

FTIR 被动遥测信号中的线形函数建模及补偿方法

吴 军¹, 崔方晓^{1*}, 袁小春², 李大成¹, 李扬裕¹, 王安静¹, 郭腾霄³

1. 中国科学院安徽光学精密机械研究所, 中国科学院通用光学定标与表征技术重点实验室, 安徽 合肥 230031
2. 昆明物理研究所, 云南 昆明 650032
3. 国民核生化灾害防护国家重点实验室, 北京 102205

摘 要 被动遥测红外信号的精确解译, 对远距离、非接触获取污染云团信息具有重要意义。然而, 测量过程中的光谱畸变阻碍了这一目的的达成。针对遥测信号中的谱线畸变问题, 提出了一种利用线形函数模型自适应补偿傅里叶变换红外光谱仪光谱仪线形函数的方法。通过对傅里叶变换光谱仪线形函数的成因分析, 结合实际仪器设计参数, 从理想线形函数、固有线形函数和相位误差三个方面构建线形函数模型; 在此基础上, 以实测畸变光谱与理论仿真光谱的均方误差作为代价函数, 利用迭代优化方法实现了对实际线形函数关键参数进行估算的算法流程; 将重构得到的线形函数应用于理论光谱补偿, 显著减少了理论仿真光谱与实测光谱之间的差异。分析结果表明, 理想线形函数主要影响谱线展宽及旁瓣幅值; 固有线形函数造成向低频方向的非对称展宽; 而相位误差则会造成谱峰非对称。必须在理论仿真光谱中综合考虑三种来源线形函数的贡献, 才能有效建立测量光谱和待反演云团参数之间的联系。实际线形函数畸变参数的获取和补偿应用, 有助于提高红外遥测信号的定量解译水平。

关键词 傅里叶变换; 线形函数; 遥感; 红外光谱

中图分类号: TH744.1 **文献标识码:** A **DOI:** 10.3964/j.issn.1000-0593(2019)11-3321-05

引 言

傅里叶变换红外光谱仪(Fourier transform infrared spectrometer, FTIR)是远距离、非接触感知污染云团信息的重要手段, 被广泛应用于污染排放监测和应急响应。相比固定站点应用方式, 由机动平台搭载的 FTIR 系统, 具有更好的机动性和空间覆盖能力, 有助于准确把握较大范围内的污染气体类型和扩散情况。

FTIR 系统获取的被动红外遥测信号, 包含了仪器视场内对应光程中的污染气体云团类型、浓度信息; 通过对 FTIR 遥测信号的准确解译, 可以得到吸收气体柱含量、云团温度和背景温度等参数; 在此基础上, 借助红外焦平面光谱成像^[1]、扫描光谱成像^[2]、计算断层扫描^[3](computed tomography, CT)等手段, 可以重构出云团浓度的二维、三维空间分布, 对相关环境执法和应急保障决策具有重要意义。但是, 外场条件的复杂性和多样性对精密红外遥测设备的性能提出了较严苛的要求。在长期外场使用中, 机动平台的振动

等因素可能导致干涉仪测量数据的准确性和精度随时间发生变化。具体表现为结构精度或关键参数逐渐偏离设计指标, 进而造成观测谱线的位置发生漂移、形状发生畸变, 影响数据的有效解析和应用。

红外信号的定量反演和解译依赖于遥感模型的精度, 后者包括如下几个方面:

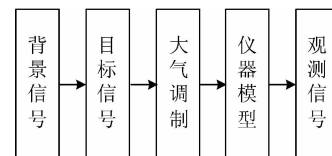


图 1 遥测信号传递模型

Fig. 1 Transfer flow of remote sensing signals

背景信号经过目标和大气路径调制后, 被观测仪器所记录, 仪器自身的光谱响应特性, 称作仪器线形函数(instrumental line shape, ILS)会混叠在目标信号中, 必须对其加以建模和补偿。FTIR 系统线形函数测定的最直接方法是观测

