

新型超分辨干涉型光谱仪光谱定标研究

施海亮 方勇华 吴 军 熊 伟

(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)

摘要 针对综合光栅衍射与空间干涉于一体的新型空间外差光谱(SHS)技术开展了光谱定标技术研究。从 SHS 干涉机理入手,列举了 SHS 与传统超光谱仪器光谱定标的差异,开展了仪器线性函数、光谱分辨率和光谱范围等光谱特性数据的定标原理研究,设计可调谐激光-积分球光谱定标法,并且针对超光谱数据特点探讨了谱峰定位等数据处理算法。利用上述光谱定标方法对 CO₂ 空间外差光谱仪样机开展了光谱定标实验,并利用镁元素灯进行了定标精度验证,结果表明该光谱定标方法能够满足 SHS 光谱定标要求,样机实测光谱定标数据与理论设计值吻合。

关键词 遥感;空间外差光谱技术;光谱定标;超光谱;半峰全宽

中图分类号 O433.4 文献标识码 A doi: 10.3788/AOS201232.0528002

Study on Spectral Calibration of a Novel Interferometric Spectrometer with Super-Resolution Capability

Shi Hailiang Fang Yonghua Wu Jun Xiong Wei

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

Abstract In connection with the new spatial heterodyne spectroscopy (SHS), integrated grating diffraction and space interference, a study on the spectral calibration technology is done. From interference mechanism of SHS, the spectral calibration difference between SHS and traditional dispersive spectrometer is analyzed, study on ILS, spectral resolution, bandwidth calibration principle and method of SHS is done, and spectral calibration method of tunable laser with integrating sphere is designed and calibration data processing algorithm according to hyper-spectral data features is explored. Finally, using the above method CO₂ spatial heterodyne spectrometer is calibrated experimentally, and calibration accuracy is validated using magnesium lamp. The results show that spectral calibration method can meet the requirements of SHS spectral calibration, and are consistent with theoretical values of prototype.

Key words remote sensing; spatial heterodyne spectroscopy; spectral calibration; hyper-spectral; full width at half maximum

OCIS codes 300.1030; 070.4790; 280.1120

1 引 言

空间外差光谱技术(SHS)是 20 世纪 70 年代被提出的,到 90 年代因技术进步而快速发展起来的一种新型光谱分析技术^[1],它综合了光栅及无动镜干涉仪技术,同时具有干涉仪的高通量和光栅空间衍射特点,在一确定的中心波长范围内(如光栅闪耀波长),可以获得极高的光谱分辨率。目前,空间外差

光谱技术已成功应用于 OH 自由基^[2,3]、大气温室气体^[4~6]等大气微量成分探测研究。此外,在星际暗介质的观测研究方面也有相关文献报道^[7~9]。

由于空间外差光谱技术具有超光谱分光能力,并且在大气遥感探测方面应用广泛^[8],因此,针对此类型光谱仪的光谱定标系数数据显得至关重要。空间外差光谱仪分光原理区别于传统的色散型光谱仪

收稿日期:2011-10-13;收到修改稿日期:2011-12-20

基金项目:中科院合肥物质科学研究院青年人才专项(Y03RC21123)和公益性行业(气象)科研专项(GYHY2011060405-1)资助课题。

作者简介:施海亮(1983—),男,助理研究员,博士研究生,主要从事超光谱遥感探测技术研究。

E-mail: hlshi@aiofm.ac.cn

导师简介:方勇华(1966—),男,研究员,博士生导师,主要从事遥感光电信息技术方面的研究。E-mail: yhfang@aiofm.ac.cn

以及迈克耳孙干涉型光谱仪,综合了光栅衍射与空间调制干涉于一体,光谱定标原理与方法较特殊。目前,针对空间外差光谱技术定标研究的相关文献报道还较少,由于空间外差光谱仪获取的原始数据为干涉条纹,并非空间位置与波长的对应关系,光谱分辨率与仪器线性函数表征方式均不同。此外,该技术属于超光谱分光,对于光谱通道中心波长的定位以及波长响应函数的拟合等数据算法要求较高。因此,传统的定标方法以及数据处理算法已不能够满足光谱定标要求。本文概述了空间外差干涉机理,分析了干涉型超分辨光谱仪定标的特殊性,重点探讨了空间外差光谱仪的光谱定标原理以及定标方法,并且研究了相关的定标数据处理算法。最后,针对中国科学院安徽光学精密机械研究所研制的 CO₂ 空间外差光谱仪样机分别开展了两种不同方法的定标实验。

