

文章编号:1000-8055(2012)08-1712-06

液态碳氢燃料热辐射物性参数反演方法

李 栋^{1,2}, 艾 青¹, 夏新林¹

(1. 哈尔滨工业大学 能源科学与工程学院, 哈尔滨 150001;

2. 东北石油大学 土木建筑工程学院, 黑龙江 大庆 163318)

摘 要: 基于光线跟踪法建立了玻璃-液态碳氢燃料-玻璃 3 层平板总透射比的正问题模型, 给出了反演液态碳氢燃料热辐射物性参数(光谱吸收指数 k 和光谱折射指数 n)的反问题模型, 采用 Monte-Carlo(M-C)法结合区间逼近法求解. 通过将已知文献中庚烷的热辐射物性参数作为“真实值”, 采用正问题模型计算总透射比作为“实验测量值”, 然后利用反问题模型计算 n 和 k , 并分析实验偏差对反演计算的影响. 研究结果表明: ①模型反演 k 计算误差的标准差小于 0.003%, 而 n 的标准差高于 21%. ②实验偏差对反演计算影响较大, 且偏差达到 1.0% 时个别反演数据明显“失真”. ③ k 反演计算误差的标准差 y 与实验偏差 γ 满足 $y=2285.2 \gamma^2 - 10.484 \gamma + 0.0037$ 的关系式; n 反演计算误差的标准差受实验偏差影响较小, 但偏差导致反演 n 误差均超过 20%.

关 键 词: 碳氢燃料; 热辐射物性; 反演方法; 吸收指数; 折射指数**中图分类号:** V231.1; TK124**文献标志码:** AInverse method investigation of thermal radiation property
of liquid hydrocarbon fuelLI Dong^{1,2}, AI Qing¹, XIA Xin-lin¹

(1. School of Energy Science and Engineering,

Harbin Institute of Technology, Harbin 150001, China;

2. School of Architecture and Civil Engineering,

Northeast Petroleum University, Daqing Heilongjiang 163318, China)

Abstract: The spectral transmittance ratio calculation model of glass-liquid hydrocarbon fuel-glass three layer slabs was developed based on ray trace method, and an inverse model was built to determine the thermal radiation property (k is extinction coefficient and n is refractive index) of liquid hydrocarbon fuel in the three layer slabs. The inverse model was retrieved, and was combined with Monte-Carlo method and area approach method. The thermal radiation property of heptane attained in the references was selected as the true values, and the spectral transmittance ratio of the three layer slabs based on the direct model simulation was regarded as the experimental values. The thermal radiation property of Heptane was achieved by the inverse model, and then the effect of measurement error on the inverse results was also investigated. The results show that, (1) the standard deviation of k calculation error by the inverse model is less than 0.003%, and that of n is higher than

收稿日期: 2011-10-12**网络出版地址:** http://www.cnki.net/kcms/detail/11.2297.V.20120830.1200.201208.1712_005.html**基金项目:** 国家自然科学基金 (90816022, 51106036)**作者简介:** 李栋 (1979—), 男, 山东安丘人, 讲师, 博士生, 从事燃料热辐射物性研究.**通信作者:** 夏新林 (1966—), 男, 河北阜城人, 教授, 主要从事介质辐射及其热物性的研究. E-mail: xiaxl@hit.edu.cn

21%。(2) the effect of measurement error on the inverse results is urgent distinct, and some inversed calculation values are obviously when the measurement error is higher than 1%。(3) the standard deviation of k calculation error and measurement error y satisfy the equation which is $y=2285.2\gamma^2-10.484\gamma+0.0037$ 。The effect of measurement error on the standard deviation of n calculation error is lower, however, the n calculation error is higher than 20% when the measurement error exists.

