

基于中阶梯光栅的波长定标方法研究

毛靖华^{1,2}, 王咏梅^{*1}, 石恩涛¹, 张仲谋¹, 江芳¹

(1. 中国科学院 国家空间科学中心, 北京 100190;

2. 中国科学院大学, 北京 100190)

摘要: 波长定标是仪器遥感数据量化的前提和基础。针对星载大气微量成分探测仪视场大、波长宽、空间分辨率和波长分辨率高的特点,建立了基于中阶梯衍射光栅的波长定标装置。中阶梯光栅因其较少的线密度和较大的闪耀角工作在较高的闪耀级次,光谱范围宽且具有较高的分辨率,可在工作波段内一次性输出多条分布较为均匀的谱线,克服了传统定标方式的缺点,提高了定标精度。本文首先介绍了波长定标装置的工作原理,接着利用该装置对高光谱大气微量成份探测仪进行波长定标,通过寻峰和回归分析给出载荷的波长定标方程,并利用标准汞灯谱线对定标结果进行检验。结果表明:高光谱大气微量成份探测仪的像元和波长近似满足线性分布规律,定标不确定度为 0.025 8 nm,汞灯特征谱线的定标值和标准值偏差最大不超过 0.043 5 nm,证明了定标结果的准确性。

关键词: 波长定标; 中阶梯光栅; 星载大气微量成分探测仪; 光栅衍射方程

中图分类号: TG502.33; TH744 文献标识码: A doi:10.3788/CO.20171003.0376

Spectral calibration based on echelle

MAO Jing-hua^{1,2}, WANG Yong-mei^{*2}, SHI En-tao², ZHAGN Zhong-mou², JIANG Fang¹

(1. National Space Science Center, Beijing 100190, China;

2. University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China)

* Corresponding author, E-mail: wym@nssc.ac.cn

Abstract: Spectral calibration is the premise of remote sensing data inversion. Considering the advantages of a large field, wide wavelength range, high spatial and spectral resolution, the spectral calibration equipment based on echelle is built. Working at a higher blazed order with a large blaze angle, the echelle is characterized by a wide spectrum range and high spectral resolution. It can output multiple spectral lines with uniform distribution in the detection band, which overcomes the shortcomings of the traditional calibration methods and improves the calibration accuracy. In our study, the working principle of the spectral calibration equipment is given first. Then using this equipment, the spectral calibration equation of the hyperspectral imaging spectrometer is given accurately by peak-searching and regression analysis. Finally, the calibration results are verified by using the unique characteristics of mercury spectral lines. The experiment results show that there is an approximate linear distribution between pixel and wavelength. The uncertainty of the wavelength calibration is

收稿日期:2017-01-12;修订日期:2017-03-28

基金项目:国家自然科学基金资助项目(No. 41005013)

Supported by National Natural Science Foundation of China(No. 41005013)

0.025 8 nm, and the maximum deviation of calibration values and standard deviation values of mercury spectral lines is less than 0.043 5 nm, which can prove the accuracy of the calibration results.

Key words: spectral calibration; echelle grating; hyperspectral imaging spectrometer; grating equation

1 引言

为满足我国环境污染监测的迫切需求,研制了风云卫星高光谱大气微量成份探测仪。高光谱大气微量成份探测仪是以差分光学吸收光谱法 DOAS^[1-2] (Differential Optical Absorption Spectroscopy) 为探测原理的成像光谱仪。高光谱大气微量成份探测仪探测光谱范围 375 ~ 500 nm, 总视场 112°, 光谱分辨率约 0.4 ~ 0.6 nm, 通过在卫星上探测大气后向散射辐射, 利用 DOAS 算法解析微量气体成分的分布和变化, 实现我国对大气微量成分全球探测。

