

气体高温辐射特性窄谱带模型参数库构建

蔡红华, 聂万胜, 吴睿, 苏凌宇, 侯志勇

(装备学院 航天装备系, 北京 101416)

摘要: 不同推进剂火箭发动机尾焰中主要辐射气体组分不同, 采用谱带模型法精确快速求解不同推进剂火箭发动机尾焰红外辐射特性, 需要构建描述气体辐射特性的谱带参数数据库。提出了一种谱带参数库构建方法并开发了计算程序, 以 HITEMP2010 数据库为基础构建了波数间隔 5 cm^{-1} 、温度间隔 100 K 的 CO_2 和 H_2O 谱带模型参数库, 通过与实验测量对比吸收系数分布特性、与逐线计算法对比透过率分布特性验证了所提出模型和开发程序的准确性; 在此基础上, 分别以 HITEMP2010 和 HITRAN2012 数据库为基础构建了辐射气体 CO 、 OH 、 NO 和 NO_2 的谱带模型参数数据库, 并结合逐线计算法对比分析了不同温度下、不同光学行程下透过率分布特性。

关键词: 红外辐射特性; 谱带模型参数; 光谱数据库; HITEMP2010; HITRAN2012

中图分类号: TN21;O433 **文献标志码:** A **DOI:** 10.3788/IRLA201746.0704001

Establishment of narrow spectral band model parameters database for gas high temperature radiation characteristics

Cai Honghua, Nie Wansheng, Wu Rui, Su Lingyu, Hou Zhiyong

(Department of Aerospace Equipment, The Academy of Equipment, Beijing 101416, China)

Abstract: The main radiation gas components are completely different in different propellant rocket engine exhaust plume, the gas spectral parameter database need to be built to quickly and accurately solve the infrared radiation characteristics of different propellant rocket exhaust plume using the spectral band model. A method of constructing the gas spectral parameter database and the program were proposed, based on the method and HITEMP2010, CO_2 and H_2O spectral parameter databases were established with the wave number interval 5 cm^{-1} and the temperature interval 100 K ; the model and the program were verified to be correct through comparing the calculated absorption coefficient distribution with the experimental measurements and comparing the calculated transmittance distribution with that calculated using the line-by-line method. Based on that, CO , OH , NO and NO_2 spectral parameter databases were established based on HITEMP2010 and HITRAN 2012, and the transmittance distributions on different temperatures and different optical strokes were comparatively analyzed combined with the line-by-line method.

Key words: infrared radiation characteristics; band model parameters; spectroscopic database; HITEMP2010; HITRAN2012

收稿日期: 2016-11-09; 修订日期: 2016-12-08

基金项目: 国家自然科学基金(91441123)

作者简介: 蔡红华(1988-), 男, 博士生, 主要从事发动机尾焰冲击与红外辐射特性方面的研究。Email: honghuacai@aliyun.com

导师简介: 聂万胜(1969-), 男, 教授, 博士生导师, 博士, 主要从事航天推进与流动控制方面的研究。Email: nws1969@126.com

0 引言

由于火箭发动机尾焰红外辐射特性研究具有重要的军事意义,早在 20 世纪 50~60 年代,美国和前苏联等国家就开展了针对导弹尾焰辐射特性的研究^[1]。国内相对起步较晚,于 20 世纪末许多科研人员开始开展大量的相关研究并取得了有意义的成果^[2-3]。纯气相尾焰红外辐射计算方法主要有逐线算法、谱带模型法和总体模型法,逐线计算方法具有计算精度高、但计算复杂且效率较低的特点,常被用以验证其他方法模型的准确性和对特定气体在特定谱段下的研究^[4];总体模型法由于计算精度低主要应用在对多种高温气体进行全谱带辐射特性研究方面^[5];谱带模型法与 CG 近似及 LS 近似结合在研究发动机尾焰红外辐射强度以及大气的红外辐射传输计算方面得到了广泛应用,而利用谱带模型法计算气体辐射特性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^[6]。

董士奎等人针对燃烧产物主要辐射气体 CO₂^[7]和 H₂O^[8],根据 Young 的非等温窄谱带模型理论建立了谱带模型参数库;陈世国等人^[9]针对航空发动机尾焰中主要辐射气体 H₂O、CO₂ 和 CO,提出了基于 Malkmus 模型计算谱带模型参数的方法,谱带内平均谱线半宽采用经验公式^[10]进行计算得到。由于不同推进剂类型的火箭发动机尾焰中主要红外辐射气体成分不同,进而导致发动机尾焰红外辐射特性不同,如氢氧发动机尾焰中主要辐射气体为 H₂O^[11],固体火箭发动机尾焰中主要辐射气体为 H₂O 和 CO₂^[12],液氧/煤油发动机尾焰中主要辐射气体为 H₂O、CO₂、CO 和 OH^[13],M. B. Garrison 研究 CO₂、H₂O 和烟颗粒的红外辐射特性时考虑了 CO、OH 和 NO 的影响^[14]。因此,为了对比研究不同推进剂火箭发动机尾焰红外辐射特性,需要建立准确的、包含多种辐射气体的谱带模型参数库。

