

在轨超高分辨率傅里叶光谱仪仪器线型函数更新方法研究

汪俊锋^{1,2}, 叶函函^{1*}, 易维宁^{1*}, 陈震霆^{1,2}, 方雪静^{1,2}, 杜丽丽¹

(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. 中国科学技术大学, 安徽 合肥 230026)

摘要: 仪器线型函数是傅里叶光谱仪重要的物理表征参数之一, 影响仪器测量光谱的精度。随着空间测量和大气探测等遥感应用在高精度上的需求, 如何实时在轨测量并更新星载光谱仪的仪器线型函数, 成为当前提高在轨超高分辨率光谱仪测量精度的重要手段。以傅里叶型光谱仪为例, 根据仪器线型函数的原理, 利用在轨超高分辨率光谱仪实测太阳光谱定标数据不受大气气溶胶影响且具有独立太阳弗朗和费线的特征, 来对在轨超高分辨率光谱仪的仪器线型函数进行监督和更新。实验以 Kurucz 太阳光谱模型作为参考光谱, 在对应波段范围内分别选取多条实测太阳定标光谱和参考光谱的特征峰, 通过调整光谱仪的狭缝模型, 对特征峰残差进行迭代对比, 演算出仪器 ILS 参数变化。最后, 用更新的仪器线型函数与临边理论光谱卷积, 与实测临边定标光谱比较验证, 误差范围在 $-6\% \sim 8\%$ 。结果表明, 该方法可为在轨超高分辨率光谱仪仪器线型函数的监督更新提供参考依据。

关键词: 仪器线型函数; 定标光谱; 傅里叶光谱仪; 太阳光谱模型; 特征峰; 在轨运行
中图分类号: TN911.73 文献标识码: A

Research on the method of updating instrument line shape function of on-orbit fourier ultrahigh resolution spectrometer

WANG Jun-Feng^{1,2}, YE Han-Han^{1*}, YI Wei-Ning^{1*}, CHEN Zhen-Ting^{1,2}, FANG Xue-Jing^{1,2}, DU Li-Li¹

(1. Key Laboratory of Optical Calibration and Characterization, 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: Instrument line shape function (ILS) is one of the important physical characterization parameters of the fourier spectrometer, which affects the accuracy of the spectrometer. With the high-precision demand for remote sensing applications such as space measurement and atmospheric detection, how to measure and update the ILS of the on-orbit spectrometer in real time is an important means to improve the accuracy of on-orbit ultrahigh resolution spectrometer. This paper used Fourier spectrometer as an example, according to the principle of ILS, used the characteristics of the measured solar spectral calibration data of the on-orbit ultrahigh resolution spectrometer, which have independent Fraunhofer line and less influenced by atmospheric aerosols, to monitor and update the ILS of the on-orbit ultrahigh resolution spectrometer. In this paper, the Kurucz solar spectrum model is used as the reference spectrum, the characteristic peaks of the measured solar calibration spectra and reference spectra are selected in the corresponding band, by adjusting the slit model of the spectrometer, the characteristic peak residuals are iteratively compared to calculate the ILS parameters of the instrument. Finally, after making a convolution between the updated ILS and the theoretical limb spectrum, we compared the results with the measured limb calibration spectrum. The error range is $-6\% \sim 8\%$. These results show that this

收稿日期: 2017-10-29 修回日期: 2018-02-14

Received date: 2017-10-29 revised date: 2018-02-14

基金项目: 国家自然科学基金项目(41601393, 41601379); 应用共性关键技术项目(30-Y20A010-9007-17/18)

Foundation items: Supported by National Natural Science Foundation of China (41601393, 41601379) and Research Fund of application generic key technique project (30-Y20A010-9007-17/18)

作者简介(Biography): 汪俊锋(1985-) 男, 安徽肥东人, 博士生。主要研究领域为遥感数字图像处理。E-mail: wangjunf@mail.ustc.edu.cn

* 通讯作者(Corresponding author): E-mail: yiwn@aiofm.ac.cn, yehanhan@aiofm.ac.cn

method can provide a reference for supervising and updating the ILS of on-orbit ultrahigh resolution spectrometer.

Key words: instrument line shape function, calibration spectrum, fourier spectrometer, solar spectrum model, characteristic peak, on-orbit

PACS: 42. 68. Wt

引言

仪器线型函数(ILS) 可以看作是输入光谱为无限窄单色谱线情况下光谱仪的输出光谱, 它是由光谱仪的特征和光谱变换方法共同决定的^[1]. ILS 是光谱仪的重要性能表征参量, 最终影响光谱仪测量光谱的精度^[2]. 传统的地面实验, 光谱仪的 ILS 是通过线宽较窄的标准单色光源, 如元素谱线灯、激光器、单色仪等, 获取单色光经仪器后在光谱通道内的能量分布曲线; 或者选取仪器光谱通道内具有吸收特性的标准气体, 利用气体吸收池内分子吸收谱线来测量光谱仪的 ILS. 再将 ILS 以参数表的方式固化到测量系统中作为光谱仪的表征参量^[3-5].

星载光谱仪可以通过高分辨率的辐射光谱获取大气微量气体的吸收和发射特征, 从而检索大气中的温室气体浓度. 温室气体在大气中含量低、浓度梯度小的特点, 使得卫星观测数据的精度必须很高才能满足应用的要求, 目前 CO₂ 的浓度优于 1% 即 3.8 ppm、CH₄ 优于 2% 即 32 ppb 是公认的基本要求^[6-7]. 傅里叶型光谱仪由于具有多通道和高通量优点而便于获取宽波段、高信噪比、高分辨率的光谱数据, 其单次观测即可反演多种气体组分, 特别适合高精度要求的大气探测. 其超高的光谱分辨率, 可以真实有效地获取地表目标或大气分子的高光谱分辨率信息, 提高了量化高光谱数据反演参量的精度, 在大气监测和污染源精细成分探测等领域发挥着越来越重要的作用^[8-9].

