

DOI: 10.3969/j.issn.1673-6141.2019.03.005

大气痕量气体差分吸收光谱仪地面数据评价软件设计

黄 珊^{1,2}, 司福祺¹, 赵敏杰^{1,2}, 汪世美¹, 周海金¹

(1 中国科学院安徽光学精密机械研究所中国科学院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: 大气痕量气体差分吸收光谱仪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反演大气中痕量气体的分布和变化。在地面对大气痕量气体差分吸收光谱仪完成实验室定标以验证其性能和可靠性, 为大气痕量气体差分吸收光谱仪的数据处理提供支持。为快速处理光谱仪定标数据, 研制了相关的光谱辐射定标软件。定标软件基于 C++ 语言, 在 Windows 平台上开发, 实现数据定标和多维度展示定标数据。其中光谱定标采用多项式拟合算法, 光谱分辨率采用 Gauss 拟合算法。辐射定标包括绝对辐射定标和相对辐射定标, 绝对辐射定标求取辐射定标非稳定性和非线性, 相对辐射定标求取相对辐射校正系数和不确定度。结果表明软件运行良好, 能够完成大气痕量气体差分吸收光谱仪地面光谱定标、辐射定标数据的处理。

关键词: 大气痕量气体差分吸收光谱仪; 光谱定标; 辐射定标; 软件设计

中图分类号: TP79 **文献标识码:** A **文章编号:** 1673-6141(2019)03-0201-010

Design of Ground Data Evaluation Software for Atmospheric Trace Gas Differential Absorption Spectrometer

HUANG Shan^{1,2}, SI Fuqi^{1*}, ZHAO Minjie^{1,2}, WANG Shimei¹, ZHOU Haijin¹

(1 Key Laboratory of Environment 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: Through acquiring high accurate UV/Vis radiation scattered or reflected by air or earth surface, atmospheric trace gas differential absorption spectrometer can monitor distribution and variation of trace gases based on differential optical absorption spectrum algorithm. The laboratory calibration of the load is performed on the ground to verify the performance and reliability of the load and support the data processing of the load. In order to quickly process load calibration data, spectral calibration and radiation calibration

基金项目: Supported by National Natural Science Foundation Youth Science Foundation Project (国家自然科学基金青年科学基金, 41605017)

作者简介: 黄 珊 (1994 -), 女, 安徽宿州人, 研究生, 主要从事星载成像光谱仪定标软件方面的研究。

E-mail: shuang@aiofm.ac.cn

导师简介: 司福祺 (1977 -), 男, 安徽蚌埠人, 博士, 研究员, 博士生导师, 主要从事痕量气体光学遥感技术方面的研究。

E-mail: sifuqi@aiofm.ac.cn

收稿日期: 2018-03-15; **修改日期:** 2018-03-21

software was developed. Calibration software is based on C++ language and developed on Windows platform to achieve data calibration and multi-dimensional display calibration data. Polynomial fitting algorithm is used in spectral calibration, while Gauss fitting algorithm is used in spectral resolution. Radiation calibration includes absolute radiation calibration and relative radiation calibration. Absolute radiation calibration is used to determine the instability and non-linearity of radiation calibration. Relative radiation calibration is used to obtain relative radiation correction coefficients and uncertainty. The results show that the software runs well and is competent for the processing the load ground spectrum calibration and radiation calibration data.

Key words: atmospheric trace gas differential absorption spectrometer; spectral calibration; radiation calibration; software design

1 引言

星载大气痕量气体差分吸收光谱仪用于获取紫外可见波段的高光谱遥感数据,可定量监测全球痕量气体分布、变化及输运过程^[1]。定标是仪器遥感数据定量化的前提和基础,定标的精度直接决定了仪器研制和应用水平的高低^[2]。大气痕量气体差分吸收光谱仪地面定标包括光谱定标和辐射定标,基于此研制了相应的处理软件,该软件可以从灰度图、光谱维、空间维等多角度观察定标数据,并且解决了大气痕量气体差分吸收光谱仪光谱与辐射定标数据集成处理的问题。

2 光谱定标算法

光谱定标包括光谱定标公式和光谱分辨率分析。光谱定标公式描述 CCD 像元位置和光波波长的关系,光谱分辨率是指大气痕量气体差分吸收光谱仪能够区分两个谱线的最小波长间隔^[3]。