文中首先提出了一种适用于多种高温气体的谱带模型参数库构建方法,采用一种新的快速准确的配分函数计算模型进行谱线积分强度计算,基于最

新版高分辨率高温燃气光谱数据库 HITEMP2010 和高分辨率大气分子光谱参数数据库 HITRAN2012,构建了 CO₂、H₂O、CO、OH、NO 和 NO₂ 共 6 种辐射气体的波数范围 2 000~5 000 cm⁻¹(间隔 5 cm⁻¹)、温度范围 300~3 000 K(间隔 100 K)的谱带模型参数库;然后分别计算了不同气体在不同温度下、不同光学路径长度下的透过率,并将计算结果与实验数据、逐线计算值进行对比,验证了计算方法和开发程序的准确性。

1 理论方法

1.1 谱带模型参数计算方法

HITEMP 和 HITRAN 数据库仅提供了在标准状态下($P_0=1.013\ 25\times 10^5$ Pa, $T_0=296$ K)的谱线参数,其他温度和压力下的参数通过理论外推获得^[6]。要采用谱带模型(如 SLG 模型和 Malkmus 模型)计算气体辐射参数,建立谱带模型参数数据库是计算的基础,数据库包括谱带模型计算时使用的等效谱线参数,即平均吸收系数、平均谱线间距和平均谱线半宽。

Young^[15]提出的非等温窄带模型理论适用于在已知详细的谱线光谱参数数据情况下计算谱带模型参数,并且该算法简单可靠,因此文中采用该算法以 HITEMP 数据库为基础计算谱带模型参数,平均吸收系数 \bar{k} 、平均谱线间距 \bar{d} 和平均谱线半宽 $\bar{\gamma}$ 的计算公式如下:

$$\bar{k} = \frac{1}{\Delta w} \sum_{m=1}^M S_{w,m} \quad (1)$$

$$\bar{\gamma} = \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M \gamma_m \quad (2)$$

$$\frac{1}{\bar{d}} = \left(\frac{1}{\Delta w} \sum_{m=1}^M \sqrt{S_{w,m} \gamma_m} \right)^2 / \bar{k} \cdot \bar{\gamma} \quad (3)$$

式中: $S_{w,m}$ 为 Δw 内第 m 条谱线积分强度; γ_m 为 Δw 内谱线的半宽; M 为 Δw 内谱线总数。HITEMP 数据库中给出的 $S_{w,m}$ 、 γ_m 均为标准态 (1.013 25×10⁵ Pa, 296 K)下的参数,其他压力、温度下需经合理的外推。由原子、分子辐射理论,对单个原子、分子的谱线积分强度仅与温度有关。

$$S'(T) = \frac{8\pi^3 10^{-36} I_a w_0 \exp\left[-\frac{G_V'' + E_R''}{kT}\right] \left[1 - \exp\left[-\frac{hcw_0}{kT}\right]\right] |R_V|^2 L(J'', 1) F(J'')}{3hc g_V Q_V(T) Q_R(T)} \quad (4)$$

式中： h 为 Planck 常数， $h=6.626\ 2\times 10^{-30}\text{ kg}\cdot\text{cm}^2/\text{s}$ ； c 为光速， $c=2.9979\times 10^{10}\text{ cm/s}$ ； I_a 为同位素丰度； w_0 为谱线位置， cm^{-1} ； E_R'' 为低态转动能， $G_V''+E_R''=Ehc$ ， E 为 HITEMP 数据库中给出的低位跃迁能级； k 为 Boltzmann 常数， $k=1.380\ 7\times 10^{-19}\text{ kg}\cdot\text{cm}^2/(\text{s}^2\cdot\text{K})$ ； g_j

为统计权重； $|R_V|^2$ 为振动态跃迁矩阵元； $L(J'', 1)$ 为 Hnl-London 因子； G_V'' 为振动谱项(能量)， $Q_V(T)$ 、 $Q_R(T)$ 分别为振动、转动配分函数； $F(J'')$ 为 Heman-Wallis 因子，由此可得标准状态下的谱线强度值：

$$S'(T_0)=\frac{8\pi^3 10^{-36} I_a w_0 \exp\left[-\frac{G_V''+E_R''}{kT}\right] \left[1-\exp\left[-\frac{hcw_0}{kT}\right]\right] |R_V|^2 L(J'', 1) F(J'')}{3hcg_j Q_V(T_0) Q_R(T_0)} \quad (5)$$

公式(4)、(5)中的跃迁矩阵元项 $|R_V|^2 L(J'', 1) F(J'')$ 只与能态(频率、波长)相关，与温度无关。设计算区间气体可按理想气体处理，气体的分子数密度是温

