

文章编号 1004-924X(2015)12-3322-07

红外傅里叶光谱仪的仪器线形函数及工程应用

张磊^{1,2}, 杨敏珠^{1,2}, 邹曜璞^{1,2}, 韩昌佩^{2*}

(1. 中国科学院大学, 北京 100049;
2. 中国科学院 红外探测与成像技术实验室, 上海 200083)

摘要:提出了利用量化的仪器线形函数对面阵傅里叶光谱仪像元进行光谱修正的方法。系统介绍了傅里叶光谱仪的仪器线形函数, 结合仪器的自身特征建立了仪器线形函数模型, 并利用 MATLAB 进行了仿真计算。通过理论计算给出了中心像元和边缘像元的激光光谱波峰之间的差值, 其同实际值的相对误差均值仅为 4.21%, 修正后的边缘像元光谱准确度达到 10^{-5} 量级。得到的结果从理论角度证明了利用仪器线形函数对面阵型傅里叶光谱仪进行光谱修正的有效性。最后从实际工程应用的角度出发, 提出了针对面阵傅里叶光谱仪非中心像元光谱修正的方法。实验显示该方法具有很强的普适性, 可在保证较高光谱准确度的基础上极大地提高光谱定标的效率, 降低光谱定标的工作量。

关键词:傅里叶光谱仪; 仪器线形函数; 光谱定标; 光谱修正

中图分类号: TH744.1 **文献标识码:** A **doi:** 10.3788/OPE.20152312.3322

Instrument line shape of infrared Fourier transform spectrometer and its engineer applications

ZHANG Lei^{1,2}, YANG Min-zhu^{1,2}, ZOU Yao-pu^{1,2}, HAN Chang-pei^{2*}

(1. *University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China;*
2. *Key Laboratory of Infrared System Detection and Imaging Technology, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200083, China*)

* *Corresponding author, E-mail: changpei_han@mail.sitp.ac.cn*

Abstract: A spectral correction method was proposed for an infrared space-borne Fourier transform spectrometer by using Instrument Line Shape (ILS). The ILS of the Fourier transform spectrometer was introduced systematically. An ILS model was established based on the instrument characteristics, and the simulation and calculation were carried out by using the MATLAB. The laser spectral peak value difference between the center detector and the edge one was calculated in theory, and the relative error between theoretical calculation value and actual value is just 4.21% and the accuracy of the corrected spectrum by the edge detector reaches 10^{-5} magnitude. The results verify the validity of the spectrum correction of the plane array Fourier transform spectrometer by using ILS in the theory. Finally, a method was proposed to correct the non-central pixels' spectrum of the plane array Fourier transform spectrometer for engineer applications. The experiments show that the method has stronger universality and both guarantees high spectrum accuracy and improves the efficiency of spectral cali-

收稿日期: 2015-08-12; 修订日期: 2015-10-10.

基金项目: 中国科学院上海技术物理研究所创新基金资助项目 (No. Q-DX-79)

bration. Moreover it reduces the workload of spectral calibration.

Key words: Fourier transform spectrometer; instrument line shape; spectral calibration; spectral correction

1 引 言

20 世纪 50 年代,Perter Fellgett 及 Pierre Jacquinot 等人论证得出傅里叶光谱仪具有多通道、高能量通过率的优点,随后 Cooley-Tukey 又提出了快速傅里叶变换(Fast Fourier Transform,FFT)算法,自此傅里叶变换光谱学及干涉成像光谱技术得到了迅速发展^[1]。21 世纪初,世界气象组织提出的大气探测目标为温度探测准确度为 1 K,湿度探测准确度为 10%~15%,对流层垂直分辨率为 1~2 km。红外傅里叶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,特别适合大气探测,因此成为重点发展的大气探测仪器。目前,最具有代表性的大气探测光谱探测装置有 MIPAS、IASI、CrIS、GIFTS 和 HES。它们均采用干涉分光技术,有的是对大气进行垂直探测,有的则是临边探测^[2],为数值大气分析提供了全面支持。我国正在研制的风云四号大气垂直探测仪是一种面阵型傅里叶光谱仪,它在中波红外和长波红外波段各使用了一个 32 pixel×4 pixel 的面阵探测器进行大气观测。

