

文章编号: 1001 - 9014(2010)02 - 0123 - 05

毫米波热辐射阵列的空间谱估计误差模型研究

吴露露, 胡飞*, 朱耀庭, 李青侠, 斯榕
(华中科技大学 电子与信息工程系, 湖北 武汉 430074)

摘要: 将空间谱估计算法应用于毫米波热辐射阵列接收系统对目标进行超分辨率探测, 需要解决目标热辐射信号弱及阵列误差使性能下降这两个主要问题。为此, 建立了低信噪比阵列误差模型, 该模型综合考虑了通道幅相误差对信源和通道噪声的影响, 推导出由它们所造成的阵列接收数据自相关矩阵的特征值扰动范围和信号特征向量空间误差距离。利用该模型提出了一种通道幅相误差校正算法, 使得高分辨率的空间谱估计算法能够很好地应用于毫米波热辐射阵列接收系统, 并通过实验证明了新模型及校正算法的正确性和有效性。

关 键 词: 毫米波热辐射; 低信噪比; 阵列误差; 校正; 空间谱估计

中图分类号: TN911. 7 文献标识码: A

ERROR MODEL FOR SPATIAL SPECTRUM ESTIMATION OF MILLIMETER-WAVE THERMAL RADIATION ARRAY

WU Lu-Lu, HU Fei*, ZHU Yao-Ting, LI Qiang-Xia, JIN Rong
(Department of Electronics & Information Engineering, Huazhong University of
Science and Technology, Wuhan 430074, China)

Abstract: In order to apply spatial spectrum estimation to millimeter-wave thermal radiation array receiving system for detecting targets with superior resolution, it is needed to solve two key problems which are weaknesses of thermal signals' energy emitted from targets and the decline of performance caused by array errors. To solve these problems, an array error model with low signal-noise ratio (SNR) was presented. In this model, the influences of amplitude and phase errors on signal source and channel noise were considered, and the perturbation range of the eigenvalues and the error distance of the signal eigenvector space of the autocorrelation matrix received by arrays were derived. Then the calibration algorithm for amplitude and phase errors based on the model was proposed, which could make the spatial spectrum estimation with high resolution be used in millimeter-wave radiation array system effectively. The effectiveness and correctness of the model are verified by the experiments.

Key words: millimeterwave thermal radiation; low signal noise ratio (SNR); array errors; calibration; spatial spectrum estimation

引言

空间谱估计测向技术能够精确估计信号的来波方向, 并突破空域“瑞利限”实现了超分辨率测向, 开辟了现代阵列信号处理的新方向, 被广泛地应用于通信、声纳及探测等众多领域^[1]。任何高于绝对零度的物体自身都将发射毫米波热辐射信号, 这种信号无法隐藏, 且涂有吸波材料的目标的毫米波热辐射信号会更强。毫米波热辐射阵列接收系统是一

种用来接收毫米波热辐射信号的高灵敏度接收机阵列。为了进一步提高分辨率, 可将空间谱估计方法应用于毫米波热辐射阵列接收系统, 形成一种基于目标毫米波热辐射的全被动目标探测技术, 该技术具有隐蔽性好、不受气候条件和战场烟尘的影响等优点, 且突破了空域“瑞利限”, 实现了超分辨率目标探测。

空间谱估计算法具有高分辨率, 是建立在理想阵列信号处理模型基础上的, 当阵列存在各种不可

收稿日期: 2009 - 03 - 13, 修回日期: 2009 - 10 - 18

Received date: 2009 - 03 - 13, revised date: 2009 - 10 - 18

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(60772090), 国家高技术研究发展计划 863(2006AA09Z143)

作者简介: 吴露露(1980-), 女, 河北迁西人, 博士研究生, 主要从事毫米波技术和阵列信号处理方面研究。

*通讯作者: hufei@hust.edu.cn

避免的实际误差时,该类算法性能迅速下降,甚至失效^[2~4],因此阵列误差一直是高分辨率空间谱估计走向实用化的一个瓶颈。而目前常用的阵列误差模型及校正算法都是针对信噪比较高的情况下所建立的(例如,文献^[5]的仿真输入信噪比最小为15dB)^[5~9]。但针对热辐射信号能量较弱的情况,即低信噪比的情况(例如输入信噪比为-20dB左右),这些阵列误差模型及校正算法并不适用。