定标是高光谱大气微量成份探测仪精确量化应用的前提和基础, 其中一项主要的定标是波长定标^[2]。波长定标可以确定遥感仪器光谱特性指标, 进而为提高仪器本身可靠性提供依据。因此, 为了保证高光谱大气微量成份探测仪能够高精度反演微量气体含量及变化, 发射前需要对仪器进行光谱定标。传统的波长定标利用标准谱线灯^[3-8] 或者可调激光器作为光源。谱线灯在遥感仪器工作范围内只能提供有限条且分布不均匀的谱线, 对高分辨率光谱仪波长定标精度影响较大; 可调激光器一次只能对一个波长的位置进行定标, 定标高光谱仪器时需要定标多条谱线, 花费时间长且不易操作, 受扫描仪器的影响, 每次引入的误差不一样, 影响波长定标精度。

针对大气微量成分探测仪视场大、探测波段宽、空间分辨率和光谱分辨率高的特点, 研究了相应的波长定标方法, 研制了一套基于中阶梯衍射光栅的波长定标实验装置, 实现了仪器全视场精确波长定标, 分析了波长定标不确定度, 并利用汞灯谱线对定标结果进行了检验。中阶梯光栅因其较少的线密度和较大的闪耀角工作在较高的闪耀级次, 光谱范围宽且具有较高的分辨率, 基于中阶梯衍射光栅的波长定标装置可以在工作波段内一

次性输出多条分布较为均匀的高分辨率谱线, 克服了传统定标方式的缺点, 提高了定标精度, 为后续波长定标提供了经验。本文首先介绍了基于中阶梯光栅衍射的定标装置的工作原理, 然后对大气微量成份探测仪进行波长定标, 最后对定标结果进行分析和评估。

2 波长定标装置的工作原理

2.1 波长定标装置的工作原理及光路图

根据光栅衍射方程:

$$\sin\alpha + \sin\beta = m\lambda/d, \quad (1)$$

式中, α 为光线入射角, β 为衍射角, m 为衍射级次, λ 为中心波长, d 为光栅常数。

推导出光栅倒线色散公式:

$$\frac{d\lambda}{dl} = \frac{10^6 \cos\beta}{mnf}, \quad (2)$$

式中, n 为光栅刻线密度, dl 为出射狭缝宽度, f 为出射焦距长度。对式(2)进行变形可得如下式:

$$d\lambda = \frac{10^6 \cos\beta}{mnf} dl, \quad (3)$$

式(3)为狭缝宽度对应的光谱增宽, 即不同波长对应的光谱分辨率。

为满足大气微量成份探测仪波长定标需求, 要求定标仪器的光谱分辨率为待测仪器光谱分辨率的五分之一到十分之一, 波长定标装置结构图如图 1 所示^[9-11]。

图 1 为基于中阶梯衍射光栅的定标装置的光路图。它主要由前置聚光系统、光谱仪和后置准直系统三个部分组成。前置聚光系统由光源、反射镜 M1 和 M2 构成, 光谱仪系统由反射镜 M3、M4 与阶梯光栅组成, 后置准直系统由反射镜 M5、M6 构成。前置光学系统将光源能量聚焦在入射狭缝处, 通过光谱仪系统分光并成像至出射狭缝, 最后经过后置准直系统准直后出射。

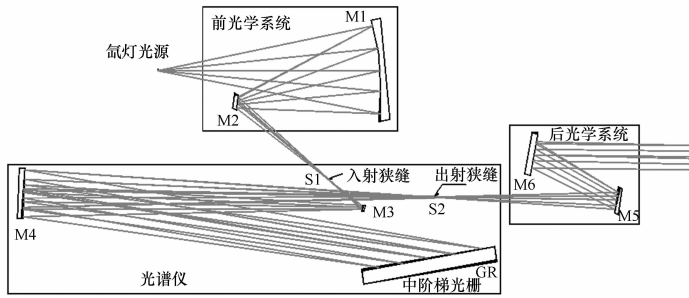


图 1 波长定标装置结构图

Fig. 1 Structural diagram of spectral calibration equipment

基于中阶梯衍射光栅的定标装置光栅刻线为 79.01 grooves/mm, 衍射角为 71.5° , 根据式(2), 当准直镜焦距 $f = 615.894$ mm 时, 对 370 ~ 505 nm 光谱范围, 狭缝函数测量仪的光谱分辨率为 0.039 4 ~ 0.057 8 nm, 可满足定标要求。