探测仪获取的高精度光谱数据对于未来数值天气预报具有重要意义;但是由于仪器的光程差有限,极易造成干涉图的截断,而采用面阵探测又会使像元与像元之间存在差别,这些都会影响光谱测量,因此有人提出了傅里叶光谱仪仪器线形函数(Instrument Line Shape, ILS)的概念。ILS 可以定量地给出仪器对单色光谱的光谱响应,并对测量光谱进行修正,从而获取高精度的光谱数据。本文系统地介绍了傅里叶光谱仪的 ILS,结合实际的仪器设备构建了模型,定量给出了 ILS,并由量化的 ILS 得到了边缘像元给定波数的光谱偏移量,从而对测量激光光谱进行修正,以提高边缘光谱的光谱准确度。该方法具有很强的普适性,对于指定像元的任意波数都可获得相同的乘法系数。

2 傅里叶光谱仪的仪器线形函数

在傅里叶变换光谱学中,ILS 定义为干涉仪系统对频率为 ν_0 的单色光源的系统响应。该系统响应主要由干涉仪动镜的运动范围(窗口截断)决定,但还受到有限视场、离轴效应、光学衍射和失准直等因素的影响^[3]。

2.1 窗口截断的影响

傅里叶光谱仪的光程差不可能无限大,必然会对干涉图造成矩形窗口截断的影响,利用傅里叶变换对干涉图进行从时域到频率的变化,如式(1)所示:

$$E(\nu)' = F[\Pi(x) \cdot I(x)]^{-1} = F[\Pi(x)]^{-1} * F[I(x)]^{-1}, \quad (1)$$

其中: $I(x)$ 为干涉图, $\Pi(x)$ 为矩形窗, F 是傅里叶变换,“ \cdot ”和“ $*$ ”分别是乘号和卷积号。由式(1)可知,因为矩形窗的截断效应,实际光谱 $E(\nu)'$ 为理想光谱与矩形窗傅里叶变换的卷积。

只考虑窗口截断效应时 ILS 为:

$$W_L(\nu) = F[\Pi(x)]^{-1} = \int_{-\infty}^{\infty} \Pi(x) e^{-2i\pi\nu x} dx = 2L \text{sinc}(2\pi\nu L), \quad (2)$$

