

星载大气痕量气体差分吸收光谱仪狭缝函数研究

黄 珊^{1,2}, 司福祺^{1*}, 赵敏杰¹, 周海金¹, 江 宇¹

1. 中国科学院安徽光学精密机械研究所环境光学与技术重点实验室, 安徽 合肥 230031
2. 中国科学技术大学, 安徽 合肥 230026

摘 要 星载大气痕量气体差分吸收光谱仪是一种新型光学遥感仪器,具有分辨率高(0.3~0.5 nm)、宽光谱范围(240~710 nm)、大视场角(114°视场对应地面 2 600 km)的特点,载荷采用推扫方式,可实现 1 日全球覆盖监测。载荷通过探测地球大气或地表反射、散射的紫外/可见光,利用差分吸收光谱技术来获取全球大气痕量气体(NO₂, SO₂, O₃ 等)分布和变化。定标是遥感数据定量应用的前提,同时为获取载荷光谱特性,需要在地面完成载荷的光谱定标。根据大气痕量气体差分吸收光谱仪视场角度大、谱段范围宽、空间和光谱分辨率高等特点,搭建了一套基于二维转台的光谱定标系统,此系统能够完成全视场光谱定标。光谱定标采用标准谱线法,光谱定标光源使用汞灯。光谱响应函数是描述光谱仪光谱响应特性的重要参数,根据光谱响应函数可以获取载荷的光谱分辨率,同时也是基于 DOAS 反演的关键输入参数,光谱响应函数的精度直接影响大气痕量气体的反演结果。根据载荷实际测试的光谱响应数据,选取了 Gauss, Lorentz 和 Voigt 三种函数作为待选的光谱响应函数。为对三种函数模型进行筛选,进行了两种筛选对比测试,首先分别用 Gauss 函数、Lorentz 函数、Voigt 函数对载荷的单色光响应数据进行拟合,以三种函数的拟合残差平方和作为评判标准,拟合结果表明 Gauss 函数作为狭缝函数拟合的残差平方和最小为 0.01, Lorentz 和 Voigt 函数作为狭缝函数拟合的残差平方和分别为 0.033 和 0.021。从载荷单色光响应数据函数拟合的结果分析, Gauss 函数可以作为载荷的光谱响应函数模型。为了进一步验证这一结论,进行了 DOAS 反演 NO₂ 样气的实验,考察三种函数模型对反演的影响。在实验室开展了 NO₂ 样气测试,大气散射光通过 30 * 40cm 的石英窗口入射到载荷狭缝,将 NO₂ 样品池放置在载荷狭缝和石英窗口中间,获取的数据为 NO₂ 样气吸收谱,随后充入 N₂ 气体获取反演的参考谱,实验在晴朗天气下进行,并能够在较短时间内完成,可以减少外界天气条件对反演结果的影响。实验中 NO₂ 样气浓度为 8.4812×10^{16} molec · cm⁻², 在利用 DOAS 进行反演时,设置仪器狭缝函数分别为 Gauss, Lorentz 和 Voigt 函数,分析三组不同的函数模型对应的 NO₂ 浓度结果,根据反演结果的相对偏差对函数模型进行评价。实验结果表明 Gauss 函数作为狭缝函数反演结果的相对偏差最小为 5.6%, Lorentz 和 Voigt 函数作为狭缝函数的反演相对偏差分别为 28% 和 15.1%。由光谱响应数据的拟合结果及样气反演结果表明, Gauss 函数可以作为载荷的光谱响应函数模型。

关键词 星载大气痕量气体差分吸收光谱仪; 光谱定标; 狭缝函数; 气体反演

中图分类号: O433 **文献标识码:** A **DOI:** 10.3964/j.issn.1000-0593(2019)07-2008-05

引 言

星载大气痕量气体差分吸收光谱仪采用四通道凸面光栅成像光谱仪,基于痕量气体对不同谱段光信息的“指纹”吸收和差分吸收光谱算法定量获取大气痕量气体分布^[1]。该仪器具有大视场、宽谱段、光谱和空间维高分辨率等特点^[2]。载

