

红外甚高光谱分辨率探测仪高精度在轨光谱定标

杜丽丽¹, 刘李², 葛曙乐², 李志伟¹, 周川杰³, 丁国绅^{1,4*}

(1. 中国科学院安徽光学精密机械研究所通用光学定标与表征技术重点实验室, 安徽合肥 230031;

2. 中国资源卫星应用中心, 北京 100094;

3. 北京市遥感信息研究所, 北京 100085;

4. 中国科学技术大学, 安徽合肥 230026)

摘要: 红外甚高光谱分辨率探测仪(AIUS)是高分五号(GF-5)卫星的主要载荷之一,它通过太阳掩星观测实现多种大气痕量气体垂直分布信息的获取,准确的光谱定标是其数据定量反演的关键和基础。针对AIUS超高的光谱分辨率、无配套星上光谱定标设备的问题,提出基于大气吸收特征谱线的多谱线线性拟合算法,通过多普勒频移修正、多谱线筛选、准确谱峰位置确定等关键技术提高其在轨光谱定标精度,并在GF-5卫星成功发射后,围绕AIUS开展了一系列的光谱定标和精度分析工作。结果表明:该方法可实现AIUS的高精度光谱定标,MCT和InSb通道的平均谱峰绝对偏差分别为 0.00437cm^{-1} 和 0.00389cm^{-1} ,均小于痕量气体反演应用要求的 0.008cm^{-1} 。

关键词: 光谱定标; 甚高光谱分辨率; 特征谱线; 多普勒频移; 高分五号卫星; 太阳掩星

中图分类号: TP732.2 文献标识码: A

High precision on-orbit spectral calibration of atmospheric infrared ultra-spectral sounder

DU Li-Li¹, LIU Li², GE Shu-Le², LI Zhi-Wei¹, ZHOU Chuang-Jie³, DING Guo-Shen^{1,4*}

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

2. China Centre for Resources Satellite Data and Application, Beijing 100094, China;

3. Beijing Institute of remote sensing information, Beijing 100085, China

4. University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China;)

Abstract: The atmospheric infrared ultra-spectral sounder (AIUS) is one of the main loads of GF-5 satellite. It is used to obtain the vertical distribution information of various atmospheric trace gases through solar occultation observation. And accurate spectral calibration is the key and foundation for its data quantitative inversion. Ultra-spectral resolution and no matching on-board spectral calibration equipment make it is difficult to realize high precision on-orbit spectral calibration for AIUS. A multi-line linear fitting algorithm based on atmospheric characteristic lines is proposed, which employs the key technologies such as Doppler shift correction, lines selection and accurate peak position determination to improve the spectral calibration accuracy. And after the successful launch of GF-5 satellite, a series of spectral calibrations and accuracy analysis are carried out for AIUS. The results show that this algorithm can achieve high precision spectral calibration of AIUS. The mean absolute deviations of MCT and InSb channels are 0.00437cm^{-1} and 0.00389cm^{-1} , which are less than 0.008cm^{-1} required by trace gas inversion application.

Key words: spectral calibration, ultra-spectral resolution, characteristic lines, Doppler shift, GF-5 satellite, solar occultation

PACS: 42. 68. Ca, 42. 72. Ai, 42. 30. Kq

收稿日期: 2020-05-05, 修回日期: 2020-06-28

Received date: 2020-05-05, Revised date: 2020-06-28

基金项目: 国家自然科学基金(41601379)

Foundation items: Supported by National Natural Science Foundation of China (41601379)

作者简介(Biography): 杜丽丽(1982-), 女, 河南南阳人, 副研究员, 主要研究领域为卫星传感器在轨辐射与光谱定标. E-mail: lilydu@aiofm.ac.cn

*通讯作者(Corresponding author): E-mail: guoshenahu@163.com

引言

人类活动对大气化学成分和全球气候变暖的影响已成为人们所关注的全球性问题, 高光谱遥感可以获取地表目标或大气分子的精细光谱信息^[1], 在大气成分和浓度反演方面具有无可比拟的优势。世界各国研制了多种星载大气环境高光谱分辨率探测仪, 用以快速、经济、可重复地获取全球尺度上大气痕量气体和气溶胶的浓度及时空分布信息^[2]。

对于星载大气环境高光谱分辨率探测仪而言, 光谱数据的辐射精度和光谱精度是影响大气成分反演的重要因素^[3]。其中, 光谱精度主要是谱线的位置精度, 是影响大气吸收谱线精确定位的主要因素, 需要通过精确的光谱定标来保证。光谱定标就是测量光谱仪随入射辐射波长变化的响应, 其主要目的是确定每个光谱通道的中心波长等光谱特征^[4]。

