

文章编号: 0253-2239(2009)06-1701-05

一种基于空间外差光谱技术观测的逐线积分水汽浓度反演方法

邹铭敏 方勇华 熊 伟 施海亮

(中国科学院安徽光学精密机械研究所 遥感研究室, 安徽 合肥 230031)

摘要 空间外差光谱技术(SHS)是一种可进行高光谱分辨率探测的光谱分析技术,其灵敏度高,可实现成像探测,特别适用于大气中痕量气体的观测。鉴于此,提出了一种在实验室理想环境下水平观测水汽的逐线积分反演算法。使用 Voigt 线型函数计算出所选带宽内各吸收线的吸收系数,并将半宽校正到相应压力水平下;考虑各吸收线的线翼吸收贡献,计算出波段内的平均透过率;结合通过实测光谱得出的透过率推算水汽浓度。应用在 1590~1610 cm^{-1} 波段内傅里叶变换红外光谱仪(FTIR)的实测数据计算不同水汽浓度的平均透过率,并与相应的应用 Modtran 计算的结果相比较,最终验证了算法的可行性。

关键词 光谱分析;水汽反演;逐线积分;空间外差光谱术;吸收系数

中图分类号 P407 文献标识码 A doi: 10.3788/AOS20092906.1701

Line-by-Line Retrieval Calculation of Water Vapor Based on Spatial Heterodyne Spectroscopy Observation

Zou Mingmin Fang Yonghua Xiong Wei Shi Hailiang

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

Abstract Spatial heterodyne spectroscopy (SHS) is an imageable spectroscopic technique with high sensitivity, and it can obtain high spectral resolution. According to these features, a line-by-line calculation method is presented for SHS observations, which is fit for the horizontal sounding of water vapor without other gas absorptions. Absorption coefficients of all lines are computed with Voigt line function, and the halfwidths are also modified to the actual pressure. Average transmittance calculation is done by taking account of line continua, and the density of water vapor can be calculated. The real-test data obtained by FTIR spectrometer covering a range from 1590 to 1610 cm^{-1} is used to calculate the transmittance. It is compared with the result obtained from Modtran computation, and the method is proved feasible.

Key words spectrum analysis; retrieval of water vapor; line-by-line calculation; spatial heterodyne spectroscopy; absorption coefficient

1 引 言

空间外差光谱技术(SHS)的概念最早提出是在上个世纪 70 年代,它综合了衍射光栅及空间调制干涉仪技术于一体,采用了两块衍射光栅代替迈克耳逊干涉仪中的两个平面反射镜,通过调整衍射光栅的角度实现不同波长的零频干涉^[1],可实现高分辨

率测量。

空间外差技术的高灵敏度、高光谱分辨率及可成像探测等特性决定了它在大气遥感中的应用前景,其对进行微量气体探测,了解大气环境、气候变迁以及天气预报等具有重要意义^[2]。另外,其体积小、重量轻、功耗低的特点非常适合于星载载荷的要

收稿日期: 2008-07-03; 收到修改稿日期: 2008-10-31

基金项目: 国家自然科学基金(60678056)和国家 863 计划(2006AA12z13)资助项目。

作者简介: 邹铭敏(1986—),男,硕士研究生,主要从事大气辐射传输方面的研究。E-mail: zoumm@mail.ustc.edu.cn

导师简介: 方勇华(1966—),男,研究员,主要从事遥感光电信息技术方面的研究。E-mail: yhfang@aiofm.ac.cn

求,以实现全球尺度的微量气体分布探测^[3]。2002年10月,美国 STS-112 航天飞机搭载的基于空间外差光谱技术的 SHIMMER-Middeck 进行了首次试飞实验,并获得了 OH 自由基的探测数据,实验获取的数据结果与理论结果吻合^[4],这就验证了 SHS 技术应用于大气探测的可行性。

2 空间外差光谱技术及其观测数据

中国科学院安徽光学精密机械研究所于 2005 年开始进行了空间外差光谱技术的研究^[1,3,5],目前已经完成了可见光波段、近红外实验台原理装置研究,并且对整个原理装置的集成装备性进行了研究,有效地减小了系统的体积,提高了系统的稳定性和可移动性。