2 光谱定标理论与方法

光谱定标的目的就是要确定仪器的光谱响应与光谱分辨率,由于空间外差光谱仪与传统色散型光谱仪的分光原理不同,在光谱定标原理与方法均存在差异:

1) 色散型光谱仪中探测器像元直接对应某个波长响应,而空间外差光谱仪的像元则是多个波长综合响应;

2) 色散型光谱仪基本都是波长等间隔,而空间外差光谱仪是波数等间隔的。

此外,空间外差光谱仪具有超分辨率分光能力,因此,对定标光源的单色性、线宽及稳定性均具有较高的要求。

2.1 空间外差光谱技术简介

如图 1 所示,空间外差光谱仪采用两个光栅代替了迈克耳孙干涉仪中的两个平面反射镜;空间干涉条纹由探测器记录。具有一定立体角的光束经透镜 L₁ 准直后入射到分束器上,分束器将入射光分为强度相等的两束相干光:一束经由分束器反射到光栅 G1 上,经光栅 G1 衍射后反射回到分束器上;另一束透过分束器后入射到光栅 G2 上,并经光栅 G2 衍射后返回分束器,两空间分解开的光再次相遇并发生干涉。

干涉条纹产生的空间频率可以通过光栅方程进行推导:

$$\sigma[\sin \theta + \sin(\theta - \gamma)] = m/d, \quad (1)$$

式中 σ 为入射光的波数, m 为光栅衍射级(通常情况

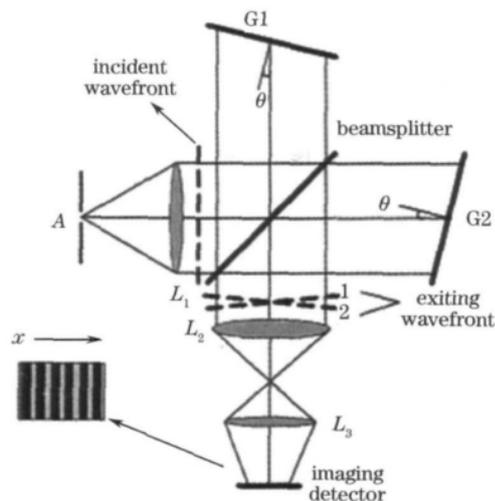


图 1 空间外差光谱仪原理图

Fig. 1 Schematic diagram of basic SHS configuration

下取 $m = 1$), θ 为光栅 Littrow 角, $1/d$ 为光栅的刻线密度。任意波数为 σ 的光束入射空间外差光谱仪后,在出射面上与 Littrow 波数 σ_0 的光束出射角相差角度 γ , 两光栅出射光波面相差角度为 2γ , 故波数为 σ 的两束光产生的干涉条纹空间频率为

$$f_x = 2\sigma \sin \gamma \approx 4(\sigma - \sigma_0) \tan \theta, \quad (2)$$

式中的右边项,是在假设 γ 很小时,由(1)式一阶展开获得。对光谱 $B(\sigma)$ 输入,探测器在 x 方向(光栅衍射方向)上获取的干涉图信号为

$$I(x) = \int_0^{\infty} B(\sigma) \{1 + \cos\{2\pi[4(\sigma - \sigma_0)x \tan \theta]\}\} d\sigma. \quad (3)$$

通过对干涉图进行傅里叶变换可以获得光谱,在此过程中,干涉图的获得不需要扫描部件,干涉条纹的零空间频率为 $\sigma = \sigma_0$ 。

2.2 光谱定标原理

对于 SHS 而言,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。令 $\sigma' = \sigma - \sigma_0$, 因此在计算复原光谱 $B_e(\sigma')$:

$$\begin{cases} B_e(\sigma') = \int_{-L}^{+L} I(x) \text{rect}\left(\frac{x}{2L}\right) \cos(2\pi\sigma'x) dx \\ \text{rect}\left(\frac{x}{2L}\right) = \begin{cases} 1, & |x| < L \\ 0, & |x| > L \end{cases} \end{cases} \quad (4)$$

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等于输入光谱与仪器函数的卷积。其中,仪器函数是矩形函数的傅里叶变换结果,SHS 的仪器函

数为

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

式中 $L = 4x_m \tan \theta$, x_m 为光栅有效截面尺寸。(5) 式表示单色光通过 SHS 仪后谱线形状发生的变化, 其半强度宽度为 $\delta\sigma = \sigma'_1 - \sigma' = 1/(8x_m \tan \theta)$ 。根据瑞利判据, 相邻两谱线之一的中央极大的中心正好与另一谱线的最小重合, 两谱线刚刚能被分辨开, 因此 SHS 仪的光谱分辨率的波数差为 $\delta\sigma = 1/(8x_m \tan \theta) = 1/(2L)$ 。若测量入射单色光的半峰全宽(FWHM)值就可以获取 SHS 的光谱分辨率值。

