

NO 有效带宽的 k 分布算法

周金伟, 石志广, 李吉成

(国防科技大学 ATR 重点实验室, 湖南 长沙 410073)

摘要: 一氧化氮(NO)是高超声速飞行器流场中重要组分, 对飞行器本体和流场红外辐射传输有重要影响, 因此研究 NO 有效带宽的快速算法很有必要。根据 HITEMP 2010 数据库, 研究了 NO 在 1~15 μm 红外波段的谱线线强以及吸收系数分布特征, 提出了改进的 k 分布模型, 采用高斯数值方法快速求解; 此外分析了吸收系数阈值对 g-k 曲线以及有效带宽的影响, 提出了吸收系数阈值的选取方法。实验结果表明: 文中方法计算得到的 NO 有效带宽与逐线计算方法结果较为吻合, 误差不超过 5%; 与宽带 k 分布算法相比, 该算法计算效率更高, 且当选择合适阈值时精度更高。

关键词: 一氧化氮; 红外辐射; k 分布; 吸收系数; 有效带宽

中图分类号: TK124 文献标志码: A 文章编号: 1007-2276(2015)02-0432-06

k-distribution algorithm for NO equivalent band width

Zhou Jinwei, Shi Zhiguang, Li Jicheng

(ATR Key Laboratory, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China)

Abstract: Nitric oxide (NO) is one of the most important gas species in hypersonic vehicle's flow field, and has significant influence on infrared radiation transferring. Therefore, it's necessary to acquire an efficient algorithm to calculate NO's equivalent band width. According to HITEMP 2010, the distribution characters of spectral lines and absorption coefficients of NO in infrared spectrum 1-15 μm were studied. Then an improved k-distribution model was proposed and the equivalent band width was solved by applying Gauss numerical scheme. Besides, the effects of absorption coefficient thresh on both g-k curve and equivalent band width were researched and the criteria of selecting the thresh was put forth. Experiments show that the results of the proposed algorithm agree with the ones obtained by line-by-line calculation, and the relative errors were less than 5%. When compared with the wide band k-distribution algorithm, the proposed algorithm has better computing efficiency and moreover it has better accuracy while using a proper thresh.

key words: nitric oxide(NO); infrared radiation; k-distribution; absorption coefficient; equivalent band width

收稿日期: 2014-06-05; 修订日期: 2014-07-10

基金项目: 国家自然科学基金(61302145, 61101185)

作者简介: 周金伟(1983-), 男, 博士生, 主要从事光学成像目标识别技术方面的研究。Email: zhoujinwei863@sina.com.cn

导师简介: 李吉成(1970-), 男, 研究员, 博士生导师, 博士, 主要从事光学成像目标识别技术方面的研究。Email: peter0516@126.com

0 引言

飞行器在临近空间高超声速飞行时,头部气流受到强烈的压缩,产生强烈的激波层辐射,将会对目标检测和识别产生重要影响。在高空, H_2O 和 CO_2 含量较少,可认为来流由 N_2 和 O_2 组成,激波层气体组分由 N 和 O 化学反应的产物组成。此时,红外辐射主要来自非对称分子振转跃迁以及小量连续辐射。 N_2 和 O_2 均为对称分子结构,自身振转跃迁辐射较小,相比之下 NO 辐射则很重要。

计算气体辐射特性方法可以分为逐线计算方法、谱带方法和吸收系数的 k 分布方法^[1]。其中,逐线计算方法精度最高,但需要占用较大的存储和计算资源,不适用于工程计算,一般作为其它模型精度和有效性的检验基准。谱带模型方法采用透射率表示辐射特性,应用受到限制。

