

不同版本 HITRAN 数据库对高层大气辐射传输影响特性分析

戴聪明^{1,2} 魏合理¹ 胡顺星¹

(¹ 中国科学院安徽光学精密机械研究所中国科学院大气成分与光学重点实验室, 安徽 合肥 230031)
² 中国科学院大学, 北京 100049)

摘要 高分辨透射率谱线(HITRAN)数据库是构建各种大气辐射传输模式的基本参数,其分子谱线参数的改进,有助于提高大气辐射传输的计算精度。简述了最近几个版本的 HITRAN 数据库,比较 7 种大气分子(H₂O、CO₂、O₃、CO、CH₄、NO 和 OH)在不同版本 HITRAN 数据库中的红外波段谱线参数差异,计算了其在局域热平衡和非局域热平衡条件下的总内配分函数;利用高层大气辐射传输软件(SHARC),分析了不同 HITRAN 数据库对以上 7 种大气分子在 2~40 μm 波段的光谱透射率和热辐射的影响特性。结果表明:在切线高度为 30 km 处,0.5 cm⁻¹ 光谱分辨率条件下,不同 HITRAN 数据库在 600~750 cm⁻¹, 950~1150 cm⁻¹, 3600~3800 cm⁻¹ 波段的平均透射率的相对偏差分别为 0.23%, 0.39%, 0.34%, 在单个波数上的最大相对偏差达 16%;不同 HITRAN 数据库在 550~750 cm⁻¹, 1490~1690 cm⁻¹, 3600~3800 cm⁻¹ 波段的积分辐射相对偏差分别为 1.95%, 1.65%, 15.94%。HITRAN08 数据库中的谱线参数最为准确,包含了许多分子弱谱线,对窄波段内高层大气的分子吸收和热辐射有一定影响。

关键词 大气光学; HITRAN; 非局域热平衡; 分子吸收; 光谱辐射; 上层大气

中图分类号 P407.6 **文献标识码** A **doi**: 10.3788/AOS201333.0501001

Analysis on Upper Atmospheric Radiance Transfer Characteristic to Different HITRAN Databases

Dai Congming^{1,2} Wei Heli¹ Hu Shunxing¹

(¹Key Laboratory of Atmospheric Composition and Optical Radiation, Anhui Institute of Optics and Fine Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Anhui, Hefei 230031, China
²University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)

Abstract High resolution transmission (HITRAN) database is the basic database of atmospheric radiance transfer model. Improvements in spectroscopic parameters enhance the calculation accuracy of atmospheric radiance transfer. The development of HITRAN database is briefly reviewed. The spectroscopic parameters of seven infrared-active trace species (H₂O, CO₂, O₃, CO, CH₄, NO, OH) listed in the different HITRAN databases are compared, and the total internal partition sums both in local thermodynamic equilibrium (LTE) and non-LTE conditions are calculated. Using the strategic high-altitude radiance code (SHARC), the impact of different HITRAN databases on upper atmospheric infrared radiance transfer are analyzed. The results show that, on the 600~750 cm⁻¹, 950~1150 cm⁻¹, 3600~3800 cm⁻¹ spectral regions, the relative differences of average transmittances are 0.23%, 0.39%, 0.34% for different HITRAN databases, and the maximum relative difference is 16% at single wavenumber with 0.5 cm⁻¹ spectral resolution; the relative differences of intergated radiances on 550~750 cm⁻¹,

收稿日期: 2012-12-13; 收到修改稿日期: 2013-02-01

基金项目: 国家 863 计划和国家自然科学基金(61077081)资助课题。

作者简介: 戴聪明(1987—),男,博士研究生,主要从事高层大气辐射传输模式方面的研究。

E-mail: dcm3918@mail.ustc.edu.cn

导师简介: 魏合理(1965—),男,博士,教授,主要从事大气辐射传输模式研究和卷云辐射传输模式等方面的研究。

E-mail: hlwei@aiofm.ac.cn(通信联系人)

1490~1690 cm^{-1} , 3600~3800 cm^{-1} are 1.95%, 1.65%, 15.94% for different HITRAN databases. HITRAN08 database has better precision on spectral line parameters, including many molecular weak lines, and can be used to calculate molecular absorption and thermal radiance of upper atmosphere accurately in the narrow band.

Key words atmospheric optics; HITRAN; non-local thermodynamic equilibrium; molecular absorption; spectral radiance; upper atmosphere

OCIS codes 010.1030; 010.1280; 010.1285; 010.1290; 010.1320

1 引 言

高分辨透射率谱线(HITRAN)数据库广泛应用于辐射传输计算、大气遥感和探测等领域。自从1982年美国空军地球物理实验室(AFGL)谱线参数数据库诞生以来,目前已发布了5个主要版本的HITRAN数据库^[1~5],最新版本数据库为HITRAN08。理论量子机理计算的发展和实验光谱测量技术的改进,提高了数据库中谱线参数的精度,增加了能级跃迁的谱线参数、分子总类、光谱带及少数同位素^[6],但一些谱线参数,如谱线位置、谱线强度、空气加宽半峰全宽和低态能量等,仍存在一定不确定性,影响大气辐射传输软件(SHARC)模拟的分子吸收与发射,给卫星反演地球大气温度、计算各种气体的浓度带来一定的误差。