荷观测的光谱范围为 240~710 nm,视场为 114°×0.5°,光谱分辨率为 0.3~0.5 nm。穿轨方向的地面观测范围为 2 600 km,能够实现一日全球覆盖从而监测全球关键大气成分分布^[3]。仪器的狭缝函数是影响反演精度的重要因素之一,所以找到一个能够正确描述星载大气痕量气体差分吸收光谱仪狭缝函数的函数模型有着重大的意义。为此,首先对星载大气痕量气体差分吸收光谱仪展开光谱定标实验,获得汞灯

收稿日期: 2018-04-25, 修订日期: 2018-08-11

基金项目: 国家自然科学基金项目(41705016, 41605017), 国家重点研发计划项目(2016YFC0200400)资助

作者简介: 黄 珊, 女, 1994 年生, 中国科学院安徽光学精密机械研究所环境光学与技术重点实验室硕士研究生

e-mail: shuang@aiofm.ac.cn * 通讯联系人 e-mail: sifuqi@aiofm.ac.cn

定标^[4]光谱数据。然后采用 Gauss, Lorentz 和 Voigt 函数作为光谱仪狭缝函数对光谱定标得到的汞灯光谱数据进行函数拟合, 分析不同模型的拟合结果。同时, 利用 DOAS 技术反演 NO₂ 样气浓度, 对三种函数作为狭缝函数反演结果与标准浓度作比对, 分析采用不同模型时反演结果的相对偏差。

1 光谱定标原理

1.1 装置

定标是遥感载荷定量反演的前提, 其精度直接决定了仪器研制和应用水平的高低^[5]。根据星载大气痕量气体差分吸收光谱仪视场角有 114° 的特点, 将星载大气痕量气体差分吸收光谱仪固定在数控二维转台上, 狭缝与水平方向平行。光源、光阑、滤光片等一起固定在二维转台的旋转臂上, 此旋转臂能够平行于狭缝在水平面上转动, 使得 114° 视场能够全面覆盖。实验采用标准谱线法进行光谱定标, 这种方法易于实现、具有结构简单、易操作的优点, 常用来实现光谱分辨率较高的线性色散仪器的波长标定^[6]。根据星载大气痕量气体差分吸收光谱仪谱段范围宽、空间分辨率和光谱分辨率高等特点, 实验采用汞氩灯作为标准灯, 汞氩灯是 Ocean Optics 公司生产的 HG-1 型光谱定标源, 波长为 253~922 nm。汞氩灯固定在旋转臂上, 调整好汞灯位置使得汞灯能够和狭缝在同一条水平线上, 设置适当的载荷积分时间以保证在光强不饱和的情况下获得较大值。这样既保证定标精度, 也能获得较高的信噪比。实验时控制电机带动旋转臂旋转, 完成光谱仪的全视场定标。

1.2 结果分析

选取中心视场光谱定标数据为例进行分析, 其他视场分析方法相同, 得到波长和 DN 值对应文件, 汞灯定标谱线图如图 1 所示。分别以 Gauss 模型, Lorentz 模型, Voigt 模型^[7]来拟合光谱特征峰, 算出每种模型拟合之后的残差平方和作为拟合效果判断依据。

Gauss 函数模型为

$$y = y_0 + A e^{-2(\frac{x-x_c}{\sigma})^2} \quad (1)$$

式(1)中, y_0 为距 X 轴偏差, A 为模型与 X 轴围成的闭合面

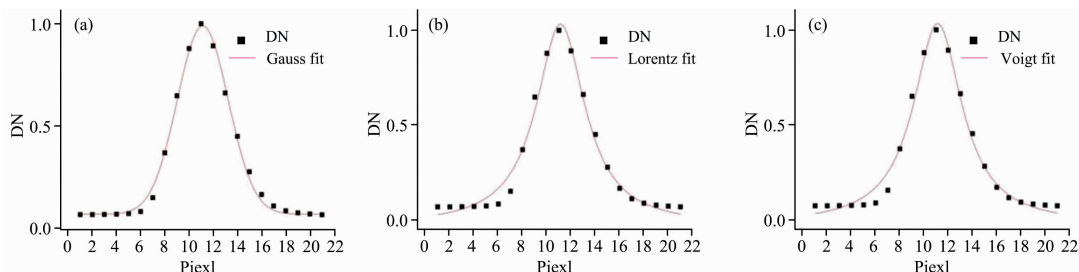


图 2 (a) Gauss 拟合曲线; (b) Lorentz 拟合曲线; (c) Voigt 函数拟合曲线

Fig. 2 (a) Gauss fitting curve; (b) Lorentz fitting curve; (c) Voigt fitting curve