发射前实验室光谱定标虽然能够获取高精度的光谱定标系数, 但发射过程中的机械振动和形变、运行环境的变化、光学或电子器件老化等一系列原因, 导致仪器响应发生变化, 进而导致各光谱通道中心波长发生漂移^[5-6], 因此, 对星载高光谱分辨率探测仪进行发射后在轨光谱定标, 监测其性能衰减情况并实时进行修正, 是保证其量化数据可靠性的关键。国外在星载高光谱分辨率探测仪在轨光谱定标方面已开展了较多的研究, ERS-2 卫星上的 GOME (Global Ozone Monitoring Experiment) 利用太阳和大气光谱采用光谱匹配和互相关的方法开展了在轨光谱定标^[7-8], ENVISAT 卫星上的 SCIMACHY (SCanning Imaging Absorption Spectro Meter for Atmospheric CHartographY) 利用特定谱线采用线拟合方法实现了在轨光谱定标^[9], SCISAT-1 卫星上的 ACE (Atmospheric Chemistry Experiment) 利用太阳光谱采用线性相位拟合算法开展了在轨光谱定标方法研究^[10]。我国星载高光谱分辨率探测仪研制起步较晚, 对应的在轨光谱定标方法研究较少, 李占峰等采用与 GOME 相同的光谱匹配算法对风云三号卫星上的紫外臭氧探测仪开展了在轨光谱定标方法研究^[11], 赵敏杰等也采用光谱匹配技术对星载痕量差分吸收光谱仪开展了在轨光谱定标方法研究^[12]。他们均采用太阳光谱作为参考谱, 通过在窄的工作波段或夫朗禾费线附近, 观测和模拟光谱的匹配, 实现色散型光谱仪的在轨光谱定标, 对

干涉型傅里叶变换光谱仪全谱段光谱定标, 该方法并不适用。

“高分五号”卫星上的大气环境红外甚高光谱分辨率探测仪 (Atmospheric Infrared Ultra-spectral Sounder, AIUS) 是我国目前光谱分辨率最高的星载傅里叶红外超光谱探测载荷, 可反演获取大气痕量气体垂直分布信息, 为气候变化研究和大气环境监测提供科学依据。由于使用大气透射光谱进行反演, 高精度的光谱定标对实现 AIUS 数据应用目标起着决定性作用。然而超高的光谱分辨率、较宽的观测谱段、无天上光谱定标装置等问题, 给 AIUS 全谱段高精度在轨光谱定标带来了一定的困难, 目前针对其开展的在轨光谱定标工作鲜有报道。本文针对 AIUS 可通过掩星观测获取不同切高大气透过率光谱且具有很高光谱分辨率的特点, 提出基于大气吸收特征谱线的多谱线线性拟合算法, 实现了 AIUS 高精度在轨光谱定标。目前获取的光谱定标系数已用于 AIUS 数据产品生产系统, 随数据产品发布。

1 定标原理

1.1 AIUS 探测原理

AIUS 搭载于“高分五号”卫星, 运行于 705 km 的地球太阳同步轨道。其采用如图 1 所示太阳掩星观测方式, 在日出过程中, 通过视场扫描实现对各层大气透射信号的观测, 从而获取 8~100 km 内一系列不同切高的大气吸收光谱, 实现南极附近区域大气痕量气体的垂直分布测量。

AIUS 主要由高精度太阳跟踪组件、双角镜摆臂式干涉仪组件、杜瓦探测器组件构成。太阳跟踪组

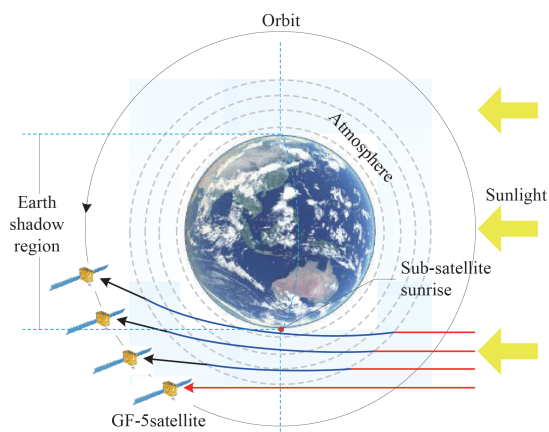


图1 AIUS在轨太阳掩星观测示意图

Fig. 1 Schematic diagram of AIUS on-orbit solar occultation observation

件由太阳跟踪器、分色片及太阳跟踪相机组成,用于在观测过程中实时捕获并自动跟踪太阳,将太阳红外光稳定地引入干涉仪组件;干涉仪组件由分束器、补偿器、角镜、端镜和计量激光器组成,前者通过大光程差、高效率傅立叶变换干涉分光技术对入射红外光束进行调制,后者出射的单色稳频激光与红外光束共光路,产生的激光干涉信号作为光程差计量信号用于扫描控制;探测器组件由分色片、光伏型碲化铟(InSb)和碲镉汞(MCT)单元探测器组成,用于将干涉调制后的干涉光束转换为干涉信号。AIUS主要技术指标如表1所示。

表1 AIUS主要技术指标

Table 1 Main technological indexes of AIUS

项目	指标
分光类型	干涉傅里叶变换
光谱范围	2.4~13.3 μm(752~4 167 cm ⁻¹)
光谱分辨率	0.03 cm ⁻¹
动态范围	800~5 800 K
信噪比	>100(在等效5 800 K黑体辐射时)
视场角	1.25 mrad
太阳跟踪稳定度	35 μrad
量化位数	18 bit
探测器	InSb:2.4~5.4 μm; MCT:5.4~13.3 μm
扫描周期	2 s