国际上许多研究者针对特定的中低光谱分辨率辐射传输软件,评估了不同版本HITRAN数据库对其最终的辐射传输计算所带来的不确定性^[7~9]。国内亦有学者评估了其对于低层大气辐射传输的影响特性^[10,11]。但以上研究只分析了HITRAN光谱数据库对低层大气局域热平衡(LTE)条件下辐射传输的影响,未对高层大气非局域热平衡(non-LTE)辐射传输的影响特性展开研究。随着空间探测及遥感技术的发展^[12],根据高层大气辐射测量反演高层大气参数信息成为研究的热点,前提必须根据高层大气内部的各种物理化学过程,构建精确的non-LTE辐射传输模式。若要满足气候模式研究及空间目标红外辐射测量等光电工程上的需求^[13],开展高层大气non-LTE辐射传输模式研究,必须具备可靠的谱线参数数据库。

本文首先比较了H₂O(包含161、181、171、182 4种同位素)、CO₂(包含626、636和627 3种同位素)、O₃、CO、CH₄、NO和OH 7种红外辐射气体在不同版本HITRAN数据库中的谱线参数差异,并计算了其在LTE和non-LTE条件下的总内配分函数,利用高层大气辐射传输软件,比较不同版本HITRAN数据库对以上7种高层大气分子吸收和发射辐射的影响,并详细分析了其产生的原因。

2 HITRAN 数据库和高层大气辐射传输模型

HITRAN数据库中每条谱线包含分子代号、同位素代号、中心波数、线强、空气加宽半峰全宽和低态能量等参数信息。其中HITRAN04和HITRAN08版本数据库采用爱因斯坦自发辐射系数 $A^{[14,15]}$ 代替之前的跃迁动量平方,且采用15个字符代替之前的整形数字来标识高低态全局量子数。为便于non-LTE辐射传输计算,有必要把HITRAN04和HITRAN08数据库中各条谱线的字符型标识符(1985年代号)转化为整形的能级代号(1982年代号)。

表1给出了HITRAN86、HITRAN96、HITRAN2K、HITRAN04和HITRAN08 5个版本数据库中7种大气分子(其中,H₂O包含161,162,171和181 4种同位素,CO₂包含626,627和628 3种同位素,其他成分均为主同位素)在250~5000 cm^{-1} 波段的谱线参数统计信息,表中所有数据是在温度296 K和气压1013.25 hPa条件下的观测值。 N 为谱线数, $\sum S$ 表示总线强[单位: $\text{cm}^2/(\text{mol} \cdot \text{cm})$], $\sum(S_{\alpha})/\sum S$ 表示加权洛伦兹半峰全宽(单位: cm^{-1})。由表1可以看出,不同版本HITRAN数据库中,H₂O的谱线数变化不大,仅谱线强度和加权洛伦兹半峰全宽略有变化;CO₂的总谱线强度和加权洛伦兹半峰全宽几乎不变,但谱线数由2004年的44034猛增到2008年的205625,增幅为4.67倍,说明这些增加的谱线主要是由实验和理论计算得到的弱谱线,对总谱线强度的贡献不大;O₃和OH的谱线数逐渐增加,总谱线强度逐渐增强,加权洛伦兹半峰全宽随之变化,其中HITRAN96数据库中OH的加权洛伦兹半峰全宽不同于其他数据库,存在明显偏差。随着HITRAN数据库的更新,CH₄和NO谱线参数一直在变化。

高层大气辐射传输软件^[16],采用气体分子单谱线等效近似的吸收带模式和蒙特卡罗辐射传输算法,可计算H₂O(包含上述4种同位素)、CO₂(有3种同位素)、O₃、CO、CH₄、NO和OH的分子吸收和发射光谱。在计算气体分子吸收系数时,采用改进

的 HITRAN86 数据库,包含跃迁中心频率、谱线强度、空气加宽半峰全宽、低振动态能量和高低振动态

表 1 250~5000 cm⁻¹ HITRAN 中主要吸收气体的谱线统计Table 1 Spectral line statistics of major infrared absorbers listed in HITRAN from 250~5000 cm⁻¹