针对毫米波热辐射信号能量弱的特点,建立了低信噪比阵列误差模型,该模型综合考虑了通道幅相误差对信源和通道噪声的影响,推导出由它们所造成的阵列接收数据自相关矩阵特征值扰动范围和信号特征向量空间误差距离。利用该模型提出了一种通道幅相误差校正算法,使得高分辨率的空间谱估计算法能够很好地应用于毫米波热辐射阵列接收系统,并通过实验验证了新模型及校正算法的正确性和有效性。

1 低信噪比阵列误差模型

1.1 模型建立

传统阵列通道幅相误差模型为^[1]:

$$X(t)_{\text{old}} = a(s)S(t) + N(t), \quad (1)$$

$X(t)_{\text{old}}$ 为 $N \times 1$ 维阵列接收信号矢量,为 $N \times N$ 维对角通道幅相误差矩阵, s 为信号入射角度, $a(s)$ 为单辅助源的信号引导矢量, $S(t)$ 为 $M \times 1$ 维入射信号矢量, $N(t)$ 为 $N \times 1$ 维加性噪声矢量,相应的阵列接收数据自相关矩阵 R_{old} 为:

$$R_{\text{old}} = o_s^2 a(s) a(s)^H + o_s^2 I, \quad (2)$$

其中, o_s^2 为信号的能量, o_s^2 为通道噪声的能量,为 $N \times N$ 维对角通道幅相误差矩阵:

$$= \text{diag}[_1 _2 \dots _N], \text{diag表示对角阵}, \quad (3)$$

为第*i*个通道相对于第1个通道不一致的系数:

$$i = i e^{j\phi_i} \quad i = 2, 3, \dots, N, \quad (4)$$

式中, ϕ_i 和 ρ_i 分别为 i 幅度和相位。从式(1)和式(2)可以明显看出,传统阵列通道幅相误差模型适用于信噪比较高的情况下,只用考虑通道幅相误差

对接收信号 $S(t)$ 的影响,忽略对接收机通道噪声 $N(t)$ 影响。但针对低信噪比的情况,例如对于毫米波热辐射阵列接收系统来说,由于接收信号为目标的毫米波热辐射信号,其能量相对于接收机通道噪声相当低,不能够忽略通道幅相误差对 $N(t)$ 的影响。

建立低信噪比的阵列误差模型为:

$$X(t)_{\text{new}} = a(s)S(t) + N(t), \quad (5)$$

相应的阵列接收数据自相关矩阵 R_{new} 为:

$$R_{\text{new}} = o_s^2 a(s) a(s)^H + o_s^2 I. \quad (6)$$

从式(6)可以看出,在低信噪比的阵列误差模型下,一般的单辅助源通道幅相误差校正算法是不适用的。因为此时 o_s^2 不是单位矩阵的倍数,导致特征值分解之后最大特征值对应的特征向量不等价于 $a(s)$ ^[1,5]。

1.2 模型性能分析

令阵列接收原始数据自相关矩阵 R_{org} (未考虑通道噪声)为:

$$R_{\text{org}} = o_s^2 a(s) a(s)^H. \quad (7)$$

令

$$X = a(s) = [_1 a_1(s) _2 a_2(s) \dots _N a_N(s)]^T, \quad (8)$$

则

$$R_{\text{org}} = o_s^2 X X^H, \quad (9)$$

$$R_{\text{org}} X = o_s^2 X X^H X = (o_s^2 X^H X) X = _1 X, \quad (10)$$

$_1 = o_s^2 X X^H = o_s^2 a(s)$ 为 R_{org} 的唯一不为零的特征值, $X = a(s)$ 为其对应的特征向量。

因此 R_{org} 的特征值分解可以写成:

$$R_{\text{org}} = U \cdot \text{diag}[_1 _2 \dots _N] \cdot U^H = U \cdot \text{diag}[o_s^2 a(s) _0 \dots _0] \cdot U^H, \quad (11)$$