在轨运行的高分辨光谱仪, 卫星发射时的振动、轨道上的热变化、在轨状态和地面实验室条件之间区别、外太空重力和辐射、仪器老化以及观察模式的切换都可能会对光谱仪的 ILS 产生微妙的影响. 因此, 对光谱仪整个在轨运行中的 ILS 变化进行监督和更新是非常有必要的^[10-11]. 由于星载光谱仪在轨运行时, 不具备单色光或者气体吸收池的 ILS 测量环境, 无法采用类似地面实验室的直接测量方法. 如何实时在轨监测并更新星载光谱仪的仪器线型函数, 成为当前提高在轨超高分辨率光谱仪测量精度的重要手段. 目前国内外对星

载光谱仪在轨运行时 ILS 的监督更新研究较少, 提出的解决方法也鲜有报道. 本文利用在轨高分辨率光谱仪实测太阳光谱定标数据不受大气气溶胶影响且具有独立太阳弗朗和费线的特征^[12-13], 以稳定的 Kurucz 太阳光谱模型作为参考光谱, 与在轨光谱仪实际测量的太阳定标光谱进行残差迭代比较, 得出仪器新的 ILS, 实现了在轨高分辨率光谱仪 ILS 的监督 and 更新.

1 原理

仪器线型函数(ILS) 是傅里叶光谱仪的脉冲响应受仪器自身(包括干涉仪和光谱计算系统) 的影响, 这种物理效应不能消除, 属于仪器固有的属性. 图 1 中, 理论光谱来自单色光的发射, 因为温度和压力之间的相互作用产生的展宽型理论光谱. 图 1(1) 光束发散是由于自我切趾, 当发射的单色光进入干涉仪时, 不同视场的不同角度产生不同的视在光谱频率. 因此, 单色信号产生一个连续的频率. 该连续体的形状是像素几何形状, 相对于光轴的像素位置和信号的光谱频率的函数. 图 1(2) 调制降解是由于干扰波束上的剪切和倾斜等扰动引起的, 这可能会波动, 从而导致测量线路的失真. 这主要仪器工艺导致的, 比如光谱仪常见的余弦效应, 中间亮四周弱, 就像一个调整系数, 直接调整成像结果, 所以可以在干涉域直接乘, 换到光谱域, 乘法变成了卷积. 图 1(3) 采样窗口是由于入射光谱形成干涉谱时, 是无穷长的, 其在光谱域的表现就是 sin 函数. 但由于光栅器件有限长, 导致记录的干涉谱被强制截断, 截断的影响使得 sin 函数变形, 变成图中的 sinc 函数, 其形状是光谱域的形状, 对应干涉域是一个矩形^[13-9].

由图 1 可知, 光谱仪测得的光谱(测量光谱) 实际为理论原始光谱和仪器线型函数的卷积, 仪器本身的影响在一定程度上改变了原始光谱的特征. 对于波数为 σ_1 的单色光, 其光谱可以用狄拉克函数 δ 表示为:

$$B(\sigma) = \frac{1}{2} [\delta(\sigma + \sigma_1) + \delta(\sigma - \sigma_1)] \quad (1)$$

傅里叶光谱仪记录的是干涉光谱函数 $I(u)$, 目

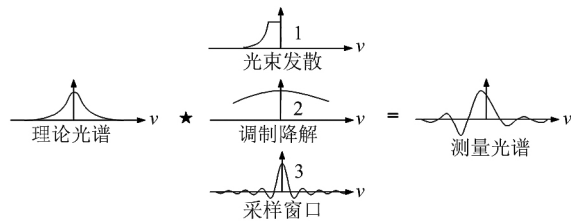


图1 仪器线型函数对理论光谱的影响

Fig.1 Influence of instrument line shape function on theoretical spectrum

的是为了求得入射光谱函数 $B(\sigma')$ (σ' 表示波数), 由于傅里叶变换是可逆的, 利用所记录的干涉光谱函数 $I(u)$ 可以求出入射光谱:

$$B(\sigma') = \int_{-\infty}^{+\infty} I(u) \cos(2\pi\sigma'u) du \quad (2)$$

事实上, 干涉图永远是测量到某一有限的极大光程差 L 为止, 而不可能无限大, 因此在计算仪器输出光谱时, 我们计算的是 $B_e(\sigma')$:

$$B_e(\sigma') = \int_{-\infty}^{+\infty} I(u) T(u) \cos(2\pi\sigma'u) du$$

$$T(u) = \text{rect}\left(\frac{u}{2L}\right) = \begin{cases} 1 & |u| < L \\ 0 & |u| > L \end{cases} \quad (3)$$

式(3)表明, 截断函数 $T(u)$ 的作用是使我们只计算区间 $-L$ 到 L 范围内的干涉图, 而截去这一区域以外的干涉图. 根据卷积定理可知, 两个函数乘积的傅里叶变换等于各自傅里叶变换的卷积, 因此计算的输出光谱 $B_e(\sigma')$ 等于输入光谱 $B(\sigma')$.

$$B_e(\sigma') = B(\sigma') \cdot FT^{-1}[T(u)] = B(\sigma') \cdot (ILS) \quad (4)$$