Molecule	H ₂ O	CO ₂	O ₃	CO	CH ₄	NO	OH	
N	86	24278	55004	162932	400	25053	10973	1881
	96	24684	43726	143752	496	28159	13364	3912
	2K	24922	43726	143725	496	28998	15689	12310
	04	25171	44034	166256	496	139989	25760	12932
	08	25170	205652	227502	496	163451	58760	11179
ΣS / [cm ² /(mol·cm)]	96	3.029×10 ⁻¹⁷	1.125×10 ⁻¹⁶	1.781×10 ⁻¹⁷	1.005×10 ⁻¹⁷	1.742×10 ⁻¹⁷	4.674×10 ⁻¹⁸	5.836×10 ⁻¹⁸
	2K	3.041×10 ⁻¹⁷	1.125×10 ⁻¹⁶	1.781×10 ⁻¹⁷	1.005×10 ⁻¹⁷	1.744×10 ⁻¹⁷	4.665×10 ⁻¹⁸	6.603×10 ⁻¹⁸
	04	3.090×10 ⁻¹⁷	1.125×10 ⁻¹⁶	1.723×10 ⁻¹⁷	1.004×10 ⁻¹⁷	1.739×10 ⁻¹⁷	4.665×10 ⁻¹⁸	6.673×10 ⁻¹⁸
	08	3.137×10 ⁻¹⁷	1.125×10 ⁻¹⁶	1.725×10 ⁻¹⁷	1.004×10 ⁻¹⁷	1.742×10 ⁻¹⁷	4.665×10 ⁻¹⁸	6.568×10 ⁻¹⁸
Σ(S _α) / ΣS /cm ⁻¹	96	0.07526	0.07358	0.07234	0.06062	0.05924	0.05017	0.08225
	2K	0.07458	0.07358	0.07234	0.06062	0.05924	0.05013	0.04901
	04	0.07643	0.07358	0.07642	0.06062	0.05894	0.05619	0.04894
	08	0.07138	0.07358	0.07644	0.06062	0.05865	0.05619	0.05058
ΣA /s ⁻¹	04	1.444×10 ⁵	1.691×10 ⁶	1.782×10 ⁵	6.625×10 ³	7.898×10 ⁴	1.041×10 ⁵	7.256×10 ⁵
	08	1.444×10 ⁵	4.791×10 ⁶	1.893×10 ⁵	6.625×10 ³	8.495×10 ⁴	2.161×10 ⁵	2.297×10 ⁵

3 光谱参数处理算法

HITRAN 数据库提供了参考温度 296 K 下的谱线参数信息,考虑实际高层大气模式下的谱线参数的温度修正,可得到地面反照光和太阳光对高层

大气的激发速率,也可反映由辐射去激发和大气发射导致分子激发态数密度的增强。在高层大气 non-LTE 条件下,谱线强度的温度修正可表达为^[14]

$$\frac{S_{m'}(T)}{S_{m'}(T_{\text{ref}})} = \frac{Q_v(T_{\text{ref}})Q_r(T_{\text{ref}})}{Q_v(T)Q_r(T)} \frac{\exp[-hcE_n/(kT)]}{\exp[-hcE_n/(kT_{\text{ref}})]} \frac{1 - \exp[-hc\omega_m/(kT)]}{1 - \exp[-hc\omega_m/(kT_{\text{ref}})]}, \quad (1)$$

式中 $S_{m'}(T_{\text{ref}})$ 是参考温度 T_{ref} 下的光谱线强度, m' 为振-转系统中的低-高态能级, h 为普朗克常数, k 为玻尔兹曼常数, E_n 为低态能量, ω_m 为谱线中心频率, Q_v 、 Q_r 分别为温度 T 下的振动配分函数和转动配分函数,其具体计算方法参见下文介绍。(1)式右边第三项为分子振动态数目的玻尔兹曼比率,第四项表示受激发射效应。

为加快计算速度,采用单条谱线等效带宽近似,处理分子振动能级跃迁的光谱带,即对光谱带中各条谱线的线强取对数,然后在谱线强度的单个数量级范围内划分 3 个间隔,并把谱线强度间隔内的所有谱线等效为单一谱线,该间隔内谱线的条数为有效谱线的统计权重。如单个谱线强度间隔内存在 L 条谱线,其等效谱线强度为

$$S_{\text{eff}}(T) = \sum_{i=1}^L S(T) / L, \quad (2)$$

式中 $S(T)$ 为温度 T 下众多谱线中一根谱线的强

度。因此,在保证计算精度前提下,有效谱线数目降低了几个数量级。

文献[17,18]采用拉格朗日 4 点插值方法计算了 LTE 条件下各种气体在 70 K~3000 K 范围内的总内配分函数,其表达式为

$$Q(T) = a + bT + cT^2 + dT^3, \quad (3)$$

式中 a 、 b 、 c 和 d 均为特定气体分子同位素的系数。

在 non-LTE 条件下,大气分子激发态的振动温度和转动温度并不相同,通常后者等于大气温度。因此,有必要把总内配分函数 $Q(T) = Q_v(T)Q_r(T)$ 拆分为振动配分函数和转动配分函数进行单独处理^[19,20]。振动配分函数 $Q_v(T)$ 的海森堡简谐共振近似(HOA of Herzberg)表达式为

$$Q_v(T) = \prod \left[\frac{1}{1 - \exp\left(-\frac{hc\varepsilon_i}{kT}\right)} \right], \quad (4)$$

式中 ε_i 为分子基态振动能量,转动配分函数 $Q_r(T)$

的分析表达式为

$$Q_r^l(T) = a_r^l + b_r^l T + c_r^l T^2 + d_r^l T^3, \quad (5)$$

式中系数 a_r^l 、 b_r^l 、 c_r^l 和 d_r^l 是通过非线性最小二乘算法得到的拟合系数。文献[13]详细说明了地球大气 100 K~450 K 温度下的分子振动配分函数的计算方法。在低热层以上的 non-LTE 区域,大气温度通常高于 500 K,且随高度的上升而增加。因此,可将以上 non-LTE 条件下的总内配分函数扩展到 500 K 以上的高温区域。