2.2 波长定标光源的选择

为保证定标装置对 375 ~ 500 nm 光谱范围的全覆盖, 定标光源选用日本浜松公司生产的 L2479 型超静氙灯, 该光源具有输出功率高、光能分布稳定等特点, 光源主要辐射特性见表 1。

表 1 L2479 的主要辐射特性

Tab. 1 Radiation characteristic of L2479

型号	功率/W	弧长/mm	光强 $\mu\text{W}/\text{cm}^2 \cdot \text{nm}@50$ cm λ 440 nm
L2479	300	3.0	5.06

2.3 定标装置的输出谱线及分辨率

利用 Andor 公司生产的型号为 SR-2234 的光

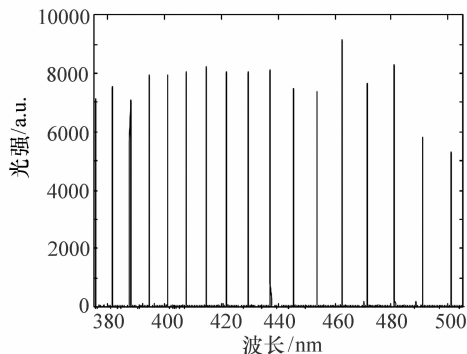


图 2 波长定标装置输出的光谱图

Fig. 2 Spectrum of the calibration equipment

谱仪对定标装置输出谱线进行测量, SR-2234 光谱仪光谱经汞灯校准, 采用 2400 刻线光栅, 光谱分辨率为 0.02 nm。利用 SR-2234 光谱仪测量中阶梯光栅定标装置, 得到光谱图如图 2, 输出谱线的中心波长及分辨率如表 2 所示。

表 2 定标装置的中心波长及分辨率

Tab. 2 Central wavelength and spectral resolution of the equipment

衍射级次	中心波长/nm	光谱分辨率/nm
64	375.798 38	0.045 321 30
63	381.749 51	0.048 817 80
62	387.895 80	0.049 600 35
61	394.273 75	0.049 250 70
60	400.854 40	0.049 650 30
59	407.637 76	0.049 716 90
58	414.654 17	0.049 567 05
57	421.945 58	0.050 366 25
56	429.456 20	0.053 846 10
55	437.251 77	0.050 932 35
54	445.359 62	0.055 927 35
53	453.745 17	0.053 246 70
52	462.462 39	0.057 459 15
51	471.542 92	0.056 809 80
50	480.961 76	0.056 443 50
49	490.780 22	0.057 559 05
48	500.994 20	0.058 424 85

由表 2 可以看出, 中阶梯衍射光栅定标装置可以在 375 ~ 500 nm 同时输出多条高分辨率谱线。利用该特点进行对高光谱分辨率成像光谱仪进行波长定标, 可以保证谱线位置计算精度, 实现高精度的波长定标。

3 实验的过程及结果

3.1 实验的过程

星载大气微量成分探测仪的波长定标任务是确定出每个像元对应的工作波长,从而确定出仪器的探测波段和光谱分辨能力。由于该载荷大视场探测的特点,会出现谱线弯曲的现象,因此,为了更准确的波长定标,需要标定全视场每个像元的工作中心波长,确定出波长随光谱维和空间维的分布矩阵,实验装置如图3所示,由光源、中阶梯衍射光栅定标装置、漫透射板、高精度转台、高光谱大气微量成份探测仪和计算机组成。

星载大气微量成分探测仪总视场为 $112^\circ \times 0.8^\circ$,氙灯发出的光经过中阶梯衍射光栅定标装置准直后照射到漫透射板上,可覆盖约 17° 视场,通过旋转转台,可以对不同空间维的像元进行定标,多次旋转,完成全视场的波长定标。

