exp \left[ -2 \frac{\bar{\gamma}}{d} \left[ \left( 1 + X \bar{k} \frac{\bar{d}}{\bar{\gamma}} \right)^{\frac{1}{2}} - 1 \right] \right] \quad (2)$$

式中: $X=X_{\text{mol}}PL$  为换算到标准状态(压强  $P_0=101\ 325\text{ Pa}$ , 温度  $T_0=296\text{ K}$ ) 下的组分压力光学行程; $X_{\text{mol}}$  为计算组分的摩尔分数; $P$  为计算压强; $L$  为行程长度; $\bar{k}$ 、 $\bar{\gamma}$  和  $\bar{d}$  即为窄谱带模型参数, $\bar{k}$  代表计算谱带区间的平均压力吸收系数, $\bar{\gamma}$  代表计算谱带区间内谱线的平均半宽, $\bar{d}$  为谱带区间内谱线的平均间距。

由公式(2)可以看出,准确描述气体的谱带平均透过率需要确定, $\bar{k}$ 、 $\bar{\gamma}$  和  $\bar{d}$  这 3 个谱带模型参数。 $\bar{\gamma}$  和  $\bar{d}$  对谱带平均透过率的影响可通过复合参数  $\beta=\pi\bar{\gamma}/\bar{d}$  实现。其中  $\bar{k}$  和  $\bar{d}$  是与温度和波数有关的参数,与压力和气体的组成无关; $\bar{\gamma}$  与气体的温度、组分浓度有关,但随波数变化不大。

以航空发动机排气系统高温燃气为例,其中含有  $\text{H}_2\text{O}$ 、 $\text{CO}_2$  和  $\text{CO}$  等多种红外活性气体组分,计算时要充分考虑外气体增宽效应对红外活性气体辐射特性的影响。当采用洛伦兹线型时,可以认为气体分子谱线半宽是仅与温度、压力和增宽气体种类有关的量。发动机排气系统红外活性气体组分的平均谱线半宽可采用如下经验公式<sup>[16]</sup>计算:

$$\begin{aligned} \bar{\gamma}_{\text{CO}_2} &= \frac{P}{P_0} \left( \frac{T_0}{T} \right)^{0.7} [0.07C_{\text{CO}_2} + 0.058(1 - C_{\text{CO}_2} - C_{\text{H}_2\text{O}}) + 0.1C_{\text{H}_2\text{O}}] \\ \bar{\gamma}_{\text{H}_2\text{O}} &= \frac{P}{P_0} \left\{ 0.462C_{\text{H}_2\text{O}} \left( \frac{T_0}{T} \right) + \left( \frac{T_0}{T} \right)^{0.5} \left[ 0.079(1 - C_{\text{CO}_2} - C_{\text{O}_2}) + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. 0.106C_{\text{CO}_2} + 0.036C_{\text{O}_2} \right] \right\} \\ \bar{\gamma}_{\text{CO}} &= \frac{P}{P_0} \left\{ 0.075C_{\text{CO}_2} \left( \frac{T_0}{T} \right)^{0.6} + 0.12C_{\text{H}_2\text{O}} \left( \frac{T_0}{T} \right)^{0.82} + \right. \\ &\quad \left. 0.06 \left( \frac{T_0}{T} \right)^{0.7} (1 - C_{\text{CO}_2} - C_{\text{O}_2}) \right\} \end{aligned}$$

谱带的平均吸收系数  $\bar{k}$  可采用谱线参数数值平均法<sup>[17]</sup>计算得到:

$$\bar{k} = \frac{1}{\Delta\eta} \sum_{i=1}^N S_i \quad (3)$$

式中: $N$  为谱带区间内谱线的总数; $\Delta\eta$  为谱带区间的波数间隔; $S_i$  为谱带中第  $i$  条谱线的积分线强,可根据 HITEMP2010 中提供的标准状态下的线强  $S_{\eta,M}(P_0, T_0)$  按照下式计算得到:

$$\begin{aligned} S_{\eta}(P, T) &= N(P_0, T_0) S_{\eta,M}(P_0, T_0) \frac{T_0}{T} \frac{P}{P_0} \frac{Q(T_0)}{Q(T)} \\ &\quad \exp \left[ -\frac{hc}{k} E_i \left( \frac{T_0 - T}{T_0 T} \right) \right] \frac{1 - e^{-hc\eta/kT}}{1 - e^{-hc\eta/kT_0}} \end{aligned}$$