根据总内配分函数的计算算法,得到了 100 K~1000 K 温度内以上 7 种大气分子在 LTE 和 non-LTE 条件下的总内配分函数。图 1 给出了 2 种典型红外

辐射气体(H₂O 和 CO₂)总内配分函数在 LTE 与 non-LTE 条件下的比值。其中图 1(a)表明,200 K 以下的低温区域,H₂O 主要同位素 161 在 non-LTE 与 LTE 条件下的总内配分函数相对偏差小于 1%,但少数同位素 181、171 和 182 的差异超过 4%,500 K 以上的高温区域,non-LTE 条件下 H₂O 的总内配分函数逐渐强于 LTE 下的数值。图 1(b)显示当温度小于 500 K 时,3 种 CO₂ 同位素的总内配分函数在 LTE 和 non-LTE 条件下的差异均小于 0.05%,500K 以上的高温区域,CO₂ 同位素在 LTE 和 non-LTE 条件下的总内配分函数差异较大,如 626 主同位素的最大相对差达 3.5%。

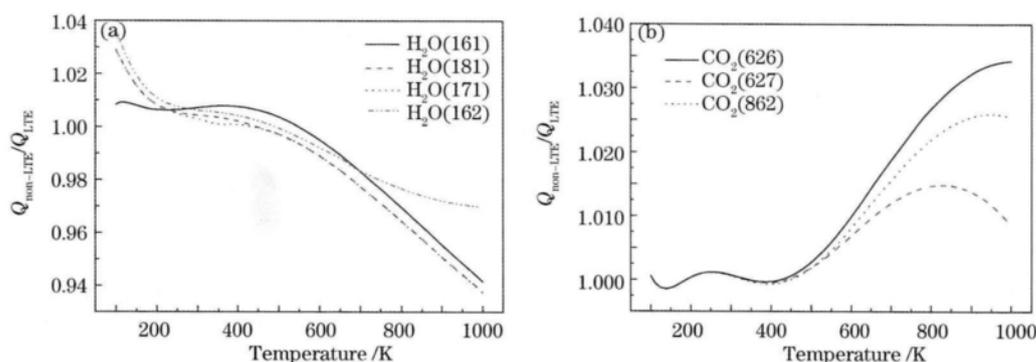


图 1 Non-LTE 与 LTE 条件下总内配分函数的比值。(a) H₂O 4 种同位素; (b) CO₂ 3 种同位素
Fig. 1 Ratio of total internal partition sums under non-LTE and LTE conditions. (a) Four isotopes of H₂O; (b) three isotopes of CO₂

4 光谱吸收和光谱辐射的比较

由第 3 节中计算的 non-LTE 条件下总内配分函数,根据(1)式对谱线强度进行温度修正,构建了新的分子吸收带模式文件。为说明 HITRAN86、HITRAN96、HITRAN2K、HITRAN04 和 HITRAN08 数据库中谱线差异对以上 7 种气体分子吸收及热辐射的影响特性,利用高层大气辐射传输软件,选择计算参数如下:900 km 观测高度上,临边切线高度为 30 km,北纬 35°白天大气参数,太阳天顶角为 23.25°,得到 7 种大气分子在不同 HITRAN 数据库下的光谱透射率和光谱辐射,其中光谱分辨率为 0.5 cm⁻¹。

4.1 不同 HITRAN 数据库中气体吸收特性分析

图 2 是采用 5 个版本 HITRAN 数据库中 4 种典型分子的谱线参数计算的光谱透射率 η 。图 2(a)显示不同 HITRAN 数据库中 H₂O 的光谱透射率差异。吸收最强的当属 $\lambda=6.3 \mu\text{m}$ 振转带(ν_2 基频带)和 $\lambda>12 \mu\text{m}$ 的转动带,前者主要由(010-000)和(020-000)两个振动跃迁构成,其次较强的吸收带为 2.7 μm 光谱

带,1.87 μm 和 3.2 μm 也有较弱的吸收。由水汽光谱透射率偏差可知,HITRAN04 与 HITRAN08 数据库中的水汽谱线参数仅在 1587.3016 cm⁻¹ 处有细微差别,而 HITRAN86 和 HITRAN96 数据库中的水汽谱线参数差异不大。和 HITRAN08 相比,HITRAN2K 数据库中的水汽吸收光谱带上的差异最大。

图 2(b)显示了 CO₂ 在 2.7,4.3,15 μm 具有较强的吸收,在 2.0 μm 和 4.8 μm 处有一系列弱吸收带。2008 年以前的各版本数据库中 CO₂ 的光谱吸收非常接近。而 HITRAN08 数据库新增了大量 CO₂ 弱谱线,其吸收相应增强。图 2(c)显示出不同 HITRAN 数据库下 O₃ 在几个重要吸收带上的透射率存在的差异。与 HITRAN08 相比,HITRAN86、HITRAN96 和 HITRAN2K 在 14.1,9.6,4.7 μm 上的谱线参数均存在较大差异,其中 4.7 μm 处主要是能级跃迁(002-000)、(111-000)和(101-000)引起的;14.1 μm 主要是由(011-001)、

