

近红外氧气 A 带大气透过率的计算

李晋华^{1,2}, 王志斌^{1,2,3}, 陈媛媛^{1,2,3}, 宗鹏飞³, 张鹏飞³

(1. 中北大学电子测试技术国防科技重点实验室; 2. 中北大学仪器科学与动态测试国家重点实验室;
3. 山西省光电信息与仪器工程技术研究中心, 山西 太原 030051)

摘要: 氧气 A 带具有单一的吸收气体成分和独特的谱线结构, 大气中分布相对均匀, 在大气辐射研究中具有广阔的应用前景。大气透过率是大气辐射传输计算的核心, 为了快速计算大气透过率, 提出带平均透过率的数学模型。将近红外氧气 A 吸收带作为研究对象, 以普朗克黑体辐射为基础, 分析了氧气 A 带在 762 nm 附近波段的光谱吸收理论, 介绍了带平均透过率数学模型的原理及方法。为了验证模型的可行性和精确度, 结合实验数据, 与 HITRAN2004 数据库逐线积分法计算的透过率进行对比, 精度达到 2.2%, 降低了计算时间。

关键词: 近红外; 带平均透过率; 大气透过率; 氧气 A 带

中图分类号: TN215 **文献标识码:** A **DOI:** 10.3969/j.issn.1001-5078.2013.10.13

Calculation of near infrared oxygen A-band atmospheric transmittance

LI Jin-hua^{1,2}, WANG Zhi-bin^{1,2,3}, CHEN Yuan-yuan^{1,2,3}, ZONG Peng-fei³, ZHANG Peng-fei³

(1. The National Defense Key Laboratory of Electronic Testing Technology;
2. State Key Laboratory of Instrumentation Science and Dynamic Measurement; 3. Engineering
Technology Research Center of Shanxi Province for Opto-Electronic Information and Instrument, Taiyuan 030051, China)

Abstract: Oxygen A band has broad application prospects in the atmospheric radiation, because it has a single absorption gas, unique line structure and uniform distribution in the atmosphere. Transmittance is the core of atmospheric radiation transmission calculation, so, band average transmittance model is proposed in order to calculate transmittance quickly. Oxygen A band at NIR is researched which is based on the Planck black-body thermal radiation. The Principle and method of band average transmittance model is discussed, and spectral absorption theory of oxygen A band near 762nm is analyzed. Finally, theoretical predictions using line-by-line integration with HITRAN database are compared with experimental results. Results show that the model is proved feasible and accurate, the accuracy achieves 2.2%, and the calculating time is shortened.

Key words: NIR; the average transmission; atmospheric transmittance; oxygen A band

1 引言

大气辐射传输理论中, 大气透过率是反应大气光学特性的一个重要参数, 其计算是大气辐射传输计算的核心。

目前大气透过率的计算方法有: 逐线积分、窄带模式、宽带模式、及经验、半经验近似方法^[1]。逐线积分法精度高, 但是耗时过大; 窄带模式和宽带模式一般用 K-分布函数法解决吸收和散射共存时的辐射传输问题, 此方法基于逐线积分法, 精度高计算复

杂; 而经验、半经验近似法多半是用某种经验或半经验公式从数值上拟合某种较为精确的理论或实验结果确定公式中的待定系数, 该方法比较快捷, 但牺牲了精度和灵活性。本文介绍一种用于红外辐射研究

基金项目: 国家自然科学基金仪器专项基金项目 (No. 61127015); 国际科技合作项目 (No. 2012DFA10680) 和山西省国际科技合作项目 (No. 2012081029) 资助。

作者简介: 李晋华 (1977 -), 女, 讲师, 博士生, 主要研究工作为红外目标测试, 光谱分析等。E-mail: ljh4961@163.com

收稿日期: 2013-03-14

的基于近红外氧气 A 带的平均透过率的计算方法。

氧气 A 带是位于 758 ~ 778 nm 的吸收带,具有动态范围大,谱线分布规则的特性。在 A 带,氧气是唯一的吸收气体,其谱线为分布规则的双峰结构,另外,由于氧气为混合比恒定的大气成分,使其成为理想的大气传输衰减特性的分析要素^[2]。Yamamoto^[3]最早将氧气吸收带作用纳入到评估大气对太阳辐射吸收影响中。Hawks^[4-5]为解决战区弹道导弹预警问题,在氧气 A 带进行了被动距离探测应用尝试。

2 透过率计算原理

2.1 氧气 A 带吸收原理

氧是一种有特大磁偶极矩的顺磁性气体,其电子基态是三重态,包括基态 $X^3 \Sigma_g^-$,两个激发态 $a^1 \Sigma_g^+$ 和 $b^1 \Sigma_g^+$ ^[6]。由于氧气 A 带跃迁涉及从单重态向三重态的过渡,所以结构比较复杂。