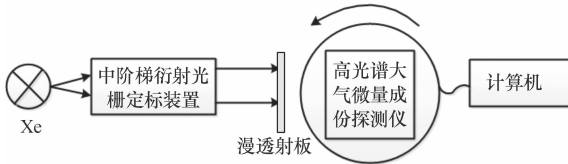


图3 实验装置示意图

Fig. 3 Schematic diagram of spectral calibration experiment

点亮光源,待氙灯稳定 10 min 后开始测量,通过调整仪器积分时间和增益以保证获得较高的信噪比。记录 CCD 感光区域光谱数据 $S_{im} - S_{jn}$, i, j 代表空间维行号, m, n 代表光谱维列号。每隔 10° 转动转台,记录下光谱数据 $S_{im} - S_{jn}$,重复该过程,记录下全视场的光谱数据。

3.2 数据的处理与分析

仪器的波长定标过程主要包括寻峰和最小二乘法回归。对于每条光谱,首先通过寻峰处理找出特种谱线对应的像元,然后采用最小二乘法将波长和像元进行回归分析,得到仪器的波长定标方程,最后根据定标方程,可以计算出探测通道的光谱范围。

将星载大气微量成分探测仪的光谱数据扣除暗计数,选取信噪比较高的几条谱线,由于高斯函

数可以较好的表征光谱响应,因此采用 Gauss 拟合^[12-15]的方法寻峰,拟合函数如式(4):

$$S(X) = A_0 e^{-\frac{X-x_0}{\sigma^2}}, \quad (4)$$

式中, $S(X)$ 代表大气微量成分探测仪的仪器计数, X 为像元序号, A_0 为拟合系数, x_0 为谱线中心峰对应像元号, σ 为谱线半高宽。图4为大气微量成分探测仪在中心波长 462.46 nm 的处的像元和响应的对应关系图。图中实心圆点为每个像元对应的计数,曲线为拟合曲线,通过拟合,确定出峰中心对应像元号为 490.959,即该像元号和波长 462.46 nm 对应。

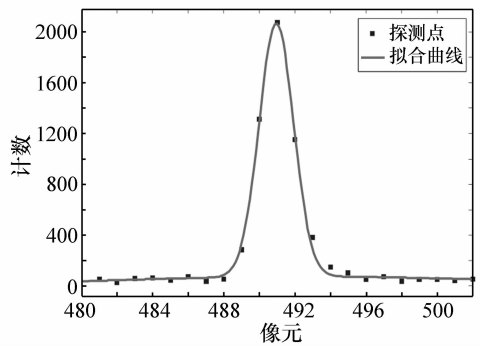


图4 462.46 nm 的像元和响应关系图

Fig. 4 Pixels signal at the wavelength of 462.46 nm

利用寻峰处理,可以得出中心波长和像元的对应关系 $[X_{im}, \lambda_{im}]$, 其中 i 为行号, m 为列号, λ_{im} 为中心波长, X_{im} 为中心波长对应的像元号。由于光谱在 CCD 上近似成线性排列,所以采用最小二乘法对数据组进行线性回归分析,回归方程如式(5)和式(6):

$$\lambda_{im}(X_{im}) = \alpha X_{im} + b, \quad (5)$$

$$\begin{cases} a = \frac{\sum_{m=1}^n (X_{im} - \bar{X}_i)(\lambda_{im} - \bar{\lambda}_i)}{\sum_{m=1}^n (X_{im} - \bar{X}_i)^2} \\ b = \bar{\lambda}_i - a\bar{X}_i \end{cases}, \quad (6)$$