(110-100)、(020-010)和(010-000)谱线跃迁构成。与此同时,在 O_3 几个弱吸收带上,以上数据库还存在差异,如 3.3, 3.6, 5.7 μm 波段。而 HITRAN04 与 HITRAN08 光谱数据库主要在 3.3 μm (中心波

数为 3000 cm^{-1})附近存在较大差异,这是因为(030-000)跃迁谱线(中心波数为 3046.0882 cm^{-1})的谱线位置、强度和低态能量均发生变化。

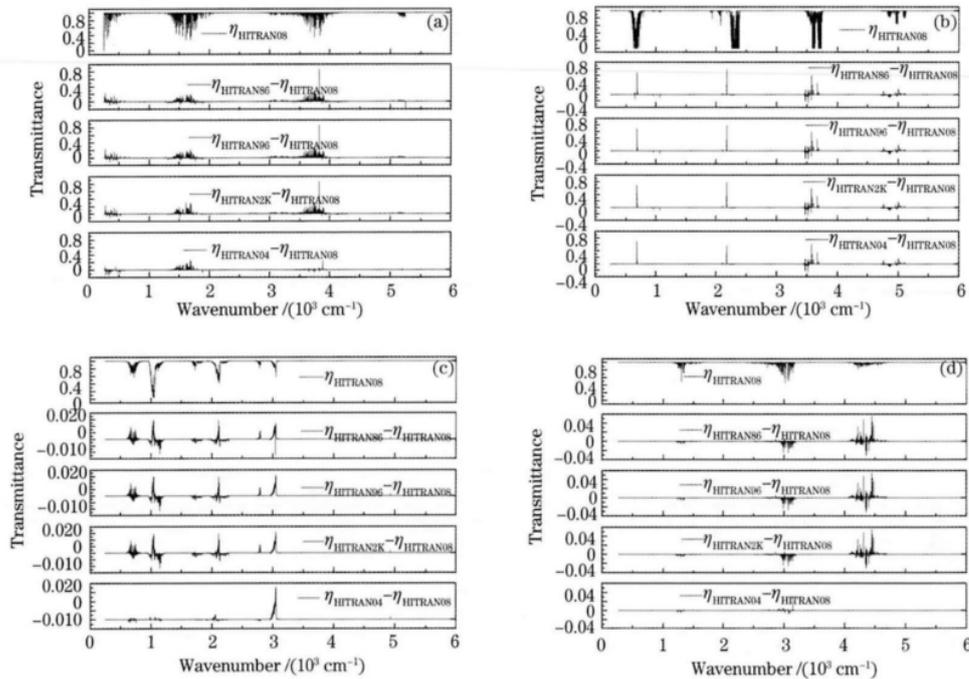


图 2 不同 HITRAN 数据库中大气分子透射率的差异。(a) H_2O ; (b) CO_2 ; (c) O_3 ; (d) CH_4

Fig. 2 Difference of atmospheric transmittances in different HITRAN databases. (a) H_2O ; (b) CO_2 ; (c) O_3 ; (d) CH_4

图 2(d)显示不同 HITRAN 数据库下 CH_4 分子的光谱透射率。 CH_4 作为球形陀螺分子,红外 $3.31\text{ }\mu\text{m}$ (ν_3 带)和 $7.66\text{ }\mu\text{m}$ (ν_4 带)是较强吸收带,在 $2.13\sim 2.44\text{ }\mu\text{m}$ 存在较弱的吸收。从图 2(d)中可知,在 $3.31\text{ }\mu\text{m}$ 光谱带附近,由 HITRAN08 计算的 CH_4 吸收透射率都较其他版本 HITRAN 数据库要小。在 4380 cm^{-1} 附近, HITRAN86、HITRAN96 和 HITRAN2K 存在几个较强的吸收谱线,而在 HITRAN04 和 HITRAN08 数据库中, CH_4 在该波数区域内的吸收很弱,表明其谱线很少或很弱。另外,在 4200 cm^{-1} 以后区域,不同 HITRAN 数据库之间的差别主要是由单个计算波数间隔内的谱线数不同造成的,如在 4449 cm^{-1} , HITRAN2K 只存在 10 条有效谱线,总线强为 $5.7426 \times 10^{-21}\text{ cm}^2/(\text{mol}\cdot\text{cm})$,而 HITRAN08 存在 74 条谱线,总线强为 $3.0979 \times 10^{-16}\text{ cm}^2/(\text{mol}\cdot\text{cm})$,其吸收比 HITRAN2K 强许多,透射率相应变小。图中还显示 HITRAN04 和 HITRAN08 数据库中 CH_4 透射率差异较小,表明其谱线参数变化不大。

图 3 为切线高度为 30 km 处包含上述 7 种大气分子的临边光谱透射率。图 3 显示,采用不同版本 HITRAN 数据库计算的大气光谱透射率存在一定差异,如在 687 cm^{-1} 和 687.5 cm^{-1} 上,不同版本 HITRAN 数据库之间的相对偏差达到最大值,即