近年来,吸收系数的 k 分布方法在辐射传输计算上得到了广泛应用,其假设在足够小的谱带区间内普朗克函数为常量,辐射强度值与谱线在谱带的具体波数位置无关,使得相同的吸收系数对应的辐射强度值相同,从而可以大大减少计算量。k 分布算法不能直接用于非均匀气体的辐射传输问题,一般采用尺度近似和相关 k 分布两方法。其中,尺度近似方法要求吸收系数的频谱依赖性和空间依赖性可以分离,条件较苛刻;相关 k 分布则要求在所研究谱段内,最大吸收系数对应的波数相同,且该性质与温度、压强等外界条件无关。当组分摩尔浓度存在较大变化时,尺度近似方法和相关 k 分布方法均会存在较大误差^[2]。针对 Stardust 等航天器再入流场激波层辐射,Bansal^[3]提出了多尺度 k 分布模型,将气体组分划分为若干个尺度,以求解非平衡气体辐射传输方程。

目前在红外辐射传输计算方面,k 分布算法及其改进算法主要集中于 CO_2 和 H_2O 这两气体组分^[4-5]。研究适宜于 NO 的红外谱段吸收系数 k 分布算法,有助于提高辐射传输计算速度,为探测器红外图像的快速校正以及目标检测、识别创造有利条件。文中根据最新的 HITEMP 2010^[6]数据库,研究了 NO 谱线特征及其随温度、压强的变化规律,建立了 NO 吸收系数的 k 分布算法,求解得到了 NO 有效带宽,为后

续的高超声速流场的辐射传输计算奠定了基础。

1 吸收系数的 k 分布理论基础

对于高超声速飞行器流场,当不考虑烧蚀现象时,可认为不存在粒子散射现象,得到光谱辐射传递方程为:

$$\frac{dI_\eta}{ds} = k_\eta I_{b\eta} - k_\eta I_\eta \quad (1)$$

式中: k_η 表示光谱吸收系数; $I_{b\eta}$ 和 I_η 分别表示黑体辐射强度和光谱辐射强度; s 表示行程长度。在公式(1)两边同时乘以 Dirac-delta 函数 $\delta(k-k_\eta)$,然后对波数 η 进行积分,按递增顺序对吸收系数进行重排。对于窄谱带区间,引入 k 分布概率函数 $f(k)$:

$$f(k) = \frac{1}{\Delta\eta} \int_{\Delta\eta} \delta(k-k_\eta) d\eta \quad (2)$$

式中: $\Delta\eta$ 表示谱带区间总长度。定义 $f(k)$ 的累积分布函数 $g(k)$ 为:

$$g(k) = \int_0^k f(k_\eta) dk_\eta \quad (3)$$

再对公式(1)积分后结果除以 $f(k)$,得到:

$$\frac{dI_g}{ds} = k(I_{b\Delta\eta} - I_g) \quad (4)$$

其中

$$I_g = \frac{\int_{\Delta\eta} I_\eta \delta(k-k_\eta) d\eta}{f(k)} \quad (5)$$

求解公式(4)得到 I_g ,最终谱带总辐射强度 I 为:

$$I = \int_{\Delta\eta} I_\eta d\eta = \int_0^1 I_g dg \quad (6)$$

公式(6)将对波数的积分转化为对 $[0, 1]$ 区间连续函数 g 的积分。对于窄谱带模型,普朗克函数基本保持不变,该转换产生的误差可忽略。且该积分可采用高斯数值方法实现,只需计算积分点的辐射强度,从而大大减少了计算量。对于宽谱带模型以及全光谱模型,普朗克函数保持不变的假设不再成立,为此需要对 k 分布概率函数 $f(k)$ 进行普朗克函数加权修正^[2-5]。

2 文中算法

2.1 NO 光谱谱线特征

目前关于气体谱线参数的最新数据库主要有 HITRAN 2012^[7]和 HITEMP 2010,其中前者对于不高于 600 K 时的气体组分精度较高,而后者则适合