图5为星载大气微量成分探测仪在中心视场的回归结果,图中实心圆点代表中阶梯衍射光栅定标装置的输出波长,直线为定标方程。定标方程如式(7):

$$\lambda_{im}(X_{im}) = -0.17167X_{im} + 546.7397. \quad (7)$$

回归系数 $R^2 = 0.9999$, 说明波长和像元近似

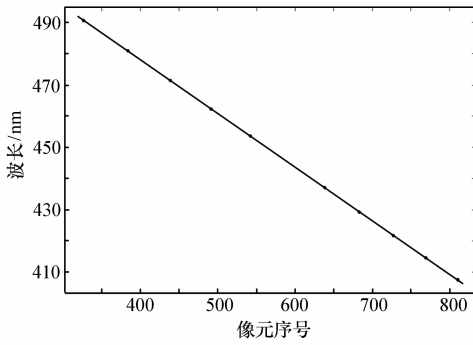


图 5 星载大气微量成分探测仪在中心视场的回归直线

Fig. 5 Regression line in center area of FOV obtained by hyperspectral imaging spectrometer

满足线性关系,图 6 为回归残差图。

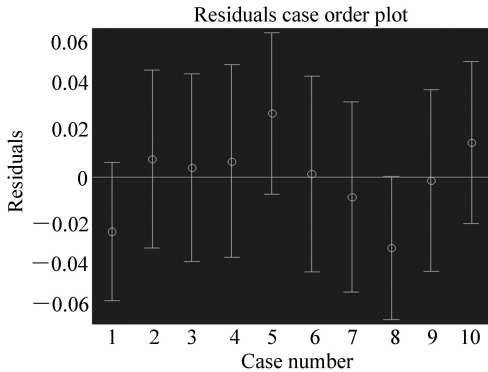


图 6 回归直线残差图

Fig. 6 Residual plot of the regression line

横坐标代表参与回归的点的序号,纵坐标代表残差。从图中可以看出,参与回归的点置信区间均包括零点,没有奇异点,最大偏差不超过 0.04 nm,再次说明了像元与波长的关系较好的满足回归直线,根据回归方程计算出探测波段为 370 ~ 510 nm,满足 375 ~ 500 nm 的设计要求。

3.3 不确定度分析

星载大气微量成分探测仪的波长定标不确定度主要包括定标光源的不稳定性、寻峰误差、回归分析误差。

波长定标装置的输出光谱不确定度取决于 SR-2234 单色仪测量不确定度,SR-2234 单色仪的测量不确定度为 0.01 nm;谱峰定位的不确定度主要由大气微量成份探测仪的稳定性以及采用算法等引起,不确定度优于 0.1 个像元;回归分析的

不确定度由残差标准差来表征。误差传递公式为:

$$\sigma = \sqrt{\sigma_1^2 + \sigma_2^2 + \sigma_3^2}, \quad (8)$$

式中, σ 为大气微量成分探测仪总的波长定标不确定度, σ_1 为波长定标装置的输出光谱不确定度, σ_2 为谱峰定位不确定度, σ_3 为回归分析不确定度。通过误差传递公式可以分析出大气微量成分探测仪中心视场的波长定标不确定度如表 3 所示。

表 3 波长定标不确定度分析

Tab. 3 Uncertainty analysis of spectral calibration

σ_1/nm	σ_2/nm	σ_3/nm	σ/nm
0.01	0.017 2	0.016 5	0.025 84

3.4 定标结果的检验

利用标准汞灯谱线对波长定标结果进行检验,将标准汞灯经光路准直后通过漫透射板并照射至大气微量成分探测仪,检验装置如图 7 所示。

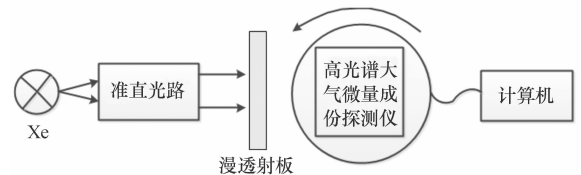


图 7 校验装置图

Fig. 7 Schematic diagram of calibration equipment

光谱的波长信息由定标方程获取,通过对比汞灯特征谱线的定标值和标准值来验证星载大气微量成分探测仪波长定标的准确性。表 4 给出了星载大气微量成分探测仪在中心视场定标波长和标准波长的对比结果。