拟合得到各个模型的参数值, 将各个模型参数值代入公式计算出每种模型的残差平方和, 如表 1 所示, 可以看出

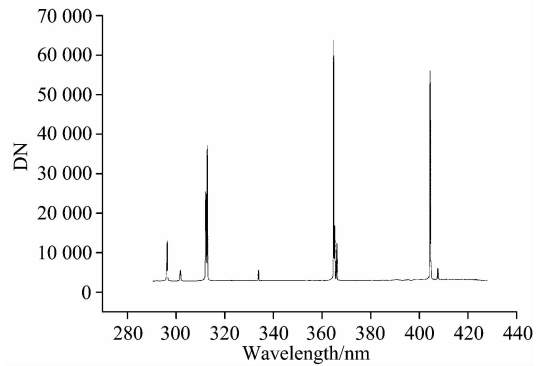


图 1 汞灯谱线图

Fig. 1 Mercury lamp spectrum

积, x_c 为中心像元, σ 为波峰宽度, 其中 σ 与 FWHM 的关系式

$$FWHM = \sqrt{2 \ln 2} \sigma \quad (2)$$

Lorentz 函数模型为

$$y = y_0 + \frac{2A}{\pi} \frac{w}{4(x-x_c)^2 + w^2} \quad (3)$$

式(3)中, y_0 为距 X 轴偏差, A 为模型与 X 轴围成的闭合面积, x_c 为中心像元, w 为波峰半高宽。

Voigt 函数模型为

$$y = y_0 + (f_1 f_2)(x) = y_0 + A \frac{2 \ln 2}{\pi^2} \frac{w_L}{w_G^2} \cdot$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-t^2}}{\left(\sqrt{\ln 2} \frac{w_L}{w_G}\right)^2 + \left(\sqrt{4 \ln 2} \frac{x-x_c-t}{w_G}\right)^2} dt \quad (4)$$

其中

$$f_1(x) = \frac{2A}{\pi} \frac{w_L}{4(x-x_c)^2 + w_L^2}$$

$$f_2(x) = \sqrt{\frac{4 \ln 2}{\pi}} \frac{e^{-\frac{4 \ln 2}{w_G^2} x^2}}{w_G}$$

式(4)中, y_0 为距 X 轴偏差, A 为模型与 X 轴围成的闭合面积, x_c 为中心像元, w_G 为高斯宽度, w_L 为洛伦兹宽度。

选取图 1 中 404 nm 特征峰进行函数拟合。将数据分别代入 Gauss 模型, Lorentz 模型, Voigt 模型进行拟合, 拟合曲线结果如图 2(a), (b)和(c)所示。

Gauss 函数的残差平方和最小, 说明 Gauss 波形更符合光谱特征峰实际波形, Gauss 函数模型拟合效果最好。

表 1 三种模型函数拟合的残差平方和

Table 1 Residual sum of squares of three fitting models

模型	Gauss	Lorentz	Voigt
残差平方和	0.01	0.033	0.021

2 DOAS 反演样气浓度

为进一步研究不同狭缝函数^[8]模型对星载大气痕量气体差分吸收光谱仪反演的影响,开展了 NO₂ 样气浓度反演的实验。采用 DOAS 方法,以 Gauss 函数、Lorentz 函数、Voigt 函数作为光谱仪狭缝函数对样气进行反演分析,以获得不同狭缝函数模型对样气浓度反演结果的影响。

2.1 DOAS 原理

DOAS 技术的基本原理为朗伯比定律,以太阳散射光为光源,入射光 $I_0(\lambda)$ 经大气中分子吸收^[9]、瑞丽散射和米散射消光作用而发生衰减,假设路径 L 上气体浓度均匀,出射光可表示为

$$I(\lambda) = I_0(\lambda) \exp \left[-L \left(\sum_{j=1}^n \sigma_j(\lambda) c_j + \epsilon_R(\lambda) + \epsilon_M(\lambda) \right) \right] \quad (7)$$