2.1 SHS 结构及原理^[1,5~8]

SHS 的光学系统原理如图 1 所示。系统中利用两个衍射光栅代替了传统迈克耳逊干涉仪中的两个平面反射镜。光束从光阑 A 进入,经准直镜后入射到分束器上分为等强度的两束相干光,并分别达到衍射光栅 G_1 、 G_2 。经衍射光栅返回的两束光再通过分束器后发生干涉产生干涉条纹,并由光学系统 L_2 、 L_3 成像于探测器上。

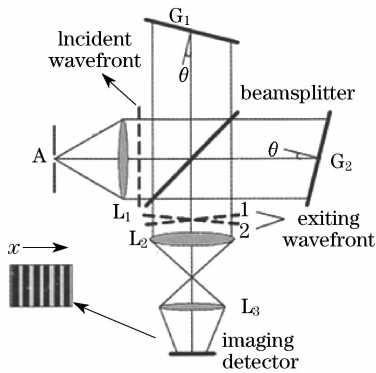


图 1 空间外差光谱仪原理图

Fig. 1 Schematic diagram of basic SHS configuration

空间外差光谱仪中,光栅位置固定,轴向光以 θ 角入射到光栅上,某一波数光将以 θ 角原方向返回,此时 θ 称为光栅的利特罗(Littrow)角,对应的波束称为 Littrow 波数光束。此时,经光栅返回的两束光相位差为零,形成空间零频干涉。而对于非 Littrow 波数的单色光,反射后的两波面将有一夹角 2γ ,中间光程差为零,两端最大。干涉条纹的空间频率可由光栅方程 $\sigma[\sin \theta + \sin(\theta - \gamma)] = m/d$ 推导

$$f = 2\sigma \sin \gamma \approx 4(\sigma - \sigma_0) \tan \theta, \quad (1)$$

其中 σ 为入射光波数, m 为衍射级(一般 $m = 1$), d

为光栅刻线间隔, γ 为任意波数光束与 Littrow 波数的光束出射角相差的角度。

假定入射光为 $B(\sigma)$,则得到的干涉图信号为

$$I(x) = \int B(\sigma) \{1 + \cos\{2\pi[4(\sigma - \sigma_0)x \tan \theta]\}\} d\sigma. \quad (2)$$

最后,通过对干涉图信号进行傅里叶变换可以得到光谱 $B(\sigma)$ 。

2.2 SHS 实验观测数据

图 2 是可见光波段利用 Na 双线光源进行波长定标实验的观测结果。

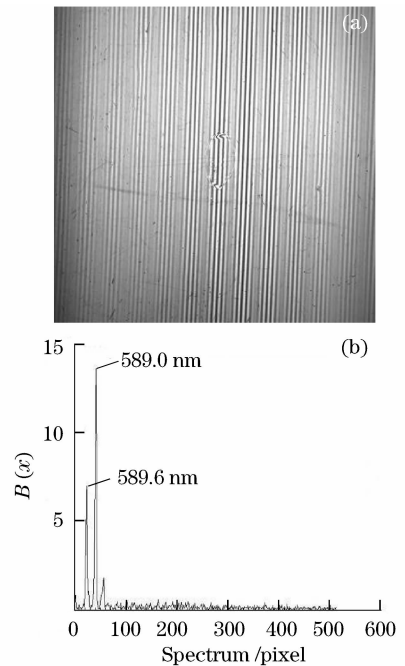


图 2 Na 光谱实验(a)干涉图像(b)光谱曲线

Fig. 2 Experiment of Na lamp (a) interference image (b) spectrum

图 2(a)是实测干涉图像(截图),经过傅里叶变换得到图 2(b)的光谱曲线。图 2(b)中的两个明显的峰由左到右分别对应 Na 灯的 589.6 nm 和 589.0 nm 双线,与其对应的像元的坐标分别为 25 和 43,由此可算出系统的光谱分辨率为 0.033 nm,分辨能力为 17000,光谱范围为 17 nm。

图 3 是在 940 nm 近红外波段水平观测水汽吸收的干涉图及变换后的光谱图。

图 3(a)是红外 CCD 相机在加了高斯响应滤光片时采集的干涉图;图 3(b)是傅里叶变换后得到的复原光谱图,可以看到有明显的吸收现象。对于红外波段的观测数据,由于波长定标以及辐射定标工作都还在进行中,因此由干涉图通过傅里叶变换得到的光谱数据还不可以直接使用。但是 SHS 系统