收稿日期: 2018-09-17, 修订日期: 2018-12-22

基金项目: 国家自然科学基金项目(41505020)和中国科学院重点部署项目(KGFZD-135-16-002-2)资助

作者简介: 吴 军, 1985 年生, 中国科学院合肥物质科学研究院副研究员 e-mail: wujun@aiofm.ac.cn

* 通讯联系人 e-mail: fxcui@aiofm.ac.cn

单色光源如激光；但是实际应用中，由于激光波长的谱段覆盖有限，且光路准直误差会引入额外偏差，故应用范围有限；Piera Raspollini^[4]等利用平流层观测到的羟基(OH)发射线单峰，通过拟合相位误差、调制效率的方法实现了对 ILS 的订正；Frank Hase^[5]等研发了专门用于 ILS 订正的环境可控的低压气体池，向其中充入浓度已知、光谱特征均匀分布于所关注波段的特定气体，通过实测气体单线与理论谱线的误差，反演得到实际 ILS。

然而，对于近地面污染云团被动红外遥测而言，当外场工作中出现线形函数误差后，不具备观测激光等单色光源的条件；低压气体池的配备涉及温压状态控制、注入气体精确定量等问题，也会进一步增加部署成本和操作复杂性；此外，近地面遥测光谱相比平流层更为复杂，压力导致的谱线展宽使理想单峰谱线的获取极为困难。因此，本研究提出了一种不依赖于额外标定设备，使用连续气体吸收光谱直接反演线形函数的方法；通过该方法的应用，使理论谱线更加逼近实测谱线，显著减少了线形函数畸变的影响。

1 研究方法

1.1 实验与现象

采用自研的 FTIR 光谱测量系统，在室内近距离直接观测气体池中的氨气云团，所采用的 FTIR 系统具体参数配置如表 1 所示。

表 1 FTIR 系统主要参数

Table 1 Specifications of FTIR system

参数名称	参数值
波段范围/ μm	8~14(1 250~714 cm^{-1})
光谱分辨率/ cm^{-1}	~4
探测器尺寸/ mm^2	1×1
探测器焦距/ mm	26

在长期外场工作后，其实测光谱相比正常光谱发生了显著的变形，影响识别和定量精度。如图 2 为对应状态下的仿真亮温谱，与包含线形函数畸变时的实测氨气(NH_3)亮温光谱对比。

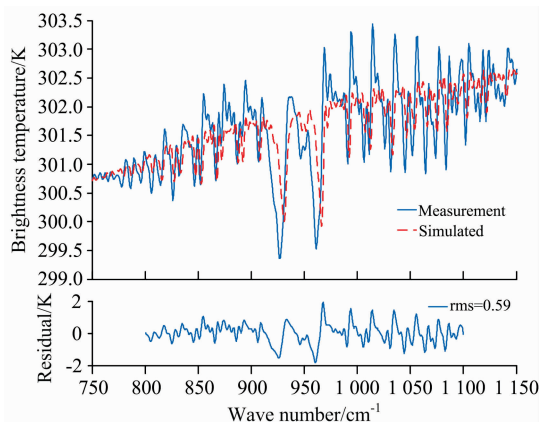


图 2 线形函数畸变导致的谱峰变形

Fig. 2 Spectral feature distortions due to poor ILS model

其中，仿真亮温光谱使用标准吸收系数，结合现场温压状态和浓度估值得到。仿真光谱对应在设计参数下的理论预期，从图 2 可以看到，实测亮温光谱在光谱分辨率、谱线形状、谱峰位置上均出现了较大偏差，且峰偏移程度随吸收强度增加而增加。同时，残差结构中包含了较多的谱峰信息，这意味着信号模型未能完整、准确反映测量信号变化过程，会制约后续光谱解译和定量反演的效果。

1.2 线形函数建模

根据傅里叶变换原理，理论干涉图中的光程差应该是无限延伸的，而实际仪器中，光程差总是有限的。这就对应于干涉图上叠加了一个矩形窗函数，其在频域对应一个 sinc 函数

$$\text{ILS}_{\text{ideal}} = F[\text{Rect}(x)]^{-1} = 2L \cdot \text{sinc}(2\pi\nu L) \quad (1)$$

探测器焦距较长，且光路准直误差及相位误差得到良好控制的情况下，理想线形函数贡献占主导地位。但是，当探测器离轴，或干涉仪两臂相对位置关系发生变化时，会造成额外的线形贡献，此时必须对相应畸变进行考虑和补偿。

