

·信号与信息处理·

一种利用 HITRAN 数据计算气体辐射特性的方法

许宏,王 锴

(光电信息控制和安全技术重点实验室 天津 300308)

摘 要 利用 HITRAN 2004 数据库提取出的相关分子谱线数据 给出了计算非均匀气体吸收和发射特性的普遍方法。以此为基础 结合大气分层数据 计算了红外波段穿越大气任意路径的透过率。此种方法也可以用于飞行器尾焰辐射或其他类型的气体特性计算。

关键词 HITRAN 非均匀气体 吸收率 发射率

中图分类号 :TP311.521

文献标识码 :A

文章编号 :1673-1255(2018)-02-0028-04

A Method for Calculating Radiant Properties of Gas by HITRAN Data

XU Hong, WANG Kai

(Science and Technology on Electro-Optical Information Security Control Laboratory, Tianjin 300308, China)

Abstract: A general method on the properties of non-uniform gas such as absorption and emission by spectrum data of interested molecules from HITRAN 2004 is provided. Based on this and atmospheric layering data, the transmissivity of infrared waveband through atmospheric path is calculated. The method is also applied to calculate the properties of plume of aircraft or other gases.

Key words: HITRAN; non-uniform gas; absorptivity; emissivity

在进行红外干扰或成像系统研究、设计和仿真的过程中,确定各类目标的红外辐射在探测器端形成的辐照度是一个关键的环节,这涉及到目标发射的红外辐射在传播过程中的衰减问题^[1]。这些红外辐射在大气中传播时产生的衰减是一个重要的系统参数。而不同波段、传播路径、气象条件乃至季节和地域都是影响大气衰减的因素^[2],从而使对实际红外辐射的估计变得十分复杂和困难,要进行较为准确的计算,在目前条件下最可靠的方法是借助 HITRAN 数据库提供的气体谱线数据,计算某种混合气体的辐射或吸收光谱特性。

1 计算原理

要得到某种混合气体的光谱特性,最准确的方法是利用 HITRAN 2004 分子光谱资料汇编^[3],得到

各种分子的谱线强度和参数。通过 Java-HAWKS 软件,从 HITRAN 数据库中读出所需分子在一定波段内各条谱线的线强、半宽度、展宽系数等参数,并据此逐线计算在一定波段内的透过率或发射率谱线。

HITRAN 数据库是各类气体的分子吸收谱线数据库,包括了 0.125~16 μm 波段内的几十种分子(O_2 、 N_2 、 CO_2 、 H_2O 、 O_3 、 HNO_3 、 CO 、 CH_4 等)的数百万条光谱线。光谱线参数包括每条谱线对应的波数、谱线强度、谱线空气展宽半宽度、自展宽半宽度、低态能量、空气展宽半宽度温度依赖系数、谱线压力漂移系数等。

首先对每一谱线的线强度和半宽度进行温度和压力修正,据此作出谱线的展宽廓线^[4],结合组份分子密度和观察路径长度得到这条谱线下的光学厚度,将波段内所有的光学厚度累加,就可以得到

这段气体的透过率和吸收率。

1.1 谱线的修正

在确定的温度 T 下,任意谱线的线强与参考温度 T_{ref} 的关系如式(1)

$$S_{\eta}(T) = S_{\eta}(T_{ref}) \frac{Q(T_{ref}) \exp(-c_2 E_{\eta}/T) [1 - \exp(-c_2 \nu_{\eta}/T)]}{Q(T) \exp(-c_2 E_{\eta}/T_{ref}) [1 - \exp(-c_2 \nu_{\eta}/T_{ref})]} \quad (1)$$

式中, T_{ref} 、 T 为参考温度(296 K)和实际温度,单位为 K; $S_{\eta}(T_{ref})$ 、 $S_{\eta}(T)$ 为参考温度和实际温度下的谱线线强,单位为 cm ; E_{η} 为量子低态能量,单位为 cm^{-1} ; c_2 为第二辐射常数, $c_2 = 1.438\ 786\ \text{cmK}$; ν_{η} 为谱线波数,单位为 cm^{-1} ; $\frac{Q(T_{ref})}{Q(T)}$ 为总内配分函数比值,可近似为

$$\frac{Q(T_{ref})}{Q(T)} = \left(\frac{T_{ref}}{T}\right)^j \quad (2)$$

其中, j 为配分函数指数,对于 CO_2 和 H_2O , $j=1$ 。

在某一压力和温度下谱线半宽度的修正为

$$\gamma(p, T) = \left(\frac{T_{ref}}{T}\right)^n [\gamma_{air}(p_{ref}, T_{ref})(p - p_s) + \gamma_{self}(p_{ref}, T_{ref})p_s] \quad (3)$$