Key words: hydrocarbon fuel; thermal radiation property; extinction coefficient; inverse method; refractive index

液态碳氢燃料在高温辐射时具有较强的半透明特性,属于半透明液体。其热辐射物性是碳氢燃料液滴蒸发分析^[1]、燃烧和超燃冲压发动机燃烧室热环境预测^[2-3]、再生冷却通道内碳氢燃料传热分析^[4-5]、碳氢燃料光学吸收诊断^[6-7]等领域的基础物性参数。

半透明液体的热辐射物性吸收系数、散射系数等均是其光学常数(吸收指数和折射指数)的函数。这些光学常数不能通过实验测量直接得到,必须通过测量其相关量并结合相应的反问题模型计算得出。目前,测量半透明液体光学常数的方法主要包括衰减全反射(attenuated total reflection, 简称 ATF)法^[8-9],结合 Kramers-Kronig(K-K)关系式的透射法^[10-12],双厚度透射法^[13-14]。前两种方法需通过联立 K-K 关系式求解反演模型,是目前应用较为广泛的方法,但是采用简化方法构造 K-K 关系式实现折射指数的求解且其过程繁琐。双厚度透射法原理简单,不需要采用 K-K 关系式,但目前的研究仅将其用于已知半透明液体透射比的反演计算^[13]。高温半透明液体光学常数测量中封装半透明液体的容器为玻璃-半透明液体-玻璃的三层平板结构,半透明液体的光学常数未知则无法获取双玻璃夹层内半透明液体透射特性数据,导致双厚度透射法不能直接采用玻璃-半透明液体-玻璃的三层平板透射比反演计算半透明液体的光学常数。

为此,本文提出了直接采用玻璃-半透明液体-玻璃的三层平板总透射比反演半透明液体光学常数的双厚度透射法。首先采用光线跟踪法分析了玻璃-半透明液体-玻璃的三层平板透射特性,给出了其总透射比的正问题模型,然后基于双厚度透射法建立了计算半透明液体的反问题模型,采用 Monte-Carlo(M-C)法和区间逼近法相结合的混合方法求解。利用文献中已有的液态碳氢燃料实验数据进行了模型验证,并分析了实验偏差对反演计算的影响。

1 数理模型

1.1 正问题模型

如图 1 所示,玻璃-半透明液体-玻璃 3 层平板结构主要由玻璃 I、半透明液体 II 和玻璃 III 组成。玻璃 I 和玻璃 III 为同一类材料,厚度均为 L_I ,材料的光谱折射指数和光谱吸收指数分别为 n_I 和 k_I 。半透明液体厚度为 L_{II} ,其光谱折射指数和光谱吸收指数分别为 n_{II} 和 k_{II} 。假设 n_I, n_{II}, k_I 和 k_{II} 均与温度无关,且透射光线在平板各表面处的反射和折射均遵循 Fresnel 定律和 Snell 定律。假设半透明液体层厚度远大于透射光线的波长,因此不考虑来自 2,3 两个界面上的透射光线之间的干涉效应。

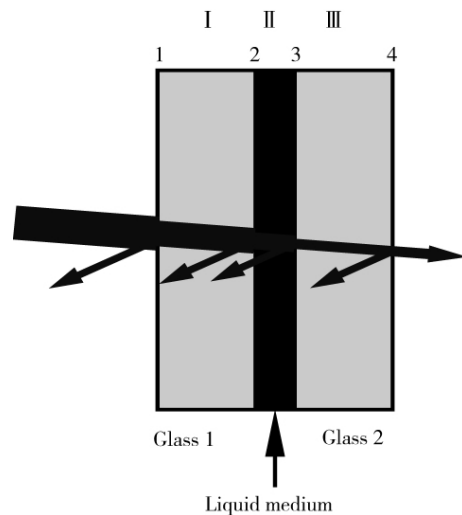


图 1 物理模型示意图

Fig. 1 Schematic of physical model

当透射光线沿法线方向进入时,满足透射光线是非偏振和漫射,且介质各向同性,平板 I、II 和 III 的反射比 $\rho_I, \rho_{II}, \rho_{III}$ 为

$$\rho_I = \rho_1 + \frac{(1 - \rho_1)^2 \rho_2 \tau_1^2}{1 - \rho_1 \rho_2 \tau_1^2} \quad (1)$$

$$\rho_{II} = \rho_2 + \frac{(1 - \rho_2)^2 \rho_3 \tau_2^2}{1 - \rho_2 \rho_3 \tau_2^2} \quad (2)$$

$$\rho_{\text{III}} = \rho_3 + \frac{(1 - \rho_3)^2 \rho_4 \tau_3^2}{1 - \rho_3 \rho_4 \tau_3^2} \quad (3)$$