1.2 光谱定标原理

根据探测原理, AIUS是一个时间调制型傅里叶变换光谱仪,一个扫描周期输出的干涉图 $I(x)$,需按式(1)经过反傅立叶变换才能得到反映大气吸收特性的光谱 $B(\nu)$ 。

$$B(\nu) = \int_{-\infty}^{\infty} I(x) \cos(2\pi\nu x) dx \quad (1)$$

式中: ν 为复原光谱的波数值; x 为干涉图采样点对应光程差,从零光程差开始计数,是计量激光器出射稳频激光波长 S_l 的线性函数,即

$$x = k_l \times S_l, k_l = 0, \dots, N \quad (2)$$

式中: N 为干涉图采样数据点数, k_l 为干涉图采样数据点序号。当 k_l 取值 N 时的光程差为最大光程差,根据傅立叶变换光谱学基本原理, AIUS的理论光谱分辨率可表示为

$$\delta_\nu = 1/(2N \times S_l) \quad (3)$$

复原光谱的波数一般从0开始取值,为理论光谱分辨率的线性函数,即

$$\nu = k_s \times \delta_\nu = k_s / (2N \times S_l), k_s = 0, \dots, M \quad (4)$$

式中: M 为复原光谱数据点数, k_s 为复原光谱数据点序号。

理论上,如果获取了计量激光器激光的准确波长,即可确定复原光谱各数据点对应的波数。然而,受干涉仪装调误差、零光程差位置偏差、干涉数据切趾等因素影响,复原光谱波数 ν 与其数据点序号 k 间的定量关系需用式(5)所示一元线性回归模型来表征。

$$\nu = a \times k + b + \varepsilon, \varepsilon \sim N(0, \sigma) \quad (5)$$

式中: a 和 b 为回归系数。若有 n 组数据 (ν_i, k_i) , ($i=1, \dots, n$),则采用数理统计中常用的最小二乘法可得 a 和 b 的估计值 \hat{a} 和 \hat{b} 为

$$\begin{cases} \hat{a} = \frac{\sum_{i=1}^n (k_i - \bar{k})(\nu_i - \bar{\nu})}{\sum_{i=1}^n (k_i - \bar{k})^2} \\ \hat{b} = \bar{\nu} - a \bar{k} \end{cases} \quad (6)$$

式中: $\bar{\nu}$ 和 \bar{k} 分别是 ν_i, k_i 的平均值。在得到 a 和 b 的估计值 \hat{a} 和 \hat{b} 后,即得到了光谱定标方程,按照式(5)可求得复原光谱每个数据点对应波数值 $\hat{\nu}$ 。

2 定标方法

根据光谱定标原理, AIUS实验室光谱定标采用激光器定标方案,通过多个已知波长的单色激光及其复原光谱峰值对应的数据点位置,求解光谱定标方程系数。但是受星上空间、功耗等因素限制, AIUS未配备星上定标装置,给高精度在轨光谱定标带来了一定困难,本文针对AIUS可通过掩星观测获取不同切高大气透过率光谱且具有很高光谱分辨率的特点,提出基于大气吸收特征谱线的多谱线线性拟合算法,通过参考谱线筛选、多谱勒频移修正、谱峰位置确定等关键技术来实现AIUS高精度在轨光谱定标。具体定标方法如下:

2.1 定标光谱选取

AIUS通过掩星观测可获取太阳光谱和不同切高的大气透射光谱。太阳光谱中的夫琅禾费线是光谱定标中的优质参考谱线,但由于AIUS工作的2.4~13.3 μm波段范围内,太阳光谱能量相对较弱,且AIUS无法进行绝对辐射定标,故太阳光谱及夫琅禾费线不适合用来对其进行在轨光谱定标;而利用观测的复原后的太阳光谱和不同切高的大气透射光谱,按照式(7)可计算得到不同切高的大气透过率光谱,该光谱反应了大气分子对太阳光的吸收特性,可筛选一些大气吸收线作为参考谱线进行AIUS的在轨光谱定标。

$$T_t(\lambda) = \frac{S_t(\lambda) - D(\lambda)}{S_s(\lambda) - D(\lambda)}, \quad (7)$$

式中: $T_t(\lambda)$ 是切高为 t 的大气透过率光谱, $S_t(\lambda)$ 是切高为 t 的复原后的大气透射光谱, $S_s(\lambda)$ 是复原后的大气层外太阳光谱, $D(\lambda)$ 是地球阴影区测得暗电流数据。

此外,地球大气是垂直分层结构,大气成分、含量、温度和压力随高度差异较大,导致大气透过率光谱中,分子吸收线的深度、宽度(碰撞增宽、多普勒增宽)随切高而发生变化,定标中需要选取合适切高的光谱,使得吸收线特征明显,且深度合理,既要与基底具有较强的对比度,又要保证一定的信噪比,避免吸收线附近出现负值或多个谷峰。

2.2 参考谱线筛选

AIUS 具有约 0.03 cm^{-1} 的甚高光谱分辨率,可准确分辨出大气透过率光谱中相当多种气体分子的特征吸收线,这些特征吸收线反映了大气分子的固有属性,波长位置不随外界条件发生变化,可作为参考谱线,用于在轨光谱定标。

由于超高的光谱分辨率, AIUS 大气透过率光谱中大气分子的吸收线密密麻麻分布在观测波段范围内,虽然有利于在整个波段范围内选取特征谱线,但却较难区分和识别,一旦选择错误,将会给光谱定标带来较大误差。为此,本文通过如下方法来筛选参考谱线:

首先,利用一种专门用于 Limb 模拟的高光谱分辨率大气辐射传输模型 SCIATRAN, 基于 HITRAN-2008 谱线库,模拟默认气体和温压廓线下 AIUS 观测南极区,切高为 15、30、45、60、80 km 的大气透过率光谱曲线,光谱分辨率为 0.02 cm^{-1} ;