其中: L 为最大光程差(Maximum Path Difference,MPD)。频域内的窗函数影响如图 1 中灰实线所示。

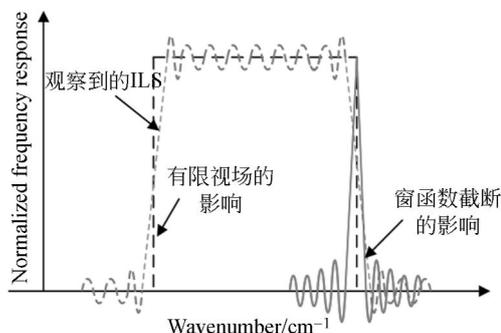


图 1 中心像元合成效应的 ILS

Fig. 1 ILS of center point's combining effects

2.2 有限视场的影响

有限视场是指由于探测的光源非点光源,光线存在有限视场角,这使得具有视场角的斜入射光线的光程差比平行于光轴的直入射光线的光程差更短一些,如图 2 所示。

由干涉光信号的光强表达式 $I(x) = 2I_0(1 + \cos(2\pi vx))$ 可知,光程 x 变小可以等效为 v 变小。

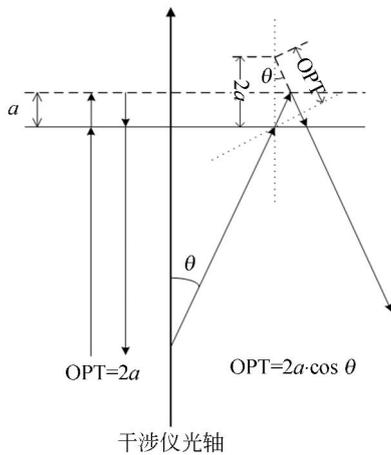


图 2 有限视场引起的光程差变化

Fig. 2 OPD changes caused by finite field of view



图 3 有限视场影响及频率响应示意图

Fig. 3 Influence of finite field of view and frequency response

由以上分析可知,有限视场将会导致光谱展宽,而且是向小波数的方向进行展宽,如图 3 所示^[4]。以圆形探测像元为例,离轴光线与轴上光线的波数差最大为:

$$\Delta v = v_\alpha - v_0 = -v_0(1 - \cos \alpha) \approx -v_0 \frac{\alpha^2}{2} \quad (3)$$

2.3 离轴效应的影响

面阵型傅里叶光谱仪存在光轴不经过探测器像元的情形,此时探测元的探测视场中心与干涉仪光轴存在一定的夹角,这被称为探测器离轴效应,或者探测器非均匀照明。一般来讲,在大部分探测器像元上会同时出现面阵型傅里叶光谱仪有限视场和离轴效应,ILS 形状由标准的矩形变成不规则的形状,如图 4 所示。

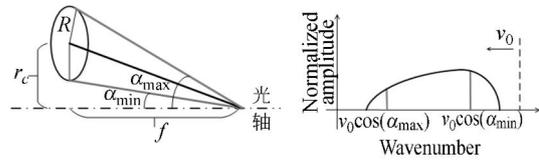


图 4 离轴效应及频率响应示意图

Fig. 4 Off-axis effect and frequency response

2.4 光学衍射的影响

依据衍射理论,当一束准直单色光通过半径为 R_D 的圆孔时,其光场随角度的分布满足:

$$I(\alpha) = I_0 \left[\frac{2J_1(q)}{q} \right]^2 \quad (4)$$

式中: I_0 对应于 $\alpha=0$ 的光强, J_1 为一阶贝塞尔函数, $q=2\pi v_0 R_D \sin \alpha$, α 代表衍射角。

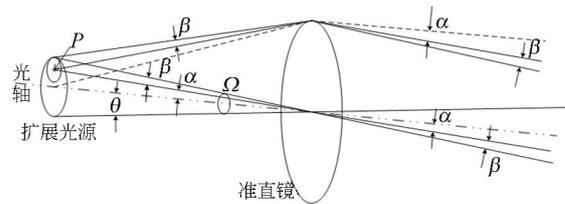


图 5 傅里叶光谱仪的光学衍射影响

Fig. 5 Diffraction effects of Fourier Transform Spectrometer (FTS)

由于准直镜衍射的影响,有限光源某一点 P 的辐射不局限于特定角度 α 进行传播。光场周围角分布为 $I = I(\beta)$, $I(\beta)$ 符合式 (4) 的衍射分布。同时 P 点周围区域的辐射也会对 α 方向产生贡献。最终其贡献为 $I(\beta)$ 与光源内弧长乘积的积分^[5]:

$$I(\alpha) = \int_0^{\alpha+\theta} F(\alpha, \beta, \theta) \left[\frac{2J_1(q)}{q} \right]^2 \beta d\beta \quad (5)$$

其中:

$$F(\alpha, \beta, \theta) = \begin{cases} 0, & \alpha \geq \theta, \beta \leq \alpha - \theta \\ 1, & \alpha \leq \theta, \beta \leq \theta - \alpha \\ 0, & \beta \geq \alpha + \theta \\ \frac{\arccos\left(\frac{\alpha^2 + \beta^2 - \theta^2}{2\alpha\beta}\right)}{\pi}, & \text{其他} \end{cases}$$