2.1 光谱定标公式

大气痕量气体差分吸收光谱仪采用的是 Offner 凸面光栅光谱成像系统^[4]。根据光栅方程

$$d(\sin \alpha \pm \sin \beta) = m\lambda \quad (1)$$

在衍射角不大的情况下,不同波长光谱线的位置基本上与其波长值成比例。大气痕量气体差分吸收光谱仪中,光波经过光栅分光按波长色散成像在 CCD 二维面阵光谱维上,光谱定标公式可以用线性多项式表示

$$Y_{ij} = \sum_{n=0}^n C_{in} X_{ij}^n, \quad (2)$$

式中 C_{in} 为波长标定的多项式系数, n 为多项式阶数, X_{ij} 为第 i 行 j 列的像元号, Y_{ij} 为对应的光谱波长。采用最小二乘法对数据组 $[x_{ij}, y_{ij}]$ 进行回归分析求解光谱定标方程中的 C_{in} 。

为了验证理论的可行性,实际开展实验求取光谱定标公式。由于标准谱线法结构简单、易操作,可以实现光谱分辨率较高且线性色散仪器的波长标定^[5],因此实验采用标准谱线法进行光谱定标。大气痕量气体差分吸收光谱仪的工作波长范围为 240~710 nm,光谱分辨率为 0.3~0.5 nm。定标光源采用汞氙灯作为标准灯,汞氙灯是 Ocean Optics 公司生产的 HG-1 型光谱定标源,波长范围为 253~922 nm,波长精度为 0.02 nm。利用一条特征谱线选定若干特征峰与谱线图对比得到对应的波长值,利用最小二乘法即可求出光谱定标公式系数。

2.2 光谱分辨率

大气痕量气体差分吸收光谱仪光谱分辨率指能够区分两个谱线的最小波长间隔, 使用线状光源一个单峰的半高宽 (Full width at half maximum, FWHM) 来表示。用汞元素灯照射光谱仪^[6], 记录元素灯特征光谱, 分析光谱仪特征峰对应的光谱分辨率。大气痕量气体差分吸收光谱仪对谱线特征峰采用 Gauss 拟合求取光谱分辨率, Gauss 函数模型为

$$y = y_0 + A \exp[-2(\frac{x - x_c}{\sigma})^2], \quad (3)$$

式中 y_0 为距 X 轴的偏差, A 为模型与 X 轴围成的闭合面积, x_c 为中心像元, σ 为波峰宽度。 σ 与 $FWHM$ 满足

$$FWHM = \sqrt{2 \ln 2} \sigma .$$

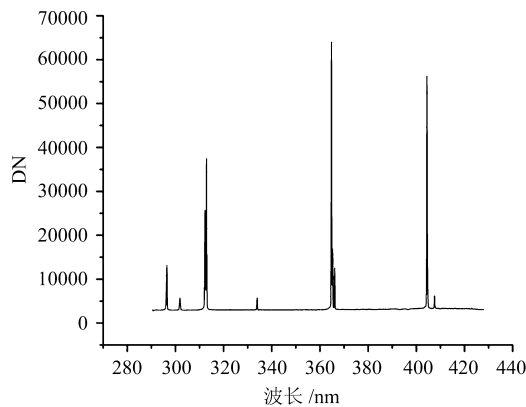


图 1 汞灯谱线图

Fig.1 Mercury lamp spectrum

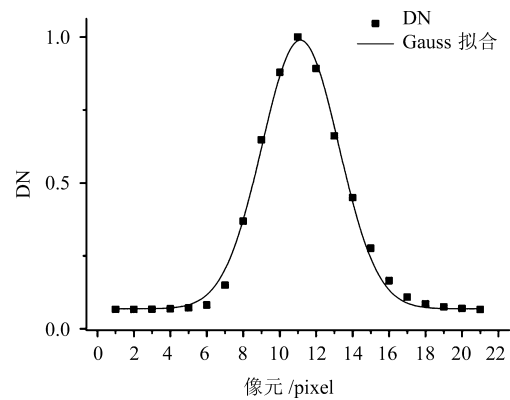


图 2 Gauss 函数拟合曲线图

Fig.2 Gauss function fitting curve

为了减少其他干扰因素的影响, 选取 114° 大视场的中心视场实验数据分析, 其它视场操作相同。汞灯定标谱线图如图 1 所示, 选取 404 nm 特征峰进行函数拟合, 在光谱仪光谱数据中找到和 404 nm 特征峰对应的 DN 值进行 Gauss 拟合, 拟合曲线结果如图 2 所示, 可以看出 Gauss 模型可以较好地描述光谱仪特征峰波形。