1.2.1 有限孔径展宽及探测器离轴效应

对于探测器而言，视场光阑并非点光源，而是具有一定的孔径，这就导致孔径边缘的光线与光轴上的光线存在夹角，由此形成的轴上、离轴光线光程差不同，会造成入射光频率向低波数展宽，对于频率为 ν_0 的轴上光线而言，夹角为 θ 的离轴光线对应频率为 $\nu_0 \cos\theta$ ；此外，光轴准直误差、探测器偏移等效效应均会造成离轴角变化，影响固有有线形函数的形状^[6]，其从机理上与有限孔径展宽类似，可以合并考虑，对应的线形函数反映了仪器自身的光谱响应特征，被称作固有有线形函数^[7](Inherent ILS)。Jerome Genest 等通过有限视场积分，证明了探测器与光轴的相对位置关系，对应了不同的频率分量^[8]

$$r = f \left(\frac{\nu_0^2}{\nu'^2} - 1 \right)^{\frac{1}{2}} \quad (2)$$

其中， r 为到光轴的距离， f 为探测器焦距， ν 为半径 r 对应的离轴光线频率。理想情况下，当探测器像面足够大时， ν 频率的能量能够完全被探测器所接收，固有有线形函数在频域对应一个矩形窗；当离轴角度持续增大时，受制于探测器尺寸、形状因素，更低频率的 ν' 能量只能被探测器部分接收，从而导致固有有线形函数低波数端发生变形。

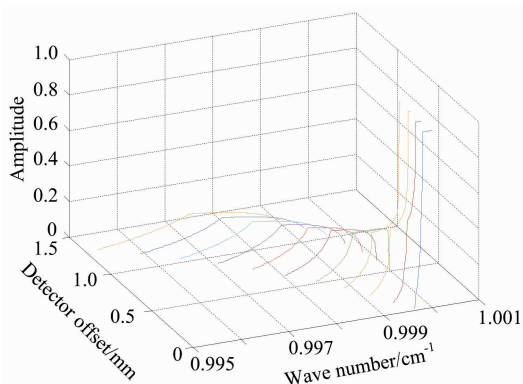


图 3 仿真得到的不同探测器离轴程度下的线形函数
Fig. 3 Simulated ILS functions under different distances from optical axis

图 3 为根据表 1 得到的仿真得到的不同探测器离轴程度下的固有线性函数 $ILS_{inherent}$ 轮廓, 其中 x 轴为归一化波数坐标, 即 $\frac{\nu}{\nu_0}$; y 轴为矩形探测器中心相对光轴的位移; z 轴为线性函数的相对幅度。可以看到, 当探测器在轴时 ($y=0$), 固有线性函数基本为一矩形轮廓, 在低波数端的缓变下降是由矩形探测器对圆形光斑的截断所致; 随着探测器中心到光轴距离的增加, 固有线性函数逐渐向低波数展宽, 且幅值逐步下降, 这是因为离轴角逐渐增大过程中, 探测器所接收能量对应的频率范围, 以及落在探测器范围内的辐射通量发生变化所致。

1.2.2 相位误差贡献

干涉仪相位误差包括两部分^[4]:

(1) 仅依赖于频率的相位误差: 主要由过零点两侧非对称采样, 以及光电部分的频率依赖造成。可以通过短双边干涉图求取低分辨率相位误差, 然后插值到高分辨率光谱图的方法来进行校正^[9];

(2) 同时依赖于频率和光程差的误差: 包括运动过程中干涉仪两臂之间的相对倾斜 (tilt) 与剪切 (shear) 效应, 以及采样误差。

对于第二种情况, 由于其依赖于光程差 x , 故无法通过短干涉图获取所有光程差位置的相位误差。Piera Raspollini 等证明了当干涉仪两臂发生倾斜或剪切时, 在校正掉第一种相位误差的前提下, 畸变干涉图可以表达为如下形式^[4]

$$I_m(x) = A(x) \int_0^{\infty} S(\sigma) \cos[2\pi\sigma x + \phi(x)] d\sigma \quad (3)$$