式中, p_{ref} 为参考气压,一个标准大气压; p 为总压力,单位为 atm ; $\gamma(p, T)$ 为谱线半宽度,单位为 cm^{-1} ; n 为谱线空气展宽半宽度温度依赖系数; γ_{air} 为谱线空气展宽半宽度,单位为 $\text{cm}^{-1}/\text{atm}@296\text{K}$; γ_{self} 为谱线自展宽半宽度,单位为 $\text{cm}^{-1}/\text{atm}@296\text{K}$; p_s 为组分分压,单位为 atm 。

跃迁频率的压力漂移,使得参考压力下的跃迁频率 ν_{η} 漂移到特定压力 p 下的 ν'_{η} ,可用下式计算

$$\nu'_{\eta} = \nu_{\eta} + \delta(p_{ref})p \quad (4)$$

式中, $\delta(p_{ref})$ 为谱线压力漂移系数,单位为 $\text{cm}^{-1}/\text{atm}@296\text{K}$ 。

1.2 谱线廓线

在压力不太高的情况下,谱线的自然展宽和多普勒展宽可忽略,因此谱线展宽可用表示压力展宽的归一化洛伦兹廓线表示。有下式

$$f(\nu, \nu_{\eta}, T, p) = \frac{1}{\pi} \frac{\gamma(p, T)}{\gamma(p, T)^2 + (\nu - \nu'_{\eta})^2} \quad (5)$$

式中, ν 表示在观察波段内的所有波数; ν_{η} 表示特定

谱线的波数。

图1所示为 CO_2 的两条相邻谱线,中心波数分别为 $2\ 301.681\ 031\ \text{cm}^{-1}$ 、 $2\ 301.696\ 903\ \text{cm}^{-1}$ 。从图中可以清楚的看到谱线展宽和重叠的情况。

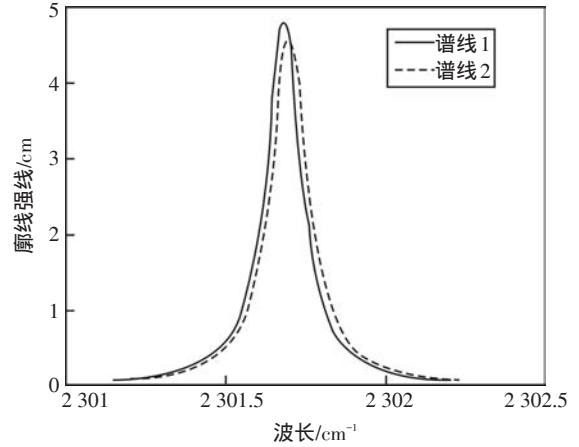


图1 两条相邻谱线的展宽和重叠情况

单条谱线的吸收系数在展宽后可表示为线强和展宽廓线之积,有下式

$$k_{\eta}(\nu, T, p) = S_{\eta} f(\nu, \nu_{\eta}, T, p) \quad (6)$$

而该谱线的光学厚度为

$$H_{\eta}(\nu, T, p) = n l k_{\eta}(\nu, T, p) \quad (7)$$

式中, n 为观察路径上的吸收分子数密度,单位为 cm^{-3} ; l 为观察路径长度,单位为 cm^{-3} 。

1.3 气体的发射率和透过率

将一定波段内所有如式(7)计算出的谱线的光学厚度叠加,得到全波段的光学厚度沿光谱的分布为

$$H(\nu) = \sum H_{\eta} \quad (8)$$

则该波段的光谱透过率为

$$\tau(\nu) = \exp(-H(\nu)) \quad (9)$$

这段气体的发射率为

$$\varepsilon(\nu) = 1 - \tau(\nu) \quad (10)$$

则这段气体的光谱辐出度为

$$M(\nu) = \varepsilon(\nu)P(\nu, T) \quad (11)$$

式中, $P(\nu, T)$ 为温度 T 下波数 ν 的普朗克函数,表示黑体的光谱辐出度^[5-6]。

以上是均匀气体,如果气体是不均匀的,如分层结构的大气,则需要将一条视线路径分割为均匀的小段,然后分段累加。如图2。

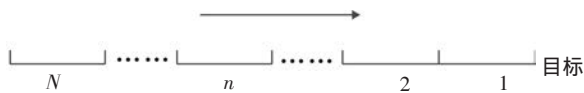


图2 气体沿着视线分割为小段,每段视为均匀气体

图2第 n 段的辐射度传播到目标处需要穿越 $1\sim n-1$ 段的吸收,参照式(11)和式(9),总的光谱辐射度为

$$M(\nu) = \sum_{n=1}^N P(\nu, T_n) (1 - \exp(-H_n)) \exp(-H_1 - \dots - H_{n-1}) \quad (12)$$