谱线平均间距  $\bar{d}$  通常有两种,一是谱线参数数值平均法,该方法是以满足弱线近似和强线近似两种极端情况为依据进行推导的,在计算光学厚或光学薄的气体透过率时比较准确,但对于中等光学厚度的气体计算会产生较大的误差;二是最小二乘法拟合增长曲线方法<sup>[14]</sup>,增长曲线是由多种光学厚度下的逐线计算结果构成,该法可利用高精度的逐线结果来改善窄谱带模型的准确度,克服了以往谱带模型参数确定方法的缺点。

由公式(2)可知,在给定的计算条件(压强、温度、组分浓度等)下,当  $\bar{\gamma}$  和  $\bar{k}$  确定后,谱带平均透过率  $\bar{\tau}_n$  可表示为以  $X$  自变量以  $\bar{d}$  为系数的函数。为了确定

系数 $\bar{d}$ 的大小,可在计算谱带区间内采用逐线计算构造 $\bar{\tau}_\eta$ 随 $X$ 变化的离散序列点 $\{[X_1, \bar{\tau}_\eta(X_1)], [X_2, \bar{\tau}_\eta(X_2)] \dots [X_n, \bar{\tau}_\eta(X_n)]\}$ ,然后根据这些离散点采用最小二乘法拟合公式来获得最优的系数 $\bar{d}$ ,该方法可利用高精度的逐线计算结果来提高 Malkmus 模型的精度。

### 3 比较与验证

为验证 Malkmus 统计窄谱带模型参数计算方法的正确性,对不同气体在不同工况下的红外光谱特性进行计算,并与文献中的实验数据进行对比。

#### 3.1 均匀单组分光谱辐射特性计算

分别以  $\text{CO}_2$  和  $\text{H}_2\text{O}$  为对象,采用 Malkmus 模型计算了均匀路径多种工况下的光谱辐射特性,并利用参考文献[14]的测量结果进行了验证。

##### 3.1.1 $\text{CO}_2$ 在 $2.7 \mu\text{m}$ 带光谱发射率

图 5 给出了压力  $P=101\ 325 \text{ Pa}$ , 温度  $T=1\ 200 \text{ K}$ , 组分浓度  $X_{\text{CO}_2}=41.7\%$ , 路径长度  $L=3.12 \text{ cm}$  条件下均匀单组分  $\text{CO}_2$  在  $2.7 \mu\text{m}$  带光谱发射率的计算和实验结果对比,波数范围为  $3\ 300\sim 3\ 800 \text{ cm}^{-1}$ 。

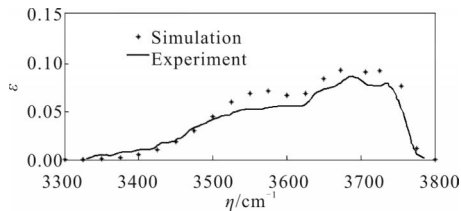


图 5  $\text{CO}_2$  在  $2.7 \mu\text{m}$  带光谱发射率计算与实验对比

Fig.5 Comparison of spectral emittance of  $\text{CO}_2$  at  $2.7 \mu\text{m}$  simulation by Malkmus model to the experiment

##### 3.1.2 $\text{CO}_2$ 在 $4.3 \mu\text{m}$ 带光谱透过率

图 6 给出了  $P=101\ 325 \text{ Pa}$ ,  $T=600 \text{ K}$ ,  $X_{\text{CO}_2}=1\%$ ,  $L=10 \text{ cm}$  条件下均匀单组分  $\text{CO}_2$  在  $4.3 \mu\text{m}$  带光谱透过率的计算和实验结果对比,波数范围为  $2\ 100\sim 2\ 600 \text{ cm}^{-1}$ 。

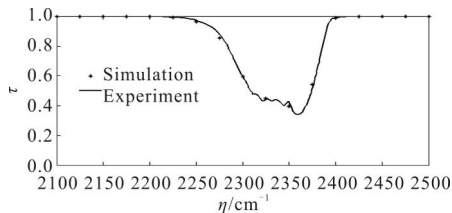


图 6  $\text{CO}_2$  在  $4.3 \mu\text{m}$  带光谱透过率计算与实验对比

Fig.6 Comparison of spectral transmittance of  $\text{CO}_2$  at  $4.3 \mu\text{m}$  simulation by Malkmus model to the experiment