式中 $F(\alpha, \beta, \theta)$ 表示以 P 点为圆心的圆弧的环带系数。

类似于离轴效应的影响,光学衍射对 ILS 的影响也是向低波数发生偏移和变形。对于单个谱

线, 由衍射引起谱线位移的经验公式为^[5]:

$$\Delta \nu_0 = \frac{6.8 \times 10^{-3}}{R_D} \cdot \sqrt{\frac{R}{\nu_0}}, \quad (6)$$

式中: R 是理想分辨率即 $1/2L$, R_D 为衍射孔半径。假设衍射孔半径 R_D 为 5 cm, R 为 0.625 cm^{-1} , ν_0 取 $1\,000 \text{ cm}^{-1}$, 则 $\Delta \nu_0 = 3.4 \times 10^{-5} \text{ cm}^{-1}$, 在一个中等分辨率的干涉仪系统中该值是可以忽略的。

2.5 失准直的影响

这里所讲的失准直的影响是指傅里叶干涉仪的动镜在运动过程中偏离光轴运动所造成的影响。如图 6 所示, 由于动镜偏离光轴, 造成有效光轴偏离实际光轴, 偏离角度用 γ 表示。如图 7 所示, 有效光轴发生偏离后, 光源相对于有效光轴变为非对称。仪器线形将从普通扩展光源的矩形发生一定的变形, 形变将根据 γ 的变化而变化^[6]。动镜的侧面移动会导致零光程差处调制的最大幅度衰减, 具体调制公式为:

$$m(0) = \frac{2J_1(q)}{q}, \quad (7)$$

其中: J_1 为一阶贝塞尔函数, $q = 4\pi\nu_0 d(0)\theta = 4\pi\nu_0 d(0)(\frac{\Omega}{\pi})^{1/2}$, $d(0)$ 为零光程差处的侧面移动距离。

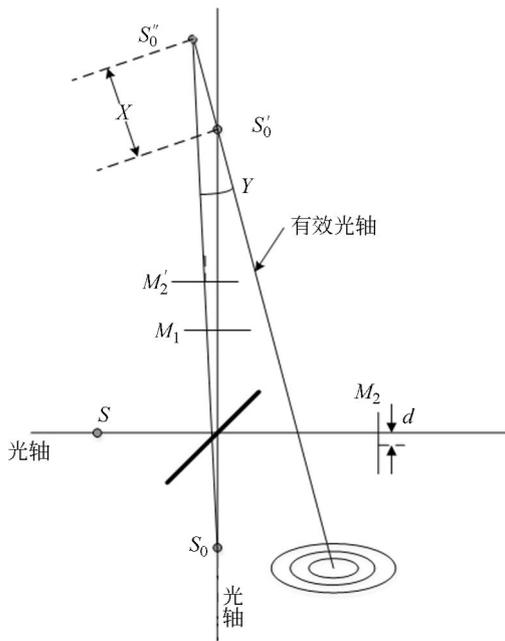


图 6 动镜失准直物像成像图

Fig. 6 Misaligned interferometric image

失准直对傅里叶光谱仪的影响也会导致反演后的光谱向低波数处偏移, 同样会造成频谱的展宽。对于动镜的失准直, 对单色光源光谱进行逆傅里叶变换得到对应的干涉图, 计算干涉图的相位得到相位与光程差之间的关系。如果是线性关系, 则认为动镜的运动是平行光轴的; 否则, 则是失准直的。为了纠正动镜的失准直, 一是重新对它进行调节对准处理, 二是利用卷积的方法修正干涉图。