信息论的采样定理表明, 若干涉图采样间隔较大, 会导致不同周期性区间上的复原光谱互相叠加, 从而导致光谱畸变。为了不致在傅里叶变换运算中损失光谱信息或浪费计算时间, 空间外差光谱仪的采样间隔 Δx 需满足

$$\Delta x \leq \frac{1}{2(\sigma_{\max} - \sigma_0)} = \frac{1}{2\Delta\sigma}, \quad (6)$$

式中 $\Delta\sigma$ 为仪器光谱带宽。因此, SHS 干涉图采样间隔需满足小于或等于 2 倍光谱带宽的倒数。假设探测器光谱维像元个数为 N , 则整个干涉图的采样点为 N , SHS 的光程差 x 为 $(N/2)\Delta x$ 。因此, 在满足光谱不发生交叠的情况下, 仪器的光谱范围与探测器光谱维像元数的关系为

$$\Delta\sigma = \frac{N\delta\sigma}{2}. \quad (7)$$

2.3 光谱定标方法

针对空间外差光谱仪光谱定标特点, 设计基于可调谐激光-积分球光谱定标法, 通过把高功率、波长可调谐的激光导入积分球, 在积分球出口形成均匀、准朗伯性的单色面光源, 在光谱通道均匀选择扫描点进行干涉数据采集, 从而拟合获取各光谱通道的精确中心波长值以及仪器线性函数。该光谱定标方法首先使可调谐激光器的输出光通过激光功率稳定器, 把激光功率稳定在设定点。用玻璃平板把一小部分光束导入波长计测量可调谐激光的波长。为了使积分球光源出射光场具有良好的朗伯特性, 设计内部旋转漫射板方法消散斑, 定标装置布局如图 2 所示。

2.4 光谱定标数据处理

针对空间外差光谱技术的超光谱特性, 光谱定标数据处理主要涉及到峰值点在亚像元尺度上的定位以及如何利用数组峰值波数进行样机光谱响应的回归分析。由于经光谱复原后的单色光峰值点不一

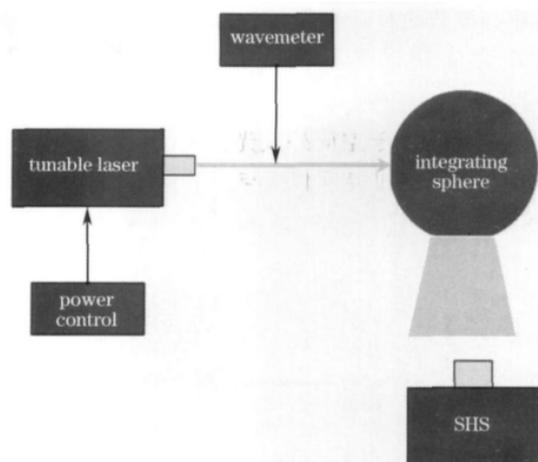


图 2 基于可调谐激光-积分球光谱定标系统

Fig. 2 Spectral calibration system based on tunable laser and integrating sphere

定恰好落在某个采样点的中心位置, 尤其对于空间外差光谱仪而言, 其具有超分辨光谱分辨能力, 因此, 峰值点波数的定位精度对光谱定标结果响应较大。为了将谱峰定位的精度提高到亚像元级, 可以采用数值方法来进行像元细分。单色光的峰形一般符合高斯分布, 因此, 可以采用高斯函数对峰进行拟合, 以拟合出高斯函数顶点作为的峰值点。选取峰值点 i 附近的两点: $i-1, i+1$, 采用下式对峰值进行高斯拟合:

$$i_{\text{Gauss}} = i - \frac{\ln S_{i+1} - \ln S_{i-1}}{2(\ln S_{i-1} - 2\ln S_i + \ln S_{i+1})}, \quad (8)$$

式中 S_{i-1} 、 S_i 和 S_{i+1} 分别是 $i-1$ 、 i 和 $i+1$ 像元所对应单色谱线的幅值。在各峰值点与波数进行匹配后, 需开展样机光谱响应的回归分析。根据峰值数目, 建立多项式拟合方程, 获取多项式系数, 从而解析出其余采样点对应的波数值。