的高光谱分辨率等特性已经得到充分证明,因此基于它的观测数据的特性,提出了一种基于 SHS 实验室观测逐线积分反演水汽浓度的算法。

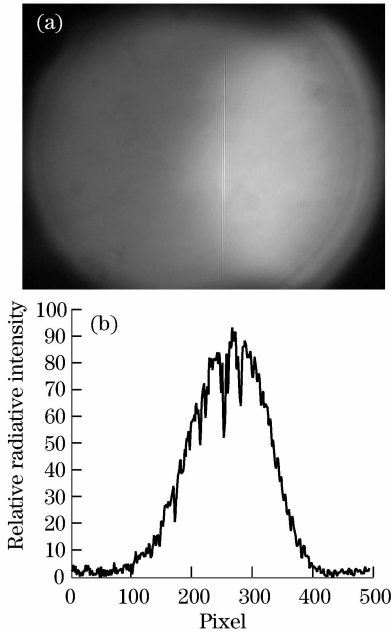


图 3 近红外波段干涉图(a)干涉图像(b)光谱曲线

Fig. 3 Near infrared interference image (a) Interference image (b) spectrum

3 反演计算

在实验室吸收池进行水汽量测量实验,环境状况稳定,温压可控,吸收气体单一,散射影响可以忽略,光谱强度的衰减只与水汽的吸收相关。计算中,首先算出所选波段范围内各吸收线位置及线强,考虑到吸收线翼的影响,实际计算的范围要比选择的波段略宽;其次是吸收系数的计算,某一吸收线处的实际吸收系数应包含临近吸收线线翼对其的影响;最后要计算所选波段内的平均透过率,这其中就包含了待测水汽的量信息,并与实测光谱算得的透过率联立方程,从而解出水汽的量。选择以 940 nm 为中心波长上下 10 nm 的带宽,使用 JavaHAWKS 算得在该波段范围内的各吸收线的线强^[9],其计算的结果为 296 K、1 个标准大气压下的线强,所以在实际实验过程中线强以及半宽要校正到实际温度以及压力的水平上。其中,温度在 JavaHAWKS 中为可选参数,而压力对 Lorentz 半宽的影响按下式进行校正

$$\alpha(P, T) = \alpha_0(P_0, T_0) \cdot (P/P_0) \cdot (T/T_0)^n, \quad (3)$$

其中 α_0 为标准状况下的半宽。

对于实验室观测,线形函数取为 Voigt 线形,因此吸收系数可表示为

$$k_\nu = S \cdot f(\nu) = \frac{k_0 Y}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\exp(-t^2)}{Y^2 + (x-t)^2} dt, \quad (4)$$

其中 $k_0 = \frac{S}{\alpha_D \sqrt{\pi}}$, $t = \frac{\nu - \nu'}{\alpha_D}$, $x = \frac{\nu - \nu_0}{\alpha_D}$, $Y = \frac{\alpha_L}{\alpha_D}$, α_L 、 α_D

分别代表 Lorentz 和 Doppler 半宽度,其计算方法参照文献[10,11]。

在所选取的波段范围内,大约有 1500 条吸收线,所以其在 20 nm 的带宽内“分辨率”达到了 0.013 nm(约 0.15 cm^{-1})。而在低层大气,吸收谱线典型半宽度为 0.1 cm^{-1} 量级,因此就以各吸收线位置为积分点、以相邻吸收线间隔为积分步长进行积分计算。

在计算某一波数处的吸收系数时,对频率的积分应取无穷大。也就是说,在计算 k_ν 时应该考虑无穷远处的吸收线线翼的贡献。但是,由于谱线的强度及其远翼行为存在着某种程度的误差和不确定性,所以在实际计算过程当中根据实际需求在离开吸收中心的某一波数处将吸收线的线翼影响截断^[12,13]。