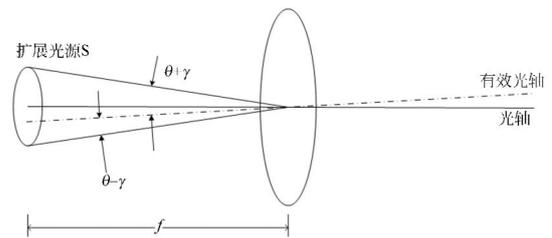


图 7 有效光轴为非对称时情形

Fig. 7 Asymmetry of light source from effective optical axis

3 傅里叶光谱仪仪器线形函数的计算

傅里叶光谱仪 ILS 的计算可以通过对以上几种效应所产生的线形进行卷积来实现。由于系统光学衍射的影响较小, 假设无失准直的影响(可检测纠正)。将窗口截断效应、有限视场和离轴效应的线形函数进行卷积即可计算 ILS。计算公式为:

$$ILS = ILS_L \otimes ILS_{FOV} \otimes ILS_{off-axis}, \quad (8)$$

其中: ILS_{FOV} 和 $ILS_{off-axis}$ 分别代表有限视场和离轴效应的线形函数。 ILS_L 可由式(2)计算得到。

通常傅里叶光谱仪的 ILS 是对各个干涉仪可接收光线角度进行积分来实现的^[7], 但是这种方法适用于中心像元的单个圆形探测器, 而目前很多系统均采用面阵矩形探测器。利用直接积分法很难量化计算傅里叶光谱仪的 ILS, 也就无法对光谱进行量化分析。

对于矩形探测器有限视场和离轴效应的 ILS 的计算, Jerome Genest 等人^[8]提出了一种新方法, 从而解决了离轴探测器入射光源非均匀情况下的求解问题。本文采用此方法求

解离轴像元 ILS, 然后利用卷积运算求解出总的 ILS。

如图 8 所示, (x_c, y_c) 是矩形探测像元的中心, A 和 B 是矩形探测元的半宽和半高, 假设目标为朗伯体, 则 ILS 归一化强度为该探测元所截取的干涉弧长与整个干涉环圆周长的比值, 即 $\varphi/2\pi$ 。

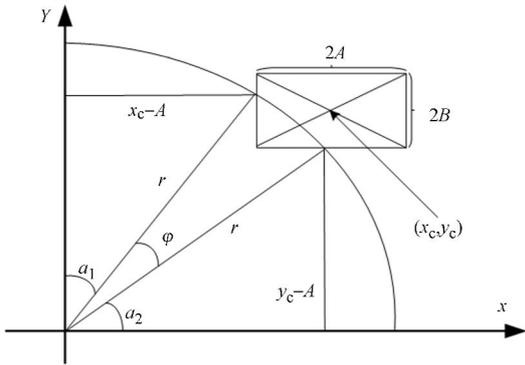


图 8 矩形探测器像元与光轴之间的几何关系

Fig. 8 Geometrical relationship of rectangular detector's pixels and optical axis

由图 8 可以得出探测器 4 个顶点与光轴之间

的距离分别为:

$$\begin{aligned} r_{\min} &= [(x_c - A)^2 + (y_c - B)^2]^{1/2} \\ r_{c1} &= [(x_c - A)^2 + (y_c + B)^2]^{1/2} \\ r_{c2} &= [(x_c + A)^2 + (y_c - B)^2]^{1/2}, \\ r_{\max} &= [(x_c + A)^2 + (y_c + B)^2]^{1/2} \end{aligned} \quad (9)$$

式中: $r_{\min}, r_{c1}, r_{c2}, r_{\max}$ 分别为矩形的 4 个顶点到原点的距离, 其排列顺序为由小到大。其中, r_{c1} 和 r_{c2} 根据实际值进行判断。

r_{\min} 到 r_{c1} (距离第二近的顶点) 所截取的干涉弧对应的弧度为:

$$\varphi = \frac{\pi}{2} - \alpha_1 - \alpha_2 = \frac{\pi}{2} - \arcsin \frac{y_c - B}{r} - \arcsin \frac{x_c - A}{r}. \quad (10)$$