傅里叶光谱仪仪器线型函数可以认为是对单色光干涉图进行复原后的光谱曲线, 该光谱曲线即是对矩形截断函数 $T(u)$ 的傅里叶变换结果, 因此傅里叶型光谱仪的仪器函数表示为:

$$t(\sigma' - \sigma'_1) = 2L \left\{ \frac{\sin[2\pi L(\sigma' - \sigma'_1)]}{2\pi L(\sigma' - \sigma'_1)} + \frac{\sin[2\pi L(\sigma' - \sigma'_1)]}{2\pi L(\sigma' + \sigma'_1)} \right\}$$

$$= 2L \{ \text{sinc}[2\pi L(\sigma' - \sigma'_1)] + \text{sinc}[2\pi L(\sigma' + \sigma'_1)] \} \quad (5)$$

同时, 对于仪器输出光谱 $B_e(\sigma')$ 来说, 其波数范围也在仪器设计过程中被限定在一定范围 $[\sigma_{\min}, \sigma_{\max}]$ 内, 因此, 实际得到的光谱数据为:

$$B_e(\sigma') = [B(\sigma') \cdot T(\sigma_{\min}, \sigma_{\max})] \cdot (ILS) \quad (6)$$

对于 ILS 更新前后两者误差对比, 采用绝对标准残差的方式进行计算:

$$S = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (R_{org}^i - R_{adj}^i)^2} \quad (7)$$

R_{org} 、 R_{adj} 分别表示原始数据和更新调整后数据. N 表示单个光谱数据的实际波长点数. S 表示 R_{org} 、 R_{adj} 之间的标准残差. 对于多个光谱数据, 采用均残差的方法进行计算:

$$S^{\Delta} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^M S \quad (8)$$

M 表示待统计的样本数量. S^{Δ} 表示 M 个样本的统计均残差.

2 方法

主要利用实测太阳光谱定标数据不受大气气溶胶的影响, 且具有独立的太阳弗朗和费线的特征, 来对在轨超高分辨率傅里叶光谱仪的仪器线型函数进行监督和更新. 调整光谱仪的狭缝模型, 让原始 ILS 卷积宽度不同矩形窗; 将 Kurucz 太阳光谱在对应波长范围内的谱段与不同切趾处理后的 ILS 做卷积, 得出不同的理论光谱; 使用迭代比较的方法, 不断将 ILS 切趾处理得到的理论光谱与实测光谱数据进行对比, 直到找到两条谱线吻合度最好.

2.1 仪器线型模型

理想准直的单色光谱线 σ_1 的干涉图应为无穷余弦函数, 若能在无限光程差上测量并实施傅里叶变换, 将得到一个波数在 σ_1 处的函数 $\delta\sigma_1$, 即为原来的单色谱线. 但在实际中, 只能测量和变换有限光程差范围内的干涉图, 这就意味着强制干涉图函数在最大光程差处突然下降到零, 导致干涉图在该处出现尖锐的不连续线, 从而引起变换光谱在颇大波数范围内的“维扰”, 即是旁瓣出现的根源^[8]. 本文使用的超高分辨傅里叶光谱仪利用实验室单色激光测量的 ILS 为 *sinc* 函数, 其第一个旁瓣约为主峰强度的 22%, 是波数 σ_1 附近虚假光谱信号的来源而且又容易掩盖波数 σ_1 附近的弱光谱信号. 因此, 需对波数 σ_1 附近的旁瓣加以抑制.

既然旁瓣出现的物理根源在于最大光程差附近干涉图尖锐的不连续性, 抑制旁瓣或者说切趾的基本方法就是用渐变的权重函数去乘干涉图, 以缓和这种尖锐的不连续性. 这一权重函数应满足在光程差 $x=0$ 处有极大值 1, 并随着 x 的增大而减少, 在 x 为 L 处为零, 这意味着加强了干涉强度较大附近的那部分干涉图的权重. 我们选择切趾函数为三角函数来对实验室单色激光测量的 ILS 进行旁瓣抑制, 其表达式为:

$$A_{(\Delta)} = \begin{cases} 1 - |x/L| & |x| < L \\ 0 & |x| > L \end{cases} \quad (9)$$

利用三角函数进行切趾时,首先需定位干涉图零光程差点,切趾过程如图 2(a) 所示. 图中实线为原始干涉图,点线为三角切趾函数,短划线为切趾后的干涉图. 经三角切趾后,两端干涉条纹明显变的缓慢回落为 0. 采用三角函数对单色光干涉图进行切趾,其傅里叶变换后的光谱曲线表达式变为 $\text{sinc}^2(z/2)$, 如图 2(b) 所示. 从图中可以看出,在经过三角函数切趾之后,“旁瓣”的峰值约减小了四倍,且去除了负值部分.