设 $\Delta\nu_{\text{cut}}$ 为截断的宽度,并令

$$\Delta\nu_{\text{cut}} = \beta \alpha_L, \quad (5)$$

其中 β 为一整数,根据文献[14,15],当 β 分别取 127、300 时,意味着谱线强度的 0.5% 和 0.2% 将被忽略不计。同时,为了部分的补偿截断所引入的误差,可将线强校正如下^[5]:

$$S' = \frac{S}{1 - \frac{2}{\beta\pi}}. \quad (6)$$

综合前面所述,可计算出各吸收线处的吸收系数(考虑了临近的吸收线的旁翼影响)。由于 SHS 观测数据是有一定带宽的入射谱线,因此需要计算该带宽内的吸收气体的平均透过率。所选波段范围内,各单线透过率为

$$\tau_\nu = \exp\left(-\int_0^L k_\nu \rho dl\right). \quad (7)$$

各单线位置处单色光谱在 $\Delta\nu$ 波段内(未经吸收的谱线)的比重

$$w(\nu) = \frac{I(\nu)}{\int_{\Delta\nu} I d\nu}. \quad (8)$$

从而 $\Delta\nu$ 内的平均透过率表示为

$$\bar{\tau} = \sum w_\nu \tau_\nu. \quad (9)$$

需要注意的是,使用采集干涉图的 CCD 像元数与 $\Delta\nu$ 带宽内的吸收线数目可能不一致,因此在计算权重过程中,需要通过插值计算来获取每一吸收线的权重值。

根据实测水汽吸收谱线,结合实测的未经吸收的标准谱线我们可以计算出所选波段内的实际透过率 $\bar{\tau}_0$ 。这样,与上述计算的透过率联立方程,从而解出水汽的实际量。

在计算过程中引入误差的环节有积分点及积分步长的选择、线翼贡献的截断以及单线权重的插值计算。对于积分点及积分步长的选择,在计算过程中选择的平均精度在 0.1 cm^{-1} 左右,能够满足实测数据分辨率的需求,误差可以忽略。线翼贡献的截断, β 的不同取值会带来不同程度的线强损失,虽然对线强作了校正,但也只是部分的补偿截断带来的误差。对于单线权重的计算,一方面依赖于实测光谱数据的精确度,另一方面不同插值运算也会对结果产生不同程度的影响。还有一点就是在最后反算水汽量的过程中,由于自然指数的存在,计算中要对其进行幂级数展开并进行近似计算,这也会给结果带来影响。

因为目前对于水汽的观测波段,SHS 系统的波长定标及辐射定标工作还在进行当中,观测数据还不能直接拿来使用。所以接下来利用红外傅里叶变换光谱仪的测量光谱,使用上述方法计算在指定水汽浓度条件下的透过率,并与同条件下利用 Modtran 计算的透过率 τ_M 相比较,即相当于以 τ_M 代替(8)式中的 $\bar{\tau}_0$,将水汽量带入,验证方程是否成立,如果成立也就证明算法的可行性。

4 基于 FTIR 实测谱线的透过率计算

对于水汽吸收系数的计算,这里分别使用了 Lorentz 线型和 Voigt 线型,其中 Voigt 线型的计算方法参照文献[10]。计算结果对比如图 4 所示。可以看到,利用两种线型函数在一个大气压条件下计算得到的结果非常相近,这就说明了在低层大气计算当中,可以使用 Lorentz 线型函数进行吸收系数的计算。本节最后给出的计算结果是使用 Voigt 线型计算得到的。

接下来利用 FTIR 实测的谱线数据来计算给定水汽浓度及程长的透过率,并与同条件下 Modtran 的计算结果相比较来验证算法的可行性。

测量仪器采用德国 Bruker 公司的 OPAG33 型傅里叶变换红外光谱仪,采集的是未经吸收的标准

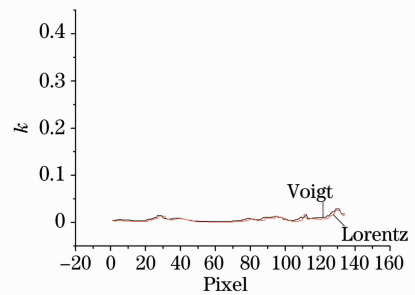


图 4 使用不同线型计算的吸收系数

Fig. 4 Coefficients of absorption with different line shapes spectrum, spectrum range is located in $600 \sim 2000 \text{ cm}^{-1}$ interval. Because water vapor has a strong absorption band at $6.25 \mu\text{m}$, therefore only choose the spectrum band centered at 1600 cm^{-1} with a width of 20 cm^{-1} for related calculation, as shown in Fig. 5. The measured spectrum line in this band range contains 85 spectral points.