式(10)两边同时除以 2π , 即可得到归一化的 ILS 强度。

离轴光线的波数会向低频方向偏移, 变为 $v = v_0 \cos \theta$, 其中 v_0 为入射光的波数, v 为偏移后的波数。根据离轴光线入射点与光轴之间的距离 r 以及准直镜的焦距 f , 可以得到:

$$r = f(v_0^2/v^2 - 1)^{1/2}. \quad (11)$$

将式(11)代入式(10), 便可得到考虑有限视场和离轴效应的 ILS_r 和波数之间的关系:

$$ILS_r = \begin{cases} 0.25 - \frac{1}{2\pi} \arcsin \frac{y_c - B}{f \left(\frac{v_0^2}{v^2} - 1 \right)^{1/2}} - \frac{1}{2\pi} \arcsin \frac{x_c - A}{f \left(\frac{v_0^2}{v^2} - 1 \right)^{1/2}}, & r_{\min} < r < r_{c1} \\ 0.25 - \frac{1}{2\pi} \arcsin \frac{y_c - B}{f \left(\frac{v_0^2}{v^2} - 1 \right)^{1/2}} - \frac{1}{2\pi} \arcsin \frac{x_c + A}{f \left(\frac{v_0^2}{v^2} - 1 \right)^{1/2}}, & r_{c2} < r < r_{c1} \\ 0.25 - \frac{1}{2\pi} \arcsin \frac{x_c + A}{f \left(\frac{v_0^2}{v^2} - 1 \right)^{1/2}} - \frac{1}{2\pi} \arcsin \frac{y_c + B}{f \left(\frac{v_0^2}{v^2} - 1 \right)^{1/2}}, & r_{c2} < r < r_{\max} \\ 0, & \text{else} \end{cases}. \quad (12)$$

最终, $ILS = ILS_L \otimes ILS_{FOV} \otimes ILS_{\text{off-axis}} = ILS_L \otimes ILS_r$ 。

4 实验结果分析

风云四号大气垂直探测仪是一个面阵型傅里叶干涉仪, 其长波和中波波段各对应 32 行 4 列 128 个像元。以长波探测器为例, 其探测器像元分布如图 9 所示, 理想光轴在 2~16 像元的一个顶点处。根据前面的理论分析, 可以求出面阵探

测器上任意一像元任意波数下的 ILS。选取像元 2~16 和 1~32, 根据式(12)可以求出有限视场和离轴效应的 ILS_r。然后同由窗口截断效应的 ILS_L 进行卷积, 得到最终的 ILS, 由 ILS 可以得到仪器的光谱分辨率及光谱偏移量, 这对仪器定标具有十分重要的意义。

将探测器像元 2~16 和 1~32 的位置尺寸信息、中心波数以及准直镜的焦距代入编写好的程序中, 即可得到它们对应的 ILS_r, 如图 10 所示。当选择中心波数为 $1\,100\text{ cm}^{-1}$ 时, ILS_r 与 ILS_L

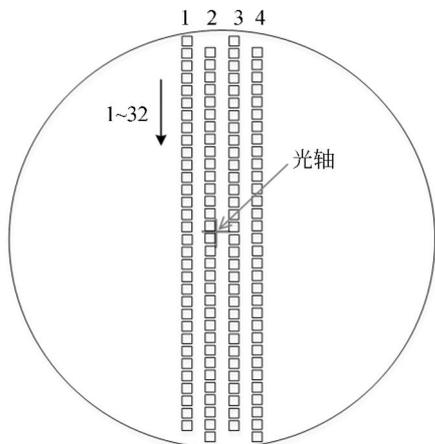


图 9 大气垂直探测仪长波面阵探测器排布图

Fig. 9 Arrangement of long wave array detectors in Space-borne Fourier Transform Spectrometer (SFTS)