3 实验与结果分析

目前, 中国科学院安徽光学精密机械研究所已成功研制了空间外差光谱仪样机, 并成功应用于大气主要温室气体 (CO_2 、 CH_4 、 CO 、 H_2O) 的探测应用中。下面针对 CO_2 空间外差光谱仪样机开展可调谐激光-积分球光谱定标法实验, 样机的理论设计参数为: 光谱范围为 $6310 \sim 6375 \text{ cm}^{-1}$; 光谱分辨率为 0.4 cm^{-1} ; 探测器在 $30 \mu\text{m}$ 处参数为 320×256 。

实验中, 在样机中心波数附近分别按一定均匀波数间隔可调谐激光输出, 采集单色光干涉条纹, 开展数据预处理(干涉图去噪、基线校正和相位校正等)^[10~12]及光谱复原获取单色光光谱图, 建立干涉

频率与波数的对应关系。按照 2.4 节光谱定标数据处理算法获取样机的光谱范围为 6310.143 ~

6375.324 cm^{-1} ; 光谱分辨率为 0.41 cm^{-1} , 光谱定标数据如图 3 所示。

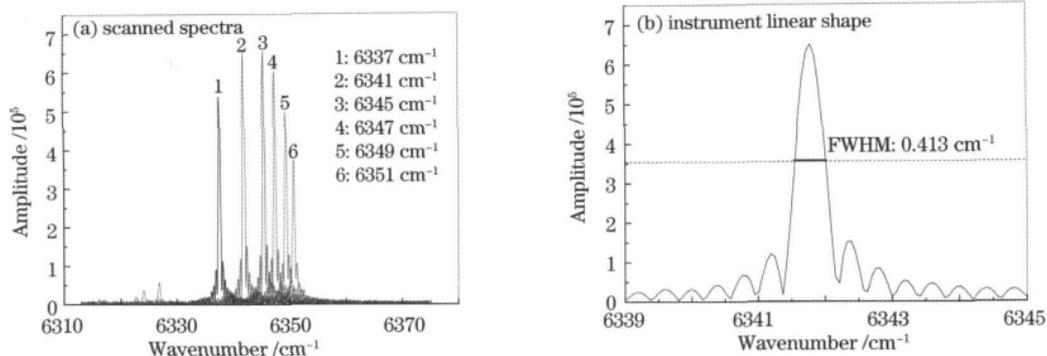


图 3 可调谐激光-积分球光谱定标实验结果

Fig. 3 Experimental results of spectral calibration based on tunable laser and integrating sphere

样机实测分辨率值约高于理论设计值可能是由于样机装调误差所造成的, 光谱分辨率值的提高同时也导致了光谱范围的扩大, 符合空间外差光谱仪的光谱分光原理。为了验证定标结果的精度, 采用元素光谱灯进行光谱定标验证, 首先查询 NIST 数据库提供的元素发射谱线数据, 在 CO_2 空间外差光谱仪光谱范围内只有镁元素灯能够满足验证定标要求, 其实测谱线如图 4 所示, 与理论发射谱线对比验证结果如表 1 所示。

光谱定标要求。

4 结 论

空间外差光谱仪由于其分光原理的特殊性, 与传统的色散型光谱仪及迈克尔孙光谱仪定标原理及方法^[13~15]存在很大差异。本文从空间外差光谱干涉机理出发, 进行了空间外差光谱定标原理研究, 分析了决定仪器光谱响应及光谱分辨率的因素, 提出了可调谐激光-积分球光谱定标法。针对空间外差光谱技术的超光谱数据特点, 开展了峰值定位及光谱响应曲线拟合等光谱数据算法研究。最后, 针对中国科学院安徽光学精密机械研究所研制的 CO_2 空间外差光谱仪样机开展了光谱定标实验, 并利用元素等进行了定标精度验证, 结果表明光谱定标数据能够满足空间外差光谱仪光谱定标要求。

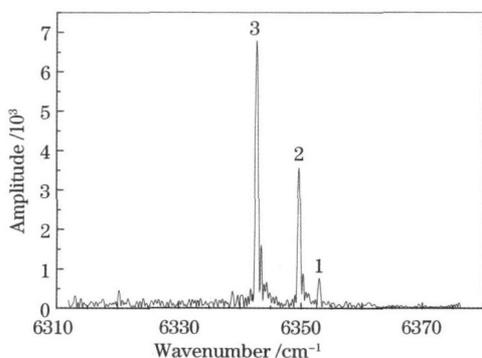


图 4 镁元素光谱灯实测光谱数据

Fig. 4 Measured spectrum of magnesium lamp

表 1 镁元素光谱灯验证数据

Table 1 Validating data of magnesium spectral lamp

Peak number	Theoretical wavenumber / cm^{-1}	Measured wavenumber / cm^{-1}	Error / cm^{-1}
1	6352.955	6352.928	0.027
2	6349.614	6349.586	0.028
3	6342.828	6342.802	0.026