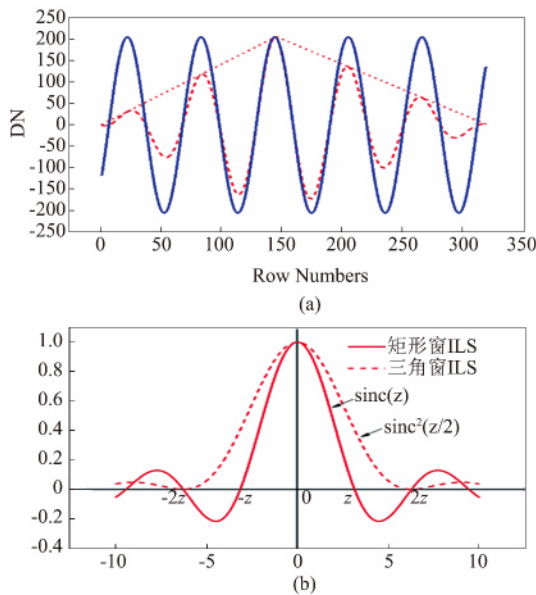


图 2 (a) 三角函数切趾对干涉图的影响, (b) 经过三角切趾函数处理后旁瓣峰值的变化

Fig. 2 (a) The influence of triangular apodisation function on interferogram, (b) the change of the side lobe peak after treatment with the triangular apodisation function

干涉图切趾处理又称为干涉图加窗,实际上起到一种空间频率滤波的作用. 切趾函数虽然使复原光谱的分辨率得以下降,但光谱信噪比却得到提高. 这是因为在干涉图中,光程差越大的部分,对应复原光谱的频率分量越高,而切趾函数一般是压低了大光程差部分的数据,因此会使高频分量得到抑制,复原光谱变得更为平滑、分辨率也降低了.

选择切趾函数为矩形函数来改变仪器狭缝模型,让经过三角函数切趾处理后的实验室测量 ILS 卷积宽度不同矩形窗,其表达式为式(3)中的截断函数 $T(u)$.

2.2 理论光谱的计算

在轨超高分辨率傅里叶光谱仪的观测目标为地球大气散射光谱,可通过大气传输模拟软件计算得

表 1 使用的两种切趾函数信息

Table 1 The information of two kinds of apodisation function

切趾函数	线型函数	半宽线高	线宽增加
三角函数	$\text{Sinc}^2(v/2L)$	$0.6/L$	0
矩形函数	$\text{Sinc}(vL)$	$0.89/L$	49%

到仪器观测条件下的高光谱分辨率地球大气散射光谱作为理论参考光谱. 但是由于超高分辨率光谱仪仪器线型函数的监督只需要参考光谱的相对光谱分布准确,并不需要大气的吸收特性. 另外,由于大气辐射传输模型的复杂性,当前的大气传输模拟软件精度较低,使用大气散射光谱作为理论参考光谱会引入二次误差,从而影响仪器线型函数更新的精度. 大气层外太阳光谱不受大气的影 响,大部分空间在轨遥感光谱仪都设有太阳光谱测量模式或太阳定标模式. 太阳光谱分布很容易通过成熟的模型计算或查找相关仪器测量结果得到. 因此我们采用高光谱分辨率的太阳光谱作为理论参考光谱. 太阳理论模型计算出太阳的普朗克函数,然后结合太阳吸收模型计算出与仪器参数对应的太阳光谱. 此种方法避免了使用固定太阳光谱插值引入的误差. Kurucz 太阳光谱来源于理论模型和经验模型计算,光谱范围为 $0.2 \sim 200 \mu\text{m}$; Kurucz 模型可得到的高光谱分辨率的太阳光谱辐照度标准值,经过验证其标准值的不确定在 CO_2 波段范围可达到 3%^[12-14]. 图 3 为 Kurucz 在 CO_2 吸收波段的谱线分布. 利用式(4),我们将 Kurucz 太阳光谱记为输入光谱 $R(\lambda)$,因此理论参考太阳光谱 $R(\lambda)$ 等于输入光谱 $R(\lambda)$ 与光谱仪仪器线型函数的 $f(\lambda)$ 卷积,其中 λ 为光谱对应的波长.

$$R(\lambda) = R(\lambda) \cdot f(\lambda) \quad (10)$$

为了将上述方法得到的标准参考太阳光谱应用到超高分辨率傅里叶光谱仪在轨 ILS 监督和更新上,还需要保证仪器输出的实测太阳定标数据的精度,即需要根据仪器在轨辐射定标条件对太阳光谱辐照度进行日地距离、太阳活动周期和光谱分辨率三方面的修正. 文中使用的高分辨率傅里叶光谱仪已经在仪器在轨辐射定标的应用上做了相关的校正,其输出的实测太阳定标数据拥有较高的精度.

2.3 特征线的选择

超高分辨率傅里叶光谱仪在轨运行过程中,其仪器线型函数(ILS)的展宽、旁瓣特征是在变化的,这些变化会直接导致光谱吸收线特征的变化,主要表现在吸收线深度、宽度和尾翼的变化. 图 4 是不

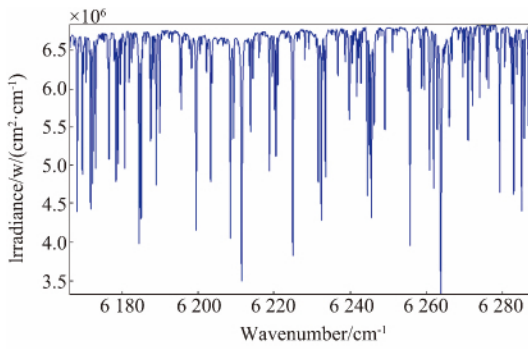


图3 Kurucz 太阳光谱在 CO₂ 波段范围内谱线图
Fig. 3 Spectral diagram of Kurucz solar spectrum in CO₂ band

同 ILS 对应的观测光谱, ILS 旁瓣抑制对应的光谱变化 表现为: 吸收线变宽变浅、尾翼变平滑; ILS 展宽 对应的光谱变化是吸收线变宽变浅、尾翼基本不变; ILS 的旁瓣和宽度均发生变化时, 对应光谱的吸收 线进一步变宽变浅, 且尾翼也变平滑.