平板 I, II 和 III 的透射比 $\tau_I, \tau_{\text{II}}, \tau_{\text{III}}$ 为

$$\tau_I = \frac{(1 - \rho_1)(1 - \rho_2)\tau_1}{1 - \rho_1 \rho_2 \tau_1^2} \quad (4)$$

$$\tau_{\text{II}} = \frac{(1 - \rho_2)(1 - \rho_3)\tau_2}{1 - \rho_2 \rho_3 \tau_2^2} \quad (5)$$

$$\tau_{\text{III}} = \frac{(1 - \rho_3)(1 - \rho_4)\tau_3}{1 - \rho_3 \rho_4 \tau_3^2} \quad (6)$$

其中界面反射率 ρ_1, ρ_2, ρ_3 和 ρ_4 满足^[15]

$$\rho_1 = \rho_4 = \frac{(n_1 - 1)^2 + k_1^2}{(n_1 + 1)^2 + k_1^2} \quad (7)$$

$$\rho_2 = \rho_3 = \frac{(n_2 - n_1)^2 + (k_2 - k_1)^2}{(n_2 + n_1)^2 + (k_2 + k_1)^2} \quad (8)$$

介质的透射率 τ_1 和 τ_2 满足 Beer 定律^[15]

$$\tau_1 = e^{-4\pi k_1 L_I / \lambda} \quad (9)$$

$$\tau_2 = e^{-4\pi k_2 L_{\text{II}} / \lambda} \quad (10)$$

3 层平板总透射比 $\tau_{\text{I+II+III}}$ 为

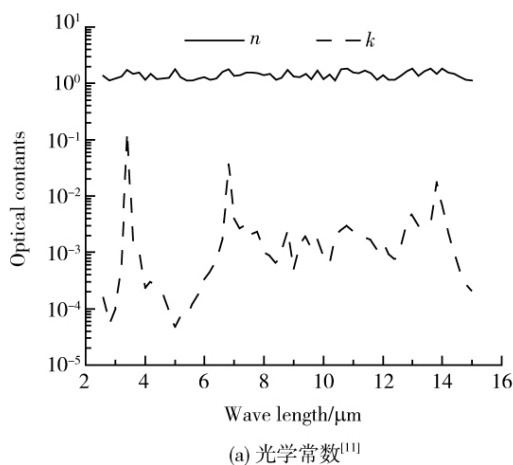
$$\tau_{\text{I+II+III}} = \frac{\tau_I \tau_{\text{II}} \tau_{\text{III}}}{1 - \rho_1 - \rho_1 \rho_{\text{II}} + \rho_1 \rho_{\text{II}} \rho_{\text{III}} + \rho_{\text{II}} \rho_{\text{III}} \tau_1^2} \quad (11)$$

1.2 反问题模型

采用实验测量的 3 层平板总光谱透射比作为光学常数反问题计算的测量值,构造目标函数

$$F_o = \sqrt{(\tau_{c1} - \tau_{m1})^2 + (\tau_{c2} - \tau_{m2})^2} \quad (12)$$

其中 τ_{c1}, τ_{c2} 分别为在同一波长下半透明液体厚度 1 和厚度 2 所对应的 3 层平板总光谱透射比正问题计算值, τ_{m1} 和 τ_{m2} 分别为同一波长下厚度 1 和厚度 2 所对应的 3 层平板总光谱透射比测量值。



(a) 光学常数^[11]

采用 M-C 法和区间逼近法相结合的混合方法求解反演模型. 采用 M-C 法反演时, 当反演值偏离真值较远时收敛速度很慢. 为此, 首先采用 M-C 法进行搜索, 当达到一定精度后, 利用区间逼近法缩小反演范围, 从而提高反演计算效率. 具体反演计算过程如下:

1) 给出半透明液体的光谱折射指数和 n 和光谱吸收指数 k 的合理取值范围, 迭代最大次数、最小精度, 初始计算精度, 区间逼近步长.