在大气层中,观察到氧分子的吸收谱主要位于大气层 50 km 以下。其原因主要是大气吸收太阳辐射,其中激发氧分子产生共振和光化反应而跃迁到激发态($^1 \Sigma_g^+$)。忽略氧原子猝灭^[7],观察到氧分子 $X^3 \Sigma_g^- \rightarrow b^1 \Sigma_g^+$ 的跃迁谱线。根据能级跃迁的选择定则,对于多电子的重原子来讲,跃迁只能发生在宇称性不同的能态之间^[8]。对于磁偶极子,宇称选择定则正好相反,氧分子各能级之间的跃迁是磁偶极子跃迁引起的,呈现双峰结构,如图 1 所示,为氧气在 762 nm 附近的吸收光谱图。该光谱图来源于 FASCODE 数据库,10 km 水平路径,光谱分辨率为 1 cm^{-1} 。

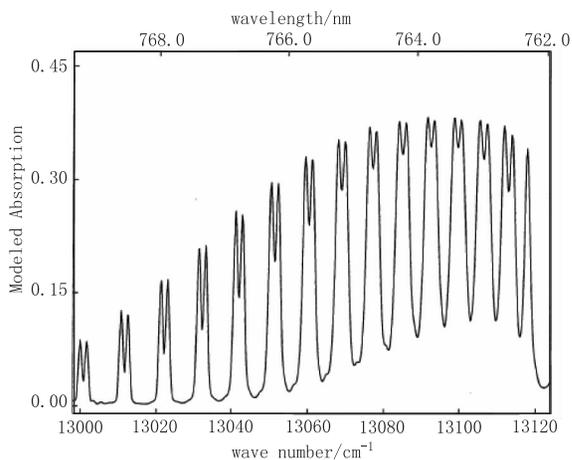


图 1 氧气在 QP 和 PP 分支的吸收光谱图

Fig. 1 Sample absorption spectrum at 1 cm^{-1}

with QP and PP branches of oxygen

2.2 透过率计算模型

实际测量中,即使是高分辨率的光谱仪,吸收物也不可能是单色的,所以测得的光谱带是多频率成分的平均值。

带平均透过率^[9]算法是计算近红外氧气 A 带在 762 nm 附近的平均透过率。该方法是利用 762 nm 带外的数据生成基线强度,该基线强度为无大气吸收时普朗克黑体的光谱强度。根据普朗克定律,当大气没有吸收时,在 762 nm 附近区域近似为直线,氧气 A 吸收带具有单一的吸收气体成分,当远距离测量有大气吸收时,会出现氧气特有的双峰结构吸收带。

吸收分子光谱区间 $\Delta \nu$ 间隔内的带平均透过率 \bar{T}_ν 定义为:

$$\begin{aligned} \bar{T}_\nu &= \frac{I_m(\nu)}{I_o(\nu)} = \frac{1}{\Delta \nu} \int T(\nu) d\nu \\ &= \frac{1}{\Delta \nu} \int_{\nu_i}^{\nu_f} \exp(-\tau(\nu)) d\nu \end{aligned} \quad (1)$$

通常情况下,测试大气的传输衰减不仅包含分子吸收,还包括气溶胶散射,同时任何测量都会受到测量系统本身的限制,只能测得一定带宽和光谱分辨率的光谱,因此实际测量到的目标辐射光谱应写为:

$$I_m(\nu) = I_o(\nu) \cdot \bar{T}_{scat}(\nu) \bar{T}_\nu(\nu) \bar{R}(\nu) \quad (2)$$

式(2)中, $\bar{T}_{scat}(\nu)$ 是与气溶胶散射有关的平均透过率; $\bar{T}_\nu(\nu)$ 是氧分子吸收的平均透过率; $\bar{R}(\nu)$ 是由与仪器函数有关的综合函数。通过基线拟合方法, $\bar{T}_\nu(\nu)$ 容易获得,但 $\bar{T}_{scat}(\nu)$ 和 $\bar{R}(\nu)$ 在实际测量中无法精确获得。