由上可知, 光谱特征线的变化与 ILS 的变化密 切相关, 因此, 根据光谱特征线的变化, 可以用于 ILS 的再定标. 特征线的选择遵循以下原则:

- 1) 无干扰, 太阳弗朗禾费线与太阳定标谱线不 相互影响, 也不受其它干扰气体吸收特征(如 H₂O) 的影响;
- 2) 独立谱线, 谱线的尾翼不受临近谱线的影 响;
- 3) 谱线特征明显, 即谱线深度与基底具有较强 对比度;
- 4) 较宽的光谱分布范围, 通道光谱范围两端和 中间均有对应特征线.

根据特征峰的选择原则, 选择的太阳光谱几条 特征线如图 5 所示.

3 实验及结果

OCO-2(轨道碳观测 2) 是美国航空航天局 (NASA) 2014 年 7 月 2 日成功发射的首颗专门用于 探测二氧化碳的卫星. OCO-2 运行在 705 km 高的太 阳同步轨道, 倾角 98.2°, 周期 98.8 min, 重访周期 16 天, 升交点赤道时间 13:15. OCO-2 上每个光谱仪 均可在光谱特定区域内进行测量, 相应的焦平面可 探测这些光谱范围内波长的细小区别^[15-16]. OCO-2 是当前世界上在轨碳卫星当中星载设备最新、性能 参数最高、数据产品公布最全的, 鉴于这些原因我们 选择 OCO-2 在 2017 年度在 CO₂ 波长范围内的实测

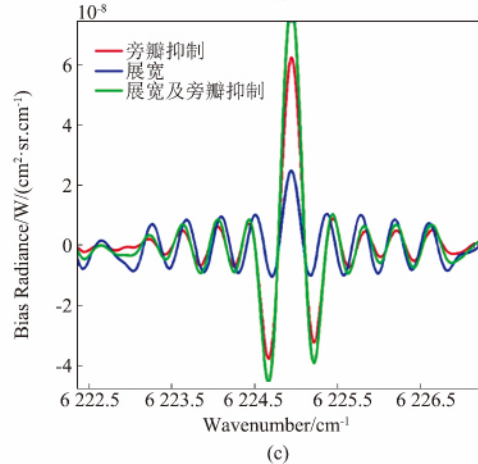
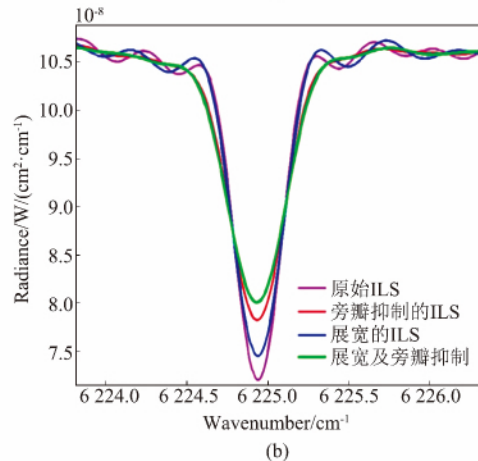
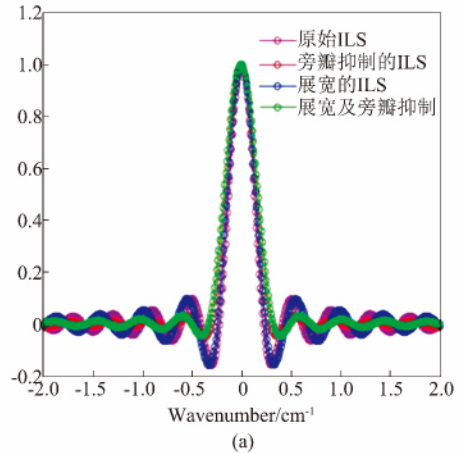


图4 各种 ILS 及对应的观测光谱, (a) 原始 ILS(紫)、旁瓣 抑制的 ILS(红)、展宽 ILS(蓝)和展宽及旁瓣抑制的 ILS (绿) (b) 不同 ILS 对应的辐亮度光谱(图中为一条太阳弗 朗禾费线的放大效果) (c) ILS 变化对应辐亮度光谱的变化
Fig. 4 Various ILS and corresponding observed spectra, (a) primitive ILS (violet), sidelobe-inhibited ILS (red), widened ILS (blue) and broadened and sidelobe-inhibited ILS (green) (b) different ILS corresponding to the radiance spectrum (the figure is a solar Fraunhofer line amplification effect) (c) changes of ILS Variation Spectra

太阳光谱定标数据作为实际光谱数据.

将 Kurucz 太阳光谱在 CO₂ 波长范围内的谱段

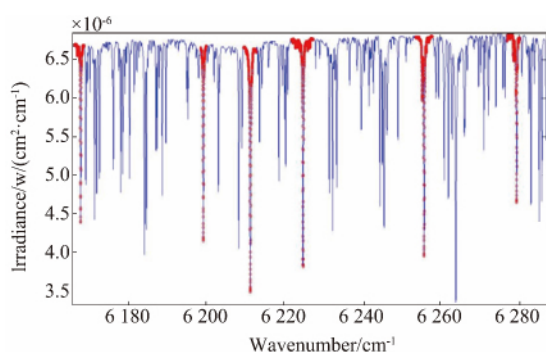


图5 太阳光谱特征线的选择(6条)
Fig.5 Selection of six solar spectral characteristic lines

与的不同切趾处理后的 ILS 做卷积,得出不同的理论光谱;图 6(a) 是 Kurucz 太阳光谱在 CO₂ 波长范围与仪器最终迭代切趾 ILS 卷积后的理论光谱;图 6(b) 是 OCO-2 实测的太阳定标数据在相应波段范围内实测光谱.可以看出此处的理论光谱和实测光谱的谱线是基本吻合的.