然后,从 HITRAN 在线数据库中,选取并下载 H_2O 、 CO_2 、 O_3 、 N_2O 、 CO 、 CH_4 、 O_2 等主要大气分子及其同位素在 $750\sim 4100 \text{ cm}^{-1}$ 范围内谱线信息,主要是谱线的波长位置和谱线强度;

最后,按 50 cm^{-1} 将观测波段划分为若干个单元,逐单元比较不同切高模拟和测量大气透过率光谱,识别出独立的(尾翼不受临近谱线影响)、特征明显的(谱线深度与基底具有较强的对比度)谱线,作为参考谱线,并使用谱线库中给出的波长位置对其进行标记。

按照上述方法共筛选出 53 个参考谱线如表 3 所示,其中 MCT 通道 20 个, InSb 通道 33 个,接近均匀分布在观测波段范围内。为定标时更好地根据

切高识别和选取特征谱线,还在不同切高(15、30、45、60、80 km)的模拟谱中,标记了筛选出参考谱线的位置及其对应波数值,受篇幅限制,给出部分波段标记结果如图 2 所示。可以看到:参考谱线在 15~30 km 切高光谱中比较明显;切高较低吸收线宽度较大,无法确定参考谱线位置;切高较高吸收线不明显甚至消失,无法满足高精度定标需求。

表 2 MCT 通道参考谱线

Table 2 Reference lines of MCT channel

序号	波数值/ cm^{-1}	序号	波数值/ cm^{-1}
1	947.74	11	1481.24
2	952.88	12	1531.64
3	957.80	13	1548.12
4	1233.455	14	1572.928
5	1386.481	15	1672.475
6	1395.803	16	1751.423
7	1404.98	17	1758.581
8	1429.945	18	1779.112
9	1446.478	19	1799.616
10	1455.30	20	1805.146

表 3 InSb 波段参考谱线表

Table 3 Reference lines of InSb channel

序号	波数值/ cm^{-1}	序号	波数值/ cm^{-1}	序号	波数值/ cm^{-1}
1	1866.38	12	2847.72	23	3313.26
2	1884.56	13	2849.34	24	3397.22
3	1895.20	14	2901.88	25	3442.5
4	1927.80	15	2904.52	26	3774.053
5	1945.34	16	3064.404	27	3777.94
6	1967.44	17	3101.16	28	3929.36
7	1998.92	18	3142.78	29	3973.92
8	2135.54	19	3185.26	30	3995.00
9	2139.42	20	3209.74	31	4008.58
10	2493.88	21	3254.148	32	4043.78
11	2494.76	22	3288.48	33	4075.30

2.3 多普勒频移修正

多普勒效应造成的发射和接收频率之差称为多普勒频移,它揭示了波的属性在运动中发生变化的规律。多普勒频移表现为:在运动的波源前面时,波被压缩,波长变得较短,频率变得较高(蓝移);在运动的波源后边时,会产生相反的效应,波长变得较长,频率变得较低(红移);波源的速度越高,所产生的效应越大。

从图 1 可以看到,在轨太阳掩星观测时, AIUS 与太阳间有相对运动,相当于在运动的波源前面,

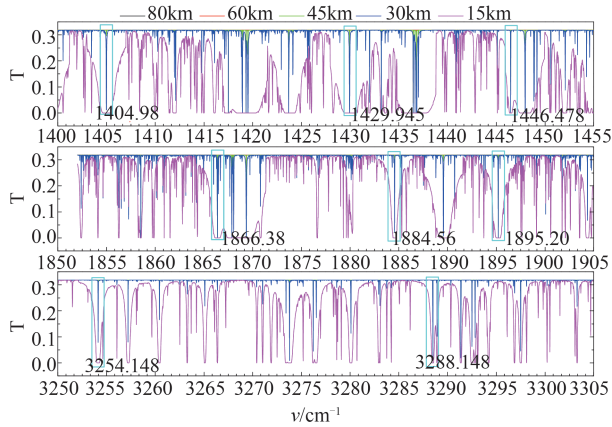


图2 部分参考谱线位置及其波数值标记图

Fig. 2 Position and wave number of some reference lines

导致其观测到的太阳光的波长变短,波数变大(频率增高)。对于光谱分辨率在纳米级的高光谱载荷,多普勒频移对数据应用影响可忽略,但对于AIUS,其光谱分辨率为 0.03 cm^{-1} ,多普勒频移对大气痕量气体垂直分布的反演影响很大。

假定在高度稀薄的气体中不存在碰撞增宽,一个给定量子态的分子在波数 ν_0 处辐射。如果该分子在视线(line of sight;指分子和观测者之间的连线)方向具有速度分量 s ,并且 $s \ll c$ (光速),则其被观测到的波数为

$$v = v_0 \left(1 \pm \frac{s}{c}\right) \quad (8)$$

从AIUS的0级辅助数据中提取某切高上卫星的运行速度为 7193 m/s ,卫星运行方向与太阳光方向夹角余弦值为 0.91 ,光速取值 $299\,792\,458\text{ m/s}$,按照式(8)计算出AIUS在轨运行中两个通道的多普勒频移量如表4所示。可以看到,InSb通道的多普勒频移量为 $0.040\,4\sim 0.090\,9\text{ cm}^{-1}$,MCT通道的多普勒频移量为 $0.016\,4\sim 0.040\,4\text{ cm}^{-1}$,当1级产品观测光谱数据点间隔为 0.02 cm^{-1} 时,InSb通道存在 $2\sim 4.5$ 个数据点的偏差,MCT通道存在 $0.8\sim 2$ 个数据点的偏差。