而图2气体的总透过率为各段透过率之积为

$$\tau(\nu) = \exp(-H_1 - \dots - H_N) \quad (13)$$

对于一个视场角为 θ 的光学系统,这团气体在其表面产生的光谱辐照度为

$$L(\nu) = M(\nu) \sin^2 \theta \quad (14)$$

2 大气透过率的光谱计算

如果将地球表面的大气视为一种具有特定组分的背景气体,按照式(13)、式(14),可以计算大气在特定路径上的透过率和背景辐射强度。计算某一观察路径上的大气分子吸收谱线,首先要建立大气分层模型。即确定大气中不同高度下的温度、压力、湿度和个分子组分的分压模型。大气分层模型主要有国军标北半球标准大气、美国标准大气、Lowtran分层大气模型,或者自定义模型。

文中利用HITRAN气体分子谱线数据库,从中选择存在于大气中的组分,结合大气分层模型,逐根谱线的计算观察路径上的光学厚度,再结合大气气溶胶消光原理,得到一定路径下的精细光谱透过率。

在HITRAN分子中选择了 H_2O 、 O_3 、 CO_2 、 CO 、 CH_4 、 N_2O 、 O_2 、 NH_3 、 NO 、 NO_2 、 SO_2 、 HNO_3 等^[7],在大气中存在的组分的谱线参数。

大气分层模型参数包括不同高度的大气温度、压力、水汽含量、密度、热容等参数;以及上述各组份的分压参数。

辐射在大气传输中的能量衰减可大体分为大气各组份分子的吸收和气溶胶散射。大气吸收造成的透过率如式(13),而大气各高度的气溶胶粒子数密度分布可以从地面能见度推算出来^[8]。

根据大气能见度的定义,气溶胶散射衰减系数与能见度关系为

$$\alpha = \frac{3.912}{V} \left(\frac{\lambda}{0.55} \right)^{-q} \quad (15)$$

式中, α 为大气散射衰减系数,单位为 km^{-1} ; V 为能见度,单位为 km ; λ 为波长,单位为 μm ; 0.55为典型可见光波长; q 为系数,有

$$q = \begin{cases} 0.585 V^{1/3} & V < 6 \text{ km} \\ 1.3 & \text{中等能见度} \\ 1.6 & \text{良好能见度} \end{cases} \quad (16)$$

气溶胶粒子数密度与衰减系数的关系为

$$n = \frac{\alpha}{\sigma} \quad (17)$$

式中, σ 为气溶胶粒子散射截面。

可认为不同高度的气溶胶粒子的散射截面分布是相同的。则由式(16)、式(17)可推出大气能见度与气溶胶粒子数密度存在反比关系,即

$$V = \frac{k}{n} \quad (18)$$

式中, k 为比例系数,可由已知的一组参数算出。

因此根据某个能见度与气溶胶粒子数密度的关系,能够推出不同气溶胶粒子数密度相应的能见度,进而得出该能见度下的散射衰减系数。结合McClachey的两种能见度(23 km、5 km)下粒子数垂直分布数据,得到不同高度时的气溶胶透过率。按照式(16)得到不同高度的气溶胶散射衰减系数。对于23 km和5 km之外的能见度值,用内插方法计算。

大气的总透过率为吸收透过率和散射透过率的乘积。

3 算例

按照上述方法,进行了 $3\sim 5 \mu m$ 中波段大气透过率计算。大气模式选用中纬度夏季大气,地面能见度设为10 km,观察高度10~30 km,仰角 $10^\circ\sim 50^\circ$,目标距离10~40 km,从中选取60条路径,计算结果如图3。显示出所有路径下的光谱透过率曲线^[9]。

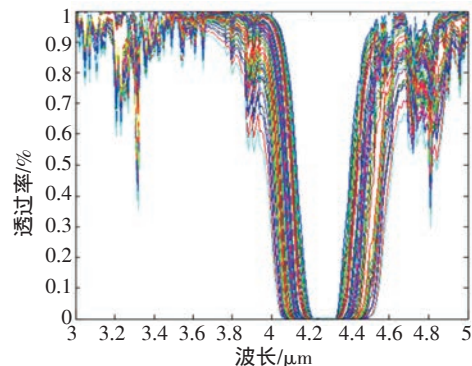


图3 所有路径下的光谱透过率曲线

计算结果同时以分页数据形式存储在 Excel 文件中。如图 4 所示。

路径平均透过率(%)	中纬度夏季, 能见度10km	观察高度10 (ka)	10	20	30	40	50
距离(km)\仰角(degree)			64.21313685	65.65377	66.69732	67.57704	68.24958
	20		59.12258251	61.81698	63.76441	65.17837	66.22031
	30		56.14842383	59.95343	62.46146	64.12769	65.3478
	40		54.22750774	58.85208	61.65011	63.60752	64.96553