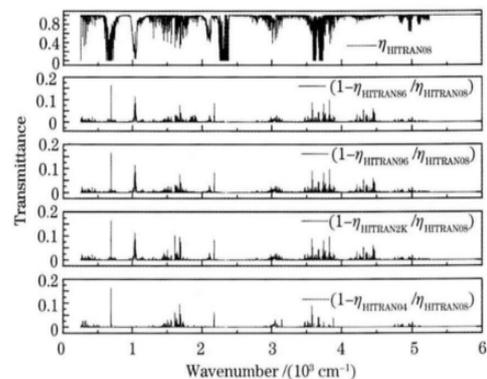


图 3 不同 HITRAN 数据库中 7 种分子光谱透射率的比较

Fig. 3 Comparison of spectral transmittances of seven molecules in different HITRAN databases

2008 年以前数据库与 HITRAN08 间的最大差异均超过 16%，这主要是因为该波数处于 CO₂ 15 μm 强吸收带上，本身大气透射率很低，同时 HITRAN08 数据库中新增了大量 CO₂ 弱谱线，导致其吸收相应增强。不同 HITRAN 数据库中的谱线参数差异主要在于分子强吸收带上，如在 H₂O 6.3 μm, CO₂ 2.7, 4.3, 15 μm, O₃ 9.6 μm, NO 5.4 μm, CH₄ 3.31 μm 等处。表 2 给出了几个重要分子光谱带上透射率的统计值，从表中可知，在 600~750 cm⁻¹ 波段(主要包含 CO₂ 15μm 吸收带，同时包含 O₃ 14.1 μm 少量吸收)，2004 年以前的数据库与 HITRAN08 在该波段内的平均透射率相对偏差均大于或等于 0.23%，而 HITRAN04 与 HITRAN08 之间的差异仅为 0.01%。在 950~1150 cm⁻¹ 波段(包含 O₃ 9.6 μm

强吸收带)，2004 年之前的数据库与 HITRAN08 间的透射率相对偏差在 0.4% 左右，而 HITRAN04 与 HITRAN08 间的平均相对偏差仅为 0.2%。在 2200~2400 cm⁻¹ 波段(包含 4.3 μm 强吸收带)，不同版本 HITRAN 数据库与 HITRAN08 间的平均相对偏差小于 0.1%。对于 3600~3800 cm⁻¹ 波段(包含 2.7 μm 吸收带)，2004 年之前的数据库中的谱线参数变化不大，与 HITRAN08 间的透射率相对偏差为 0.34%，而 HITRAN04 与 HITRAN08 间的相对偏差仅为 0.08%。因此，HITRAN86 与 HITRAN08 数据库中的光谱参数偏差最大，HITRAN04 与 HITRAN08 数据库中的谱线参数最为接近。

表 2 重要光谱带的平均透射率

Table 2 Average transmittances on importance spectral bands

HITRAN database	Spectral band /cm ⁻¹					
	600~750	950~1150	1490~1690	1780~1980	2200~2400	3600~3800
$\bar{\eta}_{\text{HITRAN08}}$	0.502	0.664	0.934	0.969	0.508	0.709
$(1 - \eta_{\text{HITRAN86}} / \eta_{\text{HITRAN08}}) / \%$	0.26	0.40	0.18	0.32	0.08	0.34
$(1 - \eta_{\text{HITRAN96}} / \eta_{\text{HITRAN08}}) / \%$	0.23	0.39	0.18	0.05	0.04	0.34
$(1 - \eta_{\text{HITRAN2K}} / \eta_{\text{HITRAN08}}) / \%$	0.23	0.39	0.18	0.04	0.04	0.34
$(1 - \eta_{\text{HITRAN04}} / \eta_{\text{HITRAN08}}) / \%$	0.01	0.02	0.17	0.01	0.00	0.08

4.2 高层大气光谱背景辐射的比较

图 4 为以上 7 种大气分子组成的混合大气临边光谱辐射 R 。从 4(b) 图中的偏差光谱线中可知，与 HITRAN08 数据库相比，其他数据库在 4 μm 以上光谱区域差异较大，尤其是在 700, 1600, 3700 cm⁻¹ 附近。与此同时，其他数据库引起的光谱差异较小。在整个波段范围内，HITRAN86、HITRAN96、HITRAN2K、

HITRAN04 和 HITRAN08 5 个数据库的积分辐射分别为 $1.552 \times 10^{-3}, 1.549 \times 10^{-3}, 1.5490 \times 10^{-3}, 1.546 \times 10^{-3}, 1.577 \times 10^{-3}$ W/(cm²·sr)，HITRAN08 数据库的总辐射比其他数据库偏大，这主要是由 HITRAN08 数据库中新增加了大量弱谱线造成的。但是 2008 年以前的各版本 HITRAN 数据库，整个宽波带上的积分辐射差异较小。