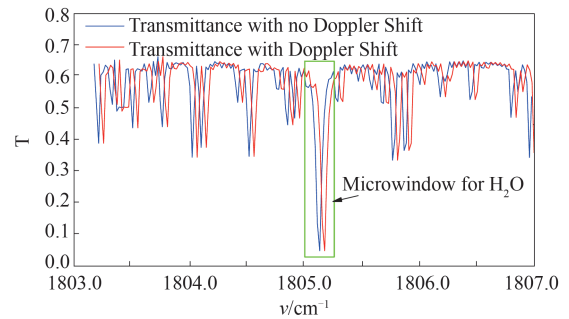
为说明多普勒频移对痕量气体反演的影响,选取AIUS工作谱段中间位置的一个水汽微窗,绘

表4 AIUS在轨运行中两个通道多普勒频移量

Table 4 Doppler shift in the AIUS two channels when on orbit

通道	波长范围 / μm	波数范围 / cm^{-1}	多普勒频移量 / cm^{-1}
InSb	2.4~5.4	1852~4167	0.0404~0.0909
MCT	5.4~13.3	752~1852	0.0164~0.0404

制其附近小范围内理论大气透过率光谱和存在多普勒频移的大气透过率光谱如图3所示。可以看到,多普勒频移导致理论光谱发生了约 0.04 cm^{-1} 的频移,该水汽微窗的中心波数值从 1805.14 cm^{-1} 变为 1805.18 cm^{-1} ,谱峰已经无法对准。而在AIUS工作谱段的终止波数上,多普勒带来的频移量约 0.009 cm^{-1} ,是中间波数的2倍多,此时谱峰已经完全错位,这在大气痕量气体反演中是无法容忍的,反演时必须按照式(8)进行多普勒频移修正。同样,在光谱定标中需要首先对观测光谱进行多普勒频移修正,以准确标定因仪器固有衰变导致的光谱漂移量。

图3 多普勒频移对 1805.14 cm^{-1} 水汽微窗光谱的影响Fig. 3 The influence of Doppler shift on spectrum at 1805.14 cm^{-1} microwindow for H_2O

2.4 谱峰位置确定

根据AIUS光谱定标的原理知,要进行高精度光谱定标,不仅要确定一定数量、分布均匀的参考谱线,而且要准确确定参考谱线峰值位置对应的数据点序号,而数据点实质上是光谱的采样点。对于干涉型光谱仪而言,受光程差的限制,其光谱分辨率不可能无限增高,这样参考谱线的峰值位置,很大概率不是正好落在采样点上。

为了准确地确定参考谱线峰值位置对应的数据点序号,采用形如式(9)所示的高斯函数,对参考谱线附近光谱点进行拟合,得到细化到小数位的谱峰位置对应的数据点序号,以提高谱峰定位精度。

$$g(k) = g_0 + A \times e^{-\frac{\sqrt{2}(k-k_c)}{w}} \quad (9)$$

式中: $g(k)$ 是序号为 k 的数据点对应的大气透过率, k_c 为谱峰位置对应的数据点序号, g_0 为参考谱线基底位置对应的大气透过率, A 为谱线的深度, w 为谱线的宽度。

图4所示为AIUS在2018年7月初次光谱定标时,对MCT通道序号为7的参考谱线(中心波数为

1 404. 98 cm⁻¹), 进行高斯拟合的结果, 下边横轴为数据点序号, 上边横轴是实验室光谱定标系数标定光谱, 各数据点对应的波数值。可以看到: 1) 高斯拟合得到该谱线对应数据点序号为 7 0834. 366, 提高了谱峰定位精度; 2) 在初次光谱定标时, AIUS 的 MCT 通道向短波数方向发生了漂移, 在序号为 7 的参考谱线位置, 漂移量约为 2. 46 cm⁻¹。

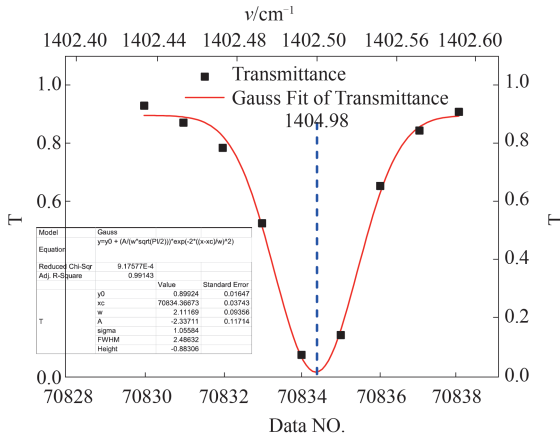


图4 高斯拟合确定谱峰精确位置
Fig. 4 Accurate position of spectral peak determined by Gaussian fitting

3 定标及精度分析

AIUS 于 2018 年 5 月 9 日搭载高分五号卫星进入预定轨道, 经入轨初期加热除气后, 6 月开始对地球北极区域进行掩星观测, 并进入在轨测试阶段。在轨运行两个月后, 初步认为仪器运行状态略稳定时, 利用 7 月 15 日的一轨数据对 AIUS 进行了初次在轨光谱定标。