图 4 Excel 文件中存储的各路径下平均透过率

4 结 论

从 HITRAN 2004 数据库中的谱线数据出发,通过基本物理过程的推算和编程计算,可得到不同大气条件下、不同路径和不同波段的光谱透过率数据,为红外探测或干扰系统的设计和仿真提供坚实的数据支持。除了大气之外,也可以用类似的方法计算飞机或导弹喷射的燃气团辐射^[10]。而且燃气辐射和大气衰减这两个模块可以串联使用,具有更广阔的应用前景。

参考文献

- [1] Gerard P Jellison, Herbert J Mitchell, David P Miller. Theory, modeling, and measurements of gas plumes[J]. Proceedings of SPIE, 2003, 5093.
- [2] Robert J DiStasio, Jr Ronald G Resmini. Atmospheric com-

ensation of thermal infrared hyperspectral imagery with the emissive empirical line method and the in-scene atmospheric compensation algorithms[J]. A Comparison, Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers, 2010.

- [3] Rothman L S, Jacquemart D, Barbe A, et al. The HITRAN2004 molecular spectroscopic database[J]. Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer.
- [4] 石广玉. 大气辐射学[M]. 北京: 科学出版社, 2007: 83-90.
- [5] Schmutge Thomas, Andrew French, Jerry C Ritchie, et al. Temperature and emissivity separation from multispectral thermal infrared observations[J]. Remote Sensing of Environment, 2002, 79:189-198.
- [6] Alan Gillespie, Shuichi Rokugawa, Tsuneo Matsunaga, et al. A temperature and emissivity separation algorithm for advanced spaceborne thermal emission and reflection radiometer (ASTER) images[J]. IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, 1998, 36(4).
- [7] Filip Neele. Two-colour infrared missile warning sensors[J]. Proceedings of SPIE, 2005, 5787.
- [8] 徐南荣, 卞南华. 红外辐射与制导[M]. 北京: 国防工业出版社, 1997: 160-161.
- [9] Pavan V, Royer A. Analysis of temperature emissivity separation (TES) algorithm applicability and sensitivity[J]. Remote Sensing, 2004, 25(1): 15-37.
- [10] 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): 1-3.

(上接第 19 页)

技大学 2011.

- [8] 陈育智. 智能视频分析技术在周界报警系统中的应用[J]. 自动化仪表, 2009, 30(11): 14-18.
- [9] 李佳. 被动红外探测技术在报警领域的应用[J]. 中国安防, 2009(7): 45-47.
- [10] 樊治敏. 一种新型周界防入侵报警设施——张力式电子围栏[J]. 智能建筑与城市信息, 2007(11): 104-106.
- [11] 张蓉竹, 蔡邦维, 杨春林, 等. 功率谱密度的数值计算方法[J]. 强激光与粒子束, 2000, 12(6): 661-664.

(上接第 23 页)

- [7] 王立国, 魏芳洁. 结合遗传算法和蚁群算法的高光谱图像波段选择[J]. 中国图像图形学报, 2013, 18(2).
- [8] 张海涛, 孟祥羽, 陈虹宇, 等. 利于目标识别的高光谱影像波段选择方法[J]. 计算机科学, 2013, 40(10).

- [12] 申凡, 郑敏, 史东锋, 等. 一种基于互功率谱密度的频域模态识别法[J]. 振动工程学报, 2001, 14(3): 259-262.
- [13] 邓戈燕, 张锋. 无线结构健康监测传感器网络中的时间序列同步算法[J]. 传感技术学报, 2006, 19(4): 1296-1300.
- [14] 李蕾, 葛悉佑, 王静涛. 南极 IGS 基准站时间序列极大似然法分析[J]. 测绘科学, 2016, 41(7): 173-180.
- [15] 刘珊. 针对 OFDM 系统最大似然同步算法的音频干扰研究[J]. 舰船电子对抗, 2015(1): 54-57.

- [9] 王金玲, 贺小军, 宋克非. 采用区域互信息的多光谱与全色图像融合算法[J]. 红外与激光工程, 2014, 43(8).
- [10] 任晓东, 雷武虎, 谷雨, 等. 一种改进的高光谱图像波段选择方法[J]. 计算机科学, 2015, 42(11A).