##### 3.1.3 $\text{H}_2\text{O}$ 在 $1.8 \mu\text{m}$ 带光谱发射率

图 7 给出了  $P=101\ 325 \text{ Pa}$ ,  $T=900 \text{ K}$ ,  $X_{\text{H}_2\text{O}}=100\%$ ,  $L=7.75 \text{ cm}$  条件下均匀单组分  $\text{H}_2\text{O}$  在  $1.8 \mu\text{m}$  带光谱发射率的计算和实验结果对比,波数范围为  $4\ 600\sim 6\ 000 \text{ cm}^{-1}$ 。

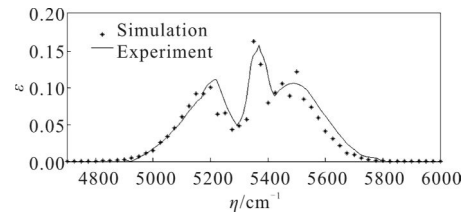


图 7  $\text{H}_2\text{O}$  在  $1.8 \mu\text{m}$  带光谱发射率计算与实验对比

Fig.7 Comparison of spectral emittance of  $\text{H}_2\text{O}$  at  $1.8 \mu\text{m}$  simulation by Malkmus model to the experiment

##### 3.1.4 $\text{H}_2\text{O}$ 在 $2.7 \mu\text{m}$ 带光谱发射率

图 8 给出了  $P=99\ 320 \text{ Pa}$ ,  $T=1\ 273 \text{ K}$ ,  $X_{\text{H}_2\text{O}}=62.1\%$ ,  $L=12.718 \text{ cm}$  条件下均匀单组分  $\text{H}_2\text{O}$  在  $2.7 \mu\text{m}$  带光谱发射率的计算和实验结果对比,波数范围为  $2\ 500\sim 4\ 600 \text{ cm}^{-1}$ 。

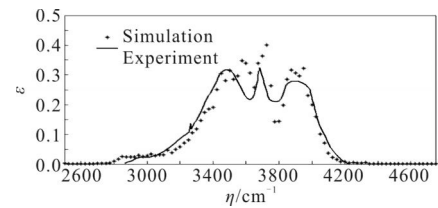


图 8  $\text{H}_2\text{O}$  在  $2.7 \mu\text{m}$  带光谱发射率计算与实验对比

Fig.8 Comparison of spectral emittance of  $\text{H}_2\text{O}$  at  $2.7 \mu\text{m}$  simulation by Malkmus model to the experiment

##### 3.1.5 $\text{H}_2\text{O}$ 在 $6.3 \mu\text{m}$ 带光谱发射率

图 9 给出了  $P=202\ 650 \text{ Pa}$ ,  $T=555 \text{ K}$ ,  $X_{\text{H}_2\text{O}}=100\%$ ,  $L=38.6 \text{ cm}$  条件下均匀单组分  $\text{H}_2\text{O}$  在  $6.3 \mu\text{m}$  带光谱发射率的计算和实验结果对比,波数范围为  $1\ 000\sim 2\ 800 \text{ cm}^{-1}$ 。

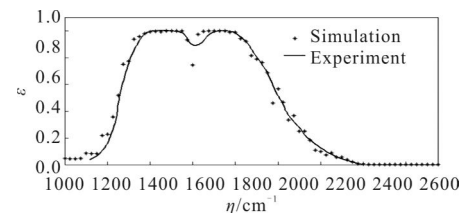


图 9  $\text{H}_2\text{O}$  在  $6.3 \mu\text{m}$  带光谱发射率计算与实验对比

Fig.9 Comparison of spectral emittance of  $\text{H}_2\text{O}$  at  $6.3 \mu\text{m}$  simulation by Malkmus model to the experiment

### 3.2 非均匀单组分光谱辐射亮度

#### 3.2.1 CO<sub>2</sub> 在 2.7 μm 带光谱辐射亮度

图 10 给出了压力  $P=101\ 325\ \text{Pa}$ , 组分浓度  $X_{\text{CO}_2}=41.7\%$ , 路径总长  $L=60\ \text{cm}$ , 非等温, 但分段路径均为  $6\ \text{cm}$ , 每段内的温度均匀且依次为  $368$ 、 $528$ 、 $719$ 、 $953$ 、 $1130$ 、 $1160$ 、 $979$ 、 $737$ 、 $541$ 、 $387\ \text{K}$  的条件下非均匀单组分 CO<sub>2</sub> 在  $2.7\ \mu\text{m}$  带光谱辐射亮度的计算和实验结果对比, 波数范围为  $3\ 200\sim 3\ 900\ \text{cm}^{-1}$ 。