度和压力的函数 $N(P, T)=NL(T_0/T)(P/P_0)$ ，将公式(4)除以公式(5)，可得其他温度压力下强度表达式：

$$S(T)=S'(T_0)NT\left[\frac{T_0}{T}\right]\left[\frac{P}{P_0}\right]\frac{Q_V(T_0)Q_R(T_0)}{Q_V(T)Q_R(T)}\exp\left[-\frac{E''}{k}\left[\frac{1}{T}-\frac{1}{T_0}\right]\right]\times\frac{1-\exp(-hcw_0/kT)}{1-\exp(-hcw_0/kT_0)} \quad (6)$$

式中： NT 为标准态下单位体积 (cm^3) 内的分子数， $NT=2.479\times 10^{19}$ 。

配分函数 $Q(T)=Q_R(T)Q_V(T)$ 采用参考文献[16]提出的三阶多项式计算方法：

$$Q(T)=a+bT+cT^2+dT^3 \quad (7)$$

式中： T 为温度；多项式系数 a 、 b 、 c 和 d 具体取值在参考文献[16]中查阅。

1.2 平均透过率计算方法

Malkmus 统计窄谱带模型计算某一中心波数为 η 的谱带平均透过率 $\bar{\tau}_n$ 公式为^[3]：

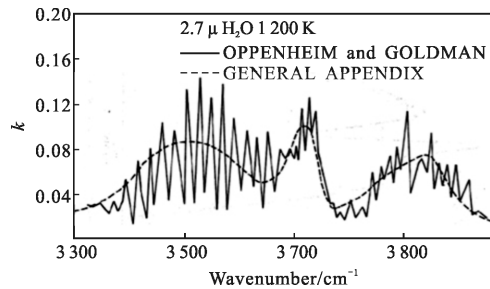
$$\bar{\tau}_n(X)=\exp\left\{-2\frac{\bar{\gamma}}{d}\left[\left(1+Xk\frac{\bar{d}}{\gamma}\right)^{\frac{1}{2}}-1\right]\right\} \quad (8)$$

式中： $X=X_{\text{mol}}PL$ 为换算到标准状态下的组分压力光学行程； X_{mol} 为计算组分的摩尔分数； P 为计算压强； L 为行程长度。

2 验证和分析

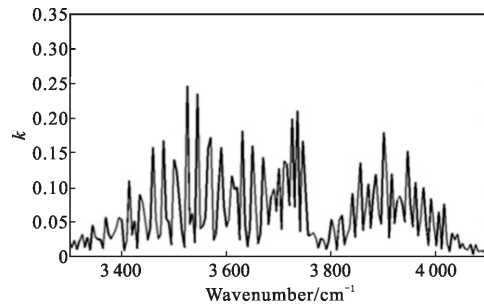
2.1 气体 H₂O

图 1(a)是参考文献[17]中实验测量得到 H₂O 在 1 200 K、2.7 μm 波段内吸收系数，基于 HITEMP2010 数据库建立 H₂O 谱带模型参数库，图 1(b)是 H₂O 数据库中 1 200 K、2.7 μm 波段内的吸收系数分布，与实验结果吻合得非常好，充分验证了文中采用计算模型和程序的准确性。



(a) 实验结果

(a) Experimental result



(b) 文中计算结果

(b) Calculation result in this paper

图 1 H₂O 在 2.7 μm 吸收系数时计算与实验结果对比

Fig.1 Absorption coefficient comparison between calculation and experiment result for water at 2.7 μm

基于建立的 H₂O 谱带模型参数库，计算得到大气压力环境($P=1\text{ atm}=101\ 325\text{ Pa}$)下、不同温度(300、1 200 K)和不同光学行程长度(20、200、2 000 cm)时平均透过率，并与采用逐线计算法计算结果进行对比如图 2 所示，H₂O 在 2.0 μm 和 2.7 μm 波段的辐射吸