一般而言, $\bar{T}_{scat}(\nu)$ 和 $\bar{R}(\nu)$ 变化缓慢,属于低频信号,而由氧分子吸收引起的 $\bar{T}_\nu(\nu)$ 属于高频信号,因此,可将不存在氧分子吸收的信号定义为基线 $I_b(\nu)$,用来消除 $\bar{T}_{scat}(\nu)$ 和 $\bar{R}(\nu)$ 带来的影响,即:

$$I_b(\nu) = I_o(\nu) \bar{T}_{scat}(\nu) \bar{R}(\nu) \quad (3)$$

又由于在测量带之外的吸收带, $\bar{T}_\nu(\nu) \approx 1$,因而,结合氧气 A 吸收带之外的光谱数据(用 $I_{m(\text{带外})}$ 表示),利用多项式插值算法拟合基线 $I_b(\nu)$ 。

$$I_{m(\text{带外})} \cong I_b(\nu) \quad (4)$$

如图 2 所示,为 130 m 处测得氧气 A 带的吸收光谱经平滑后与基线之间的关系图。

将式(3)代入式(2),有:

$$I_m(\nu) = \bar{T}_\nu(\nu) I_b(\nu) \quad (5)$$

综上所述,带平均透过率可通过探测器得到目标辐射光谱 $I_m(\nu)$,并利用 $I_m(\nu)$ 中吸收带外的光谱数据,结合多项式插值方法,拟合测量基线 $I_b(\nu)$,即可得到如下关系:

$$\bar{T}_\nu = \frac{I_m(\nu)}{I_b(\nu)} \quad (6)$$

理论上,根据吸收系数与透过率的关系,当已知当前温度、压强的条件下,可推算吸收光谱线强。

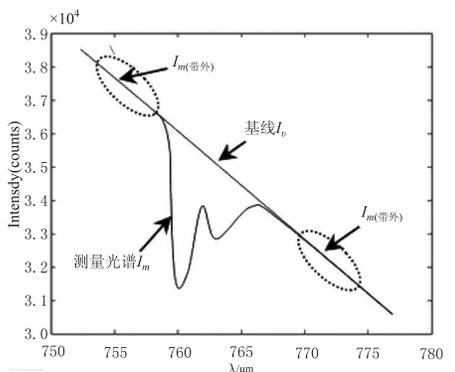


图 2 被测光谱、基线拟合示意图

Fig. 2 The diagram of measured spectrum and baseline

3 实验过程与结果分析

实验数据来自山西太原地区,空气温度为 23℃,标准大气压下,ABB 公司 SQG770G 为光源,在水平方向 66m 和 130m 处用 AvaSpec-3648 光谱仪,光谱仪输入端采用望远镜,多次测量获得氧气 A 带的吸收光谱。如图 3 为光谱仪测得 130 m 处 750 ~ 780 nm 间平滑前后的光谱对比图。拟合基线,利用式(6)计算出氧气分子透过率,如图 4 所示。

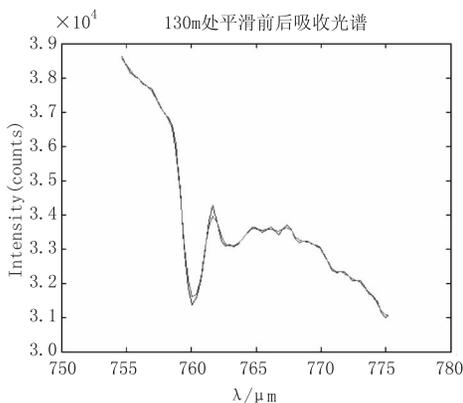


图 3 130m 处平滑前后吸收光谱对比图

Fig. 3 absorption spectrum in Smooth before and after at 130m

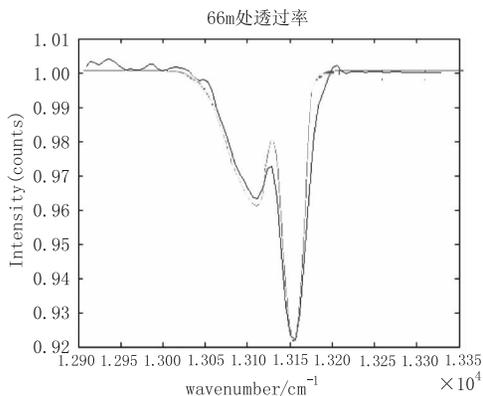


图 4 (a) 66m 处平均透过率与 HITRAN 数据库逐线积分法算的透过率比较

Fig. 4 (a) the comparison of transmittance with HITRAN database using line-by-line integration at 66m