2) 利用 M-C 法给 n 和 k 赋值.

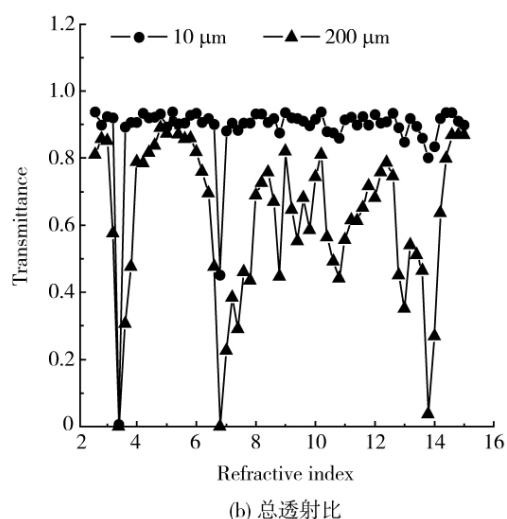
3) 通过式(11)计算 τ_{c1} 和 τ_{c2} , 并通过式(12)确定计算误差. 若计算误差小于初始计算精度, 则采用区间逼近法缩小 n 和 k 的取值范围, 并用计算误差取代初始计算精度.

4) 计算过程控制, 若计算误差小于最小精度, 或者累加迭代次数大于迭代最大次数, 则程序计算结束, 否则返回第 2) 步.

2 算例与误差分析

2.1 反演算例分析

为检验本文模型的合理性, 采用文献^[13]中液态庚烷 Heptane(C_7H_{16})的光学常数 n 和 k 的实验数据作为“真实值”, 玻璃为透明介质且其折射指数为 1.4, 然后利用本文的正问题模型计算庚烷液膜厚度为 10, 200 μm 所对应的 3 层平板总透射比作为“实验数据”, 其中“真实值”和“实验数据”如图 2. 将“实验数据”带入反问题模型计算庚烷光学常数 n 和 k , 反演结果见图 3.



(b) 总透射比

图 2 光学常数和三层平板总透射比

Fig. 2 Optical constants and total transmittance results

如图3所示,本文模型反演计算半透明液体的光学常数 k 与文献中的“真实值”吻合较好,其中最大反演误差出现在波长为 $13.8\mu\text{m}$ 处,反演误差为 0.02% ,说明此模型反演计算光学常数 k 是可靠的.同时可见,本文模型反演计算半透明液体的光学常数 n 的大部分结果与“真实值”吻合较好,但近 40% 反演数据的计算误差超过 10% ,其中最大误差约为 60% ,这说明此模型反演半透明液体光学常数 n 的精度有待于进一步提高.

2.2 实验偏差对反演的影响分析

上述反演计算半透明液体的光学常数所用的“实验数据”是精确的.而由于仪器精度、环境、操作等影响,实验数据存在一定偏差,分析实验偏差对反演模型的影响是保证反演精度的关键.

假设在实验光谱范围内,3层平板总透射比的实验数据分别存在 $\gamma=0.1\%, 0.5\%, 1.0\%$ 的相对误差,并将该“实验数据”作为反演的已知量,其余条件不变,反演计算光学常数 n 和 k ,并采用

式(13)计算与“真实值”的相对误差,结果如图4所示.其中,相对误差和标准差为

$$\Delta = \left| \frac{D_{\text{cal}} - D_{\text{exp}}}{D_{\text{exp}}} \right| \times 100\% \quad (13)$$

$$\sigma = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (D_{\text{cal}} - D_{\text{exp}})^2}{N}} \times 100\% \quad (14)$$

式中 Δ 为相对误差; σ 为标准差. D_{cal} 和 D_{exp} 分别为计算值和“真实值”; N 为数据个数.