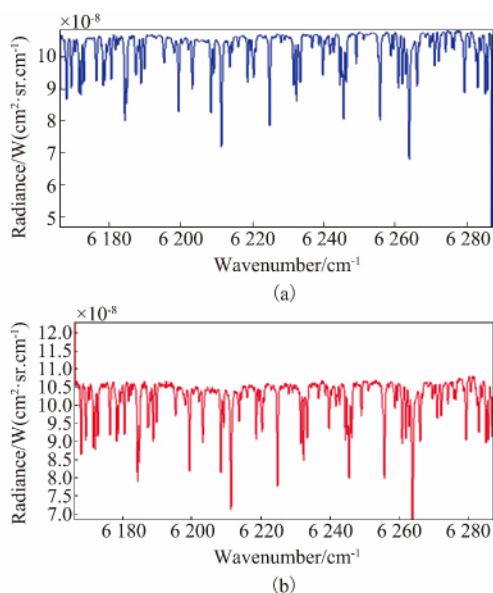


图6 (a) Kurucz 太阳光谱在 CO₂ 波长范围与光谱仪 ILS 迭代切趾卷积后的理论光谱 (b) 实测太阳光谱定标数据 CO₂ 波段谱

Fig.6 (a) The theoretical spectrum which made a convolution between the iterative apodization ILS and the kurucz solar spectrum in CO₂ wavelength range; (b) measured solar spectral calibration data for CO₂ band spectra

图7 中红色线部分是超高分辨率傅里叶光谱仪发射前在实验室使用单色激光测出的设备 ILS; 黑色线部分是超高分辨率傅里叶光谱仪在轨后,通过改变仪器狭缝模型,对原始 ILS 不断做切趾后得出调整后仪器的 ILS,该 ILS 与 kurucz 太阳光谱卷积后

得出的理论光谱与 OCO-2 实测的太阳定标光谱在对应波段是吻合的.

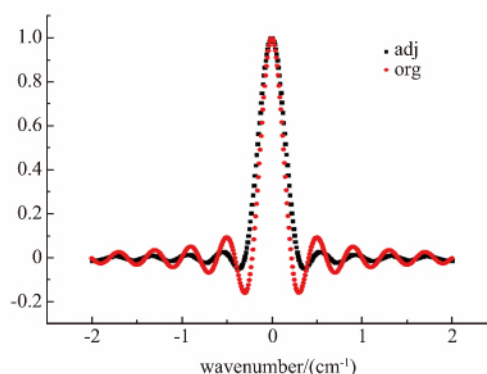


图7 傅里叶光谱仪发射前和在轨更新调整后的 ILS
Fig.7 The ILS of Fourier spectrometer prior to the emission and the adjusted ILS on-orbit

为了量化分析在轨超高分辨率傅里叶光谱仪更新调整后 ILS 对仪器输出光谱的影响,分别对原始 ILS 对应的理论谱、调整后 ILS 对应的理论谱、太阳定标实测谱进行特征峰比对.根据以上特征峰的选择原则,选择的 6 条特征线的具体信息,如图 8 所示.图 8 中, sim 0 是原始 ILS 对应的理论谱, sim adj 是调整后 ILS 对应的理论谱, mea 是太阳定标实测谱, dif 0 是原始 ILS 对应的残差曲线, dif adj 是调整后 ILS 对应的残差曲线,残差计算见公式(7).

该实验的傅里叶超高分辨率光谱仪在 CO₂ 波段范围内 ILS 更新前后模拟的理论光谱与实测光谱的对比信息如表 2 所示.从两者的残差值和差值度对比上看,更新的 ILS 对理论谱的影响较大,很好地校正因为仪器设备在轨运行环境等影响而产生的 ILS 变化.

表2 ILS 更新前后理论光谱与实测光谱对比信息
Table 2 Comparison of theoretical spectrum and measured spectra of ILS before and after updating

ID	中心波长 /cm ⁻¹	特征峰宽度 /cm ⁻¹	原始残差 ΔS _{org}	最终残差 ΔS _{adj}	差值度/%
1	6168.2	1.99	1.79E-09	2.67E-10	85.08
2	6199.5	4.89	3.68E-10	-1.90E-10	151.63
3	6211.5	3.29	7.77E-10	-5.59E-11	107.19
4	6224.9	5.49	2.40E-10	-6.72E-11	102.8
5	6255.8	5.99	2.48E-10	-2.39E-10	196.37
6	6279.4	3.19	3.24E-10	-1.32E-10	140.74