于高温气体。根据 HITEMP 2010 数据库, NO 谱线分布在 $0\sim 9\,273\text{ cm}^{-1}$ 范围内。对于红外谱段 $1\sim 15\text{ }\mu\text{m}$ (对应波数 $660\sim 9\,273\text{ cm}^{-1}$), 取截止线强为 $10^{-60}\text{ cm}^{-1}/(\text{molecular}\cdot\text{cm}^{-2})$ 时, 计算得到谱线强度随波数的分布曲线(见图 1)。然后根据逐线计算方法, 得到 NO 在 $P=1.0\text{ atm}$ ($1\text{ atm}=1.013\times 10^5\text{ Pa}$), $T=1\,000\text{ K}$, $X_{\text{NO}}=100\%$ 时的吸收系数(见图 2, 其中, 谱线参数修正方法见参考文献[8])。

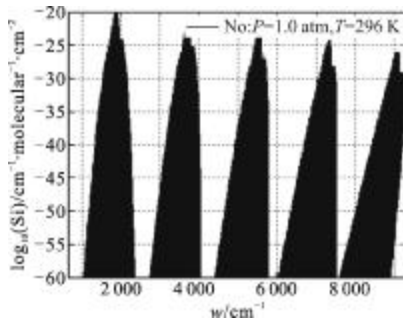


图 1 $660\sim 9\,273\text{ cm}^{-1}$ 谱段 NO 谱线强度分布图

Fig.1 NO spectral line strength in $660\sim 9\,273\text{ cm}^{-1}$

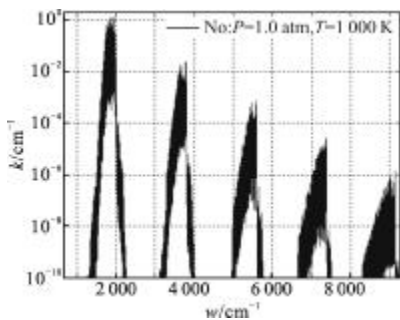


图 2 NO 吸收系数

Fig.2 NO absorption coefficient

可知, 在 $660\sim 9\,273\text{ cm}^{-1}$ 红外谱段, NO 谱线强度和吸收系数均呈现五个明显谱带, 且在 $1\,000\sim 2\,350\text{ cm}^{-1}$ 谱带谱线强度最大, 其最大线强比其他 4 个谱带最大线强大几个数量级。在每个谱带内, 谱线强度分布范围较广, 最大线强与最小线强相差数十个数量级。最主要的吸收带是 $1\,000\sim 2\,350\text{ cm}^{-1}$ (中心波数为 $1\,876\text{ cm}^{-1}$, 即 $5.3\text{ }\mu\text{m}$ 谱带)。

下文将对 $5.3\text{ }\mu\text{m}$ 谱带的吸收系数进行分析(由于谱带内吸收系数变化范围广, 对吸收系数进行阈值化后, 文中将该谱带压缩到 $1\,650\sim 2\,050\text{ cm}^{-1}$)。

2.2 压强和温度对吸收系数的影响

首先, 分析压强对 NO 吸收系数的影响。计算得到典型温度($1\,000\text{ K}$)时 NO 在不同压强下 $5.3\text{ }\mu\text{m}$ 谱带吸收系数(见图 3)。