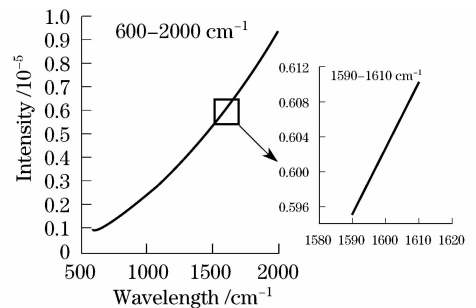


图 5 FTIR 实测光谱

Fig. 5 Spectrum from FTIR

这里使用的谱线资料为 Hitran 2004,考虑到吸收线翼的影响,谱线资料的范围扩大到 $1550 \sim 1650 \text{ cm}^{-1}$;吸收线型选择 Voigt 线型函数;线翼贡献的截断取 $\beta=60$ 。在所选择的 20 波数宽的波段内包含有 148 条吸收线,每条的权重由标准光谱(含 85 个点)计算并通过插值方式获得,结果如图 6 所示。

在 1 个标准大气压、296 K 的温压条件下,水平

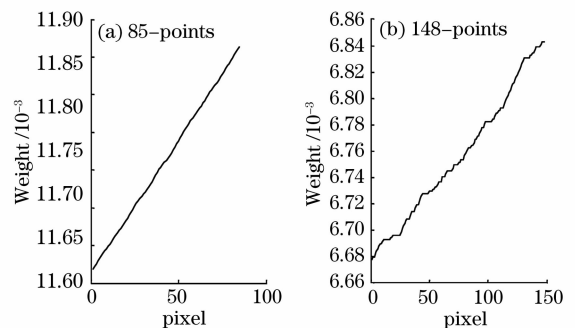


图 6 权重因子(a)实测的含 85 个光谱点位的权重;(b)插值后 148 个点位的权重

Fig. 6 Weighting factors of the measured 85 points (a) and the 148 points after interpretation (b)

程长为 1 m, 分别使用 Modtran 和本文算法计算不同浓度水汽的透过率, 计算结果对比如表 1 所示。

表 1 不同浓度水汽透过率对比

Table 1 Comparison of transmittance of different densities

Concentration		Transmittance	
$/10^{-6}$	$/(g \cdot m^{-3})$	Modtran	New method
100	0.07411	0.9994	0.9994
200	0.1482	0.9989	0.9989
300	0.2223	0.9982	0.9983
400	0.2965	0.9977	0.9978
500	0.3706	0.9972	0.9972
600	0.4447	0.9966	0.9967
700	0.5188	0.9961	0.9961
800	0.5929	0.9955	0.9956
900	0.6670	0.9950	0.9950
1000	0.7411	0.9944	0.9944
2000	1.4823	0.9889	0.9889
3000	2.2234	0.9835	0.9835
4000	2.9645	0.9783	0.9781

由上面的对比可以发现, 两者的计算结果几乎一致, 从而就证明了算法是正确可行的。

5 结 论

基于空间外差光谱系统观测数据的高分辨特性, 提出了一种逐线积分实验室水汽吸收的计算方法。依据于入射光谱并通过插值的方式确定单线吸收的权重, 进而计算选定波段内的平均透过率, 并通过与 Modtran 的计算结果比较, 验证了算法的可行性。对于计算误差, 在处理各吸收线翼贡献的截断以及远翼线型的处理方法会对结果产生一定的影响; 此外, 在根据透过率解算水汽浓度时对单线透过率进行幂级数近似展开, 也会带来一定的误差, 因此这些因素的处理方法应根据实验室测量结果进行择优选择。

参 考 文 献

- Ye Song, Fang Yonghua, Hong Jin *et al.*. System design of spatial heterodyne spectrometer [J]. *Optics and Precision Engineering*, 2006, **14**(6): 959~964
叶松, 方勇华, 洪津等. 空间外差光谱仪系统设计[J]. *光学精密工程*, 2006, **14**(6): 959~964
- Wei Heli, Wu Chengjiu, Ma Zhijun *et al.*. A new method for improving the measurement spectral resolution of atmospheric absorption spectral[J]. *Acta Optica Sinica*, 2002, **22**(2): 165~169
魏合理, 邹承就, 马志军等. 提高大气吸收光谱测量分辨率的新