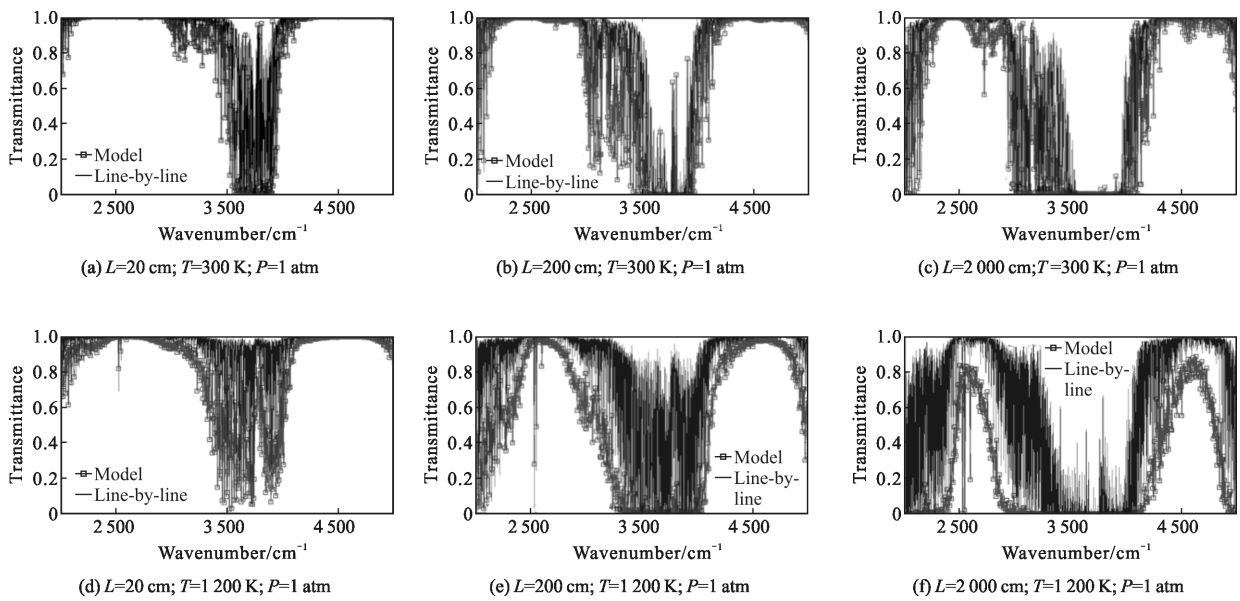


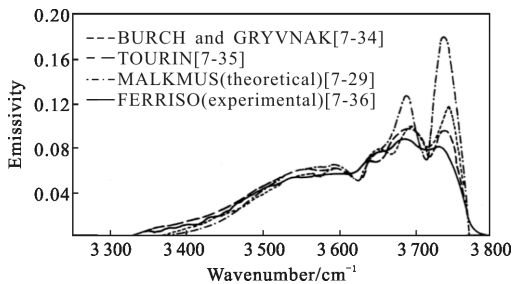
图 2 H₂O 在 2~5 μm 的平均透过率

Fig.2 Average transmittance of water in 2~5 μm

收能力强，并且辐射吸收带宽随着光学行程和温度的增大而增大。

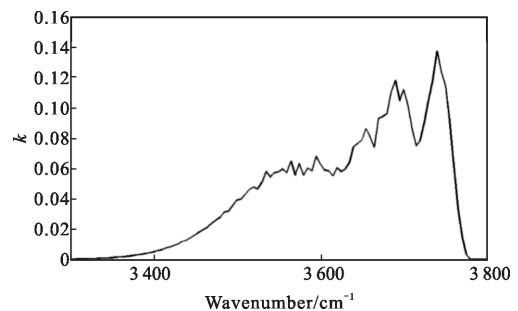
2.2 气体 CO₂

图 3(a)是实验测量得到 CO₂ 在 1 200 K、2.7 μm 波段内的吸收系数，基于HITEMP2010 数据库建立 CO₂ 谱带模型参数,图 3(b)是 CO₂ 数据库中 1 200 K、2.7 μm 波段内的吸收系数分布,吻合得非常好。



(a) 实验结果

(a) Experimental result



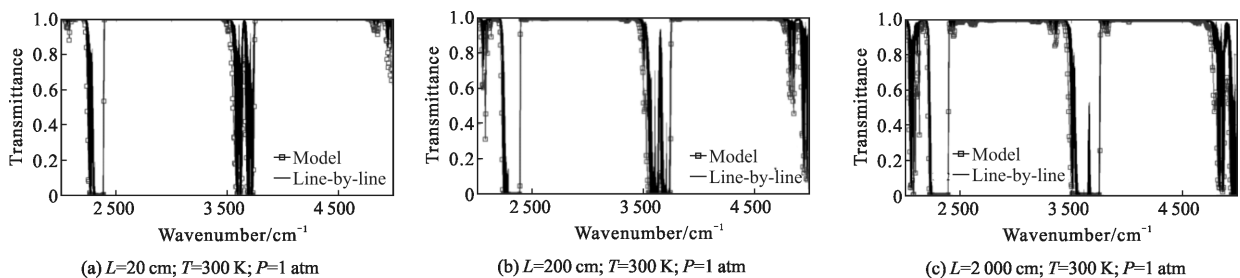
(b) 文中计算结果

(b) Calculation result in this paper

图 3 CO₂ 在 2.7 μm 时吸收系数计算与实验结果对比

Fig.3 Absorption coefficient comparison between calculation and experiment result for carbon dioxide at 2.7 μm