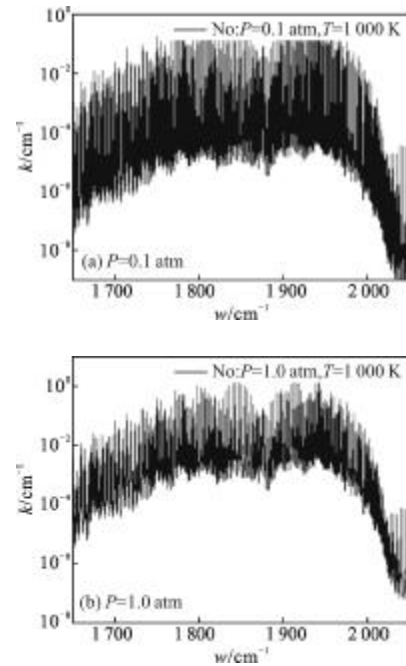


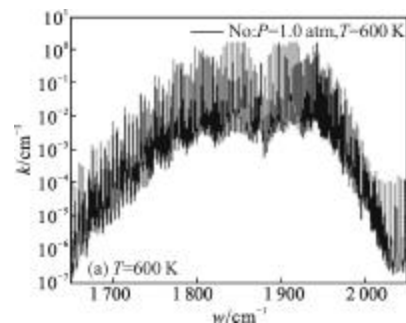
图 3 NO 不同压强条件下的吸收系数($T=1\,000\text{ K}$)

Fig.3 NO absorption coefficient with different pressure ($T=1\,000\text{ K}$)

图 3 中, 图(a)和(b)中分别表示压强为 0.1 atm 和 1.0 atm 时的吸收系数。可以看出, 不同压强时, 吸收系数分布基本轮廓保持不变, 但是总体来说, 压强越大, 吸收系数越大, 由此相同累积分布函数值 g 对应的吸收系数将增大; 反之, 相同 g 对应的吸收系数将减小。

其次, 分析温度对 NO 吸收系数的影响。计算时取压强 $P=1.0\text{ atm}$, 温度 T 分别为 600 K 和 $1\,000\text{ K}$, 得到吸收系数分别见如图 4(a)和(b)。由于存在谱线“热线”, 不同温度对吸收系数影响不同。

由图 4 可知, 对于 $5.3\text{ }\mu\text{m}$ 谱带中大部分波数, 谱线吸收系数随温度升高而降低, 但其轮廓发生变化。当温度变化剧烈时, 相关 k 分布算法将不再成立, 由此会增加辐射传输计算难度。



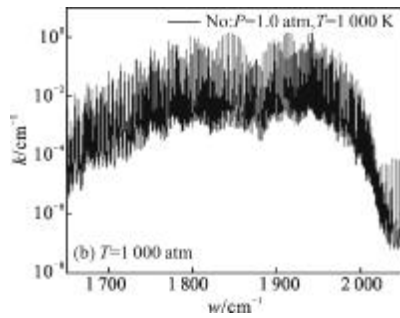


图 4 NO 不同温度条件下的吸收系数(P=1.0 atm)

Fig.4 NO absorption coefficient with different temperature (P=1.0 atm)

2.3 改进的 k 分布算法

若定义谱带区间内普朗克函数的相对变化率为最大普朗克函数 $I_{b,\max}$ 和最小普朗克函数 $I_{b,\min}$ 的差值与中心波数处的普朗克函数 I_{b0} 的比值, 即 $\text{diff} = (I_{b,\max} - I_{b,\min})/I_{b0} \times 100\%$, 则不同温度条件下的 Diff 值见表 1。

表 1 普朗克函数在 5.3 μm 谱带相对变化率

Tab.1 Relative variation of Planck function in band 5.3 μm

T/K	600	1 000	1 800	2 400	3 000
Diff/%	11.03	44.46	63.85	69.20	72.23

由此可知, 对于该谱带区间, 普朗克函数保持不变的假设不再成立, 窄带 k 分布算法直接求解辐射传输方程将导致较大误差。由于谱带区间内吸收系数变化较为剧烈, 且最大吸收系数与最小吸收系数相差几个数量级。当吸收系数小到一定程度时, 其对辐射的吸收作用可以忽略。为此, 文中首先对吸收系数进行阈值化处理, 目的是提高计算效率和在 g 空间数值积分的准确性。具体过程如下:

(1) 给定吸收系数阈值 thresh , 对逐线方法计算得到的吸收系数 k 进行阈值处理, 即:

$$k' = \begin{cases} k & \text{if } k \geq \text{thresh} \\ 0 & \text{if } k < \text{thresh} \end{cases} \quad (7)$$