进行卷积后得到最终的 ILS, 计算光谱偏移量分别为 -0.004 cm^{-1} 和 -2.419 cm^{-1} 。

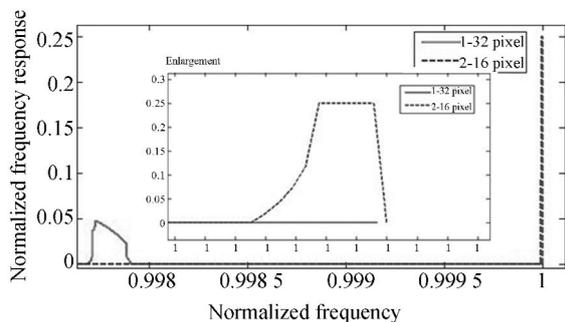


图 10 2~16 像元与 1~32 像元离轴效应的 ILS

Fig. 10 Off-axis effect ILS of 2-16 pixels and 1-32 pixels

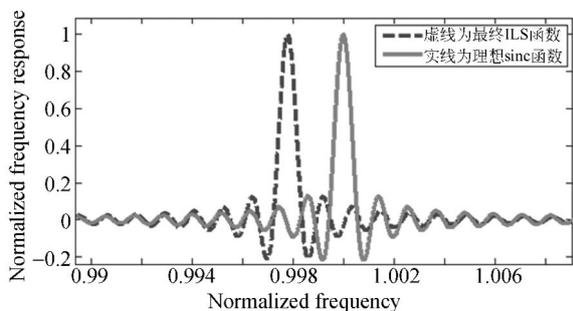


图 11 1100 cm^{-1} 波数下 1~32 像元的最终 ILS 函数

Fig. 11 1-32 pixels' ILS calculated at 1100 cm^{-1}

在定标实验中,利用激光器和积分球或者气

体池测定干涉仪的 ILS 和光谱分辨率。仪器测得的激光波数相比于实际波数会存在一定的误差,在定标实验中需要分析误差来源,并对测量值进行修正。为验证本文理论的正确性,忽略无关变量,将中心像元 2~16 像元所测得的光谱值作为探测器的激光输入量。将仪器的设计参数代入 ILS 计算公式,计算边缘像元 1~32 像元与 2~16 像元激光光谱峰值的差值。表 1 为实验过程中 2~16 像元和 1~32 像元测得的人射激光的光谱峰值波数差值以及利用 ILS 计算得到的理论差值。由表 1 可知,理论与实际值的相对误差均值仅为 4.21%,利用理论计算差值修正边缘像元的光谱后,光谱准确度可达 8.38×10^{-5} 。

表 1 2~16 像元与 1~32 像元的激光光谱数据

Tab. 1 Laser spectral data of 2-16 pixels and 1-32 pixels

	测得方向一波峰波数/ cm^{-1}		
	1 组	2 组	3 组
2~16 像元	944.333 3	942.527 8	936.947 7
1~32 像元	942.345 1	940.536 5	934.965 6
两像元实际差值	1.988 2	1.991 3	1.982 1
两像元理论差值	2.078 3	2.073 8	2.060 7
相对误差值	4.53%	4.14%	3.96%

如同美国的 GIFTS 地面定标过程^[9],目前面阵型傅里叶光谱仪每个像元的光谱范围是由各像元对气体池进行成像反演后确定的,然后再根据确定的气体池光谱修正像元的光谱尺度。该方法利用气体的标准谱线对像元的逐个谱线进行比对修正,可以获得很高的光谱准确度,但是工程计算量非常庞大。而根据 ILS 定标,每个像元的光谱偏移是有规律的,在已知仪器各项参数的情况下,可以结合 ILS 对仪器进行光谱定标。

在实际工程应用中,首先利用中心像元测得的与实际输入光源的光谱差值计算出系统偏移量,然后利用中心像元与非中心像元之间的差值修正非中心像元(可以是全谱段),最后对每个像元进行系统偏移量的修正。该方法可以极大地提高光谱定标的效率,减少工作量。利用该方法首先需要测得仪器各项准确的参数,然后利用软件计算出各像元对测量光谱的 ILS,建立起数据库或者查找表,进而可以利用上述方法完成定标工作。

