

13

226-230

叠加模型仿真化学烟雾光谱

X515

X122

张骏 江飞桥* 荀毓龙

(中国科学院安徽光学精密机械研究所, 安徽, 合肥, 230031)

摘要 提出化学战剂烟雾红外光谱辐射传输的计算机仿真模型, 利用自行研制的被动式傅里叶变换红外光谱仪(FTIS)遥测的各种背景光谱, 仿真出几种特殊的化学烟雾的光谱, 并对仿真的结果进行了讨论。

关键词 化学烟雾, 红外光谱, 仿真, 模型。

叠加模型

引言

由于各种因素的限制, 不可能从野外场地获得化学烟雾的数据来建立各种类型烟雾的训练数据库, 早期的研究是采用与真实化学烟雾光谱特征^[1]相似、无致命毒性的模拟剂如DMMP、SF₆进行的, 通过在野外施放获取数据进行特征训练, 构成识别该种模拟剂的系数。

为了研究对远距离化学烟雾的监测, 有必要建立相应的化学烟雾计算机仿真模型, 对于不是地平天空做背景的情况, 特别是背景比较复杂, 有山、树和各种辐射源存在时, 任何一种模式大气都无法提供较为详细的信息, 这就需要我们收集大量的、不同背景物、不同地区的背景光谱, 通过在大量背景光谱上叠加多种真实化学烟雾的影响, 仿真出化学烟雾的红外光谱, 建立这些化合物的数据库, 烟雾红外光谱计算机仿真模型的建立, 将多种气体的影响通过仿真, 得到化学烟雾红外光谱, 可产生各种战剂的训练数据序列, 训练出实际需要的各种气体鉴别器, 为监测技术、识别技术以及相应的探测器灵敏度的测试, 提供充分的科学依据。

文章在建立叠加模型仿真化学烟雾红外光谱的基础上, 利用不同地区、不同环境条件下实测的背景光谱, 仿真出最为关心的几种气体的光谱, 同时对仿真结果进行了讨论。

1 仿真模型

对于水平或低仰角观测, 将观测方向的大气分为三层考虑, 如图1所示, 第一层为远处复杂背景(如山、树、大气等)到化学气体前L₁处的辐射传输, 第二层为化学气体和大气的辐射传输, 第三层为化学气体到探测器的辐射传输, 根据辐射原理^[2], 大气或化学烟雾(简称云团)的热辐射传输方程可表示为

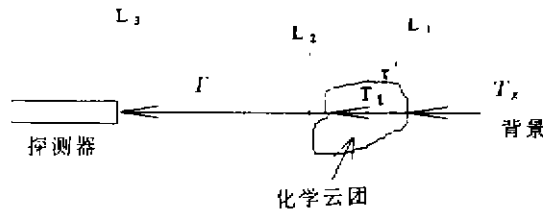


图1 大气或化学云团热辐射传输示意图
Fig. 1 The model for radiative transfer of atmosphere or chemical smoke

* 复旦大学物理系, 上海, 200433
稿件收到日期 1997-07-22, 修改稿收到日期 1997-09-05

$$I(\nu) = \int_{\tau_0}^1 B(\nu, T) d\tau + B(\nu, T_g) \tau_0, \quad (1)$$

其中 $B(\nu, T_g)$ 为背景温度 T_g 的背景辐射, $B(\nu, T)$ 是各层大气温度为 T 的黑体辐射, τ_0 表示观测方向上大气总的透过率, 无化学气体出现时, 假定各层大气温度均匀, 式(1)可表示为

$$I_0(\nu) = B(\nu, T_g) \cdot \tau_0 + B(\nu, T) \cdot (1 - \tau_0), \quad (2)$$