基于建立的 CO₂ 谱带模型参数库，计算得到大气压力环境下、不同温度、光学行程长度时的平均透过率,图 4 示出与采用逐线计算法计算结果的对比，



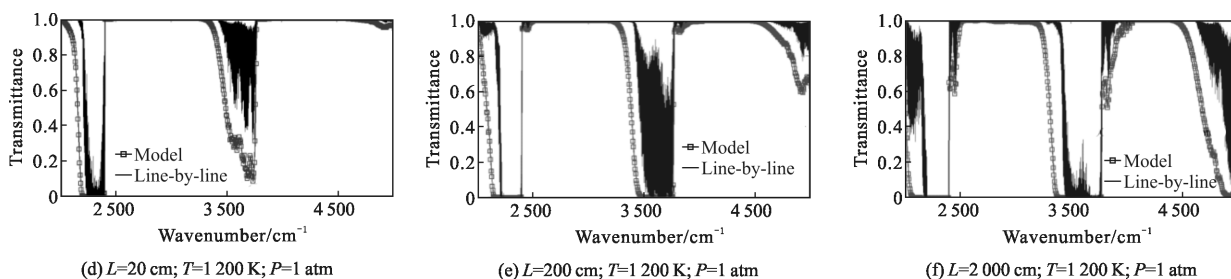


图 4 CO₂ 在 2~5 μm 的平均透过率

Fig.4 Average transmittance of carbon dioxide in 2~5 μm

CO₂ 在 2.0、2.7、4.3 μm 波段的辐射吸收能力强, 尤其是在 2.0 μm 波段的辐射吸收能力随着光学行程和温度的增大逐渐增强; 且 CO₂ 辐射吸收带宽亦随着温度和光学行程的增大而增大。

2.3 气体 CO

基于 HITEMP2010 数据库建立 CO 谱带模型参

数库, 基于建立的 CO 参数库计算得到大气压力环境下、不同温度和不同光学行程长度时的平均透过率, 并与采用逐线计算法计算结果进行对比如图 5 所示, 透过率分布结果表明 CO 在 2.35 μm 和 4.7 μm 波段具有很强的辐射吸收能力, 尤其是在 2.35 μm 波段的辐射吸收能力随着光学行程和温度的增大而

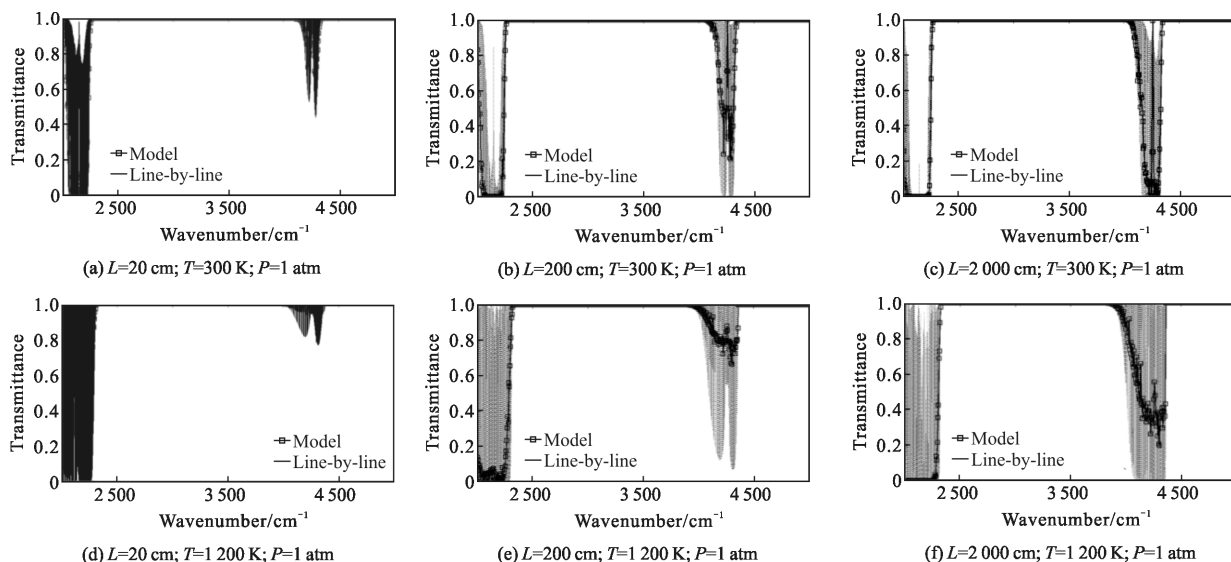


图 5 CO 在 2~5 μm 的平均透过率

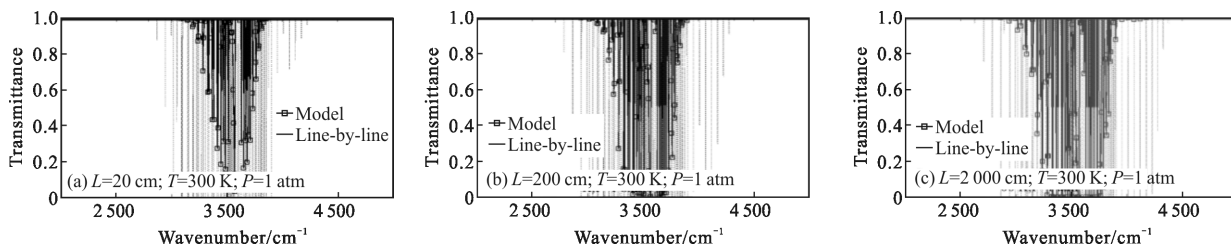
Fig.5 Average transmittance of carbon monoxide in 2~5 μm