其中 $\sigma_j(\lambda)$ 是所测气体的分子吸收截面, c_j 是气体浓度, n 是所测气体的种类数, $\epsilon_R(\lambda)$ 和 $\epsilon_M(\lambda)$ 分别表示瑞丽散射、米散射的消光系数。

DOAS 的核心思想是引入了“差分”的概念,即将吸收截面分为两个部分

$$\sigma_j = \sigma_j^b + \sigma_j^s \quad (8)$$

其中 σ_j^b 为宽状结构光谱(即“慢变化”部分), σ_j^s 为差分吸收截面(即“快变化”部分),其反映了窄带光谱结构。由于瑞丽

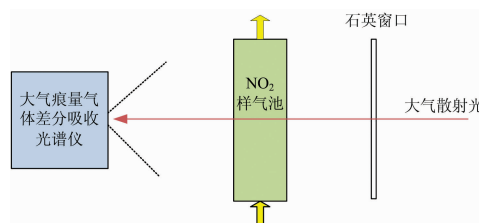
散射和米散射的吸收都是随着波长 λ 做“慢变化”的,光谱分析中可以通过高通滤波等方法滤除“慢变化”消除来自瑞利散射和米散射的干扰。将所有“慢变化”部分写作 $I'_0(\lambda)$, 最终可得到与气体浓度成比例的差分光学密度

$$I(\lambda) = I'_0(\lambda) \exp \left\{ - \left[\sum_{j=1}^n \sigma_j^s c_j \right] L \right\} \quad (9)$$

$$D' = \ln \left[\frac{I'_0(\lambda)}{I(\lambda)} \right] = L \sum_{j=1}^n [\sigma_j^s(\lambda) c_j] \quad (10)$$

2.2 结果分析

在晴朗天气情况下进行实验,为了确保进入星载大气痕量气体差分吸收光谱仪的太阳散射光全部来自于 NO₂ 样气池透过的太阳散射光,实验在完全黑暗环境下进行。实验过程中关闭所有光源,实验室透光部位用遮光材料遮盖,太阳散射光来自于一面大小为 40 cm × 30 cm 的透明窗口,透明窗口外部是宽阔的空地,没有异物遮挡。星载大气痕量气体差分吸收光谱仪、NO₂ 样气池、透明窗口放置在同一水平面上,如图 3 所示。

图 3 NO₂ 气体反演实验装置Fig. 3 NO₂ gas inversion experimental device

在以太阳散射光为光源的 DOAS 数据分析中,首先需要获得测量谱和参考谱^[1]。太阳散射光通过 NO₂ 样气池进入到光谱仪得到测量谱,通过 N₂ 时测量的光谱作为参考谱。