U 为特征向量矩阵, $\text{diag}[_1 _2 \dots _N]$ 为特征值对角矩阵, $_1 = o_s^2 a(s)$, $_2 = _3 = \dots = _N = 0$

根据

$$R_{\text{old}} = R_{\text{org}} + o_s^2 I, \quad (12)$$

可得

$$\begin{aligned} / _i I - R_{\text{org}} / &= / _i I - (R_{\text{old}} - o_s^2 I) / \\ &= / (_i + o_s^2) I - R_{\text{old}} / \\ &= / _i I - R_{\text{old}} / = 0. \end{aligned} \quad (13)$$

因此,由传统阵列通道幅相误差模型得到的阵列接收数据自相关矩阵 R_{old} 的特征值分解为:

$$\begin{aligned} R_{\text{old}} &= U \cdot \text{diag}[_1 _2 \dots _N] \cdot U^H \\ &= U \cdot \text{diag}[_1 + o_s^2 _2 + o_s^2 \dots _N + o_s^2] \cdot U^H \\ &= U \cdot \text{diag}[o_s^2 a(s) + o_s^2 _2 + o_s^2 \dots + o_s^2] \cdot U^H, \end{aligned} \quad (14)$$

U 为特征向量矩阵, $\text{diag}[_1 _2 \dots _N]$ 为特征值对角矩阵, $_1 = o_s^2 a(s) + o_s^2$, $_2 = _3 = \dots = _N = o_s^2$

由式(1)、式(2)、式(13)和式(14)可以看出,(1)在传统阵列通道幅相误差模型 $X(t)_{\text{old}}$ 中,只考虑了通道幅相误差对信源的影响,未考虑通道幅相误差对通道噪声 o_s^2 的影响;(2)通道噪声 o_s^2 对 R_{old} 的影响仅是对其谱 $_i$ 作了一个平移,对矩阵特征向量空间并未构成影响。

这显然是较为理想化的模型,并不符合实际情况。再来看由新建的低信噪比的阵列误差模型(式(5)和式(6))所得到的阵列接收数据自相关矩阵 R_{new} 可表示为:

$$R_{\text{new}} = R_{\text{old}} + \frac{2}{s} \mathbf{H}^H \mathbf{H}, \quad (15)$$

$$\frac{2}{s} \mathbf{H}^H = \text{diag} \left[\begin{array}{cccccc} 2 & & & & & \\ & 1 & & & & \\ & & 2 & & & \\ & & & 2 & & \\ & & & & \cdots & \\ & & & & & N \end{array} \right] \\ = \text{diag} \mathbf{L} \left[\begin{array}{cccccc} 2 & & & & & \\ & 1 & & & & \\ & & 2 & & & \\ & & & 2 & & \\ & & & & \cdots & \\ & & & & & N \end{array} \right]. \quad (16)$$

根据定理1^[10], R_{new} 的特征值 μ_i 会在如下的范围内波动:

$$\mu_i + \frac{2}{s} \min(\frac{2}{i}) \leq \mu_i \leq \mu_i + \frac{2}{s} \max(\frac{2}{i}). \quad (17)$$

由于对矩阵的谱作平移对矩阵特征向量空间不构成影响,为了方便分析将式(17)变换为:

$$\mu_i - \frac{2}{s} (\max(\frac{2}{i}) - \min(\frac{2}{i})) \leq \mu_i \leq \mu_i + \frac{2}{s} (\max(\frac{2}{i}) - \min(\frac{2}{i})). \quad (18)$$

将 μ_i 的值带入式(18), R_{new} 的特征值矩阵 μ 由以下两种形式构成:

$$\begin{aligned} & \frac{2}{s} a(s) - \frac{2}{s} (\max(\frac{2}{i}) - \min(\frac{2}{i})) \leq \mu_i \leq \frac{2}{s} a(s) \\ & \frac{2}{s} \sum_{i=1}^N \frac{2}{i} - \frac{2}{s} (\max(\frac{2}{i}) - \min(\frac{2}{i})) \leq \mu_i \leq \frac{2}{s} \sum_{i=1}^N \frac{2}{i} a_i^2, \end{aligned} \quad (19)$$