3 辐射定标算法

根据光谱仪测量数据定量获取所观察的地物目标的辐射信息从而反推出地物目标的辐射特性, 需要对大气痕量气体差分吸收光谱仪进行辐射定标。辐射定标包括相对辐射定标和绝对辐射定标, 相对辐射定标是校正由仪器成像通道中各个探测器 (CCD 像元) 之间的响应不均匀性, 得出相对辐射定标的不确定度。绝对辐射定标用于得出辐射定标系数, 确定绝对辐射定标不确定度。

3.1 绝对辐射定标

光谱仪的绝对辐射定标采用基于辐亮度计的绝对辐射定标系统, 积分球提供均匀的辐射源, 绝对辐射定标过程不确定主要包括以下几方面: 基于光谱辐射计的辐亮度定标系统的不确定度、光谱仪响应的非稳定性不确定度、光谱仪响应的非线性不确定度。其中系统的不确定度在积分球定标系统检测报告中明确给出。

3.1.1 非稳定性

非稳定性不确定度为

$$U = \frac{\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (V_i - \bar{V})^2}{n}}}{\bar{V}} \times 100\% , \quad (4)$$

式中 U 为非稳定性不确定度, V_i 为第 i 次测量值, \bar{V} 为测试时间内的平均值。为了测量得到的非稳定性具有可靠性, n 应该有较大的取值, 测试时间内实验环境条件要严格一致, 防止有其他干扰因素影响。因为非稳定数量级较小, 一旦有其他因素干扰, 会带来较大的误差。

3.1.2 非线性

非线性计算公式如下

$$NL = \left[\frac{RMSE}{\bar{Y}} \right] \times 100\% , \quad (5)$$

式中, NL 为相应非线性系数, $RMSE$ 为输出信号线性拟合曲线的残差标准差, \bar{Y} 为输出信号算术平均值。其中

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (\Delta y_i - \bar{\Delta y})^2}{n-1}} , \quad (6)$$

$$\bar{Y} = \frac{\sum_{i=1}^n DN_i}{n} . \quad (7)$$

从式 (6) 可以看到, 需要实际测得光谱辐亮度和经过公式计算的光谱辐亮度。

对光谱仪面阵 CCD 像元辐射定标建立定标模型

$$L_{ij}(\lambda) = \alpha N_{ij} + \beta , \quad (8)$$

式中 $L_{ij}(\lambda)$ 是第 i 行、第 j 列像元对应的光谱辐亮度, N_{ij} 是第 i 行、第 j 列像元响应的灰度值, α 、 β 为定标系数。 α 、 β 可以通过对不同辐亮度等级和其对应的灰度值进行拟合得到。

3.2 相对辐射定标

一列像元对应光谱仪狭缝的单色像, 均匀入射光照射, 单色像也应该为均匀的。但由于像元响应的差异性、入射狭缝本身结构特性以及系统装调原因, 单色像变得不均匀。需要采用一定的校正算法进行校正, CCD 响应非均匀性校正式 (9) 表示为

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} a_{1j} \cdot R_{1j} \\ \vdots \\ a_{mj} \cdot R_{mj} \\ \vdots \\ a_{ij} \cdot R_{ij} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} b_{1j} \\ \vdots \\ b_{mj} \\ \vdots \\ b_{ij} \end{bmatrix} , \quad (9)$$

式中下标 i, j 为面阵 CCD 行列号。 R_{ij} 是 CCD 的 DN 响应值, R 是一列像元 DN 值的平均值, a_{ij}, b_{ij} 为像元的非均匀性校正系数。改变入射辐射强度, 得到

$$\mathbf{R}' = \begin{bmatrix} a_{1j} \cdot R'_{1j} \\ \vdots \\ a_{mj} \cdot R'_{mj} \\ \vdots \\ a_{ij} \cdot R'_{ij} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} b_{1j} \\ \vdots \\ b_{mj} \\ \vdots \\ b_{ij} \end{bmatrix} . \tag{10}$$