剔除吸收系数小于阈值 thresh 的子谱带区间, 得到不连续的有效谱带, 记为 $\Delta\eta'$ (此时有效谱带宽度 $\Delta\eta'$ 一般小于 $\Delta\eta$)。

(2) 对阈值化处理后的吸收系数 k' 进行大小重排序, 记 k' 的最小值为 k'_{\min} , 最大值为 k'_{\max} 。对于

NO, k'_{\max} 一般不会大于 10, 而 k'_{\max} 和 k'_{\min} 相差若干数量级。若直接在线性坐标对吸收系数进行划分, 将使得较小吸收系数附近处的权值函数 f_0 较大, 累积函数 g 在 $g=0$ 附近处一阶导数过大, 这不利于后续的数值积分计算, 为此文中对吸收系数区间进行对数处理, 压缩 k 值动态范围, 后续计算将在对数变换后区间进行。

定义函数 $f_0(T, k)$ 为:

$$f_0(T, k) = \int_{\Delta\eta} I_{b\eta}(T)(k - k_\eta) d\eta \quad (8)$$

显然 $f_0(T, k)$ 不满足概率函数特征, 计算 $\text{sum} = \sum f_0(T, k)$, 得到新的权值函数 $f'(T, k)$:

$$f'(T, k) = \frac{f_0(T, k)}{\text{sum}} \quad (9)$$

该函数满足 $0 < f'(T, k) < 1$, 且 $\sum f'(T, k) = 1.0$ 。当所选阈值 $\text{thresh} \leq k_{\min}$ 时, $f'(T, k)$ 为传统的普朗克函数加权 $f(T, k)$; 当 $\text{thresh} > k_{\min}$ 时, 一般有 $f'(T, k) > f(T, k)$ 。

(3) 计算 k' 的累积分布函数 $g(T, k')$:

$$g(T, k') = \int_0^{k'} f'(T, k_\eta) dk_\eta \quad (10)$$

累积分布函数 g 位于 $[0, 1]$ 区间, 且 $k(g)$ 为连续函数, 故采用高斯-切比雪夫 10 点积分, 得到积分数值点 g_i 对应的吸收系数 k_i (见图 5)。

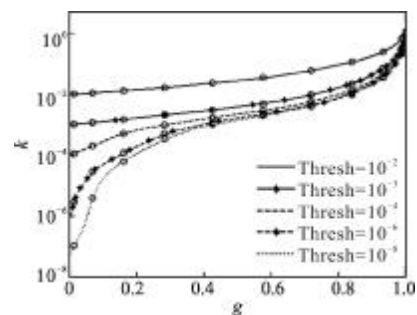


图 5 不同吸收系数阈值下的 g-k 分布曲线

Fig.5 g-k curve with different absorption coefficient thresh

图 5 中符号 “o” 表示高斯-切比雪夫数值积分点。可以看出, 总体上看, 随着阈值 thresh 增大, 相同 g 值对应的吸收系数 k 值增大, 即曲线 $g-k$ 上移。在 $g > 0.5$ 时, $\text{thresh} \leq 10^{-4}$ 对应的 $g-k$ 曲线基本重合, 此时这些阈值对 $g-k$ 分布曲线没有影响。可见, 选择合适的阈值可以在提高计算效率的同时保持较好精度。

2.4 NO 谱带有效带宽的计算

有效带宽是辐射传输中的重要参数, 求解积分

形式的辐射传输方程以及所有和指数宽带模型有关的辐射特性计算都需要求解该参数。有效带宽定义为：

$$A(L) = \int_{\text{band}} \epsilon_{\eta} d\eta = \int_{\eta}^{7b} (1 - e^{-k_{\eta} L}) d\eta \quad (11)$$