或

$$\frac{2}{s} (\min(\frac{2}{i}) - \max(\frac{2}{i})) \leq \mu_i \leq 0. \quad (20)$$

从式(19)和式(20)可以看出,(1)由低信噪比阵列误差模型所得到的阵列接收数据自相关矩阵 R_{new} 的特征值波动范围是由通道噪声 σ^2 、通道幅相误差 α_s^2 的幅度 α_s 所决定的;(2)通道噪声 σ^2 越大,通道幅相误差 α_s^2 的幅度 α_s 的差异越大, R_{new} 的特征值的波动范围也越大;(3)当 $\alpha_s \gg \sigma^2$ 时,即信噪比较高时, μ 趋近于 μ_i , R_{new} 趋近于 R_{old} ,低信噪比阵列误差模型退化为传统阵列通道幅相误差模型。

根据定理2^[10],可令

$$E = \frac{2}{s} (\mathbf{H}^H - I), \quad (21)$$

则

$$R_{\text{new}} = R_{\text{old}} + E, \quad (22)$$

$$D = R_{\text{new}} X - X_1 = (R_{\text{new}} - I) X. \quad (23)$$

取

$$\delta = \frac{\alpha_s}{\sigma} = \frac{1}{1} = \frac{1}{1} + \frac{2}{s}, \quad (24)$$

$$= \frac{1}{1} + \frac{2}{s} - \frac{2}{s} \max(\frac{2}{i}), \quad (25)$$

则 R_{new} 与 R_{old} 的信号特征向量空间的误差距离为:

$$\sin(\theta) (X_{R_{\text{old}}}, X_{R_{\text{new}}}) = D / \|D\|. \quad (26)$$

由式(26)看出,分母越小, R_{new} 与 R_{old} 的信号特征向量空间的距离就越大,通道噪声及幅相误差对矩阵特征向量的所造成的扰动越大。将 δ 的值代入式(25),设 $\max(\frac{2}{i}) > 1$,可得

$$= \frac{2}{s} a(s) + \frac{2}{s} - \frac{2}{s} \max(a_i^2)$$

$$\begin{aligned} & = \frac{2}{s} \sum_{i=1}^N \frac{2}{i} + \frac{2}{s} - \frac{2}{s} \max(\frac{2}{i}) \\ & = \left[\frac{2}{s} - \frac{2}{s} \left(1 - \frac{1}{\max(\frac{2}{i})} \right) \right] \max(\frac{2}{i}) \\ & + \frac{i \max(\frac{2}{i})}{s} \frac{2}{i}, \end{aligned} \quad (27)$$

从式(27)可以看出,通道噪声的功率 σ^2 越大,就越小, R_{new} 与 R_{old} 的信号特征向量空间的距离就越大,通道噪声的功率 σ^2 对矩阵的信号特征向量所造成的扰动越大。

2 校正算法

入射信号 $S(t)$ 通过天线阵列进入通道中,通道对入射信号 $S(t)$ 和叠加的通道噪声 $N(t)$ 产生通道幅相误差,形成阵列接收信号 $X(t)$,其相应的自相关矩阵为 R_{new} ,对 R_{new} 进行特征值分解同时结合迭代的方法可求解出 μ ,具体如下。

1) 迭代初始值的设定

设单辅助源放在接收阵列前方任意一位置 s ,其信号引导矢量为 $a(s)$ 。设通道幅相误差矩阵的初始值为单位矩阵 I

2) 迭代规则的设定

利用ⁿ对 R_{new} 进行校正得到新的自相关矩阵 R_{new}^n :

$$\begin{aligned} R_{\text{new}}^n & = \text{inv}(\alpha^n) R_{\text{new}} \text{inv}((\alpha^n)^H) \\ & = \frac{2}{s} \text{inv}(\alpha^n) a(s) a(s)^H \text{inv}((\alpha^n)^H) \\ & + \frac{2}{s} \text{inv}(\alpha^n)^H \text{inv}((\alpha^n)^H), \end{aligned} \quad (28)$$