按照上述方法, 首先进行大气透过率光谱计算、多普勒频移修正和谱峰位置数据点序号精细确定等一系列处理, 然后将确定的谱峰位置数据点序号与参考谱线波数值, 按照式(6)进行一元线性回归, 求解光谱定标系数, 结果如图 5、表 5 所示。其中, 5 为 MCT 和 InSb 两个通道谱峰数据点序号与波数的回归关系图, 图中蓝色圈代表两者对应散点, 红色线为对散点进行一元回归分析得到的光谱定标方程; 表 5 为回归求解得到的两个通道的光谱定标系数。

可以看到: AIUS 两个通道谱峰数据点序号与波数值间线性非常好, 相关系数接近于 1, 残差平方和分别为 0. 004 54 和 0. 001 82, 均比较小; 两个通道光谱定标系数比较接近, 定标系数 *b* 不为零, 且量值接

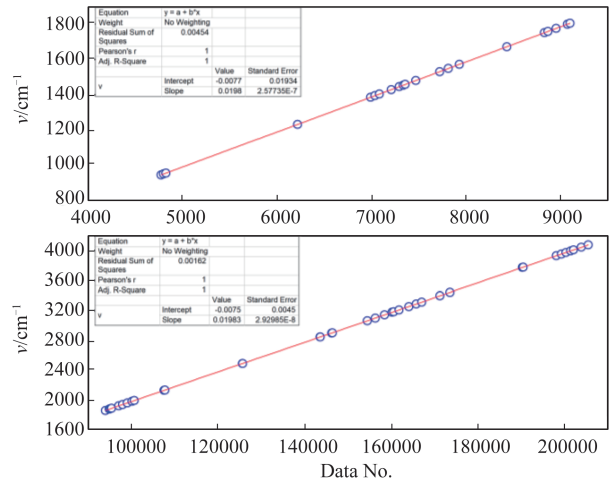


图5 AIUS 两个通道谱峰数据点序号与波数值的回归关系
Fig. 5 Regression relation between data point number and wave number of spectral peak in the AIUS two channels

表5 AIUS 两个通道光谱定标系数

Table 5 Spectral calibration coefficient of the two AI-US channels

通道	<i>a</i>	<i>b</i>
MCT	0. 019 835 39	-0. 007 740 703 2
InSb	0. 019 835 36	-0. 007 507 766 4

近 AIUS 痕量气体反演应用要求的光谱定标精度 (0. 008 cm⁻¹)。因此, 若简单地利用激光器波长计算各数据点对应波数会带来较大的误差, 而采用上述的一元线性回归模型进行光谱定标, 可有效提高定标精度。

利用在轨光谱定标系数可得到大气透过率光谱中每个数据点对应的波数值, 称为光谱定标后大气透过率光谱曲线。将光谱定标前后的透过率光谱曲线进行多普勒频移修正后, 与 SCIATRAN 模拟的相同切高的大气透过率光谱曲线进行比较, MCT 和 InSb 通道最后 50 cm⁻¹ 波段范围的对比结果如图 6 所示。其中, 图 6(a) 和 (c) 为定标前测量光谱曲线与模拟光谱曲线的比较结果; 图 6(b) 和 (d) 为定标后测量光谱曲线与模拟光谱曲线的比较结果。可以看到: 定标前参考特征谱线的位置明显发生了漂移 (绿色箭头位置), InSb 通道漂移量要大于 MCT 通道; 定标后测量和模拟光谱曲线中参考特征谱线的位置已经对准。

为评价光谱定标精度, 将定标后光谱进行多普勒频移修正, 确定参考特征谱峰对应的波数值, 并与参考谱线谱峰理论波数值进行比较, 计算两者的绝对偏差, 并统计所有参考谱线的绝对偏差的均

值,作为光谱定标精度。利用初次光谱定标系数生产的8月3日的一轨数据,对AIUS两个通道光谱定标精度进行评价结果如表6-7所示。可以看到,两个通道经光谱定标后,参考特征谱线谱峰波数值与理论值相差较小,平均绝对偏差分别为 0.00437 cm^{-1} 和 0.00389 cm^{-1} ,小于痕量气体反演应用要求的 0.008 cm^{-1} 。获取的光谱定标系数经验证和精度评价后,自2018年8月开始用于AIUS的1级数据产品生产,在南极区域大气痕量气体反演中发挥了重

要作用。

此后,在2018年11月对AIUS进行了光谱漂移情况监督,发现在仪器状态调整后,光谱又向短波方向发生了漂移,但量值没有7月大。因此,对其进行了第2次在轨光谱定标,并对1级产品中光谱定标系数进行了更新,图7所示为AIUS数据反演应用部门,对12月份AIUS一级产品切高序号为20的大气透过率光谱与理论光谱的比较的结果,可以看到,AIUS观测光谱和理论光谱中,谱峰位置十分吻

表6 MCT通道光谱定标精度分析

Table 6 Analysis of spectral calibration precision in MCT channel

序号	波数/ cm^{-1}			序号	波数/ cm^{-1}		
	理论	定标后	绝对偏差		理论	定标后	绝对偏差
1	947.74	947.74527	0.00527	11	1481.24	1481.24552	0.005516
2	952.88	952.882518	0.002518	12	1531.64	1531.64609	0.006086
3	957.80	957.801582	0.001582	13	1548.12	1548.1289	0.00892
4	1233.455	1233.44767	0.007327	14	1572.928	1572.92259	0.005414
5	1386.481	1386.4742	0.006803	15	1672.475	1672.47412	0.000875
6	1395.803	1395.79662	0.006384	16	1751.423	1751.41717	0.005834
7	1404.98	1404.98019	0.000191	17	1758.581	1758.57758	0.003423
8	1429.945	1429.95237	0.007374	18	1779.112	1779.1067	0.00526
9	1446.478	1446.47488	0.003125	19	1799.616	1799.61606	5.8E-05
10	1455.30	1455.30142	0.001421	20	1805.146	1805.15	0.004005
平均绝对偏差				0.00437 cm^{-1}			