式中： L 表示等效光程； ϵ_{η} 和 k_{η} 分别表示波数 η 处的吸收率和吸收系数。对于 k 分布模型，有：

$$A(L) = \Delta\eta \int_0^1 (1 - e^{-k(g)L}) dg = \Delta\eta \sum_{i=1}^N (1 - e^{-k_i L}) w_i \quad (12)$$

式中： N 表示积分点数； w_i 为第 i 个积分点权值。

3 计算与验证

为了验证文中 k 分布模型性能，下面将本文模型与逐线计算模型进行比较。逐线计算中波数步长为 0.01 cm^{-1} ，谱线线型翼宽半宽为 20 cm^{-1} 。定义阈值 thresh 对应的有效带宽 A_i 与逐线计算有效带宽 A 的相对误差 $\text{err} = |A_i - A|/A \times 100\%$ 。由于不同计算条件下谱线吸收系数变化范围不同，为了体现不同阈值对误差 err 曲线的影响，文中对吸收系数阈值进行了归一化，记谱段内最大和最小吸收系数分别为 K_{\max} 和 K_{\min} ，对阈值 thresh 进行变换 $\log_{10}(\text{thresh}/K_{\min})/\log_{10}(K_{\max}/K_{\min})$ ，从而将横坐标归一化到 $[0, 1]$ ，记变换后值为 x 。

下面对不同压强和温度条件下文中算法与逐线计算结果的相对误差 err 进行分析。图 6 表示温度为 1000 K ，压强分别为 0.5 atm 、 1.0 atm 、 5.0 atm 、 10.0 atm 时的误差曲线；而图 7 表示压强为 1.0 atm ，温度分别为 600 K 、 1200 K 、 1800 K 、 3000 K 时的误差曲线。两图中符号“o”和“*”分别表示误差曲线上值为 5% 和 10% 点。

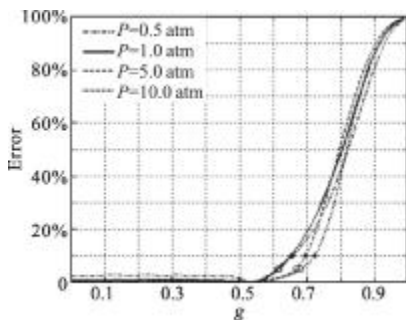


图 6 不同压强下的有效带宽误差曲线

Fig.6 Error curve of equivalent bandwidth with different pressures

从图 6 和图 7 可知，两图中误差变化曲线基本相同。且当 $x \leq 0.6$ 时，此时有效带宽误差小于 5%。

当 $x > 0.7$ 时，误差迅速增大。可见与逐线计算方法 (Line-by-line, LBL) 相比，当 $x = 0.6$ 时文中算法计算得到的有效带宽仍具有较高的精度。

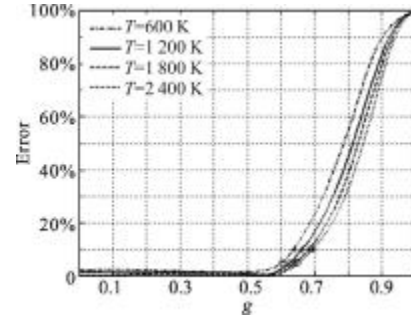


图 7 不同温度下的有效带宽误差曲线

Fig.7 Error curve of equivalent bandwidth with different temperatures

表 1、2 将文中算法与尹雪梅的宽谱带 k 分布算法^[5](以下简称尹方法)进行对比。计算中等效光程 $L = 10.0 \text{ cm}$ ，为保证精度尹方法采用 12 点 Gauss-Lobatto 数值积分方法。对于文中算法，取 $x = 0.5$ ，则有：

表 2 不同算法计算结果比较 ($x = 0.5$)

Tab.2 Comparison of results with different algorithms ($x = 0.5$)