其中 x 为光程差, σ 为频率, $S(\sigma)$ 为原始光谱信号, $I_m(x)$ 为包含相位误差 $\phi(x)$ 的实测干涉图, $A(x)$ 为依赖于光程差的调制效率。对应畸变光谱为:

$$S_m(\sigma) = FT[I_m(x)] = S(\sigma) * ILS_{\phi}(x)$$

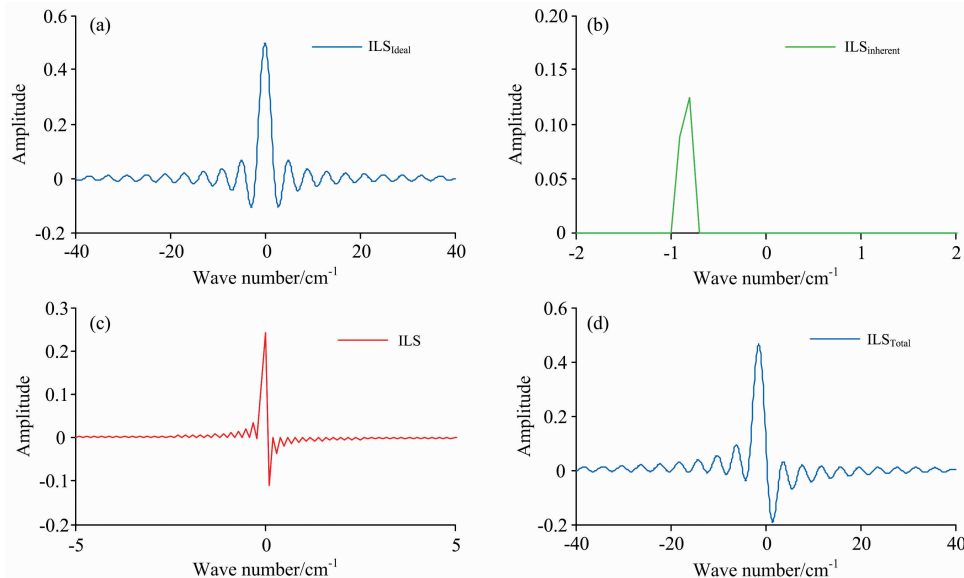


图 4 不同因素对应的线性函数, 及其贡献对比

(a): 理想线性函数; (b): 固有线性函数; (c): 相位误差贡献; (d): 总的线性函数

Fig. 4 Retrieved ILS functions due to different sources

(a): Ideal ILS; (b): Inherent; (c): Phase-error contribution; (d): Total ILS

$$= S(\sigma) * FT\{A(x)\exp[i\phi(x)]\} \quad (4)$$

可以看到, 相位误差引起的畸变项 $ILS_{\phi}(\sigma)$ 是调制效率和相位误差 $A(x)$ 和 $\phi(x)$ 的傅里叶变换, 而二者均是 x 的缓变函数, 可以用低阶多项式来表示; 进而经过傅里叶变换, 得到对应的光谱畸变项 $ILS_{\phi}(\sigma)$ 。

1.3 线性函数补偿

根据前述 FTIR 线形成因分析, 在发生线性畸变的情况下, 完整的仿真光谱表达式应为

$$S'(\sigma) = S(\sigma) * ILS_{ideal} * ILS_{inherent} * ILS_{\phi} \quad (4)$$

根据表 1 所述光程差、探测器焦距等参数, 分别构建 ILS_{ideal} , $ILS_{inherent}$ 和 ILS_{ϕ} 初值, 并将其与给定的仿真氨气光谱相卷积, 使用 Levenberg-Marquardt 方法, 以云团浓度程长积、温度、相位偏移程度、有限孔径展宽等因素为变量, 以 $800 \sim 1\,100 \text{ cm}^{-1}$ 范围内的亮温谱线均方根误差为代价函数, 进行非线性迭代优化, 最终得到结果, 见表 2 所示。