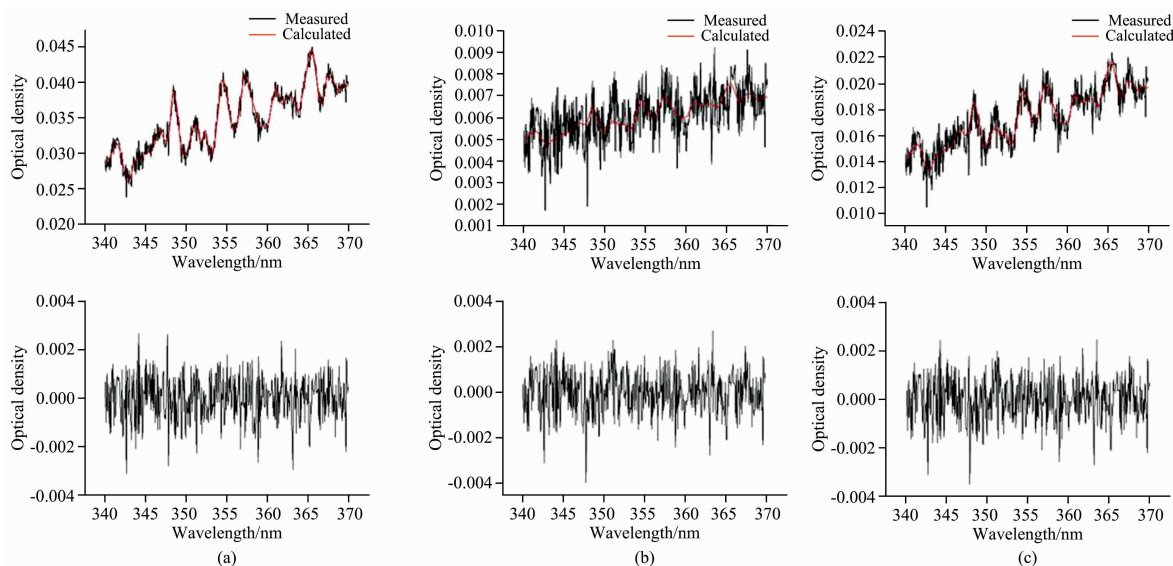


图 4 (a) Gauss 函数反演; (b) Lorentz 函数反演; (c) Voigt 函数反演

Fig. 4 (a) Gauss function inversion; (b) Lorentz function inversion; (c) Voigt function inversion

表 2 反演结果误差

Table 2 Inversion results and errors

Slit function	$\text{NO}_2 / (\times 10^{16} \text{ molec} \cdot \text{cm}^{-2})$	$E/\%$
Gauss function	8.957 9	5.6
Lorentz function	10.852 0	28.0
Voigt function	9.761 9	15.1

利用 DOAS 方法对测得数据进行反演, 拟合波段为 340~370 nm, 采用 Gauss 函数, Lorentz 函数, Voigt 函数作为狭缝函数得到不同反演结果, 然后与标准气体浓度对比, 如图 4(a), (b) 和 (c)。NO₂ 样气浓度为 $8.4812 \times 10^{16} \text{ molec} \cdot \text{cm}^{-2}$, 表 2 是三个函数作为狭缝函数反演的 NO₂ 气体浓度结果及相对偏差。可以看出 Gauss 函数作为仪器狭缝函数反演误差最小, 可选取 Gauss 函数作为仪器的狭缝函数。

References

- [1] Chan K L, Pohler D, Kuhlmann G, et al. Atmos. Meas. Tech., 2011, 4: 6615.
- [2] ZHAO Min-jie, SI Fu-qi, JIANG Yu, et al(赵敏杰, 司福祺, 江宇, 等). Optics and Precision Engineering(光学精密工程), 2013, 21(03): 567.
- [3] SI Fu-qi, JIANG Yu, JIANG Qing-wu, et al(司福祺, 江宇, 江庆五, 等). Acta Optica Sinica(光学学报), 2013, 33(3): 244.
- [4] Dobber M R, Dirksen R J, Levelt P F, et al. IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, 2006, 44(5): 1209.
- [5] ZHOU Hai-jin, LIU Wen-qing, SI Fu-qi, et al(周海金, 刘文清, 司福祺, 等). Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析), 2012, 32(11): 2881.
- [6] QI Xiang-dong, HAN Peng-peng, PAN Ming-zhong, et al(齐向东, 撒芑芑, 潘明忠, 等). Optics and Precision Engineering(光学精密工程), 2011, 19(12): 2870.
- [7] YIN Zeng-qian, WU Chen, GONG Wan-jue, et al(尹增谦, 武臣, 宫琬琬, 等). Acta Physica Sinica(物理学报), 2013, 62(12): 212.
- [8] Barry P S, Shepanski J, Segal C. Proc. SPIE, 2002, 4480: 231.
- [9] DAI Cong-ming, WEI He-li, CHEN Xiu-hong(戴聪明, 魏合理, 陈秀红). Infrared and Laser Engineering(红外与激光工程), 2013, 42(1): 174.