式中, inv 表示对矩阵求逆。从该式可看出,虽然经过通道幅相误差矩阵ⁿ校正后 R_{new}^n 不是无通道幅相误差情况下的理想阵列接收数据自相关矩阵,但随着 n 的增加, $\text{inv}(\alpha^n)^H \text{inv}((\alpha^n)^H)$ 越趋近于 I , R_{new}^n 也越趋近于理想阵列接收数据自相关矩阵。

然后对 R_{new}^n 进行特征值分解,得到:

$$R_{\text{new}}^n = U^n \alpha^n U^{nH}, \quad (29)$$

其中,ⁿ为按降序排列的特征值矩阵:

$$\alpha^n = \text{diag} \mathbf{L} \left[\begin{array}{cccccc} n & & & & & \\ & n & & & & \\ & & n & & & \\ & & & n & & \\ & & & & \cdots & \\ & & & & & n \end{array} \right],$$

$$\text{其中 } \frac{n}{1} > \frac{n}{2} > \frac{n}{3} > \cdots > \frac{n}{N}. \quad (30)$$

U^n 为特征向量矩阵:

$$U^n = [u_1^n \ u_2^n \ \dots \ u_N^n]^T. \quad (31)$$

令ⁿ⁺¹为

$$\alpha^{n+1} = k \text{diag}(u_1^n) * \text{inv}(\text{diag}(a(s)))^H, \quad (32)$$

再将其归一化

$$\alpha^{n+1} = \alpha^{n+1} / \frac{n+1}{1}, \quad (33)$$

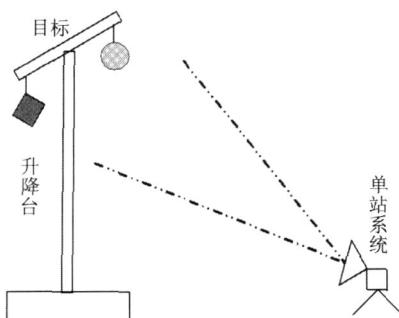


图1 实验设计示意图

Fig. 1 The sketch map of the experiment

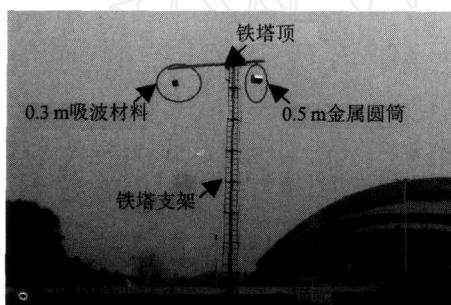


图2 实验设计光学图

Fig. 2 Photo of the experimental field

令新的通道幅相误差校正矩阵 n^{+1} 为:

$$n^{+1} = n * n^{+1} \quad (34)$$

3) 迭代结束条件的设定

设定误差系数(可根据需求选取),重复迭代,直到

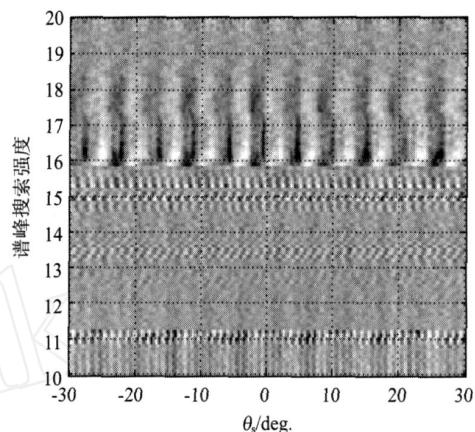
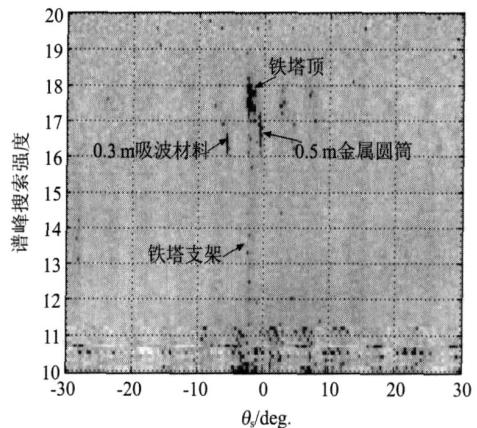
$$|n - n^{+1}| < \dots \quad (35)$$