增大; 且 CO 辐射吸收带宽亦随着温度和光学行程的增大而增大。

2.4 气体 OH

基于 HITEMP2010 数据库建立 OH 谱带模型参数库, 基于建立的 OH 参数库计算得到大气压力环

境下、不同温度和不同光学行程长度时的平均透过率, 并与采用逐线计算法的计算结果进行对比, 如图 6 所示, OH 在 2.8 μm 波段辐射吸收能力强, 并且在这个波段的吸收带宽比较大, 与其他辐射性气体相比吸收系数变化没有那么尖锐; 且 OH 辐射吸收



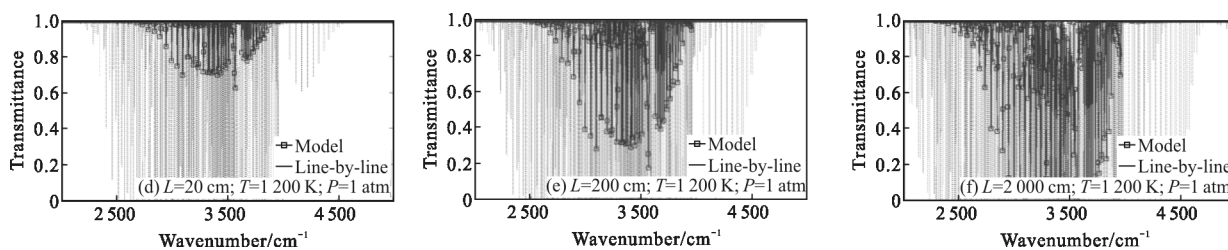


图 6 OH 在 2~5 μm 的平均透过率

Fig.6 Average transmittance of hydroxyl in 2-5 μm

带宽亦随着温度和光学行程的增大而增大。

2.5 气体 NO

基于 HITEMP2010 数据库建立 NO 谱带模型参数库，基于建立的 NO 参数库计算得到大气压力环

境下、不同温度和不同光学行程长度时的平均透过率，并与采用逐线计算法的计算结果进行对比，如图 7 所示，在 5.0 μm 波段和 2.7 μm 波段强度较大，说明 NO 在该波段范围辐射吸收能力强，尤其是在 5.0 μm