- 方法[J]. *光学学报*, 2002, **22**(2): 165~169
- Ye Song, Fang Yonghua, Hong Jin *et al.*. Development and application of spatial heterodyne spectroscopy[J]. *Chinese J. Scientific Instrument*, 2006, **27**(6): 983~985
叶松, 方勇华, 洪津等. 空间外差光谱技术的发展与应用[J]. *仪器仪表学报*, 2006, **27**(6): 983~985
- J. G. Cardon, C. R. Englert, J. Harlander *et al.*. SHIMMER on STS-112: development and proof-of-concept flight [C]. Space 2003 (American Institute of Aeronautics and Astronautics) AIAA2003~6224
- Ye Song, Fang Yonghua, Hong Jin *et al.*. Experimental study on spatial heterodyne spectroscopy [J]. *Opto-Electronic Engineering*, 2007, **34**(5): 84~88
叶松, 方勇华, 洪津等. 空间外差光谱技术实验研究[J]. *光电工程*, 2007, **34**(5): 84~88
- Shi Hailiang, Fang Yonghua, Xiong Wei *et al.*. Simulation of Heterodyne Spectroscopy [J]. *Opto-Electronic Engineering*, 2008, **35**(12): 34~39
施海亮, 方勇华, 熊伟等. 空间外差光谱技术仿真研究[J]. *光电工程*, 2008, **35**(12): 34~39
- Shen Weimin, Chen Linsen, Guo Huajie *et al.*. Theory and performance analysis of a spatial heterodyne common path interferometer[J]. *Laser Journal*, 2000, **21**(1): 21~25
沈为民, 陈林森, 顾华俭等. 共光路空间外差干涉仪理论与性能分析[J]. *激光杂志*, 2000, **21**(1): 21~25.
- Shen Weimin, Shi shanjin. Compact Spatially Modulated Fourier Transform Spectrometer [J]. *Semiconductor Optoelectronics*, 2001, **22**(6): 408~410.
沈为民, 时善进. 紧凑型空间调制傅里叶变换光谱仪[J]. *半导体光电*, 2001, **22**(6): 408~410
- Chen Hongbing, Gao Junyi, Ding Qiang *et al.*. High resolution absorption spectroscopy of water vapor at 917 ~ 945 nm: Measurement of line strengths and air broadening [J]. *Acta Optica Sinica*, 1996, **16**(11): 1619~1625
陈红兵, 高军毅, 丁强等. 917~945 nm 水汽吸收线强度和空气加宽系数测量[J]. *光学学报*, 1996, **16**(11): 1619~1625
- S. R. Drayson. Rapid computation of the Voigt profile[J]. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 1976, **16**: 611~614
- Xu Shenchu, Zou Lingfeng, Guo Dong *et al.*. Family of standard Voigt profiles and its application[J]. *Chin. J. Lasers*, 1993, **20**(11): 818~822
徐慎初, 邹玲枫, 郭栋等. 标准 Voigt 线型曲线族及其应用[J]. *中国激光*, 1993, **20**(11): 818~822
- Zhang Hua, Shi Guangyu. A fast and efficient line-by-line calculation method for atmospheric absorption [J]. *Chinese Journal of Atmospheric Sciences*, 2000, **24**(1): 111~120
张华, 石广玉. 一种快速高效的逐线积分大气吸收计算方法[J]. *大气科学*, 2000, **24**(1): 111~120
- Shi Guangyu. On the k-distribution and correlated k-distribution models in the atmospheric radiation calculations [J]. *Scientia Atmospherica Sinica*, 1998, **22**(4): 659~673
石广玉. 大气辐射计算的吸收系数分布模式[J]. *大气科学*, 1998, **22**(4): 659~673
- M. D. Chou, L. Kouvaris. Monochromatic calculations of atmospheric radiative transfer due to molecular line absorption [J]. *J. Geophys. Res*, 1986, **19**: 4047~4055
- Shi G. Y.. An accurate calculation and representation of the infrared transition function of the atmospheric constituents. [D]. Tohoku university of Japan, 1981, 27~49