表7 InSb通道光谱定标精度分析

Table 7 Analysis of spectral calibration precision in InSb channel

序号	波数/ cm^{-1}			序号	波数/ cm^{-1}		
	理论	定标后	绝对偏差		理论	定标后	绝对偏差
1	1866.38	1866.38	0.000449	18	3142.78	3142.778	0.001649
2	1884.56	1884.569	0.009085	19	3185.26	3185.265	0.004782
3	1895.20	1895.201	0.00061	20	3209.74	3209.741	0.001092
4	1927.80	1927.809	0.009243	21	3254.148	3254.152	0.003511
5	1945.34	1945.343	0.003325	22	3288.48	3288.486	0.005784
6	1967.44	1967.439	0.000557	23	3313.26	3313.26	0.000382
7	1998.92	1998.917	0.002515	24	3397.22	3397.221	0.000898
8	2135.54	2135.541	0.000517	25	3442.5	3442.504	0.004054
9	2139.42	2139.428	0.008164	26	3774.053	3774.045	0.008007
10	2493.88	2493.878	0.001547	27	3777.94	3777.933	0.00736
11	2494.76	2494.751	0.00881	28	3929.36	3929.353	0.007466
12	2847.72	2847.714	0.006142	29	3973.92	3288.486	0.005784
13	2849.34	2849.34	0.000323	30	3995.00	3973.922	0.001633
14	2901.88	2901.883	0.003066	31	4008.58	3995.006	0.006169
15	2904.52	2904.521	0.001112	32	4043.78	4008.573	0.006736
16	3064.404	3064.411	0.006523	33	4075.30	4043.78	0.000274
17	3101.16	3101.165	0.004658				
平均绝对偏差				0.00389 cm^{-1}			

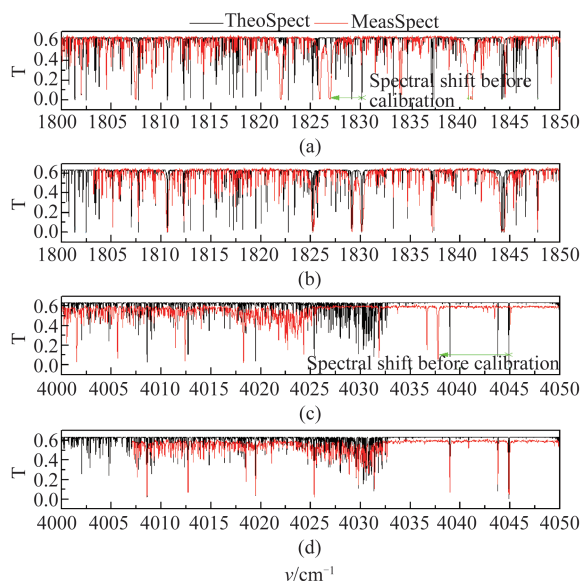


图6 第1次在轨光谱定标前后观测与理论大气透过率曲线对比图

Fig. 6 Comparison of the observed and theoretical atmospheric transmittance curves before and after the first on-orbit spectral calibration

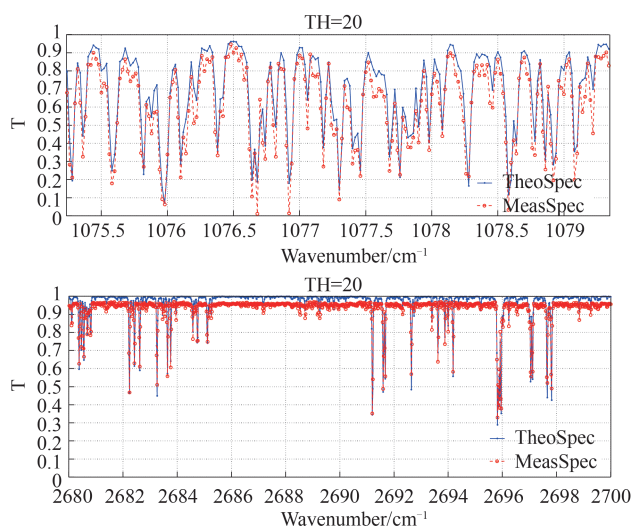


图7 第2次在轨光谱定标后观测与理论大气透过率光谱比较图

Fig. 7 Comparison of the observed and theoretical atmospheric transmittance curves after the second on-orbit spectral calibration

合, 选取若干个谱峰, 比较高斯拟合后观测和理论光谱的峰值偏差小于 0.005 cm^{-1} 。2019年4月又对 AIUS 进行了光谱漂移情况监督, 光谱基本没有漂移, InSb 通道最大偏差也小于 0.008 cm^{-1} , 可以认为仪器已基本稳定。