验证结果表明, 可调谐激光-积分球光谱定标法获取的各光谱通道中心波数值精度较高, 能够满足

参 考 文 献

- 1 J. Harlander. Spatial Heterodyne Spectroscopy: Interferometric Performance at Any Wavelength without Scanning[D]. Madison: University of Wisconsin-Madison, 1991
- 2 J. Harlander, F. L. Roesler, J. G. Cardon *et al.*. SHIMMER: a spatial heterodyne spectrometer for remote sensing of Earth's middle atmosphere[J]. *Appl. Opt.*, 2002, **41**(7): 1343~1352
- 3 J. Harlander, F. L. Roesler, C. R. Englert *et al.*. Robust monolithic ultraviolet interferometer for the SHIMMER instrument on STPSat-1 [J]. *Appl. Opt.*, 2003, **42**(15): 2829~2834
- 4 Xiong Wei, Shi Hailiang, Wang Yuanjun *et al.*. Study on NIR spatial heterodyne spectrometer and detection of water vapor[J]. *Acta Optica Sinica*, 2010, **30**(5): 1511~1515
- 5 熊 伟, 施海亮, 汪元钧 等. 近红外空间外差光谱仪及水汽探测研究[J]. *光学学报*, 2010, **30**(5): 1511~1515
- 6 Wu Jun, Wang Xianhua, Fang Yonghua *et al.*. Ability analysis of spatial heterodyne spectrometer in atmospheric CO_2 detection [J]. *Acta Optica Sinica*, 2011, **31**(1): 9~15
- 7 吴 军, 王先华, 方勇华 等. 空间外差光谱技术应用于大气二氧化碳探测的能力分析[J]. *光学学报*, 2011, **31**(1): 9~15

- 6 Yunlong Lin, G. Shepherd, B. Solheim *et al.*. Introduction to spatial heterodyne observations of water (SHOW) project and its instrument development[C]. Beijing: ITSC-IV, 2005
- 7 S. Watchorn, F. L. Roesler, J. Harlander *et al.*. Development of the spatial heterodyne spectrometer for VUV remote sensing of the interstellar medium[C]. *SPIE*, 2001, **4498**: 284~295
- 8 J. Harlander, F. L. Roesler, R. J. Reynolds *et al.*. A differential field-widened spatial heterodyne spectrometer for investigations at high spectral resolution of the diffuse far-ultraviolet 1548-nm emission line from the interstellar medium [C]. *SPIE*, 1993, **2006**: 139~148
- 9 F. L. Roesler, J. Harlander. Spatial heterodyne spectroscopy for atmospheric remote sensing [C]. *SPIE*, 1999, **3756**: 337~345
- 10 J. M. Harlander, H. T. Tran, F. L. Roesler *et al.*. Field-widened spatial heterodyne spectroscopy: correcting for optical defects and new vacuum ultraviolet performance tests[C]. *SPIE*, 1994, **2280**: 310~319
- 11 C. R. Englert, J. M. Harlander, J. G. Cardon *et al.*. Correction of phase distortion in spatial heterodyne spectroscopy [J]. *Appl. Opt.*, 2004, **43**(36): 6680~6687
- 12 Lan Tiange, Xiong Wei, Fang Yonghua *et al.*. Research on preprocessing algorithm for infrared spectral signals of biological aerosols[J]. *Acta Optica Sinica*, 2010, **30**(9): 2742~2747
兰天鸽, 熊伟, 方勇华等. 生物气溶胶红外光谱信号预处理算法研究[J]. *光学学报*, 2010, **30**(9): 2742~2747
- 13 G. Vane, T. G. Chrien, E. A. Miller *et al.*. Spectral radiometric calibration of the airborne visible/infrared imaging spectrometer[C]. *SPIE*, 1987, **834**: 91~101
- 14 A. Villemaire, M. Chamberland. Radiometric calibration of FT-IR remote sensing instrument[C]. *SPIE*, 1997, **3082**: 83~91
- 15 A. D. Meigs, R. Gsellar. Measured performance of an airborne Fourier transform hyper-spectral imager[C]. *SPIE*, 1996, **2819**: 291~299

栏目编辑：何卓铭