表 2 初值参数设置及迭代结果

Table 2 Initial values and iterative optimization results

迭代变量	初始值	收敛值
云团温度/ $^{\circ}\text{C}$	27.00	28.415
探测器离轴距离/mm	0	0.300
云团浓度-程长积/(ppmv·m)	1 500	1 830
相位误差 $\phi(x)$ 截距/rad	0	$\pi/5.19$
相位误差 $\phi(x)$ 斜率	0	0.06
调制效率 $A(x)$ 截距	1	0.989
调制效率 $A(x)$ 斜率	0	-0.460
均方根误差	0.39	0.210

利用迭代优化得到的参数组合, 分别重构 $ILS_{inherent}$, ILS_{ϕ} , 以及最终合成线性函数对比如图 4 所示。

可以看到, 固有线性函数会影响谱峰位置, 而依赖于光程差的相位误差则会改变谱峰对称性。将上述合成线性函数卷积到仿真光谱上, 实现对仿真光谱的线性函数补偿。

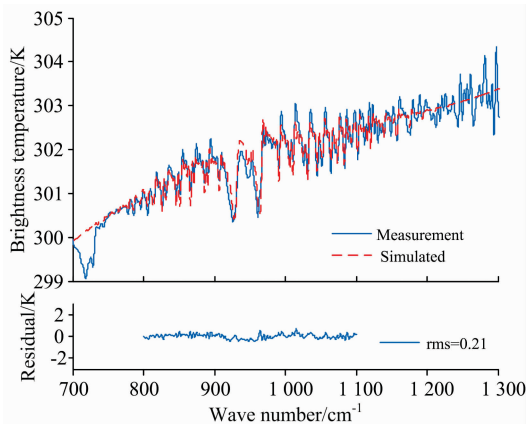


图 5 经过 ILS 补偿后的仿真光谱与实测光谱对比
Fig. 5 Comparison of ILS compensated simulated spectrum with measured spectrum

线性函数补偿后的仿真亮温光谱与实测亮温光谱对比如图 5 所示。

通过引入对 $ILS_{inherent}$, ILS_{ϕ} 的考虑, 有效消除了残差中的谱峰相关结构。图 2、图 5 的对比表明, 几种线性误差贡献的建模和补偿, 改善了仿真光谱与实测光谱的相似度。这意味着完善线性函数模型的引入, 能够使光谱信号仿真流程更接近真实光谱产生过程; 同时也证明线性函数误差是红外光谱测量过程中的重要影响因素, 在精确解译和定量反演中, 必须考虑线性函数畸变带来的影响。

2 结 论

通过对 FTIR 系统线性函数畸变的成因分析, 实现了不同线性函数畸变因素的建模和仿真; 利用非线性迭代优化方法, 获得了能与真实谱线相匹配的线性函数相关参数, 有效补偿了光谱仿真流程中线形函数贡献缺失带来的误差。该技术不依赖于特定的精确标定设备, 能够直接从实测光谱估算线性函数, 为提高复杂外场条件下, 特别是搭载于机动平台的傅里叶变换光谱设备数据质量, 提供了新的技术途径。

References

- [1] Tremblay P, Savary S, Rolland M, et al. Standoff Gas Identification and Quantification from Turbulent Stack Plumes with an Imaging Fourier-Transform Spectrometer. *Advanced Environmental, Chemical, and Biological Sensing Technologies* **Ⅷ**, 2010. 1.
- [2] Harig R, Gerhard M. *Field Analytical Chemistry and Technology*, 2001, 5(1-2): 75.
- [3] De donato P, Barres O, Sausse J, et al. *Remote Sensing of Environment*, 2016, 175(1): 301.
- [4] Raspollini P, Ade P, Carli B, et al. *Applied Optics*, 1998, 37(17): 3697.
- [5] Hase F, Blumenstock T, Paton-walsh C. *Applied Optics*, 1999, 38(15): 3417.
- [6] Kauppinen J, Saarinen P. *Applied Optics*, 1992, 31(13): 2353.
- [7] Harig R. *Applied Optics*, 2004, 43(23): 4603.
- [8] Genest J, Tremblay P. *Applied Optics*, 1999, 38(25): 5438.
- [9] Griffiths R P, James A H. *Fourier Transform Infrared Spectrometry*. New Jersey: John Wiley & Sons, 2007.