	LBL A/cm ⁻¹	Yin ^[5] method		Proposed method	
		A/cm ⁻¹	Error/%	A/cm ⁻¹	Error/%
Case 1	3.318 5	2.954 3	10.976 5	3.226 5	2.773 3
Case 2	28.656 9	28.875 3	0.762 3	28.803 9	0.513 0
Case 3	121.759 7	122.118 7	0.294 8	121.678 6	0.066 6
Case 4	192.373 0	193.167 2	0.412 8	192.749 0	0.195 5

其中，计算条件 1、2、3、4 表示在温度 1000 K 时压强分别为 0.1 atm 、 1.0 atm 、 5.0 atm 、 10.0 atm 。在相同计算条件下，当取 $x = 0.6$ 时，有

表 3 取 $x = 0.6$ 时文中算法计算结果

Tab.3 Results of proposed algorithm ($x = 0.6$)

	Case 1	Case 2	Case 3	Case 4
A/cm ⁻¹	3.252 3	27.449 7	119.983 7	189.084 7
err/%	1.994 9	4.212 5	1.458 6	1.709 3

可见，文中算法与逐线计算相比，具有较高的精度，当取 $x = 0.6$ 时在上述 4 个计算条件下相对误差

不超过 5%。当取 $\alpha=0.5$ 时,文中算法比尹方法精度更高,由于文中算法只需要计算 10 个积分点参数,而尹方法需要计算 12 个积分点参数,因此文中算法在对积分点辐射物性参数进行多项式拟合时效率更高。

4 结 论

高超声速流场中 NO 对红外辐射传输有重要影响。文中根据 HITEMP 2010 数据库,分析了 1.0~15.0 μm 谱段内 NO 谱线线强、吸收系数特点以及压强和温度变化对 NO 吸收系数的影响,采用改进的 k 分布方法,求解得到 NO 有效带宽,取得了与逐线方法较吻合的结果,且大大提高了计算效率,为下一步红外辐射传输计算创造了条件。值得注意的是,对于 Stardust 等飞行器,再入时平衡气体的假设不再成立,此时的红外辐射传输高效计算将是下一步研究重点。

参考文献:

- [1] Yin Xuemei, Liu Linhua. Wide band k distribution model for gas absorption and its application in long-range sensing [J]. *Infrared and Laser Engineering*, 2008, 37(3): 420-423. (in Chinese)
尹雪梅, 刘林华. 气体宽带 k 分布模型及其在远程探测中的应用[J]. *红外与激光工程*, 2008, 37(3): 420-423.
- [2] Modest M F. Narrow-band and full-spectrum k-distributions for radiative heat transfer-correlated -k vs. scaling approximation [J]. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 2003, 76(1): 69-83.
- [3] Bansal A, Modest M F, Levin D A. Multi-scale k - distribution model for gas mixtures in hypersonic nonequilibrium flows[J]. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 2011, 112(7): 1213-1221.
- [4] Wang A, Modest M F. High-accuracy, compact database of narrow-band k -distribution for water vapor and carbon dioxide [J]. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 2005, 93 (1-3): 245-261.
- [5] Yin Xuemei, Liu Linhua. Wide band k distribution model for equivalent line width of water vapor[J]. *Journal of Engineering Thermophysics*, 2008, 29(5): 868-870. (in Chinese)
尹雪梅, 刘林华. 水蒸气有效带宽计算的宽带 k 分布模型 [J]. *工程热物理学报*, 2008, 29(5): 868-870.
- [6] Rothman L S, Gordon I E, Barber R J, et al. HITEMP, the high-temperature molecular spectroscopic database [J]. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 2010, 111(15): 2139-2150.
- [7] Rothman L S, Rothman L S, Gordon I E, et al. The HITRAN 2012 molecular spectroscopic database [J]. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 2013, 130: 4-50.
- [8] Pearson J T, Webb B W, Solovjov V P, et al. Effect of total pressure on the absorption line blackbody distribution function and radiative transfer in H₂O, CO₂, and CO [J]. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 2014, 143: 100-110.