式中 R'_{ij} 、 R' 对应式 (9) 中的 R_{ij} 、 R , 联立公式 (9)、(10) 可以求得均匀性校正系数 a_{ij} , b_{ij} 。

利用校正系数校正数据后, 需要对校正后数据求取不确定度

$$R_\lambda = \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^n (L_i - \bar{L})^2}}{\bar{L}} \times 100\% , \tag{11}$$

式中 L_i 为该空间维第 i 像元辐亮度值, \bar{L} 为该列所有测试像元的辐亮度算术平均值, 由式 (11) 计算得到该空间列下相对定标精度 R_λ 。

4 软件设计

软件设计的环境搭建在 Windows 平台上, 使用 VS2010 完成应用程序框架下开发, 可实现光谱定标、辐射定标等功能, 系统框架如图 3 所示。

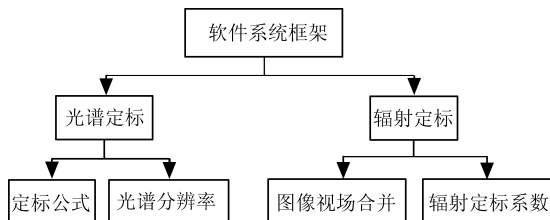


图 3 程序系统框图

Fig.3 Program system block diagram

4.1 软件流程图

4.1.1 光谱定标

光谱定标包括光谱定标公式和光谱分辨率。光谱定标流程如图 4 所示。由于波长和像元近似成线性关系。已知若干组像元波长数据对利用最小二乘法即可求出光谱定标公式。软件计划通过弹出对话框的形式获取用户提交的像元波长数据对, 对话框如图 5 所示, 然后软件后台计算数据, 并将定标结果以文本文件的方式保存到本地电脑中。

4.1.2 辐射定标

大气痕量气体差分吸收光谱仪采用包括两片偏轴球面镜的宽视场前置望远镜, 在穿轨方向能够形成 114° 大视场。由于光谱仪视场较大, 实验不能一次性均匀照亮整个视场, 每次测量仅能获得十几度有效数

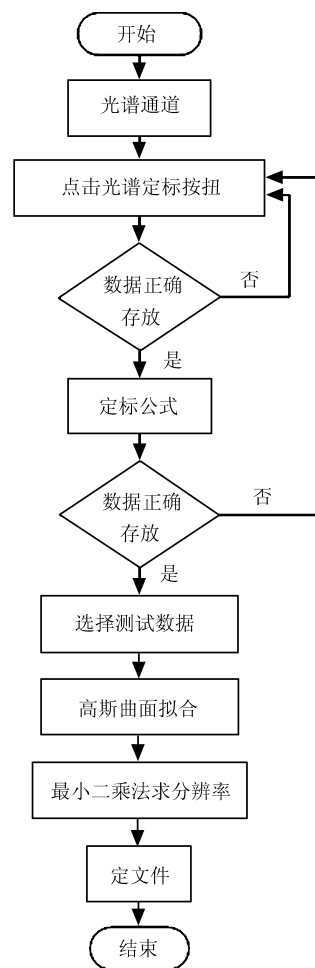


图 4 光谱定标流程图

Fig.4 Flow chart of spectral calibration

据，需要多次转动二维转台完成全视场定标。因此辐射定标数据是数十个视场文件，每一个视场文件只有一段有效数据。软件底层通过观察每个视场数据特点找到文件有效数据首尾行，将每个视场的有效数据提取出来，最终获得完整定标数据。辐射定标流程如图 6 所示。全视场完整定标数据如图 7 所示，辐射定标数据计划以弹出对话框的形式将用户输入的数据提交给后台，辐射定标对话框如图 8 所示。