通过图4可看出,当实验数据存在偏差时,光学常数 n 和 k 的反演计算精度均较呈现降低趋势.由图4(a)可看出,当 $\gamma=1.0\%$ 时,反演计算 k 的个别值出现“失真”,例如波长 $13.8\mu\text{m}$ 的反演计算 k 值,从而说明此模型反演计算要求实验偏差应小于 1.0% .由图4(b)可知,当 $\gamma=0.1\%, 0.5\%, 1.0\%$ 时, k 反演计算误差的标准差分别为 $0.003\%, 0.060\%, 0.650\%, 12.000\%$,由此可

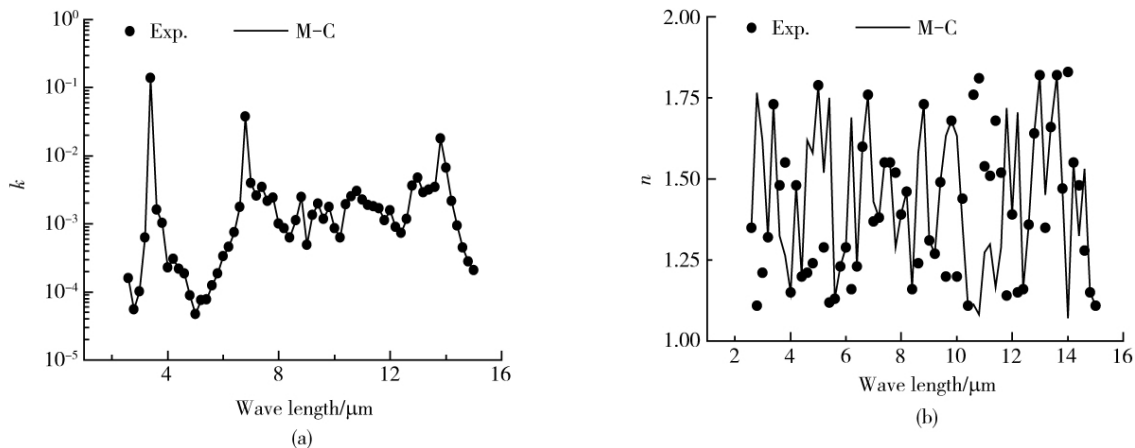
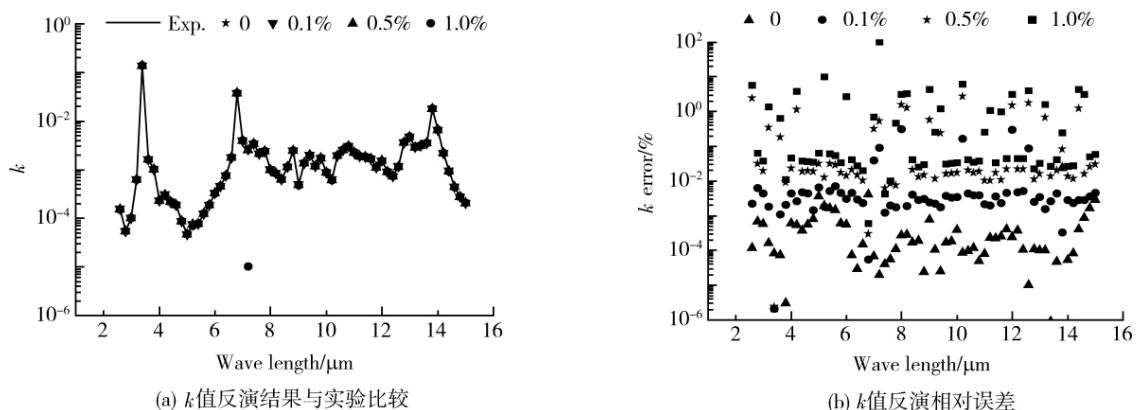