5 结 论

本文系统地介绍了傅里叶光谱仪的 ILS, 及对 ILS 产生影响的诸多因素。对于一个中等分辨率的面阵傅里叶光谱仪系统, 其 ILS 需要考虑的因素主要有窗口截断、有限视场以及离轴效应的影响。通过理论计算得出了中心像元和边缘像元的激光光谱波峰之间的差值, 同实际值的相对

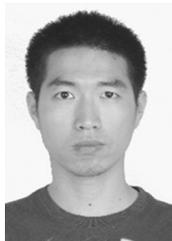
误差均值为 4.21%。利用理论计算差值修正边缘像元的光谱后, 光谱准确度可达 8.38×10^{-5} 。

本文从实际工程应用的角度出发, 提出了一套针对面阵傅里叶光谱仪非中心像元光谱修正的方法。该方法虽然可以极大地简化定标过程, 但是需要给出精确的仪器参数, 对仪器的测量技术提出了较高的要求。若要进行更高精度的光谱定标, 需要对仪器进行更加深入的分析, 这对系统的输入标定以及各方面测量水平也提出了更高的要求。

参考文献:

- [1] 张淳民. 干涉成像光谱技术[M]. 北京: 科学出版社, 2010.
ZHANG CH M. *Interference Imaging Spectroscopy*[M]. Beijing: Science Press, 2010. (in Chinese)
- [2] 张晶, 王淑荣, 黄煜, 等. 临边成像光谱仪的发展现状与进展[J]. 中国光学, 2013, 6(5): 692-700.
ZHANG J, WANG SH R, HUANG Y, *et al.*. Status and development of limb imaging spectrometers [J]. *Chinese Optics*, 2013, 6(5): 692-700. (in Chinese)
- [3] TREMBLAY J P. *High Resolution Measurements of the Instrument Line Shape Function of Fourier-Transform Spectrometer*[S]. Bad wildbad; 11th International Workshop on Atmospheric Science from Space using Fourier Transform Spectrometry, 2003.
- [4] Northrop Grumman Space & Mission Systems Corporation. *Cross Track Infrared Sounder (CrIS) Sensor Data*[R]. Redondo Beach, California, 2009.
- [5] SALONEN K I, SALOMAA I K, KAUPPINEN J K. Diffraction in a Fourier-transform spectrometer [J]. *Applied Optics*, 1995, 34(7): 1190-1196.
- [6] PEKKASAARINEN J K A. Line-shape distortions in misaligned cube corner interferometers [J]. *Applied Optics*, 1992, 31(1): 69-74.
- [7] NIPLE E, PIRES A, POULTNEY S K. Exact modeling of lineshape and wave-number variations for off-axis detectors in Fourier Transform Spectrometer (FTS) sensor systems [J]. *SPIE*, 1983, 364: 11-20.
- [8] GENEST J. Analytic solutions for nonuniformly illuminated off-axis detector [J]. *Applied Optics*, 1999, 38(25): 5438-5446.
- [9] BEST F A, BINGHAM G E, KNUTESON R O, *et al.*. Calibration of the Geostationary Imaging Fourier Transform Spectrometer (GIFTS) [J]. *SPIE*, 2001, 4151: 1-11.

作者简介:



张磊(1989—),男,山东东营人,博士研究生,2012年于中国海洋大学获得学士学位,主要从事嵌入式系统、数字信号处理方面的研究。E-mail: zhanglei_sitp@163.com

通讯作者:



韩昌佩(1979—),男,安徽庐江人,博士研究生,2000年于北京工商大学获得学士学位,2008年于中科院大学获得博士学位,主要从事航天光学载荷整机集成及标定、高精度扫描机构控制技术、遥感信息定量化等方面的研究。E-mail: changpei_han@mail.sitp.ac.cn