Study on the Slit Function of Atmospheric Trace Gas Differential Optical Absorption Spectrometer

HUANG Shan^{1, 2}, SI Fu-qi^{1*}, ZHAO Min-jie¹, ZHOU Hai-jin¹, JIANG Yu¹

1. Key Laboratory of Environmental Optics and Technology, Anhui Institute of Optics and Fine Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Hefei 230031, China
2. University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China

Abstract In this paper, spaceborne atmospheric trace gas differential absorption spectrometer is introduced. This instrument is a new optical remote sensing instrument whose spectral resolution is better than 0.5 nm. With high resolution (spectral resolution 0.3~0.5 nm), wide wavelength range (240~720 nm), large field (114° field of view corresponds to the ground 2 600 km) features, the load is pushed and swept to achieve 1 day global coverage monitoring. This instrument acquires high accuracy UV/Vis radiation scattered or reflected by air or earth surface, and can monitor distribution and variation of trace gases (NO₂, SO₂, O₃ and so on) based on differential optical absorption spectrum algorithm. Calibration is the premise when formally putting this instrument into operation. At the same time, in order to obtain the spectral characteristics of the load, on-ground spectral calibration is needed. According to the large field, wide wavelength range, high spatial resolution and high spectral resolution of this load, a set of spectral calibration system based on two dimensional turntables is set up. This system can finish the spectral calibration of full field of view. Spectral calibration was performed using standard spectral line method with mercury lamp as calibration source. The spectral response function is an important parameter to describe the spectral response characteristics of the

3 结 论

介绍了星载大气痕量气体差分吸收光谱仪以及光谱定标装置, 并利用汞灯为定标源开展了光谱定标实验, 对得到的汞灯光谱数据寻找合适的仪器狭缝函数, 分别以 Gauss 函数、Lorentz 函数、Voigt 函数作为狭缝函数进行拟合, 得到 Gauss 函数拟合效果最好, 可以作为载荷的光谱响应函数模型的结论。为了进一步验证这一结论, 利用 DOAS 反演技术, 采用 Gauss 函数、Lorentz 函数、Voigt 函数作为狭缝函数进行样气反演分析, 确认了 Gauss 函数可以作为仪器的狭缝函数的结论。

spectrometer. The spectral resolution of the load can be obtained according to the spectral response function. It is also the key input parameter of inversion which is based on DOAS method. The accuracy of the spectral response function directly affects the inversion results of the atmospheric trace gas. According to the spectral response data of load tests, three function models of Gauss, Lorentz and Voigt are selected as the potential spectral response functions. In order to find the most suitable function model, two kinds of contrast tests are carried out. First, the Gauss function, Lorentz function and Voigt function are used to fit the monochromatic light response data of the load, and the sum of the squares of the three kinds of functions is used as the evaluation criterion, the fitting results show that the sum of the residual squares of the Gauss function as the slit function is 0.01, and the sum of the residual squares of the Lorentz and Voigt functions as the slit function is 0.033 and 0.021 respectively. From the analysis of the fitting results of monochromatic light response data, the Gauss function could be used as a spectral response function model of load. In order to further verify this conclusion, DOAS inversion of NO_2 experiment was carried out, and the influence of three kinds of function models on inversion was investigated. The NO_2 sample gas test was carried out in the laboratory. The atmospheric scattering light was incident through the $30\text{ cm} \times 40\text{ cm}$ quartz window to the load slit, and the NO_2 sample pool was placed in the middle of the load slit and the quartz window. The data obtained were NO_2 like gas absorption spectra, and then it was filled into the N_2 gas to obtain the reference spectrum of the inversion. The experiment was carried out in sunny weather and can be completed in a short time, which can reduce the influence of weather conditions on the inversion results. In the experiment, the concentration of NO_2 sample gas is 8.4812×10^{16} molec $\cdot \text{cm}^{-2}$. During the inversion, Gauss function, Lorentz function, Voigt function were set as slit function respectively. The results of NO_2 concentration corresponding to the different functional models of three groups are analyzed, and the function model is evaluated according to the relative deviation of the inversion results. The experimental results show that the relative deviation of the Gauss function as a slit function is 5.6%, and the relative deviation of the Lorentz and Voigt functions as the slit functions is 28% and 15.1%, respectively. The fitting results of spectral response data and gas sample inversion results show that the Gauss function can be used as a spectral response function model of load.

Keywords Spaceborne atmospheric trace gas differential absorption spectrometer; Spectral calibration; Slit function; Gas inversion

(Received Apr. 25, 2018; accepted Aug. 11, 2018)

* Corresponding author