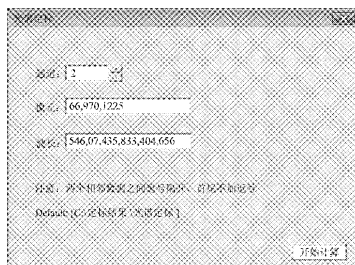


图 5 光谱定标对话框

Fig.5 Spectral calibration dialog

4.2 主界面设计

4.2.1 菜单模块

菜单模块完成光谱定标、辐射定标等信息获取与计算功能。以弹出对话框的形式与用户交互，将获取信息交给程序后台处理。菜单模块位于程序主界面的上侧，如图 9 所示。主菜单包括创建文件夹、光谱定标、绝对辐射定标、相对辐射定标等。光谱定标有两个子菜单，视场定位和像元波长匹配。视场定位可以定位文件最大值所在的行。像元波长匹配弹出对话框获取像元波长信息，完成光谱定标计算。绝对辐射定标有两个子菜单，非线性和非稳定性，两个子菜单都通过对话框获取数据有效首尾行，完成绝对辐射定标计算。

4.2.2 主视图模块

为了能够实时多维度观察多组实验数据，软件利用 MFC 视图切割技术将框架客户区划分为 6 个独立视图，每个视图从不同维度展示数据特点，如图 9 所示。左上和左下视图利用 MFC 的 CTreeCtrl^[7] 类构建文件目录树，将根目录的定标文件和定标结果分别与电脑实际文件路径联系起来。点击视图中任意文件，软件底层会实时查找电脑对应目录下的子文件，自动更新当前目录并显示出来。定标文件是

星载成像光谱仪生成的 FD 格式文件，鼠标点击目录树中 FD 文件时，软件底层会对该 FD 格式文件进行解析，提取其中有效二维数据，根据数据大小设置亮度值将二维数据以灰度图的形式展示在中上视图。灰度图直观展示了光源照射在星载成像光谱仪 CCD^[8] 面板上的位置和亮度。灰度图横向表示光谱维，纵向