迭代结束,此时的 n^{+1} 就是所求解的阵列的通道幅相误差校正矩阵。

3 实验

利用毫米波热辐射阵列接收系统在微波辐射试验场上进行了实验,通过实验对比了传统单辅助源通道幅相误差校正算法和论文提出的校正算法的校正效果。

1) 实验设备。毫米波热辐射阵列接收系统1套,工作波段为8mm波段,天线阵元数为16,阵列采取1倍波长最小冗余阵列排列方式,即最大基线长度为90倍波长。自然辐射目标2个,分别为边长0.3m正方形吸波材料(即隐身目标)和直径0.5m金属圆筒;毫米波校正源1个,实验中采用固体噪声源作为校正源,工作频率为34.5~37.5GHz,超噪比为23dB;铁塔1个,可自动升降15m,两端可悬挂目标。

图3 传统校正算法空间谱图(θ_s -入射角)Fig. 3 The imaging result of traditional calibration method (θ_s -incidence angle)图4 实验提出的校正算法空间谱图(θ_s -入射角)Fig. 4 The imaging result of the calibration method proposed in this paper (θ_s -incidence angle)

2) 实验。实验示意图及光学图片如图1和图2所示。

铁塔悬挂2个目标,左边为吸波材料,右边为金属圆通。目标与天线水平距离为49m,目标距离地面高度为12m,目标与天线斜径距离为50m。先采用毫米波热辐射阵列接收系统对整个场景的自然辐射进行扫描接收,俯仰角度10~20°,步进角度0.1°。天线阵列水平视场角度为-30°~30°。然后利用传统单辅助源通道幅相误差校正算法和论文提出校正算法对得到实验数据进行处理(迭代次数为10次),最后采用经典MUSIC算法^[11]进行空间谱估计,得到结果如图3和图4所示。

从图3和图4明显看出,经过传统的校正算法校正后的空间谱图效果不佳,不能够重现光学场景图的内容。但是经过论文提出校正算法校正后的空

间谱图不仅可明显看到边长 0.3m 隐身目标和直径 0.5m 金属圆筒,且连铁塔的边长 2m 顶端以及升高支架都可见.

4 结论

针对毫米波热辐射信号能量弱的特点,建立了低信噪比阵列误差模型,并利用该模型提出了一种校正算法,可以在低信噪比情况下准确求得通道幅相误差.最后通过实验对比了传统校正算法和本文提出的校正算法的校正效果,实验结果表明经过传统校正算法校正后的空间谱图不能够重现光学场景图的内容,但是经过本文提出的校正算法校正后的空间谱图却可以清晰地看到光学场景图中的典型目标,充分验证了本文所建立的阵列误差模型及提出的校正算法的正确性和有效性.另外,对于低信噪比的非热辐射信号(有源信号),所建立的低信噪比阵列误差模型和提出的校正算法也是适用的.

