

# 基于 Web 的痕量气体特征光谱数据库

方 静, 刘文清, 李素文

(中国科学院安徽光学精密机械研究所, 合肥 230031)

**摘 要:** 痕量气体特征光谱是应用光谱分析技术检测大气污染的基础, 与大气痕量气体测量、空气质量评估等诸多环境问题密切相关。在研究特征光谱基本参数的基础上, 设计了基于 Web 的痕量气体特征光谱数据库的数据模型、系统结构和模块组成, 完成了远程交互查询, 在线预览谱线绘图和下载结果谱线数据等功能, 为对比分析痕量气体分子吸收谱线提供了更有效的途径。

**关键词:** 分子吸收光谱; 基于网络; 数据库

## Web-based Characteristic Spectral Database of Trace Gas

FANG Jing, LIU Wen-qing, LI Su-wen

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

**【Abstract】** The characteristic spectral data of trace gas is the basis of monitoring atmosphere pollution through spectrum analysis technology. It is highly relevant in many environmental study fields, such as measurement of trace gases in the atmosphere or air quality estimation. For this reason, a web-accessible database is developed, offering ready access to the main parameters of molecular absorption spectral data. The design of data model, system structure and function composition is described. Web-based and friendly interfaces allow for the input of telnet interactive queries, as well as preview of plots and download of the result spectral data files for thorough, comparative analysis.

**【Key words】** molecular absorption spectrum; Web-based; database

### 1 概述

痕量污染气体主要以分子和PM的形势存于大气中。测量仪器在严格的温度、压力以及痕量气体混合比的条件下测量得到的吸收光谱特性信息可以看作鉴别分子类别的“指纹”<sup>[1]</sup>。痕量气体特征光谱信息可用于多种环境问题的研究领域: 污染气体检测, 痕量气体浓度反演, 未知气体的发现, 空气质量评估等。在目前存在的国内外相关光谱收集中, 大多数的存储管理模式仍然采用的是基于文件组织的结构。例如 HITRAN 标准大气分子光谱数据库(NASA EOS)<sup>[2]</sup>、大气组分的紫外可见光谱数据库(AUC DLR)<sup>[3]</sup>, 光谱数据多采用独立或组合的文本文件形式存储。基于文件系统提供了数据的逻辑组织结构树, 除了简单的存储, 文件的组织管理和维护有其局限性, 文件系统的数据库结构和应用程序之间有很强的依赖型, 特别是处理大量数据的时候, 难以表达数据信息的完整性和一致性, 数据的检索尤其是多特征值的检索效率低下, 而且往往要依靠人工完成, 描述性数据结构的伸缩性较低, 直接依赖文件格式存储。不同的实验环境及不同的测量仪器测得的数据也难以进行具有可比性的分析, 数据资源无法得到远程共享。基于 Web 的痕量气体特征光谱数据库的开发主要完成光谱特征信息的存储、管理、处理和分析功能, 保证光谱特征数据文件格式的独立性、属性变化的可调性、数据之间关系的建立以及基于内容的远程数据查询搜索能力和通用友好的用户界面, 为研究者正确通过光谱信息反演痕量气体, 发现未知污染物的光谱特征, 研究自主污染物检测技术和尖端探测技术提供进一步的技术保证。

### 2 痕量气体特征光谱

大气中不同物质的痕量气体分子对光辐射具有各自的特征吸收。当一束光穿过大气, 光线会被其中的分子选择性地

吸收, 使得其在强度上和光谱结构上发生变化, 与未经过大气的吸收光谱比较后, 可得到这些气体的吸收光谱。通过分析这些吸收光谱, 不仅可以定性确定某些组分的存在, 还可以定量地分析这些物质的含量<sup>[4]</sup>, 一些重要的大气痕量气体, 如 NO<sub>3</sub>, NO, NH<sub>3</sub>, SO<sub>2</sub> 都是通过光学检测手段探测得到的。作为痕量气体分子“指纹”的光谱特征数据就是进行污染气体检测, 痕量气体浓度反演的基础。特征光谱主要包括 2 个部分: 分子吸收截面(cross section)和分子线参数(line transition)及其光谱数据元数据。其中, 光谱数据元数据, 主要是光谱数据本身的内容特征和质量、来源、状况和其他有关特征的描述数据; 分子吸收截面主要是波数和对应分子吸收截面的二维数据; 分子线参数包括对应分子的一系列逐线参数, 如表 1 所示。