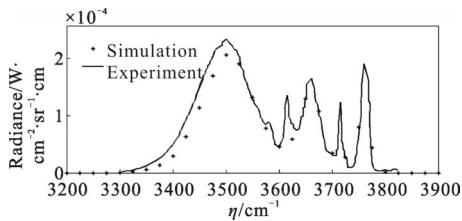


图 10 非均匀 CO<sub>2</sub> 在  $2.7\ \mu\text{m}$  带光谱辐射亮度计算与实验对比  
Fig. 10 Inhomogeneous test: comparison of spectral radiance of CO<sub>2</sub> at  $2.7\ \mu\text{m}$  simulation by Malkmus model to the experiment

#### 3.2.2 H<sub>2</sub>O 在 $2.7\ \mu\text{m}$ 带光谱辐射亮度

图 11 给出了压力  $P=92\ 259\ \text{Pa}$ , 组分浓度  $X_{\text{H}_2\text{O}}=100\%$ , 路径总长  $L=60\ \text{cm}$ , 非等温, 但分段路径均为  $6\ \text{cm}$ , 每段内的温度均匀且依次为  $392$ 、 $513$ 、 $593$ 、 $671$ 、 $745$ 、 $835$ 、 $918$ 、 $993$ 、 $1\ 059$ 、 $1\ 152\ \text{K}$  的条件下非均匀单组分 H<sub>2</sub>O 在  $2.7\ \mu\text{m}$  带光谱辐射亮度的计算和实验结果对比, 波数范围为  $3\ 000\sim 4\ 400\ \text{cm}^{-1}$ 。

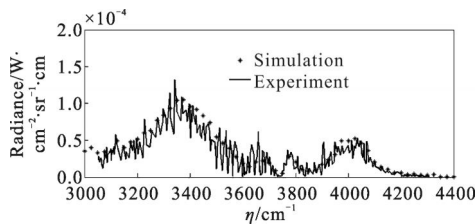


图 11 非均匀 H<sub>2</sub>O 在  $2.7\ \mu\text{m}$  带光谱辐射亮度计算与实验对比  
Fig. 11 Inhomogeneous test: comparison of spectral radiance of H<sub>2</sub>O at  $2.7\ \mu\text{m}$  simulation by Malkmus model to the experiment

### 3.3 非均匀多组分光谱辐射亮度

图 12 给出了压力  $P=100\ 925\ \text{Pa}$ ,  $P_{\text{H}_2\text{O}}=3\ 733\ \text{Pa}$ ,  $X_{\text{CO}_2}=3\ 733\ \text{Pa}$ ,  $P_{\text{N}_2}=3\ 733\ \text{Pa}$ , 组分浓度  $X_{\text{H}_2\text{O}}=100\%$ , 路径总长  $L=60\ \text{cm}$ , 非等温, 但分段路径均为  $6\ \text{cm}$ , 每段内的温度均匀且依次为  $378$ 、 $537$ 、 $723$ 、 $958$ 、 $1\ 127$ 、

$1\ 158$ 、 $990$ 、 $752$ 、 $555$ 、 $383\ \text{K}$  的条件下非均匀 CO<sub>2</sub>、H<sub>2</sub>O、N<sub>2</sub> 混合气体在  $3\ 000\sim 4\ 400\ \text{cm}^{-1}$  波数范围内光谱辐射亮度的计算和实验结果对比。

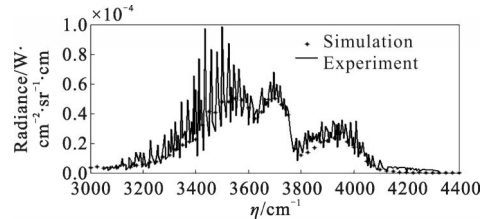


图 12 非均匀混合气体  $2.7\ \mu\text{m}$  光谱辐射亮度计算与实验对比  
Fig. 12 Inhomogeneous test: comparison of spectral radiance of H<sub>2</sub>O at  $2.7\ \mu\text{m}$  simulation by Malkmus model to the experiment

## 4 结论

文中研究结论主要有:

(1) 分别调用 HITRAN2008 和 HITEMP2010 得到了 CO<sub>2</sub> 在不同条件下光谱透过率的逐线计算结果, 通过与试验值比较说明: 对于高温燃气红外辐射特性计算, 采用 HITEMP2010 能够获得更为精确的结果。

(2) 通过采用 Malkmus 统计窄谱带模型对均匀单组分光谱发射率、非均匀单组分光谱辐射亮度、非均匀多组分光谱辐射亮度进行计算研究, 计算结果与文献中的实验数据吻合较好, 验证了文中提出的 Malkmus 统计窄谱带模型参数计算方法与程序的正确性。

(3) 文中提出的基于 HITEMP2010 的 Malkmus 统计窄谱带模型参数库构建方法是一种精度很高的高温气体辐射特性计算方法, 其波数区间、波数间隔、温度区间、温度间隔等参数可任意设置, 从而能够满足不同场合和精度的需求, 对于提高发动机喷流等高温燃气辐射特性的求解精度具有重要的工程应用价值。

## 参考文献:

- [1] Chen Shiguo, Jiang Yong, Fang Haobai, et al. IR radiation imaging test, process and evaluation of jet aeroengine [J]. *Infrared and Laser Engineering*, 2014, 43(3): 727-731. (in Chinese)
- [2] Zhou Jinwei, Shi Zhiguang, Li Jicheng. K-distribution algorithm for NO equivalent band width [J]. *Infrared and Laser Engineering*, 2015, 44(2): 432-437. (in Chinese)

- [3] An Yongquan, Wang Zhibin, Li Jinghua, et al. Research on single station passive ranging based on O<sub>2</sub> absorption characteristics [J]. *Infrared and Laser Engineering*, 2015, 44(1): 310–316. (in Chinese)
- [4] Yan Zongqun, Liu Bingqi, Hua Wenshen, et al. Application of CKD method to passive ranging by oxygen absorption [J]. *Optics and Precision Engineering*, 2015, 23(3): 667–677. (in Chinese)
- [5] Modest M F. Radiative Heat Transfer [M]. 2nd ed. New York: Academic Press, 2003.
- [6] Chetwynd J H, Wang J, Anderson P G. Fast atmospheric signature CODE (FASCODE): an update and applications in atmospheric remote sensing[C]//SPIE, 1994, 2266: 613–623.
- [7] Berk A, Anderson G P, Bernstein L S, et al. MODTRAN4 radiative transfer modeling for atmospheric correction [C]//SPIE, 1999, 3756: 348–353.
- [8] Soufiani A, Taine J. High temperature gas radiative property parameters of statistical narrow band model for H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub>, and CO, and correlated-k model for H<sub>2</sub>O and CO<sub>2</sub> [J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 1997, 40(4): 987–991.
- [9] Ludwig C B. Handbook of infrared radiation from combustion gases [R]. NASA SP-3080, 1973.
- [10] Rothman L S, Gordon I E, Barbe A, et al. The HITRAN08 molecular spectroscopic database [J]. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 2009, 110(9–10): 533–572.
- [11] Rothman L S, Gordon I E, Barbe A, et al. HITEMP, the high-temperature molecular spectroscopic database[J]. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 2010, 111(15): 2139–2150.
- [12] Mei Fei, Jiang Yong, Chen Shiguo, et al. Experimental verification for line by line prediction model of gas absorption[J]. *Acta Optica Sinica*, 2012, 32(3): 0330002–1–0330002–8. (in Chinese)
- [13] Modest M F, Bharadwaj S P. Medium resolution transmittance experiments of CO<sub>2</sub> at high temperature [J]. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 2002, 73(2–5): 329–338.
- [14] Modest M F, Bharadwaj S P. Medium resolution transmission experiments of CO<sub>2</sub> at high temperature –an update [J]. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 2007, 103(1): 146–155.
- [15] Soufiani A, Hartmann M, Taine J. Validity of band-model calculations for CO<sub>2</sub> and H<sub>2</sub>O applied to radiative properties and conductive-radiative transfer[J]. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 1985, 33(3): 243–257.
- [16] Riviere P H. An approximate data base of H<sub>2</sub>O infrared lines for high temperature applications at low resolution, statistical narrow band model parameters [J]. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 1995, 53(2): 221–234.
- [17] Mei Fei. Prediction of radiation for high temperature gas and exhaust plume [D]. Xi'an: Air Force Engineering University, 2012. (in Chinese)