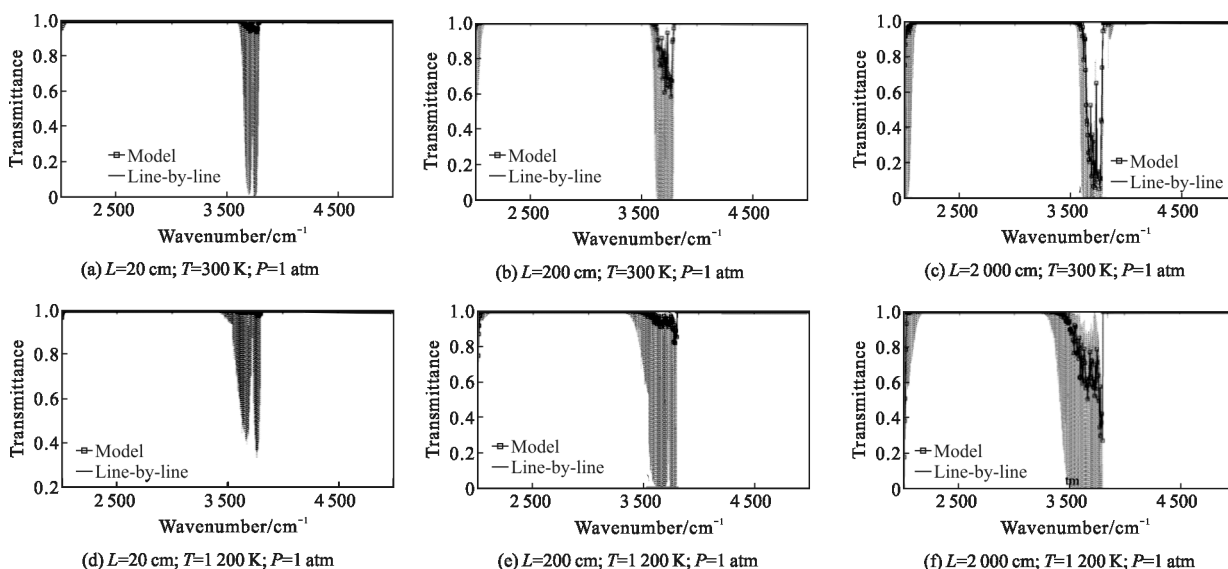


图 7 NO 在 2~5 μm 的平均透过率

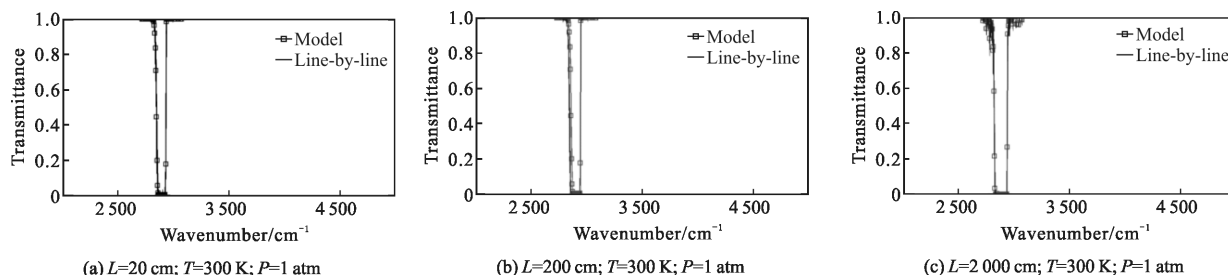
Fig.7 Average transmittance of nitric oxide in 2-5 μm

波段的辐射吸收能力随着光学行程和温度的增大而增大；且 NO 辐射吸收带宽亦随着温度和光学行程的增大而增大。

2.6 气体 NO₂

由于 HITEMP 数据库中仅含有 CO₂、H₂O、CO、OH 和 NO₅ 中辐射气体谱线参数，因此基于 HITRAN2012

数据库建立 NO₂ 谱带模型参数库，基于建立的 NO₂ 参数库计算得到大气压力环境下、不同温度和不同光学行程长度时平均透过率，并与采用逐线计算法计算结果进行对比如图 8 所示，在 3.8 μm 波段强度较大，说明 NO₂ 在该波段辐射吸收能力强；且 NO₂ 辐射吸收带宽亦随着温度和光学行程的增大而增大。



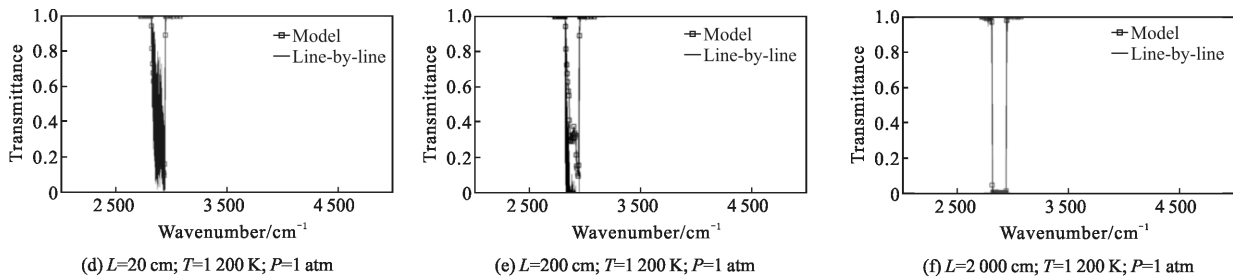


图 8 NO₂ 在 2~5 μm 的平均透过率

Fig.8 Average transmittance of nitrogen dioxide in 2~5 μm

3 结论

综上所述,得出以下结论:

(1) 基于 HITEMP2010 构建了 H₂O 和 CO₂ 谱带模型参数库,并将计算得到的 H₂O 和 CO₂ 吸收系数分布与实验测量值进行对比,验证了文中计算模型与程序的准确性;基于建立参数库采用 Malkmus 方法计算了 H₂O 和 CO₂ 在不同温度、不同光学行程下的透过率,并与采用逐线计算法进行了对比分析。

(2) 基于 HITEMP2010 和 HITRAN2012 分别构建了 CO、OH、NO 和 NO₂ 谱带模型参数库,基于建立数据库采用 Malkmus 方法计算了在不同温度、不同光学行程下的透过率,并与采用逐线计算法得到结果进行了对比分析,辐射气体的辐射带宽随着温度和光学行程的增大逐渐增宽,并且部分辐射气体在某波段的辐射能力在高温时更加凸显。

(3) 提出的基于 HITEMP2010 和 HITRAN2012 的谱带模型参数库构建方法在计算高温气体辐射特性时精度很高,可以根据实际需求对数据库的温度区间及间隔、波数区间及间隔等进行任意设置,并且该方法能够适用于多种不同气体辐射参数库构建,从而满足不同推进剂发动机尾焰燃气红外辐射特性的研究。

参考文献:

[1] Morizumi S J, Carpenter M J. Thermal radiation from the exhaust plume of an aluminized composite propellant rocket [J]. *Journal of Spacecraft and Rocket*, 1964, 1(4): 501-507.
 [2] Xu Nanrong. Numerical computation on infrared plume radiation [J]. *Acta Aerospace et Astronautica Sinica*, 1995, 16(6): 647-653. (in Chinese)
 徐南荣. 喷气流红外辐射场的数值计算 [J]. 航空学报,