表 1 分子线参数

参数	含义
$S_{ij}$	线强(单位: cm <sup>-1</sup> /molecule* cm <sup>-2</sup> @296K)
$A_{ij}$	Einstein-A 系数
$\gamma_{air}$	空气展宽(HWHM, 单位: cm <sup>-1</sup> /atm @ 296K)
$\gamma_{self}$	自然展宽(HWHM, 单位: cm <sup>-1</sup> /atm @ 296K)
$E''$	低能态(单位: cm <sup>-1</sup> )
$n_{air}$	空气展宽的温度依赖系数
$\delta_{air}$	空气展宽的压力漂移(单位: cm <sup>-1</sup> /atm @ 296K)
$v', v''$	高能态、低能态全局量子指数

### 3 系统设计

根据实际应用需求, 基于 Web 的痕量气体特征光谱数据

**基金项目:** 国家“863”计划基金资助项目(2005AA641010)

**作者简介:** 方 静(1979 - ), 女, 博士, 主研方向: 环境光学, 信息工程; 刘文清, 研究员、博士; 李素文, 副教授、博士

**收稿日期:** 2007-03-11 **E-mail:** fangjing@aiofm.ac.cn

库的设计要满足如下几个原则：

(1)逻辑关系的一致性：关系是建立在光谱属性之间，允许查询光谱的通用属性。每一个光谱数据集都是完全描述的，受到描述性一致性约束标准约束。此时数据库中的语义冗余减少，使得数据质量得以保持。

(2)直观的用户界面：方便的数据获取和处理是主要目标。Web 和通用命令行界面不需其他预备知识就可合理匹配，允许用户与数据库进行交互，所有的功能都是完全在线的。

(3)结构的可扩展性：元数据是描述光谱测量的结构化数据。数据库中的属性集提供清晰完整的光谱描述，如果需要，新属性可以很方便地加入。

(4)文件格式的独立：文件和数据库服务器分离保证了最大的独立性和扩展弹性。

### 3.1 Web 结构

考虑到目前的基于 Web 的痕量气体特征光谱环境光谱特征数据库系统提取出来的数据还需要经过一些科学运算然后形成结果返还给用户，而这些运算可能需要消耗一定的 CPU 资源，所以，采用 B/C/S 结构，将运算和处理用户请求等调整到 Client 上。从而形成一种扩展性很强的解决方案。痕量气体特征光谱的网络数据库目标是为相关科研人员提供一个标准平台，而采用 B/C/S 结构最适合将这些数据提供给任何一个有数据需求的用户并与这些用户交互。随着数据库的完善，其所具有的易用性和广泛性将最终使得这个平台成为一个标准。所以选择建立在这样的一个架构上。而且这是一个可伸缩性方案，在系统早期，任务不重的情况下可以先采用 B/S 结构，而随着系统任务的逐渐加重，可以弹性平滑地扩展到如下的方案，而无须重新更改系统的低层设计和布局，从而可以节约初期的成本投入。B/C/S 结构如图 1 所示。

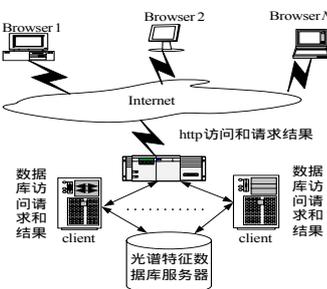


图 1 B/C/S 结构

在实际应用中选择 ASP 和一些扩展的 CGI 程序解释来自数据库的结构化查询语句，这样选择的原因是速度快和易用性。用标准 HTTP 协议作为客户机和服务器的交流。用户以 HTML 表格方法提交查询或更新，这些参数以 HTTP 形式送到 Web 服务器，用 CGI 程序来解释请求和建立到数据库的连接。查询结果嵌入了 HTML 文件，由数据库提供然后返回客户机。最后，在浏览器窗口可能会选择单个数据集作为运行时间产生的图像显示。图像显示部分由 Javascript 编写实现。选择 IIS 作为 Web 发布平台，后台选用 SQL Server 2000 作为数据库平台，由内嵌的 SQL 代码实现访问，特别适合一致可靠存储和备份大量数据。

### 3.2 功能模块

基于 Web 的痕量气体特征光谱数据库系统主要用来存储、管理、分析在不同的测量环境下各种痕量气体的特征光谱数据，根据痕量气体在不同波段性质的光谱特征，具有如图 2 所示的功能模块。