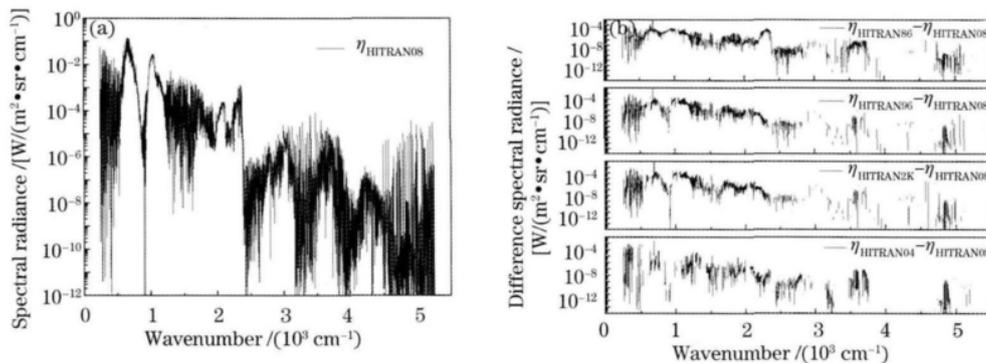


图 4 不同 HITRAN 数据库中所有成分的光谱辐射比较

Fig. 4 Comparison of spectral radiances of seven molecules in different HITRAN databases

表 3 给出了不同 HITRAN 数据库中，各气体重要光谱带的积分辐射。从中可知，在 550~750 cm⁻¹ 波段内，其他数据库的积分辐射均比 HITRAN08 计

算值小 1.9% 以上，这是因为 HITRAN08 数据库包含大量 CO₂ 弱谱线，其发射辐射得以增强。O₃ 9.6 μm 强辐射带是 950~1150 cm⁻¹ 波段的主要发射源，表中

显示 HITRAN86 的积分辐射与 HITRAN08 数据库计算值间的相对偏差为 0.32%，而其他数据库与 HITRAN08 间的相对偏差小于 0.1%，表明 O₃ 在不同 HITRAN 数据库中的谱线强度差异不大。在 1490~1690 cm⁻¹ 波段，由于 HITRAN 数据库中的谱线参数的不确定性，导致采用 2008 年以前数据库计算的积分辐射比 HITRAN08 大 1.6% 以上。1780~1980 cm⁻¹ 波段，除 HITRAN04 之外，其他数据库与 HITRAN08 间的相对偏差均超过 1%，尤其是 HITRAN86 与 HITRAN08 数据库间的相对

偏差达 4%。在 2200~2400 cm⁻¹ 波段，采用 HITRAN86 计算的积分辐射比 HITRAN08 大 25%，而其他数据库与 HITRAN08 相差 1% 左右，这一差异主要是由 CO₂ 和 O₃ 谱线参数的不确定性引起的。因此，这一波段内的 HITRAN86 光谱参数存在较大偏差。在 3600~3800 cm⁻¹ 大气窗口波段，HITRAN96 和 HITRAN2K 计算的分辐射比 HITRAN08 大 15% 以上，HITRAN04 比后者大 6.5%，说明 HITRAN08 数据库中新增加的 CO₂ 弱谱线对 2.7 μm 波段的辐射有一定影响。

表 3 重要光谱吸收带的积分辐射[单位: W/(cm²·sr)]Table 3 Integrated radiances in importance spectral bands [unit: W/(cm²·sr)]

HITRAN database	Spectral band /cm ⁻¹					
	550~750	950~1150	1490~1690	1780~1980	2200~2400	3600~3800
R_{HITRAN08}	1.781×10^{-3}	1.803×10^{-4}	4.685×10^{-7}	7.943×10^{-7}	3.003×10^{-5}	3.276×10^{-7}
$(1-R_{\text{HITRAN86}}/R_{\text{HITRAN08}})/\%$	1.95	0.32	-1.65	-3.91	25.07	-3.79
$(1-R_{\text{HITRAN96}}/R_{\text{HITRAN08}})/\%$	1.95	0.06	-1.65	1.33	-1.08	-15.94
$(1-R_{\text{HITRAN2K}}/R_{\text{HITRAN08}})/\%$	1.95	0.07	-1.82	1.05	-1.09	-15.48
$(1-R_{\text{HITRAN04}}/R_{\text{HITRAN08}})/\%$	2.33	0.03	-1.90	0.21	-0.03	-6.54

5 结 论

简述了最近几个版本的高分辨率分子吸收光谱参数数据库 HITRAN，比较了不同版本 HITRAN 数据库中的 H₂O、CO₂、O₃、CO、CH₄、NO 和 OH 7 种分子在 2~40 μm 波段的谱线参数，计算了其在 LTE 和 non-LTE 下的总内配分函数，并对高层大气分子谱线进行温度修正，得到新的光谱带参数文件。最后结合高层大气辐射传输软件，模拟了以上 7 种大气分子在 30km 以上高层大气中的辐射传输特性。结果表明：

1) 2004 年以前的 HITRAN 数据库与 HITRAN08 数据库在 600~750 cm⁻¹，950~1150 cm⁻¹，3600~3800 cm⁻¹ 波段的透射率相对偏差分别为 0.23%，0.39%，0.34%；在 0.5 cm⁻¹ 分辨率条件下，不同 HITRAN 数据库在 687 cm⁻¹ 单个波数点处的透射率相对偏差达最大值 16%；