当观测方向上加入化学气体(或蒸气)时, 对于非均匀温度分布的介质, 式(2)应逐层积分, 同样, 假定各层水平温度分布是均匀的, 式(1)可表示为

$$I_i(\nu) = B(\nu, T_g) \cdot \tau_0 \tau_i + (\tau' - \tau_0 \tau_i) \cdot B(\nu, T) + B(\nu, T_i) \cdot (1 - \tau_i) \tau_0 + B(\nu, T) \cdot (1 - \tau_0), \quad (3)$$

式中 τ_i 为云团的光谱透过率, τ' 为层 L_i 处的光谱透过率, 若云团放在接近 T_g 处, 可令 $\tau' \approx \tau_0 \tau_i$. 分析式(3)和(2)的各项的贡献, 我们可以利用有、无云团时的辐射量之差来消除 $B(\nu, T)(1 - \tau_0)$ 和背景的大部分贡献, 即

$$\Delta I(\nu) = I_i(\nu) - I_0(\nu) = [B(\nu, T_i) - B(\nu, T_g)] \cdot (1 - \tau_i) \tau_0, \quad (4)$$

设 T_{eff} 为环境或化学云团的等效温度, 令 $T = T_i = T_{eff}$, 利用无化学气体时的辐射亮度式(2), 可将式(4)表示为

$$\Delta I(\nu) = [B(\nu, T_{eff}) - I_0(\nu)] \cdot (1 - \tau_i), \quad (5)$$

式(5)为计算机仿真化学云团的基本模型, $I_0(\nu)$ 是利用 FTIS 获取的各种背景光谱, 式(5)表明在各种背景下叠加的化学云团光谱, 故称为仿真模型为叠加模型。

2 仿真结果与讨论

2.1 背景光谱获取

叠加模型式(5)表明: 仿真化学烟雾光谱需大量的背景光谱为基础, 式(5)中 $I_0(\nu)$ 为 FTIS 实测的背景光谱, $B(\nu, T_{eff})$ 为等效温度, T_{eff} 的黑体辐射亮度, 可由普朗克公式得到

$$B(\nu, T) = \frac{c_1 \cdot \nu^3}{\exp(c_2 \cdot \nu/T) - 1.0} \quad (6)$$

其中 h 为普朗克常数, c 为光速, k 为波兹曼常数, ν 为波数 (cm^{-1}), 常数 $c_1 = hc^2 = 1.19104 \times 10^{-16} [\text{W} \cdot \text{cm}/(\text{sr} \cdot \text{cm}^{-1})]$, $c_2 = hc/k = 1.4388 \times 10^{-2} (\text{cm} \cdot \text{K})$.

背景测量选取华北和东北某两处试验场处分别进行, 使用自行研制的专用傅里叶变换红外光谱辐射仪 (FTIS). 它是一种折射扫描干涉仪, 采用楔形 ZnSe (或 KBr) 分束器. 其稳定性、抗振动性能优于迈克尔逊干涉仪, 并具有光通量大的优点. ZnSe 晶体在 $0.56 \sim 22 \mu\text{m}$ 范围具有优良的透过率, 光吸收率极低, 不易潮解, 特别适合于野外监测. FTIS 专用干涉仪主要技术指标为: 工作波长 $8 \sim 13 \mu\text{m}$, 光谱分辨率 4cm^{-1} , 扫描速度 $3 \sim 5 \text{r/s}$. 它的噪声等效光谱辐射亮度 $\text{NESR} = 3.0 \times 10^{-9} \text{W}/(\text{cm}^2 \cdot \text{sr} \cdot \text{cm}^{-1})$, 可探测到 0.02K 的微弱温度变化. 由于式(5)中 $I_0(\nu)$ 是仪器的实测值, 而 $B(\nu, T_{eff})$ 是计算值, 可利用标准黑体炉对仪器进行