4 结论

AIUS 是我国目前光谱分辨率最高的星载红外超光谱探测载荷, 它使用太阳掩星观测获取的大气透射光谱, 进行痕量气体垂直分布信息反演, 高精度的光谱定标对实现其数据应用目标具有决定性作用。然而超高的光谱分辨率、较宽的光谱覆盖范围, 使得简单地通过确定稳频激光器波长的方法难以满足数据反演应用的精度需要。此外, 受星上资源限制, AIUS 无星上光谱定标装置。这些给 AIUS 高精度在轨光谱定标带来了一定的困难。

本文针对 AIUS 可通过掩星观测获取不同切高大气透过率光谱的特点, 提出基于大气吸收特征谱线的多谱线线性拟合法。该方法首先选取合适切高的大气透过率光谱, 从观测光谱中得到特征明显、信噪比高的特征峰, 并基于 HITRAN-2008 谱线库和 SCIATRAN 辐射传输模型, 通过模拟计算与分析, 确定了全谱段范围内多个参考谱线及其理论波数值; 然后, 通过多普勒频移修正, 准确标定因仪器固有衰变导致的光谱漂移量, 通过高斯拟合, 确定了观测光谱中谱峰位置对应的精确数据点序号; 最后, 通过一元线性回归方法, 计算获取了在轨光谱定标系数。

在 GF-5 卫星发射升空后, 使用该方法对 AIUS 进行了一些列在轨光谱定标和精度分析验证工作, 结果表明: 该方法可实现 AIUS 的高精度光谱定标, MCT 和 InSb 波段的平均谱峰绝对偏差分别为 0.00437 cm^{-1} 和 0.00389 cm^{-1} , 小于痕量气体反演应用要求的 0.008 cm^{-1} 。目前, 该方法获取的光谱定标系数已随 AIUS 的 1 级数据产品发布, 在南极区域大气痕量气体反演中发挥了重要作用。

References

- [1] WANG Jun-Feng, YE Han-Han, Yi Wei-Ning, *et al.* Research on the method of updating instrument line shape function of on-orbit fourierultrahigh resolution spectrometer [J]. *J. Infrared Millim. Waves* (汪俊峰, 叶函函, 易维宁, 等. 在轨超高分辨率傅立叶光谱仪仪器线型函数更新方法研究. *红外与毫米波学报*), 2018, 37(5): 613-620.
- [2] CHENG Jie, LIU Qin-Huo, LI Xiao-Wen. Review of trace gases inversion utilizing space-borne hyperspectral infrared remote sensor data [J]. *Remote Sensing Information* (程洁, 柳钦火, 李小文. 星载高光谱红外传感器反演大气痕量气体综述. *遥感信息*), 2007, 2: 90-97.
- [3] Crisp D, Fisher B M, O'Dell C, *et al.* The ACOS CO₂ re-

- trieval algorithm—part II: Global X CO₂ data characterization[J]. *Atmos. Meas. Tech.*, 2012, **5**: 687–707.
- [4] ZHANG Ya-Qiong, ZHANG Wen-Juan, CHEN Zheng-Chao, *et al.* A comparative analysis of the accuracy of alternative spectral calibration methods based on TG-1 hyperspectral imager[J]. *J. Infrared Millim. Waves* (张雅琼, 张文娟, 陈正超, 等. 基于天宫一号高光谱成像仪的替代光谱定标方法精度对比分析. *红外与毫米波学报*), 2015, **34** (3): 360–367.
- [5] Guanter L, Richter R, Moreno J. Spectral calibration of hyperspectral imagery using atmospheric absorption features [J]. *Applied Optics*, 2006, **45**(10): 2360–2370.
- [6] ZHENG Yu-Quan. Precise spectral calibration for hyperspectral imager[J]. *Optics and Precision Engineering* (郑玉权. 超光谱成像仪的精细光谱定标. *光学精密工程*), 2010, **18**(11): 2347–2354.
- [7] Caspar C, Chance K. GOME wavelength calibration using solar and atmospheric spectra [C]. Proc. 3rd ERS symp. on Space at the service of our Environment, Florence, Italy, 17–21 March 1997 (ESA SP 414, 3 Vols, May 1997), 610–614.
- [8] Jos H. G. M. van Geffen, Roeland F. van Oss. Wavelength calibration of spectra measured by the global ozone monitoring experiment by use of a high-resolution reference spectrum[J]. *Applied Optics*, 2003, **42**(15): 2739–2753.
- [9] Lichtenberg G, Kleipool Q, Krijger J M, *et al.* SCIAMACHY Level 1 data: calibration concept and in-flight calibration [J]. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2006, **6**: 5347–5367.
- [10] Dutil Y van, Lantagne S, Poulin R. ACE-FTS spectral calibration [C]. Proceedings of SPIE, 2002, **4833** (1): 178–183.
- [11] LI Zhan-Feng, WANG Shu-Rong, HUANG Yu, *et al.* Research on high-accuracy in-flight spectral calibration of the solar backscattered ultraviolet spectroradiometer [J]. *ACTA OPTICA SINICA* (李占峰, 王淑荣, 黄煜, 等. 紫外臭氧垂直探测仪高精度在轨光谱定标方法研究. *光学学报*), 2013, **33**(2): 0228002.
- [12] ZHAO Min-Jie, SI Fu-Qi, LU Yi-Huai, *et al.* Spectral calibration of space-born imaging spectrometers using spectrum-matching technique [J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis* (赵敏杰, 司福祺, 陆亦怀, 等. 基于谱线匹配技术的星载成像光谱仪星上光谱定标方法研究. *光谱学与光谱分析*), 2015, **35**(7), 2049–2053.