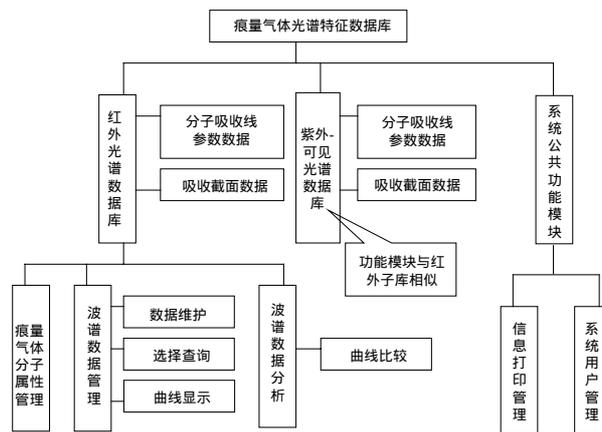


图 2 功能模块

其中，痕量气体分子属性管理是维护和查询痕量气体分子的基本属性参数和对应的代码表。

光谱数据管理是管理各种痕量气体在不同的测量波段下的光谱特征数据，包括如下几个部分：

(1)光谱数据维护：维护各种痕量气体在不同测量波段下的光谱特征数据，进行添加、修改、删除等数据库日常工作。

(2)光谱数据查询：查询各种痕量气体在不同测量波段下的光谱特征数据，为用户提供多索引查询，可以根据痕量气体分子各种属性参数检索吸收或发射谱，也可以选择监测光源的各种属性参数检索所有痕量气体分子的吸收或发射谱。

(3)光谱数据显示：采用二维曲线显示查询所得谱线，允许用户定制曲线、视图的样式和图例。

光谱数据分析可以同时显示具有多条具有可比性的不同测量条件下的光谱数据。

信息打印管理能够根据用户需求打印各种光谱数据曲线视图。

文件格式转换能将原有数据和保存的中间数据进行文件格式转换，将其转变为易读文本。

### 3.3 数据模型

数据模型描述了信息在数据库中的组织方式。数据模型通常的描述是 E-R 图<sup>[5]</sup>，由指定属性的实体和有主键和外键的逻辑关联组成。图 3 显示了系统的数据模型，光谱信息被系统分成 8 个语义实体，每一个都表示一个光谱描述的不同部分。

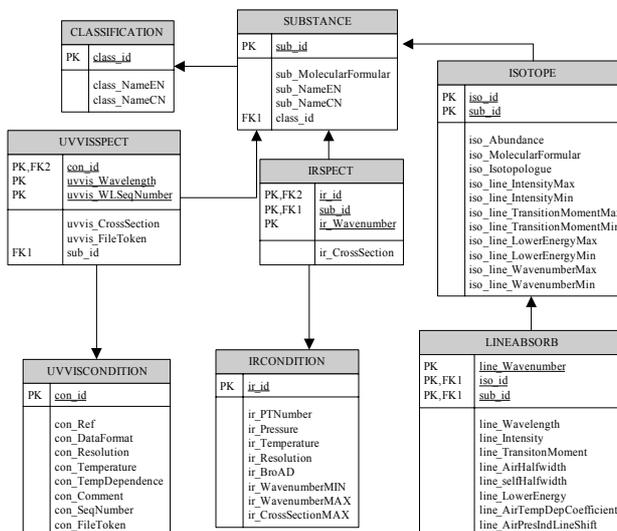


图 3 ER 关系图

系统的 ER 关系图由 ERwin(Computer Associates)经典的设计分析工具完成,可以通过前向工程自动在 SQL-Server 生成 SQL 代码。数据模型保证了数据的完整性、一致性,在硬件故障时仍可以修复数据,通过 SQL 语句有效地取回数据集, Spectrum 实体包含区分单个光谱的属性,条件实体包含对全体光谱都通用的实验条件属性。Spectrum 实体中的每一个实例都与一个光谱对应相关, Spectrum 和其他实体关系不唯一,参考实体约束(外键),满足第 3 范式里的关系,用来保证一致性和减小数据的冗余。

#### 4 实现和应用

基于Web的痕量气体特征光谱数据库系统易于使用,界面操作方便,用户可以从标准Web浏览器进行远程查询。动态产生的Web页面提供了和后台数据库交互的通用方法。Web 界面提供:在线查询和光谱谱线绘图,远程下载光谱数据和元数据,在线察看数据库的内容,图 4~图 7 逐步描述了一个使用实例:选择紫外波段,查询N<sub>2</sub>O<sub>5</sub>的标准吸收界面,获取N<sub>2</sub>O<sub>5</sub>紫外波段的所有谱线,远程下载光谱数据细节和资源数据。点选需要绘图的谱线,绘出所选的数据集,可以改变显示坐标轴的方式,并提供绘图打印等定制功能。