1995, 16(6): 647-653.
 [3] Zhang Haixing, Zhang Jianqi, Yang Wei. Theoretical calculation of the IR radiation of an aeroplane[J]. *Journal of Xidian University*, 1997, 24(1): 78-81. (in Chinese)
 张海兴, 张建奇, 杨威. 飞机红外辐射的理论计算[J]. 西安电子科技大学学报, 1997, 24(1): 78-81.
 [4] Mei Fei, Jiang Yong, Chen Shiguo, et al. Experimental verification and line by line prediction model of gas absorption[J]. *Acta Optica Sinica*, 2012, 32(3): 0330002. (in Chinese)
 梅飞, 江勇, 陈世国, 等. 一种气体吸收的逐线计算模型及其实验验证[J]. 光学学报, 2012, 32(3): 0330002.
 [5] Wang Darui, Zhang Nan, Ge Minghe. Calculation method on infrared of liquid rocket exhaust plume [J]. *Missiles and Space Vehicles*, 2015, 1(1): 69-73. (in Chinese)
 王大锐, 张楠, 葛明和. 液体火箭发动机尾焰红外辐射计算方法[J]. 导弹与航天运载技术, 2015, 1(1): 69-73.
 [6] Dong Shikui, Yu Qizheng, Liu Linhua, et al. A new method of calculating high temperature radiative property parameters of narrow-band model for CO₂ [J]. *Journal of Engineering Thermophysics*, 2001, 22(S): 177-180. (in Chinese)
 董士奎, 余其铮, 刘林华, 等. 一种新的 CO₂ 高温辐射特性窄谱带模型参数计算方法 [J]. 工程热物理学报, 2001, 22(S): 177-180.
 [7] Dong Shikui, Yu Qizheng, Tan Heping, et al. Narrow band model parameters of high temperature radiation for carbon dioxide of combustion products [J]. *Journal of Aerospace Power*, 2001, 16(4): 355-359. (in Chinese)
 董士奎, 余其铮, 谈和平, 等. 燃烧产物二氧化碳高温辐射的窄谱带模型参数[J]. 航空动力学报, 2001, 16(4): 355-359.
 [8] Dong Shikui, Yu Qizheng, Tan Heping, et al. Infrared radiation band model parameters of water vapor in 300-3 000 K[J]. *Thermal Power Engineering*, 2001, 16(91): 33-38. (in Chinese)

- 董士奎, 余其铮, 谈和平, 等. 300~3000 K 水蒸气红外辐射谱带模型参数[J]. 热能动力工程, 2001, 16(91): 33-38.
- [9] Chen Shiguo, Chen Lihai, Mo Dongla, et al. Construction of Malkmus statistical narrow spectral band model parameters database on HITEMP2010 [J]. *Infrared and Laser Engineering*, 2015, 44(8): 2327-2333. (in Chinese)
- 陈世国, 陈立海, 莫冬腊, 等. 利用 HITEMP2010 的 Malkmus 窄谱带模型参数库构建研究 [J]. 红外与激光工程, 2015, 44(8): 2327-2333.
- [10] Saufiani A, Taine J. High temperature gas radiative property parameters of statistical narrow-band model for H₂O, CO₂ and CO, and correlated-K model for H₂O and CO₂ [J]. *Journal of Heat Mass Transfer*, 1997, 40(4): 987-991.
- [11] Qiao Ye, Nie Wansheng, Feng Songjiang, et al. Numerical research on influence exerted by afterburning on flow field and radiation characteristics of LH2/LOX rocket engine [J]. *Missiles and Space Vehicles*, 2016, 2(2): 22-26. (in Chinese)
- 乔野, 聂万胜, 丰松江, 等. 复燃对氢氧火箭发动机尾焰流场及辐射特性影响数值研究 [J]. 导弹与航天运载技术, 2016, 2(2): 22-26.
- [12] Liu Zunyang, Shao Li, Wang Yafu, et al. Influence on afterburning on infrared radiation of solid rocket exhaust plume [J]. *Acta Optica Sinica*, 2013, 33 (6): 0604001. (in Chinese)
- 刘尊洋, 邵立, 汪亚夫, 等. 复燃对固体火箭尾焰红外辐射特性的影响[J]. 光学学报, 2013, 33(6): 0604001.
- [13] Alexeenko A A, Gimelshein N E, Levin D A. Modeling of flow and radiation in the Atlas plume [J]. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 2002, 16(1): 50-57.
- [14] Garrison M B, Ozawa T, Levin D A. An improved CO₂, H₂O, and soot infrared radiation models for high temperature flows [C]//36th AIAA Plasmadynamics and Lasers Conference, 2005: AIAA 2005-4777.
- [15] Young S J. Nonisothermal band model theory [J]. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 1976, 18: 1-28.
- [16] Gamache R R, Kennedy S, Hawkins R, et al. Total internal partition sums for molecules in the terrestrial atmosphere [J]. *Journal of Molecular Structure*, 2000, 517-518: 407-425.
- [17] Ludwig C B, Malkmus W, Reardon J E, et al. Handbook of infrared radiation from combustion gases. NASA SP-3080 [Z]. 1973.