进一步评估在轨超高分辨率傅里叶光谱仪调整后的 ILS 精度效果,选择 OCO-2 在 2017 年度在

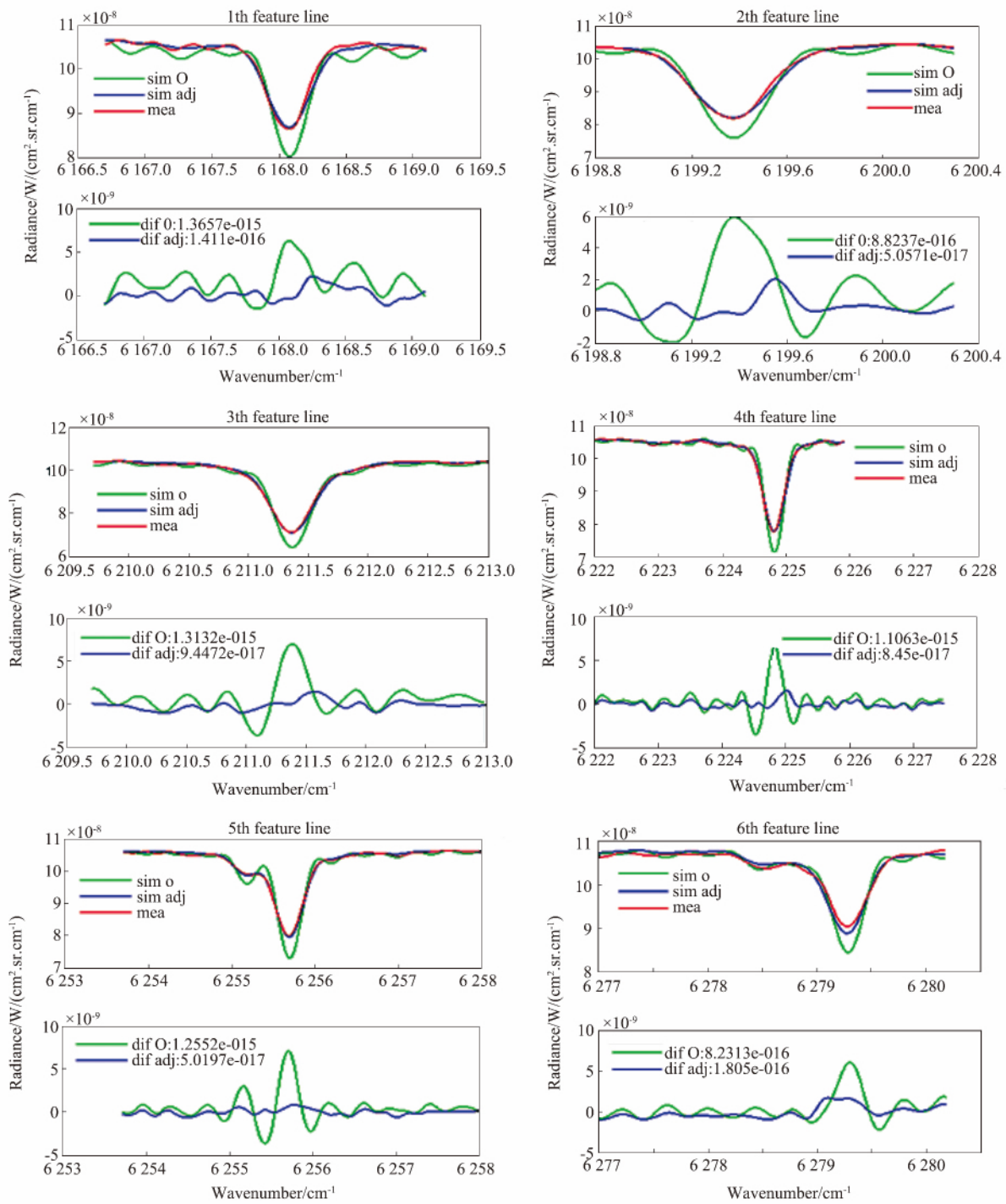


图8 6条特征峰的谱线特征和残差分布
 Fig.8 Spectral characteristics and residual distribution of six characteristic peaks

1.594 ~ 1.619 μm 波长范围内的实测太阳光谱定标数据作为实际验证光谱数据,如表3所示.利用公式(7)统计至少10条在不同时间段的实测太阳定标光谱,剔除特征峰不明显的部分,以免造成异常误差.最后利用公式(8)将统计的均值作为最终在轨超高分辨率傅里叶光谱仪更新调整后的 ILS 精度误

差,平均相对误差为 $-6\% \sim 8\%$.

4 结论

提出了一种星载在轨超高分辨率傅里叶光谱仪仪器线型函数的监督和更新方法.针对在轨超高分辨率光谱仪的 ILS 无法在地面实验室通过线宽较窄标准

表 3 多条实测光谱统计对比的平均相对误差
Table 3 The average relative error of statistical comparison of several measured spectra

ID	原始均残差 $\overline{\Delta S_{org}}$	最终均残差 $\overline{\Delta S_{adj}}$	平均相对误差/%
1	6.25E-10	6.54E-10	4.64
2	-3.18E-09	-3.37E-09	5.97
3	5.39E-11	5.81E-11	7.79
4	-1.50E-11	-1.41E-11	-6.00
5	3.35E-10	3.23E-10	-3.58
6	-7.39E-11	-6.95E-11	-5.95
7	3.94E-10	4.19E-10	6.35
8	2.48E-09	2.37E-09	-4.44
9	-4.62E-10	-4.77E-10	3.25
10	2.51E-10	2.57E-10	2.39
11	-3.04E-11	-2.98E-11	-1.97
12	1.69E-09	1.72E-09	1.78

备注: 实验中所有原始实测数据都是由 OCO-2 官方提供, 数据下载地址为: https://disc.gsfc.nasa.gov/datacollection/OCO2_L1B_Calibration_7r.html.