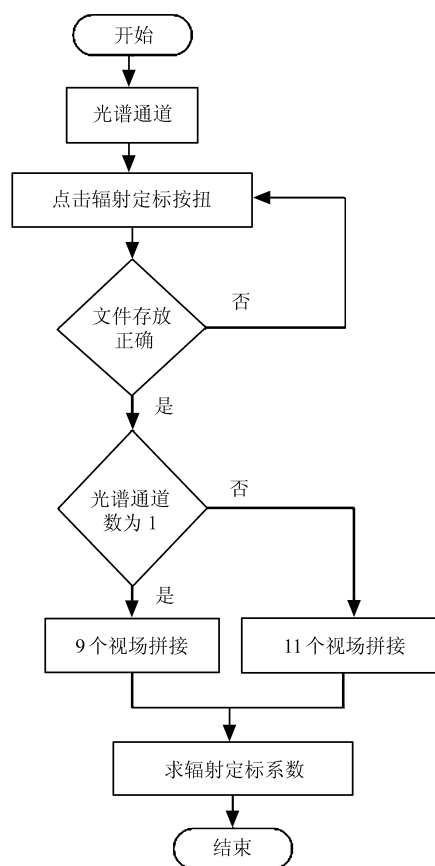


图 6 辐射定标流程图

Fig.6 Flow chart of radiation calibration

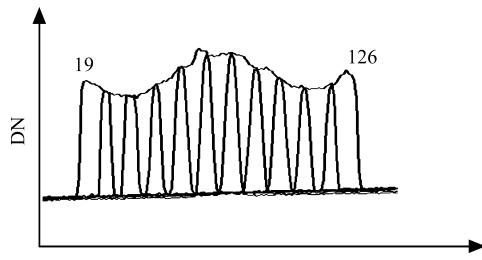


图 7 辐射定标拼接文件

Fig.7 Complete file of radiation calibration



图 8 辐射定标对话框

Fig.8 Radiation calibration dialog

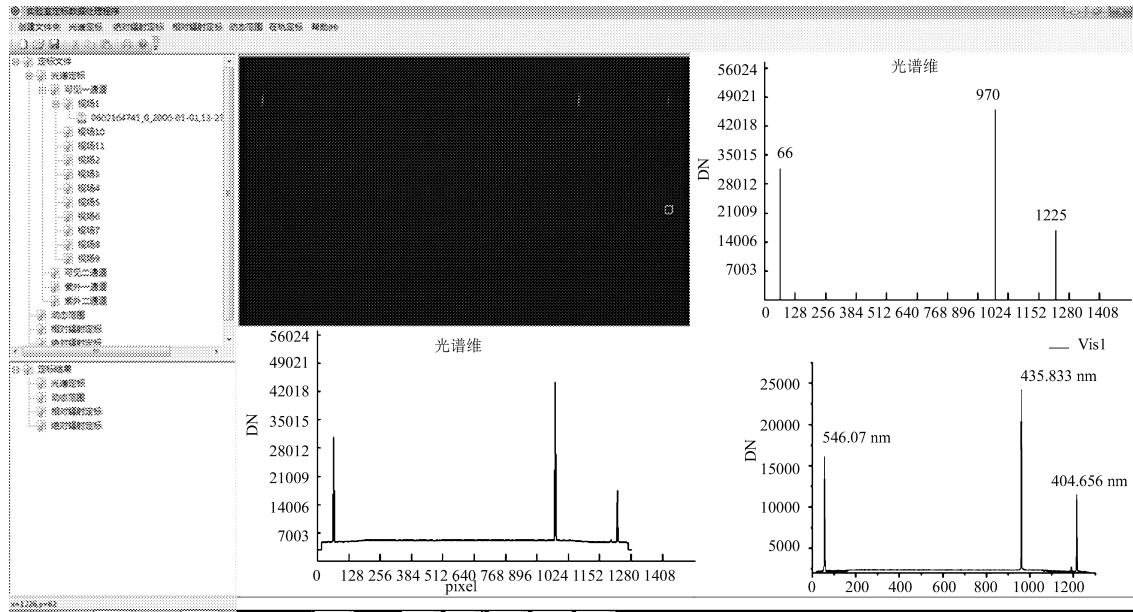


图 9 程序主界面

Fig.9 Software main interface

表 1 四个光谱通道中心视场光谱定标公式及光谱范围

Table 1 Spectral calibration formula and spectral range of the central field of view of the four spectral channels

光谱通道	光谱定标公式	光谱范围 (nm)
紫外一通道	$Y = -3.38 \times 10^{-9} X^2 - 7.53 \times 10^{-2} X + 3.17 \times 10^2$	236.71~317.36
紫外二通道	$Y = 1.66 \times 10^{-5} X^2 - 1.20 \times 10^{-1} X + 4.16 \times 10^2$	306.96~415.83
可见一通道	$Y = -3.91 \times 10^{-7} X^2 - 1.21 \times 10^{-1} X + 5.53 \times 10^2$	396.21~552.87
可见二通道	$Y = 7.90 \times 10^{-6} X^2 - 1.56 \times 10^{-1} X + 7.23 \times 10^2$	535.59~722.80

表示空间维。为了放大灰度图某一点的光谱维和空间维信息，鼠标点击中上视图某一点，软件后台提取该点的光谱维或空间维信息在中下视图展示。光谱定标时需要匹配的像元和波长信息，右上视图展示匹配的

像元信息, 通过鼠标双击灰度图特征点获取。右下视图展示四个光谱通道的谱线图匹配波长。此外, 鼠标点击左下视图中的 TXT 文件时, TXT 文件内容会在右下视图显示出来。

5 软件处理结果分析

以大气痕量气体差分吸收光谱仪实验室实验数据为数据源, 运行定标软件, 在主视图界面观察数据在灰度图、光谱维、空间维的表现, 弹出对话框进行光谱定标、辐射定标, 查看定标结果, 评估软件运行效果。

5.1 光谱定标

光谱定标公式求取需要获取像元波长数据对, 软件以灰度图的形式将定标文件显示出来, 在灰度图中选择几组特征值双击鼠标, 右上视图会显示特征点的像元值, 对比右上视图的像元和右下视图的谱线图,