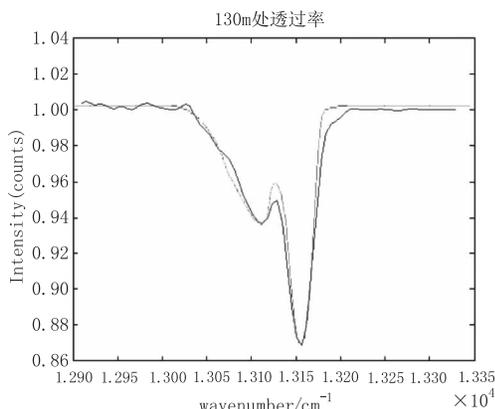


图 4 (b) 130m 处平均透过率与 HITRAN 数据库逐线积分法算的透过率比较

Fig. 4 (b) the comparison of transmittance with HITRAN database using line-by-line integration at 130m

由于逐线积分法计算透过率为目前最为精确的算法,可作为标准处理,为验证带平均透过率算法的可行性及精度,将所得数据与逐线积分法计算的数据进行比较。

图 4(a)所示为水平距离在 66 m 时,计算得出的光谱透过率,与利用 HITRAN 数据库采用逐线积分法计算出的透过率比较,轮廓相似,且曲线特征点近似重合,说明带平均透过率算法可行,精度达到 2.4%;图 4(b)为水平距离为 130 m 时,计算得到的光谱透过率,与逐线积分法所得透过率比较,精度达到 2.2%。计算机 Intel(R) Core(TM) i5-2380P 用逐线积分法计算耗时 28 s,而带平均透过率计算只需 0.64 s,可见,该方法大大提高了计算时间。

误差产生的原因有以下三个方面:(1)因光程越长吸收越明显,故距离越长则理论精度越高,但是,由于大气中除了氧气吸收外,还存在大气散射,会影响到测量精度;(2)HITRAN 数据库来自美国大气条件,而我国,受地域及环境的影响,大气条件不同,均会影响到系统测量的精度;(3)测量过程中每次测量条件并不完全相同,且测量所用望远镜的效率不是 100%,也会影响到测量精度。

4 结论

基于基于大气传输衰减特性,将氧气 A 吸收带应用于大气衰减测试中,提出了一种计算近红外大气透过率的计算模型,可以计算空间任意两点之间的红外大气光谱透过率。与 HITRAN2004 数据库利用 LBLRTM 计算的透过率比较,验证其可行性,计算速度提高了约 44 倍,其可靠性也得到验证。由于大气影响因素分析中只考虑影响红外辐射传输的几个主要因素,势必影响计算结果的精度,对于精度要

求不高的工程计算,基本上可满足要求。

参考文献:

- [1] Shi Guangyu. Atmospheric radiation theoretical[M]. Beijing: Science Press, 2007. (in Chinese)
石广玉. 大气辐射学[M]. 北京: 科学出版社, 2007.
- [2] Zhang Yan, Duan Minzheng, et al. Review of oxygen A-band research[J]. Remote Sensing Technology and Application, 2010, 25(2): 288 - 295. (in Chinese)
张岩, 段民征, 等. 氧气 A 吸收带大气遥感应用研究进展[J]. 遥感技术与应用, 2010, 25(2): 288 - 295.
- [3] Yamamoto G. Direct absorption of solar radiation by atmospheric water vapor, carbon dioxide and molecular oxygen[J]. Journal of the Atmospheric Sciences, 1962, 19: 182 - 188.
- [4] Michael R Hawks, aild Glen P. Perram. Passive ranging of emissive targets using atmospheric oxygen absorption lines[J]. Proc. SPIE 2005, 5811: 10. 1117/12. 604538.
- [5] Joel R Anderson, Michael R Hawks, Kevin C Gross, et al. Light test of an imaging O₂(X - b) monocular passive ranging instrument[J]. Proc. SPIE, 2011, 8020: 10. 1117/12. 883484.
- [6] Vincent, Robert A. Passive ranging of dynamic rocket plumes using infrared and visible oxygen attenuation[J]. Proc. SPIE 8052, 2011: 80520D - 1.
- [7] Else Lemp, Germán Günther, et al. Reaction of singlet molecular oxygen, O₂(¹Δ_g), with the cinchona tree alkaloids effect of absolute configuration on the total rate constant[J]. Journal of Photochemistry and Photobiology. A: Chemistry, 2005, 175(2 - 3): 146 - 153.
- [8] François-Marie Bréon, Sophie Bouffies. Land Surface Pressul of Applied Meteorology, 1996, 35(1): 69 - 77.
- [9] Zong Pengfei, Zhang Jilong, et al. Simulation and analysis of oxygen 'A' band's transmittance of infrared radiation along slanting route[J]. Laser & Infrared, 2013, 43(2): 171 - 175. (in Chinese)
宗鹏飞, 张记龙, 等. 氧气 A 带红外辐射不同路径透过率的仿真分析[J]. 激光与红外, 2013, 43(2): 171 - 175.
-