Line Shape Effect Modeling and Compensation for Passive Remote Sensing Signals of Fourier Transform Infrared Spectrometers

WU Jun¹, CUI Fang-xiao^{1*}, YUAN Xiao-chun², LI Da-cheng¹, LI Yang-yu¹, WANG An-jing¹, GUO Teng-xiao³

1. Key Laboratory of General Optical Calibration and Characterization, Anhui Institute of Optics and Fine Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Hefei 230031, China

2. Kunming Institute of Physics, Kunming 650032, China

3. State Key Laboratory of Nuclear, Chemical and Biological Disaster Protection, Beijing 102205, China

Abstract Accurate quantification of infrared remote sensing signal is important for acquisition of pollutant cloud's information, but spectral distortions occurred in measurement may hinder the achievement of such purpose. An adaptive method based on instrumental line shape (ILS) model was established in order to compensate the contributions due to ILS distortion. Through analysis of the sources of ILS function, the ideal, inherent function as well as phase error contribution were modeled based on design parameters of a real infrared spectrometer. Furthermore, an algorithm which reconstructs ILS function from measurement was developed by using iterative optimization method, which takes root mean square between differences of simulation and measurement spectrum as cost function. The compensation result by using reconstructed ILS function on simulated spectrum suggests

that differences between simulation and measurement were effectively eliminated. The analysis showed that inherent ILS may cause spectral feature broadening toward low frequency, and phase error is responsible for spectral feature asymmetry. All three sources of ILS distortion must be considered simultaneously to get accurate pollutant cloud parameter from measured spectrum. The acquisition of distortion parameters and the corresponding compensation method may be helpful for the recognition and quantification of infrared remote sensing signals.

Keywords Fourier transform; ILS; Remote sensing; Infrared spectrum

(Received Sep. 17, 2018; accepted Dec. 22, 2018)

* Corresponding author

欢迎投稿

欢迎订阅

欢迎刊登广告

《光谱学与光谱分析》2020年征订启事

国内邮发代码：82-68

国外发行代码：M905

《光谱学与光谱分析》1981年创刊，国内统一刊号：CN 11-2200/O4，国际标准刊号：ISSN 1000-0593，CODEN 码：GYGFED，国内外公开发行，大 16 开本，332 页，月刊；是中国科协主管，中国光学学会主办，钢铁研究总院、中国科学院物理研究所、北京大学、清华大学共同承办的学术性刊物。北京大学出版社出版，每期售价 95 元，全年 1140 元。刊登主要内容：激光光谱测量、红外、拉曼、紫外、可见光谱、发射光谱、吸收光谱、X 射线荧光光谱、激光显微光谱、光谱化学分析、国内外光谱化学分析领域内的最新研究成果、开创性研究论文、学科发展前沿和最新进展、综合评述、研究简报、问题讨论、书刊评述。

《光谱学与光谱分析》适用于冶金、地质、机械、环境保护、国防、天文、医药、农林、化学化工、商检等各领域的科学研究单位、高等院校、制造厂家、从事光谱学与光谱分析的研究人员、高校有关专业的师生、管理干部。

《光谱学与光谱分析》为我国首批自然科学核心期刊，中国科协优秀科技期刊，中国科协择优支持基础性、高科技学术期刊，中国科技论文统计源刊，“中国科学引文数据库”，“中国物理文摘”，“中国学术期刊文摘”，同时被国内外的 CSCD，SCI，AA，CA，Ei，AJ，MEDLINE，Scopus 等文献机构收录。根据国家科技部信息研究所发布信息，中国科技期刊物理类影响因子及引文量《光谱学与光谱分析》都居前几位。欢迎国内外厂商在《光谱学与光谱分析》发布广告（广告经营许可：京海市监广登字 20170260 号）。

《光谱学与光谱分析》的主编为高松院士。

欢迎新老客户到全国各地邮局订阅，若有漏订者可直接与《光谱学与光谱分析》期刊社联系。

联系地址：北京市海淀区学院南路 76 号（南院），

《光谱学与光谱分析》期刊社

邮政编码：100081

联系电话：010-62181070，62182998

电子信箱：chnghpxygpfx@vip.sina.com

修改稿专用邮箱：gp2008@vip.sina.com

网 址：<http://www.gpxygpfx.com>