表 4 定标波长与标准波长的对比

Tab. 4 Comparison of the calculated value and standard values

标准波长/nm	定标波长/nm	偏差绝对值/nm
435.833 5	435.794 8	0.038 7
407.783 7	407.774 9	0.008 7
404.656 5	404.613 0	0.043 5

对比结果表明,峰位偏差绝对值最大不超过0.043 5 nm,说明了波长定标方程的准确性。

4 结 论

本文研究了星载大气微量成分探测仪的波长定标技术。针对载荷大视场、宽探测波段的特性,确定了大气微量成分探测仪波长定标方案,选取超静氙灯作为定标光源,构建了基于中阶梯衍射光栅的波长定标装置,对仪器进行了波长定标。波长定标装置在375~500 nm范围内一次性输出

多条分布较为均匀的高分辨率谱线,相比传统波长定标方式,不仅可以提高定标效率,而且还能提高波长定标精度,通过数据处理后得到波长定标方程,并通过标准汞灯谱线对定标结果进行检验。结果表明:大气微量成分探测仪的像元与波长的关系较好的符合回归直线,回归系数 $R^2 = 0.999\ 9$,探测范围为370~510 nm,满足设计要求。通过对定标不确定度的分析,定标不确定度为0.025 8 nm,为后续星载大视场成像光谱仪的波长定标工作积累了经验。

参考文献:

- [1] 周斌,刘文清,齐峰,等. 差分吸收光谱法测量大气污染中数据处理方法研究[J]. 物理学报,2001,9(50):1818-1823.
ZHOU B, LIU W Q, QI F, *et al.*. Study of concentration method in differential optical absorption spectroscopy for measuring air pollutants[J]. *Acta Physica Sinica*, 2001, 9(50):1818-1823. (in Chinese)
- [2] 郑玉权. 温室气体遥感探测仪器发展现状[J]. 中国光学, 2011, 4(6):546-561.
ZHENG Y Q. Development status of remote sensing Instruments for greenhouse gases[J]. *Chinese Optics*, 2011, 4(6):546-561. (in Chinese)
- [3] 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,2013,3(21):567-573.
ZHAO M J, SI F Q, JIANG Y, *et al.*. In-lab calibration of space-borne differential optical absorption spectrometer[J]. *Opt. Precision Eng.*, 2013, 3(21):567-573. (in Chinese)
- [4] 郑玉权. 超光谱成像仪的精细光谱定标[J]. 光学精密工程,2010,18(11):2347-2354.
ZHENG Y Q. Precise spectral calibration for hyperspectral imager[J]. *Opt. Precision Eng.*, 2010, 18(11):2347-2354. (in Chinese)
- [5] 刘倩倩,郑玉权. 超高分辨率光谱定标技术发展概况[J]. 中国光学,2012,5(6):566-577.
LIU Q Q, ZHENG Y Q. Development of spectral calibration technologies with ultra-high resolutions[J]. *Chinese Optics*, 2012, 5(6):566-577. (in Chinese)
- [6] 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,2012,11(32):2881-2885.
ZHOU H J, LIU W Q, SI F Q, *et al.*. Spectral calibration for space-borne differential optical absorption spectrometer[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2012, 11(32):2881-2885. (in Chinese)
- [7] 李聪,王咏梅. 用PtNe灯对大气紫外成像光谱仪进行光谱定标[J]. 光谱学与光谱分析,2010,30(12):3302-3305.
LI C, WANG Y M. Spectral calibration of the atmosphere ultraviolet imaging spectrograph using a PtNe lamp[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2010, 30(12):3302-3305. (in Chinese)
- [8] 裴舒. 成像光谱仪光谱定标[J]. 光机电信息,2011,28(11):48-51.
PEI SH. Spectral calibration of imaging spectrometer[J]. *OME Information*, 2011, 28(11):48-51. (in Chinese)
- [9] DOBBER M R, DIRKSEN R J, LEVELT P F, *et al.*. Ozone monitoring instrument calibration[J]. *IEEE Transactions on Geoscience & Remote Sensing*, 2006, 44(5):1209-1238.
- [10] DIRKSEN R, DOBBER M, VOORS R, *et al.*. Prelaunch characterization of the ozone monitoring instrument transfer function in the spectral domain[J]. *Appl. Opt.*, 2006, 45(17):3972-3981.
- [11] DIRKSEN R, DOBBER M, LEVELT P, *et al.*. The on-ground calibration of the ozone monitoring instrument from a scientific point of view[J]. *SPIE*, 2004, 5234:400-410.