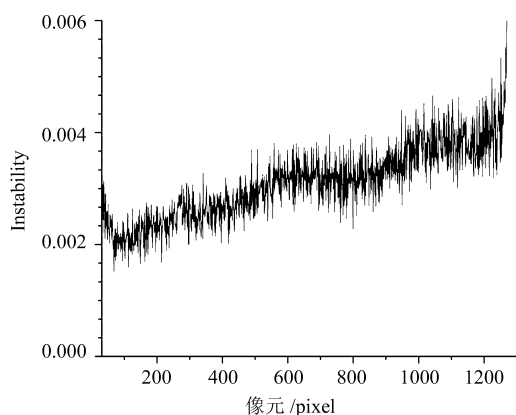


图 10 可见一通道第 60 行非稳定性

Fig.10 Instability in the 60th line of visible channel 1

如图 9 所示, 匹配若干组像元波长数据对填入到光谱定标对话框中。计算完成后通过左下视图可以查看最新生成的光谱定标结果文件。重复上述操作求出四个通道的光谱定标结果, 表 1 为光谱仪四个光谱通道中心视场的光谱定标公式和光谱范围。对上述若干特征峰求取分辨率, 结果如表 2 所示, 单位是 nm。

5.2 辐射定标

5.2.1 非稳定性

为了确保数据的可靠性, 选取 500 个文件作为测试数据, 由于光谱仪视场较大, 不能一次性照亮整个视场, 通过二维转台转动仪器以完成全视场的观测, 每个局部视场大概照亮十几度, 所以有 9~11 个视场文件, 每个文件夹下面有 500 个相同视场的文件数据, 对每个视场求取中心视场非稳定性。以可见一通

表 2 四个光谱通道中心视场光谱分辨率

Table 2 Four spectral channel center field spectral resolution

光谱通道	特征峰 1	特征峰 2	特征峰 3
紫外一通道	5.22	5.12	5.20
紫外二通道	5.21	4.55	5.09
可见一通道	3.13	2.75	2.77
可见二通道	3.05	3.05	3.37

表 3 可见一通道非线性 ($\times 10^{-3}$)

Table 3 Nonlinearity of visible channel 1

行	非线性 ($\times 10^{-3}$)		
	400 列	600 列	800 列
20 行	9.57	5.60	8.53
29 行	6.38	5.33	4.22
40 行	8.97	5.89	7.20
51 行	2.95	4.60	4.08
61 行	7.40	6.90	6.65
71 行	11.27	9.02	11.56
80 行	1.09	3.29	5.45
90 行	11.20	3.81	9.84
100 行	11.79	5.03	7.70
110 行	6.04	2.27	8.22
120 行	7.36	2.57	4.20

道为例,可见一通道第60行数据的非稳定性如图10所示。

5.2.2 非线性

实验选择5个不同等级亮度光源进行实验,得到5组对应的光谱数据,在中心视场光谱维400列、600列、800列上均匀选取三个测试点,观察它们非线性不确定度。以光谱仪可见一通道为例,结果如表3所示。

5.2.3 相对辐射定标

实验以可见一通道为例,采用两个不同辐亮度文件求得校正系数,用校正系数校正相对辐射定标文件,结果如图11所示。虚线是校正前数据,实线是校正后数据,可以看出校正后的数据变化较平稳。为了观察校正效果,对校正后的数据求取不确定度,求得相对辐射不确定度如图12所示。