单色光源或具有吸收特性的标准气体进行测量, 利用在轨高分辨率光谱仪实测太阳光谱定标数据不受大气气溶胶影响且具有独立太阳弗朗和费线的特征, 提出了一种利用在轨高分辨率光谱仪实测太阳光谱定标数据和 Kurucz 太阳光谱模型残差迭代对比的方法, 演算出在轨高分辨率光谱仪 ILS 的变化, 解决了星载高分辨率光谱仪在整个在轨运行中 ILS 变化量的描述和监督, 进一步提高了在轨超高分辨率傅里叶光谱仪的测量精度. 此外, 随着星载高分辨率光谱仪载荷的不断发射升空以及星下多种实测光谱数据的不断丰富, 可对本文中用到多种实验参考数据进行实样更新和样本增加, 有针对性的对各个感兴趣波段进行精细处理, 从而进一步提高星载高分辨率光谱仪的 ILS 参数变化量的精度.

References

- [1] Cirilo Bernardo, David W. T. Griffith. Fourier transform spectrometer instrument line shape (ILS) retrieval by Fourier deconvolution [J]. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, **95** (2005): 141-150.
- [2] Frank Hase, Thomas Blumenstock. Analysis of the instrumental line shape of high-resolution Fourier transform IR spectrometers with gas cell measurements and new retrieval software [J]. *APPLIED OPTICS* 20, May 1999 Vol. 38, No. 15.
- [3] ZHANG Lei, YANG Min-zhu, ZOU Yao-pu, HAN Chang-pei. Instrument line shape of infrared Fourier transform spectrometer and its engineer applications [J]. *Optics and Precision Engineering* (张磊, 杨敏珠, 邹曜璞, 等. 红外傅里叶光谱仪的仪器线形函数及工程应用. *光学精密工程*), 2015, **12**(2): 45-49.
- [4] Harig Roland, Rusch Peter, Schäfer Klaus, Flores-Jardines, Edgar. Method for on-site determination of the in-

strument line shape of mobile remote sensing Fourier transform spectrometers [J]. *Proceedings of SPIE-The International Society for Optical Engineering*, vol 5979, 2005.

- [5] XIONG Wei, SHI Hai-liang, YU Neng-hai. Study on a New Method for Instrumental Line Shape Measurement of Spatial Heterodyne Interference Spectrometer [J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis* (熊伟, 施海亮, 俞能海. 空间外差干涉光谱仪仪器线型函数测量新方法研究. *光谱学与光谱分析*), 2015, **1**: 35: 267-271.
- [6] LIU K. N.. An Introduction to Atmospheric Radiation (Second Edition) (M). (郭彩丽, 周诗健(译) 大气辐射导论(第2版) 北京: 气象出版社). Beijing: China Meteorological Press 2002: 28-33.
- [7] Richard A. M. Lee, Christopher W. O' Dell, Debra Wunch, Coleen M. Roehl, et al.. Preflight Spectral Calibration of the Orbiting Carbon Observatory 2 [J]. *IEEE TRANSACTIONS ON GEOSCIENCE AND REMOTE SENSING*, 2017 VOL. 55, NO. 5.
- [8] WU Jin-Guang. Modern Fourier Transform Infrared Spectroscopy and Its Application (Volume 1) (M). Beijing: Science and Technology Literature Press (吴瑾光. 近代傅里叶变换红外光谱技术及应用(上卷) 北京: 科学技术文献出版社) 1994. **12**: 3-46.
- [9] Té Y. Jeseck P. Payan, S., et al. The Fourier transform spectrometer of the Université Pierre et Marie Curie QualAir platform [J]. *REVIEW OF SCIENTIFIC INSTRUMENTS*. 2010 **81**, 103102.
- [10] Kang Sun, Xiong Liu, Caroline R. Nowlan, et al. Characterization of the OCO-2 instrument line shape functions using on-orbit solar measurements [J]. *Atmospheric Measurement Techniques*. 2017, **10**, 939-953.
- [11] WANG Jun-Feng, DENG Hong-Ping, YI Wei-Ning et al. Application of Matching between Two Kinds of Non-coaxial Remote Sensing Equipment Based on Coastline Area [J]. *J. Infrared Millim. Waves* (汪俊峰, 邓宏平, 易维宁, 等. 基于海岸线区域的两类不同轴遥感设备之间匹配应用研究. *红外与毫米波学报*), 2017, **36**(4): 439-445.
- [12] Michele Meroni, Lorenzo Busetto, Luis Guanter, et al.. Characterization of fine resolution field spectrometers using solar Fraunhofer lines and atmospheric absorption features [J]. *APPLIED OPTICS*. 20 May 2010 **49**(15).
- [13] Frankenberg C., Pollock R., RAM Lee, et al. The Orbiting Carbon Observatory (OCO-2): Spectrometer performance evaluation using prelaunch direct sun measurements [J]. *Atmospheric Measurement Techniques*, 2015, **8**: 301-313.
- [14] François Châteauneuf, Serge Fortin, Henry Buijs, Marc-André Soucy. On-orbit performance of the ACE-FTS Instrument [J]. *Earth Observing Systems IX*. Proceedings of SPIE 2004, 5542.
- [15] Crisp D. Pollock, H. R., Rosenberg R., et al. The on-orbit performance of the Orbiting Carbon Observatory (OCO-2) instrument and its radiometrically calibrated products, *Atmospheric Measurement Techniques*. Discuss. (2016).
- [16] Eldering A., Randy Pollock, Richard Lee et al. Orbiting Carbon Observatory 2 Level 1B Theoretical Basis Document. [Online]. Available: http://disc.sci.gsfc.nasa.gov/OCO-2/documentation/oco-2-v7/OCO2_L1B_ATBD.V7.pdf, last access: 27 November 2015.