图 4 选择光谱波段,输入字段进行查询匹配界面图

分子式	波长 MIN (nm)	波长 MAX (nm)	温度	精度	出处	备注	资料原文件	数据原文件
N2O5	290	350	225K	10.0nm	Yao F., I. Wilson and H. Johnston J. Phys. Chem. 86 (1982), 3611-3615 Temperature-Dependent Ultraviolet Absorption Spectrum for Dinitrogen Pentoxide		点击下载	点击下载
N2O5	290	380	243K	10.0nm	Yao F., I. Wilson and H. Johnston J. Phys. Chem. 86 (1982), 3611-3615 Temperature-Dependent Ultraviolet Absorption Spectrum for Dinitrogen Pentoxide		点击下载	点击下载
N2O5	290	380	263K	10.0nm	Yao F., I. Wilson and H. Johnston J. Phys. Chem. 86 (1982), 3611-3615 Temperature-Dependent Ultraviolet Absorption Spectrum for Dinitrogen Pentoxide		点击下载	点击下载
N2O5	294.12	371.08	273K	15.0nm	Holmes H.H., and F. Daniels J. Am. Chem. Soc., 56 (1934), 630-637 The Photolysis of Nitrogen Oxides: N2O5, N2O4 and NO2		点击下载	点击下载
N2O5	265	280	273K	0nm	Jones E.J., and O.R. Wulf J. Chem. Phys. 5 (1937) 873-877 The Absorption Coefficients of Nitrogen Pentoxide in the Ultraviolet and the Visible Absorption Spectrum of NO3		点击下载	点击下载
N2O5	290	380	277K	10.0nm	Yao F., I. Wilson and H. Johnston J. Phys. Chem. 86 (1982), 3611-3615 Temperature-Dependent Ultraviolet Absorption Spectrum for Dinitrogen Pentoxide		点击下载	点击下载
N2O5	200	360	298K	0nm	Johnston H.S., S.G. Chang, and G. Witten J. Phys. Chem. 78 (1974), 1-7 Photolysis of Nitric Acid Vapour		点击下载	点击下载

图 5 获取匹配数据集,远程下载谱线数据界面图

	分子式	波长MIN(nm)	波长MAX(nm)	温度	资料原文件	数据原文件
删除	N2O5	290	350	225K	点击下载	点击下载
删除	N2O5	290	380	243K	点击下载	点击下载
删除	N2O5	290	380	263K	点击下载	点击下载

图 6 可选显示界面图

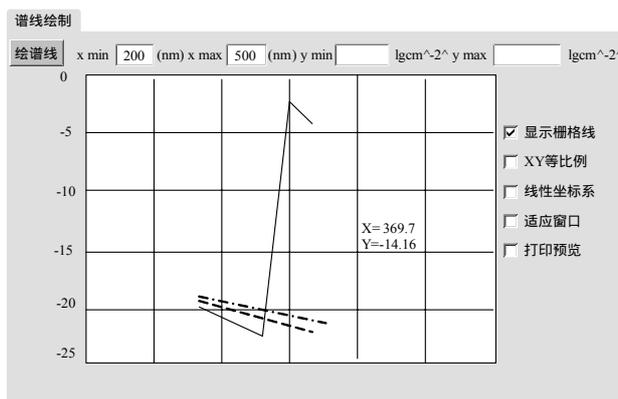


图 7 绘出结果数据集,允许用户自定义样式和图例界面图

#### 5 结束语

痕量气体特征光谱数据库是进行污染气体浓度反演、分析的基础。数据库所收集的数据侧重于各种已知污染痕量气体的光谱特性。从“科学数据”的高度,以面向环境监测应用的标准数据为目的,通过数据的规范化-标准化,结合标定检测系统,提供大量的环境监测应用基础数据、过程数据、成果数据和分析数据,为环境光学学科做必要的基础积累。

基于Web的痕量气体特征光谱数据库的建立是保证光谱特征数据文件格式的独立性,属性变化的可调性,数据之间关系的建立以及基于内容的远程数据查询搜索能力,解决领域内大量的异构原始数据难以共享、管理的有效途径。

#### 参考文献

- [1] Grant W B, Kagann R H, McClenny W A. Optical Remote Measurement of Toxic Gases[J]. J. Air Waste Manage Assoc., 1992, 42(1): 18.
- [2] Rothman L S, Barbe A. The HITRAN 2004 Molecular Spectroscopic Database[J]. Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 2005, 99(2): 139-204.
- [3] Rudek H K, Moortga G K. UV-VIS Spectral Atlas of Gaseous Molecules: A Database Including Numerical Data and Graphical Representations[J]. Geophysical Research, 2005, 7(3): 42.
- [4] Grant W B, Kagann R H, Mclenny W A. Optical Remote Mesurement of Toxic Gases[J]. J. Air Waste Manage. Assoc., 1992, 42(1): 18.
- [5] Date C. Introduction to Database Systems[M]. 6th ed. [S. l.]: Addison-Wesley, 1995.