- [12] ZHANG R, BAYANHESHIG, YIN L, LI X T, *et al.*. Wavelength calibration model for prism-type echelle spectrometer by reversely solving prism's refractive index in real time[J]. *Appl. Opt.*, 2016, 55:4153-4158.
- [13] KIM J H, HAN J H, JEONG J CH. Accurate wavelength calibration method for spectrometer using low coherence interferometry[J]. *J. Lightwave Technol.*, 2015, 33:3413-3418.
- [14] PEARLMAN A, POGORZALA D, CAO CH Y. GOES-R advanced baseline imager: spectral response functions and radiometric biases with the NPP Visible Infrared Imaging radiometer Suite evaluated for desert calibration sites[J]. *Appl. Opt.*, 2013, 52:7660-7668.
- [15] WANG K, DING ZH H. Spectral calibration in spectral domain optical coherence tomography[J]. *Chin. Opt. Lett.*, 2008, 6:902-904.

作者简介:



毛靖华(1990—),女,河南驻马店人,博士,主要从事星载光学仪器地面定标方面的研究。E-mail: renne1230@126.com



王咏梅(1967—),女,贵州人,博士,研究员,主要从事中高层大气、电离层光学遥感仪器研制和数据应用方面的研究。E-mail: wym@nssc.ac.cn

《发光学报》

—EI 核心期刊(物理学类;无线电电子学、电信技术类)

《发光学报》是中国物理学会发光分会与中国科学院长春光学精密机械与物理研究所共同主办的中国物理学会发光分会的学术会刊。该刊是以发光学、凝聚态物质中的激发过程为专业方向的综合性学术刊物。

《发光学报》于1980年创刊,曾于1992年,1996年,2000年和2004年连续四次被《中文核心期刊要目总览》评为“物理学类核心期刊”,并于2000年同时被评为“无线电电子学、电信技术类核心期刊”。2000年获中国科学院优秀期刊二等奖。现已被《中国学术期刊(光盘版)》、《中国期刊网》和“万方数据资源系统”等列为源期刊。英国《科学文摘》(SA)自1999年;美国《化学文摘》(CA)和俄罗斯《文摘杂志》(AJ)自2000年;美国《剑桥科学文摘社网站》自2002年;日本《科技文献速报》(CBST, JICST)自2003年已定期收录检索该刊论文;2008年被荷兰“Elsevier Bibliographic Databases”确定为源期刊;2010年被美国“EI”确定为源期刊。2001年在国家科技部组织的“中国期刊方阵”的评定中,《发光学报》被评为“双效期刊”。2002年获中国科学院2001~2002年度科学出版基金“择重”资助。2004年被选入《中国知识资源总库·中国科技精品库》。本刊内容丰富、信息量大,主要反映本学科专业领域的科研和技术成就,及时报道国内外的学术动态,开展学术讨论和交流,为提高我国该学科的学术水平服务。

《发光学报》自2011年改为月刊,A4开本,144页,国内外公开发行。国内定价:40元,全年480元,全国各地邮局均可订阅。《发光学报》欢迎广大作者、读者广为利用,踊跃投稿。

地 址:长春市东南湖大路3888号

《发光学报》编辑部

邮 编:130033

电 话:(0431)86176862, 84613407

E-mail: fgxbt@126.com

国内统一刊号: CN 22-1116/04

国际标准刊号: ISSN 1000-7032

国内邮发代号: 12-312

国外发行代号: 4863BM

http://www.fgxb.org