定标,找出 FTIS 仪器的光谱响应函数.具体做法是:设定两个黑体温度,如 313K 和 500K, FTIS 的值为 I_1 和 I_2 ,利用对应温度的普朗克公式得到 B_1 和 B_2 ,则该 FTIS 的光谱响应函数为

$$R(\nu) = [I_1(\nu) - I_2(\nu)]/[B_1(\nu) - B_2(\nu)]. \quad (7)$$

2.2 仿真结果

这里主要介绍对模拟剂 DMMP 和 SF_6 ,以及强毒化学气体 GB 和 HD 的仿真结果.利用波尔-朗伯^[4]定律可描述气体的光谱透过率和气体浓度的关系,即

$$\tau_i(\nu) = \exp[-\alpha(\nu) \cdot CL]. \quad (8)$$

这里 $\tau_i(\nu)$ 为化学气体的光谱透过率, $\alpha(\nu)$ 为化学气体的光谱吸收系数 (m^2/mg), C 为浓度 (mg/m^3), L 为气体的观测方向的厚度 (m),并假定化学气体到探测器的距离约 1km.

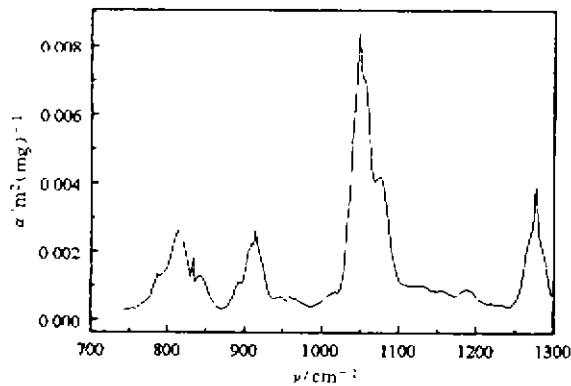


图2 模拟剂 DMMP 的光谱吸收系数
Fig. 2 Absorptivity of simulant DMMP

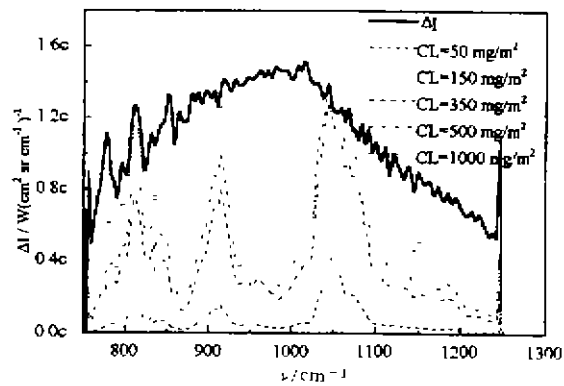


图3 模拟剂 DMMP 的仿真结果
Fig. 3 The results of simulation for DMMP

模拟剂 DMMP 在 $810, 920, 1040 cm^{-1}$ 带有特征峰,主要用于模拟含磷成份的气体.其光谱吸收系数如图 2 所示,图 3 给出对 DMMP 不同浓度程长积的几组仿真结果.其中横坐标为波数 (cm^{-1}),纵坐标为光谱辐射亮度 ($W/cm^2 \cdot sr \cdot cm^{-1}$), c 表示常数.图中清楚地表明,当气体的 $CL < 150 mg/m^2$ 时,DMMP 的光谱特征较明显,从直观上就可识别出这种化学气体.当 $CL = 1000 mg/m^2$ 时,DMMP 的特征更为显著.但在 $1040 cm^{-1}$ 带上已经出现饱和.图中曲线 ΔI 表示等效温度 T_{eff} 的黑体辐射值 $B(\nu, T_{eff})$ 与实测背景辐射 $I_0(\nu)$ 之差.

为说明仿真结果的可靠性,图 4 给出了实测野外场地施放化学模拟剂 DMMP 的红外光谱和仿真结果的比较.图中曲线表明:两种光谱符合得很好,说明仿真结果是可靠的,叠加模型仿真化学烟雾的方法是可行的.仿真中使用 $CL = 350 mg/m^2$.实验场地的条件为:背景有山、树,环境温度 $19^\circ C$,风速 $2 m/s$.