2) 不同版本 HITRAN 数据库中在 550~750 cm⁻¹，1490~1690 cm⁻¹，3600~3800 cm⁻¹ 波段的积分辐射相对偏差分别为 1.95%，1.65%，15.94%。

对于空间弱目标红外辐射测量，应扣除高层大气红外背景辐射的影响，同时也应考虑高层大气分子吸收造成的辐射衰减；对于窄波段红外探测，应考虑分子强吸收带，合理选择探测波段。因此，利用更精确的分子吸收光谱参数数据库 HITRAN08，结合

高层大气辐射传输软件，可准确模拟高层大气分子吸收与热辐射，有助于光电探测领域的仪器性能优化设计和红外辐射测量领域内的大气修正研究。

参 考 文 献

- 1 L. S. Rothman, R. R. Gamache, A. Goldman *et al.*. The HITRAN database; 1986 edition [J]. *Appl. Opt.*, 1987, **26**(19): 4058~4097
- 2 L. S. Rothman, C. P. Rinsland, A. Goldman *et al.*. The HITRAN molecular spectroscopic database and HAWKS (HITRAN Atmospheric Workstation); 1996 edition [J]. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 1998, **60**(5): 665~710
- 3 L. S. Rothman, A. Barbe, D. C. Benner *et al.*. The HITRAN molecular spectroscopic database; edition of 2000 including updates through 2001 [J]. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 2003, **82**(1-4): 5~44
- 4 L. S. Rothman, D. Jacquemart, A. Barbe *et al.*. The HITRAN 2004 molecular spectroscopic database[J]. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 2005, **96**(2): 139~204
- 5 L. S. Rothman, I. E. Gordon, A. Barbe *et al.*. The HITRAN 2008 molecular spectroscopic database[J]. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 2009, **110**(9-10): 533~572
- 6 S. Pinnock, K. P. Shine. The effects of changes in HITRAN and uncertainties in the spectroscopy on the infrared irradiance calculations [J]. *J. Atmos. Sci.*, 1998, **55**(11): 1950~1964
- 7 S. M. Newman, J. P. Taylor. Impact of updates to the HITRAN spectroscopic database on the modeling of clear-sky infrared radiances [J]. *Geophys. Res. Lett.*, 2002, **29**(20): 1957~1961
- 8 D. P. Kratz. The sensitivity of radiative transfer calculations to the changes in the HITRAN database from 1982 to 2004 [J]. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 2008, **109**(6): 1060~1080
- 9 L. S. Rothman. The evolution and impact of the HITRAN

- molecular spectroscopic database [J]. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 2010, **111**(11): 1565~1567
- 10 Peng Lu, Hua Zhang, Xiawen Jing. The effects of different HITRAN versions on calculated long-wave radiation and uncertainty evaluation [J]. *Acta Meteor. Sinica*, 2012, **26**(3): 390~398
- 11 Xuan Feng, Fengsheng Zhao. Effect of changes of the HITRAN database on transmittance calculations in the near-infrared region [J]. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 2009, **110**(4-5): 247~255
- 12 Zhang Chunmin, Zhu Huachun, Wang Dingyi *et al.*. Passive measurement technology used for upper atmosphere measurement [J]. *Acta Optica Sinica*, 2011, **31**(9): 0900136
张淳民, 朱化春, 王鼎益 等. 高层大气被动探测技术 [J]. *光学学报*, 2011, **31**(9): 0900136
- 13 Wu Zhensen, Dou Yuhong. Visible light scattering and infrared radiation of spatial object [J]. *Acta Optica Sinica*, 2003, **23**(10): 1250~1254
吴振森, 窦玉红. 空间目标的可见光散射与红外辐射 [J]. *光学学报*, 2003, **23**(10): 1250~1254
- 14 M. Šimečková, D. Jacquemart, L. S. Rothman *et al.*. Einstein A-coefficients and statistical weights for molecular absorption transitions in the HITRAN database [J]. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 2006, **98**(1): 130~155
- 15 R. R. Gamache, L. S. Rothman. Extension of the HITRAN database to non-LTE application [J]. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 1992, **48**(15-16): 519~525
- 16 J. H. Gruninger, R. L. Sundberg, P. K. Acharya *et al.*. User's Manual for SHARC-4, the Strategic High-Altitude Radiance Code [R]. PL-TR-97-2114, 1997, ADA329472
- 17 A. Goldman, R. R. Gamache, A. Perrin *et al.*. HITRAN partition functions and weighted transition-moments squared [J]. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 2000, **66**(5): 455~486
- 18 J. Fischer, R. R. Gamache, A. Goldman *et al.*. Total internal partition sums for molecular species in the 2000 edition of HITRAN database [J]. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 2003, **82**(11-14): 401~412
- 19 D. P. Edwards, M. Lopez-Puertas *et al.*. The non-LTE correction to the vibrational component of the internal partition sum for atmospheric calculations [J]. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 1998, **59**(3-5): 423~436
- 20 J. Fischer, R. R. Gamache. Partition sums for non-local thermodynamic equilibrium applications [J]. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 2002, **74**(3): 273~284

栏目编辑: 王晓琰