图3 半透明液体光学常数的反演结果

Fig. 3 Inversed results of optical constants of the semitransparent liquid



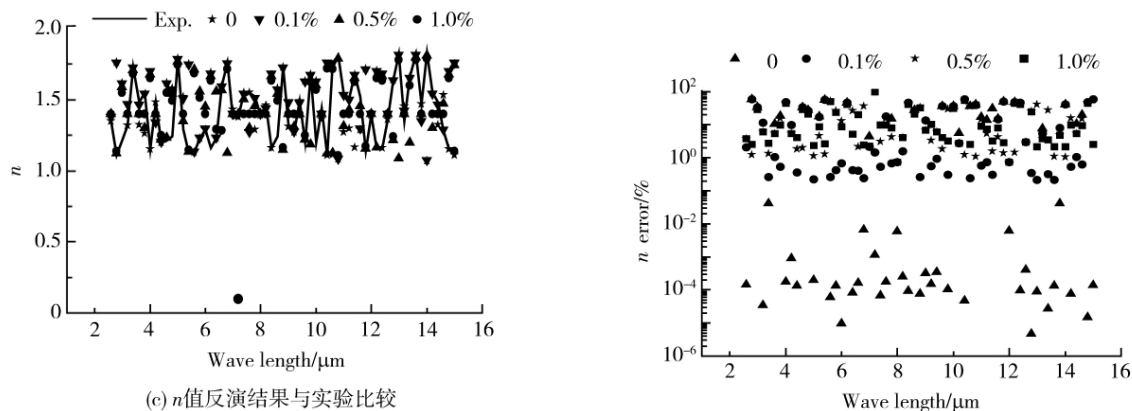


图 4 半透明液体光学常数反演值和误差分析

Fig. 4 Inversed results of semitransparent liquid and errors

见实验偏差增大,则计算误差以偏差值近 2 次方的速度增加,其计算误差的标准差 y 和 γ 满足关系式 $y = 2\,285.2\gamma^2 - 10.484\gamma + 0.0037$ 。由图 4(d)可知,当 $\gamma = 0, 0.1\%, 0.5\%, 1.0\%$ 时, n 反演计算误差的标准差分别为 21%, 25%, 22%, 24%, 可见实验偏差增大对 n 反演计算误差的标准差影响较小,但偏差存在导致其反演计算误差均超过 20%,且由图 4(c)可看出,当 $\gamma = 1.0\%$ 时,反演计算 n 的个别值也出现“失真”,例如波长 $13.8\mu\text{m}$ 的反演计算 n 值,从而进一步说明此模型反演计算要求实验偏差应小于 1%。

3 结 论

本文开展了玻璃-半透明液体-玻璃的三层平板中半透明液体辐射热物性的正、反问题模型研究,以其吸收指数、折射指数为研究对象,对模型进行了算例分析,同时分析了实验偏差对反演的影响。通过研究,得到如下结论:

1) 基于双厚度透射法测量,结合玻璃-半透明液体-玻璃的三层平板总透射比的反演模型,可以实验获取半透明液体的光学常数。

2) 对玻璃-半透明液体-玻璃的三层平板模型,采用 Monte-Carlo(M-C)法和区间逼近法相结合的求解方法反演半透明液体光学常数,其 k 值的反演结果可靠,但 n 值的反演精度有待提高。

3) 当实验数据存在偏差时,光学常数 n 和 k 的反演计算精度均较呈现降低趋势。 k 值的反演计算误差随实验偏差的变化满足 $y = 2\,285.2\gamma^2 - 10.484\gamma + 0.0037$ 的关系式;而 n 值的反演计算误差随实验偏差的变化无规律,其反演误差均大于 20%。当 $\gamma = 1.0\%$ 时,光学常数 n 和 k 的个别反演计算数据明显“失真”,说明该反演方法要求

实验偏差小于 1.0%。

参考文献:

- [1] 孙凤贤,王银燕. 辐射与对流耦合加热下正十二烷液滴的蒸发特性[J]. 航空动力学报, 2008, 23(11): 2043-2048.
SUN Fengxian, WANG Yinyan. Evaporation characteristics of a single dodecane droplet heated by coupled thermal radiation and convection[J]. Journal of Aerospace Power, 2008, 23(11): 2043-2048. (in Chinese)
- [2] 肖保国,杨顺华,赵慧勇,等. RP-3 航空煤油燃烧的详细和简化化学动力学模型[J]. 航空动力学报, 2010, 25(9): 1948-1955.
XIAO Baoguo, YANG Shunhua, ZHAO Huiyong, et al. Detailed and reduced chemical kinetic mechanisms for RP-3 aviation kerosene combustion[J]. Journal of Aerospace Power, 2010, 25(9): 1948-1955. (in Chinese)
- [3] Jill M S, Thomas K B, Allen J R, et al. Characterization of thermal radiation spectra in 2 m pool fires[J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2009, (32): 2567-2574.
- [4] 康玉东,孙冰. 再生冷却通道跨临界甲烷流动传热研究[J]. 航空动力学报, 2010, 25(11): 2493-2497.
KANG Yudong, SUN Bing. Flow and heat transfer investigation of transcritical methane in regenerative cooling channels[J]. Journal of Aerospace Power, 2010, 25(11): 2493-2497. (in Chinese)
- [5] 夏新林,黄勇,刘顺隆,等. 高温下加热/冷却管内参与性介质的辐射与对流耦合换热研究[J]. 航空动力学报, 2001, 16(4): 370-375.
XIA Xinlin, HUANG Yong, LIU Shunlong, et al. Coupled radiation and convection heat transfer in high temperature heated/cooled tubes with inside participating medium flowing[J]. Journal of Aerospace Power, 2001, 16(4): 370-375. (in Chinese)
- [6] Adam E K, Jason M P, Jay B J, et al. Two-wavelength Mid-IR absorption diagnostic for simultaneous measurement of temperature and hydrocarbon fuel concentration [C]//Proceedings of the Combustion Institute 32nd International Symposium on Combustion. United Kingdom:

- Elsevier Ltd. ,2009;821-829.
- [7] Gregory B R, Jay B J, Ronald K H. Calibration-free wave-length-modulation spectroscopy for measurements of gas temperature and concentration in harsh environments[J]. Applied Optics,2009,48(29):5546-5560.
- [8] LU Yutian, Alfons P. Optical constants measurements of strongly absorbing media[J]. Applied Optics,1986,25(2):221-225.
- [9] Hans R Z. Temperature dependence of the optical constants for liquid H₂O and D₂O in the far IR region[J]. Journal of Molecular Structure,1995,350(2):95-114.
- [10] Jason M P, Jay B J, Ronald K H. Mid-infrared absorption measurements of liquid hydrocarbon fuels near 3.4 μm [J]. Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer,2009,110(18):2135-2147.
- [11] Keefe C D, Janet E P. Infrared optical constants, dielectric constants, molar polarizabilities, transition moments, dipole moment derivatives and raman spectrum of liquid cyclohexane[J]. Spectrochimica Acta (Part A), 2009, 72(5): 947-953.
- [12] Keefe C D, Scott J F. Infrared optical properties and Raman spectra of *n*-pentane and *n*-pentane-d₁₂[J]. Vibrational Spectroscopy,2011,57(1):72-80.
- [13] Tuntomo A, Tien C L, Park S H. Optical constants of liquid hydrocarbon fuels[J]. Combustion Science and Technology,1992,84(1):133-140.
- [14] Otanicar T P, Phelan P E, Jay S G. Optical properties of liquids for direct absorption solar thermal energy systems[J]. Solar Energy,2009,83(7):969-977.
- [15] 谈和平,夏新林,刘林华,等. 红外辐射特性与传输的数值计算-计算热辐射学[M]. 哈尔滨:哈尔滨工业大学出版社,2006.