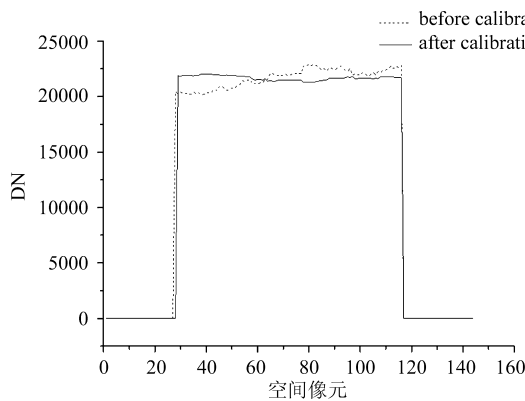


图11 相对辐射定标校正数据对比图

Fig.11 Comparison of relative radiation calibration data

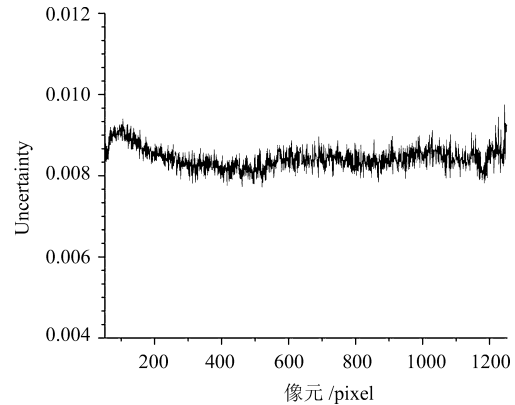


图12 可见一通道相对辐射不确定度

Fig.12 Relative radiation uncertainty of visible channel 1

6 结 论

介绍了大气痕量气体差分吸收光谱仪实验室定标软件研制工作,程序界面分为菜单模块和主视图模块,菜单模块完成定标信息获取和计算的功能,计算生成文件以TXT形式存储在本地电脑上。主视图模块被分割成6个独立视图多维度展示数据特征。研制的光谱辐射定标软件可以很好地应用到大气痕量气体差分吸收光谱仪实验室定标中,为快速分析数据、考察大气痕量气体差分吸收光谱仪定标结果提供了有力的支持。

参考文献:

- [1] Liu Yu, Liu Wenqing, Kan Ruifeng, et al. Measurement of OH radicals in flame with high resolution differential optical absorption spectroscopy [J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2011, **31**(10): 2659-2663(in Chinese).
刘宇,刘文清,阚瑞峰,等.超高分辨差分吸收光谱技术测量火焰中OH自由基[J].*光谱学与光谱分析*, 2011, **31**(10): 2659-2663.
- [2] Zhou Haijin, Liu Wenqing, Si Fuqi, et al. Spectral calibration for space-borne differential optical absorption spectrometer [J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2012, **32**(11): 2881-2885(in Chinese).
周海金,刘文清,司福祺,等.星载大气痕量气体差分吸收光谱仪光谱定标技术研究[J].*光谱学与光谱分析*, 2012, **32**(11): 2881-2885.

- [3] Zhao Minjie, Si Fuqi, Jiang Yu, *et al.* In-lab calibration of space-borne differential optical absorption spectrometer [J]. *Optics and Precision Engineering*, 2013, **21**(3): 567-574(in Chinese).
赵敏杰, 司福祺, 江宇, 等. 星载大气痕量气体差分吸收光谱仪的实验室定标 [J]. *光学精密工程*, 2013, **21**(3): 567-574.
- [4] Zheng Yuquan. Design of compact Offner spectral imaging system [J]. *Optics and Precision Engineering*, 2005, **13**(6): 650-657(in Chinese).
郑玉权. 小型 Offner 光谱成像系统的设计 [J]. *光学精密工程*, 2005, **13**(6): 650-657.
- [5] Qi Xiangdong, *et al.* Spectral calibration of imaging spectrometer with convex grating [J]. *Optics and Precision Engineering*, 2011, **19**(12): 2870-2876(in Chinese).
齐向东, 等. 凸面光栅成像光谱仪的光谱定标 [J]. *光学精密工程*, 2011, **19**(12): 2870-2876.
- [6] Zhang Zihui, Wang Shurong, Huang Yu, *et al.* High-precision wavelength calibration of wide-band monochromator [J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2012, **32**(10): 2870-2874(in Chinese).
张子辉, 王淑荣, 黄煜, 等. 宽波段单色仪多级谱高精度波长定标 [J]. *光谱学与光谱分析*, 2012, **32**(10): 2870-2874.
- [7] Zhao Chuan, Tang Weihua, Li Xuzhi. Design of a General Testing & Supervisor software Based CTreeCtrl Class [J]. *Microcomputer Information*, 2010, **26**(4): 190-191, 182(in Chinese).
赵川, 唐卫华, 李绪志. 基于 CTreeCtrl 的通用测试监显软件设计 [J]. *微计算机信息*, 2010, **26**(4): 190-191, 182.
- [8] Qin Li, Dong Lili, Xu Wenhai, *et al.* Method for conversion calibration between CCD image gray value and illumination [J]. *Chinese Journal of Scientific Instrument*, 2015, **36**(3): 639-644(in Chinese).
秦莉, 董丽丽, 许文海, 等. CCD 图像灰度与照度的转换标定方法 [J]. *仪器仪表学报*, 2015, **36**(3): 639-644.