图 4 中仿真结果和实测结果存在差异的主要原因之一是:由于实际化学云团的内部结构极其复杂,且分布不可能是均匀的,而仿真中均假定化学云团的分布是均匀的.另外,对于野外实测 DMMP 光谱,虽然采取了悬空爆弹方式以减小尘土的干扰,但由于爆弹的初生云

团不仅含有 DMMP, 同时还携带有大量的硝烟及尘土, 因此获取的光谱总是目标烟雾与硝烟、尘土的混合谱, 这也是仿真结果与实测结果存在差异的主要原因。尽管存在差异, 但对图 4 分析比较表明对 DMMP 的仿真结果和实测结果符合得非常好, 仿真化学烟雾光谱特征的方法是正确的。

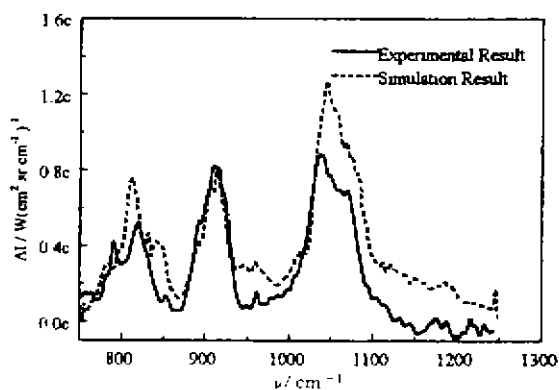


图 4 实验结果和仿真结果的比较

Fig. 4 The results of experiment compared with simulation

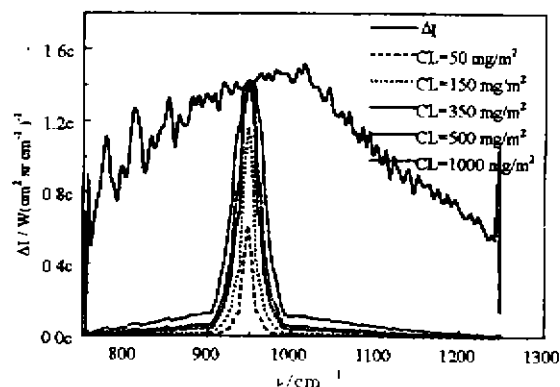


图 5 模拟剂 SF₆ 的仿真结果

Fig. 5 The results of simulation for SF₆

由于模拟剂 SF₆ 在 930cm⁻¹ 带上有一个极强的峰, 因此通常用它来作化学烟雾的模拟剂, 进行测试遥测系统的工作状态。利用实测背景光谱, 图 5 给出几组浓度程长积的仿真结果, 表明当气体 SF₆ 的浓度程长积为 CL=50mg/m² 时, 模拟剂 SF₆ 的特征十分明显, 很有利于该种气体特征的识别。当 CL=1000mg/m² 时的仿真结果中, SF₆ 的特征已出现饱和, 这说明再继续增大 CL 值, SF₆ 的特征不可能有大的变化。

由于化学气体 GB 的最强峰值约为模拟剂 SF₆ 峰值的 1/8, 而 GB 的红外光谱特征有些类似于模拟剂 DMMP 的红外光谱特征, 在 810、920、1040cm⁻¹ 带附近有特征峰变化。因此从仿真的结果图 6 得到: 当化学气体 GB 的 CL 接近 3000mg/m² 时, 其最强光谱特征才接近饱和。对于 CL=150mg/m² 和 CL=500mg/m², 化学气体 GB 的特征都比较明显, 化学探测