REFERENCES

- [1] WANG Yong-Liang, CHEN Hui, PENG Ying-Ning, et al. *The theory and calculation of Spatial Spectrum estimation* [M]. Beijing: Tsinghua university press(王永良,陈辉,彭应宁等.空间谱估计理论与算法.北京:清华大学出版社), 2004, 430—431.
- [2] WEISS A J, Friedlander B. Effects of modeling errors on the resolution threshold of the MUSIC algorithm [J]. *IEEE Trans on Signal Processing*, 1994, **42**(6): 1519—1526.
- [3] Li F, Vaccaro R J. Sensitivity analysis of DOA estimation algorithms to sensor errors [J]. *IEEE Trans on Aerospace and Electronic Systems*, 1992, **28**(3): 708—717.
- [4] Swindlehurst A L, Kailath T. A performance analysis of subspace-based methods in the presence of model errors, part I: the MUSIC algorithm [J]. *IEEE Trans on Signal Processing*, 1992, **40**(7): 1758—1774.
- [5] ZHOU Qing-Hui, JING Xue-Ming, XUE Zong-Ze. Calibration of channel mismatch in super-resolution direction finding [J]. *Radar Science and Technology*(周庆辉,靳学明,许宗泽.超分辨测向中通道间不一致的校正.雷达科学与技术), 2006, **4**(5): 280—283.
- [6] Hung E K L. Matrix-construction calibration method for antenna arrays [J]. *IEEE Trans on Aerospace and Electronic Systems*, 2000, **36**(3): 819—828.
- [7] Zhang M, Zhu Z D. DOA estimation with sensor gain, phase and position perturbations [C]. Proceedings of the IEEE National Aerospace and Electronics Conference, NAECO, 1993, **1**: 67—69.
- [8] Fistas N, Manikas A. A new general global array calibration method [C]. Proceedings of IEEE ICASSP '94, 1994, **4**: 73—76.
- [9] LI Yue-Hua, LI Xing-Guo, NI NG Jun, et al. Error correction of quadrature coherent I/Q channels of step frequency high resolution MMW radar based on SVD of matrix [J]. *J. Infrared Millim. Waves*(李跃华,李兴国,宁军,等.基于矩阵奇异值分解的频率步进高分辨率毫米波雷达 I/Q 通道误差校正.红外与毫米波学报), 1998, **17**(4): 247—254.
- [10] Sun Ji-Guang. *The analysis of Matrix perturbation* [M]. Beijing: science press(孙继广.矩阵扰动分析.北京:科学出版社), 2001, 195—262.
- [11] Schmidt R O. Multiple emitter location and signal parameter estimation [J]. *IEEE Trans on Antennas and Propagation*, 1986, AP-**34**(3): 276—280.

(上接 116页)

- [6] CHEN Zhong-Ming SHI Fei, ZHU Li-Hua. Yields of carbonyl products from the gas-phase oxidation of isoprene with excess ozone [J]. *Environmental Chemistry*(陈忠明,史飞,朱李华.臭氧过量条件下异戊二烯氧化生成羰基化合物的产率.环境化学), 2005, **24**(5): 516—519.
- [7] Hao L Q, Wang Z Y, Huang M Q, et al. Size distribution of the secondary organic aerosol particles from the photooxidation of toluene [J]. *J. Environ. Sci.*, 2005, **17**(6): 912—916.
- [8] Liu X Y, Zhang W J, Huang M Q, et al. Effect of illumination intensity and light application time on secondary organic aerosol (SOA) formation from the photooxidation of α -pinene [J]. *J. Environ. Sci.*, 2009, **21**(4): 447—451.
- [9] Atkinson R, Carter W P L, Winer A M, et al. An experimental protocol for the determination of OH radical rate constants with organics using methyl nitrite photolysis as an OH radical source [J]. *J. Air Pollution Control Association*, 1981, **31**(10): 1090—1092.
- [10] Frisch M J, Trucks G W, Schlegel H B, et al. Gaussian 03, Revision C.01, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2004. Q
- [11] Hohenberg P, Kohn W. Inhomogeneous electron gas [J]. *Phys. Rev. B*, 1964, **136**(3B): 864—871.
- [12] Kohn W, Sham L J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects [J]. *Phys. Rev. A*, 1965, **140**(4A): 1133—1138.
- [13] Parr R G, Yang W. *Density-functional theory of atoms and molecules* [M]. Oxford University: Oxford, 1989, 1—212.
- [14] At the Essential FTIR website: Essential FTIR Free File ViewerMode, <http://www.essentialftir.com/>.
- [15] LU Yong-Quan, DENG Zhen-Hua. *Practical Infrared spectrometry analysis* [M]. Beijing: Electronic industry Press(卢涌泉,邓振华.实用红外光谱解析.北京:电子工业出版社), 1989, 20—35.
- [16] Ruppert L, Becker K H. A product study of the OH radical-initiated oxidation of isoprene: formation of C_5 -unsaturated diols [J]. *Atmos. Environ.*, 2000, **34**(10): 1529—1542.