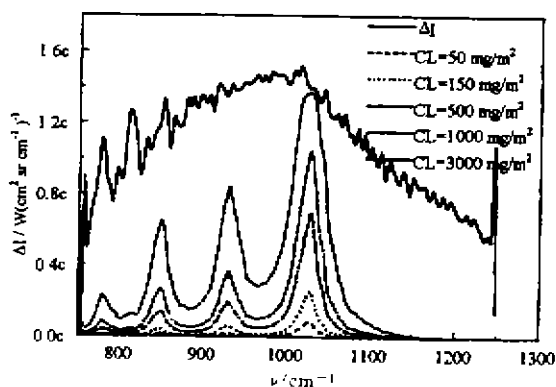


图 6 化学气体 GB 的仿真结果

Fig. 6 The results of simulation for GB

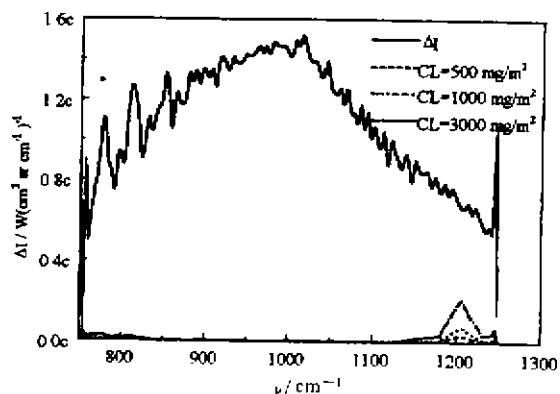


图 7 化学气体 HD 的仿真结果

Fig. 7 The results of simulation for HD

器有能力探测这些特征并进行特征识别。

化学气体 HD 的主要光谱特征峰值仅约模拟剂 SF₆ 的 1/30, 而且它的光谱特征处于大气窗口(700~1300cm⁻¹)的边缘, 对图 7 几组 CL 值的仿真结果, 直观上, 只有在 700cm⁻¹和 1200cm⁻¹附近, 有 HD 的特征出现, 而且特征峰的大小比其它几种化学气体要小得多。尽管 CL 已高达 3000mg/m², 但光谱特征仍未出现饱和。

3 结语

在建立叠加模型仿真化学烟雾红外光谱特征的基础上, 利用 FTIS 实测各种背景光谱, 仿真出模拟剂 DMMP、SF₆ 和真实气体 GB、HD 的红外光谱特征, 这对建立化学云团特征训练数据有重要意义, 是研制可实际应用的多种气体鉴别器的基础。使用仿真模型不仅可预测几种化学气体的 CL 探测极限, 仿真光谱还可用于特殊化学探测器性能的评估, 有助于指导和改进探测器的发展方向, 同时还可作为评价特征提取及识别信号等处理算法的手段。

REFERENCES

- 1 Hoffland L D, Piffath R J, Bouck J B. *Opt. Eng.*, 1985, 24(6): 982~984
- 2 Zhou X J, Tao S C, Yao K Y eds. *Advanced Atmospheric Physics*, Beijing: Meteorological Press (周秀骥, 陶善昌, 姚克亚编, 高等大气物理学. 北京: 气象出版社), 1991, 1049~1054
- 3 Griffiths P R, de Haseth J A. *Fourier Transform Infrared Spectrometry*, A Wiley-interscience Publication, New York: John Wiley & Sons. 1986, 338

SUPERIMPOSITION MODEL ON COMPUTER SIMULATION FOR SPECTRA OF CHEMICAL SMOKE

ZHANG Jun JIANG Fei-Qiao* XUN Yu-Long

(Anhui Institute of Optics and Fine Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Hefei, Anhui 230031, China)

Abstract The superimposition model of computer simulation for infrared spectra of chemical smoke radiative transfer was proposed. Infrared spectra of several compounds were shown by using large background spectra which were measured by Fourier transform infrared spectrometer. Finally, the results of simulation were discussed.

Key words chemical smoke, infrared spectrum, simulation, model.

* Department of physics, Fudan University, Shanghai 200433, China
Received 1997-07-22, revised 1997-09-05