

超光谱成像差分吸收光谱技术研究*

司福祺^{1)†} 谢品华¹⁾ Klaus-Peter Heue²⁾ 刘 诚³⁾ 彭夫敏¹⁾ 刘文清¹⁾

1) 中国科学院环境光学与技术重点实验室, 中国科学院安徽光学精密机械研究所, 合肥 230031)

2) 环境物理研究所, 德国海德堡大学, 海德堡, 德国)

3) 卫星研究小组, 马普化学所, 美因茨, 德国)

(2007 年 9 月 27 日收到, 2008 年 1 月 20 日收到修改稿)

基于散射光的被动差分吸收(DOAS)技术利用气体的特性吸收谱线可实现对不同大气污染气体的定量测量, 介绍了一种基于成像光谱仪的光学遥感系统, 该系统运用被动 DOAS 原理实现了对大气污染气体的二维成像测量, 并报道了该系统对实验室样品池一维测量与城市道路上方 NO₂ 组分的成像测量实验. 基于成像光谱仪的被动 DOAS 系统利用太阳散射光可获取垂直方向一维的光谱信息, 结合扫描装置, 便可实现对污染气体的二维成像解析.

关键词: 被动差分吸收光谱, 成像光谱仪, 污染气体, 二维成像

PACC: 8670L

1. 引 言

采用紫外、可见波段散射光、基于差分吸收光谱(DOAS)原理的大气痕量气体解析方法通常被称为被动 DOAS 技术, 这种命名是相对于采用人工光源(如氙灯等)的主动 DOAS 技术而言的^[1-4]. 近些年, 随着全球臭氧测量系统^[5](global ozone monitoring experiment, GOME)大气探测扫描差分吸收光谱系统^[6,7](scanning imaging absorption spectrometer for atmospheric cartography, SCIAMACHY)以及天底观测光谱仪全球 O₃ 监测系统^[8](Dutch-Finnish nadir-pointing spectrometer OMI)等星载大气成分探测系统的发射、运行成功, 被动 DOAS 技术取得了长足的发展. 相比主动 DOAS 技术, 被动 DOAS 技术具有以下优点: 1) 采用散射光作为光源, 简化系统同时减少了系统的安装难题; 2) 相比主动系统, 具有大范围监测的能力; 3) 易于实现平台搭载(如机载、星载等).

GOME, SCIAMACHY 和 OMI 等都具有大气污染气体浓度二维成像解析功能, GOME 与 SCIAMACHY 采用摆扫方式, 而 OMI 工作在推扫方式下. 推扫工作方式不仅减少了扫描装置, 同时具有更佳的时间分辨率, 如 OMI 一天便可实现全球覆盖, 而

SCIAMACHY 则需要三天. 近年来, 德国海德堡大学的研究人员对地基推扫方式工作的被动 DOAS 系统进行了相应的研究, 成功的实现了对可见烟羽, 如工厂烟囱、火山等的排放二维成像解析^[9,10]. 地基系统不仅是机载、星载的基础, 同时也为机载、星载的数据校正提供校准数据源.

因此, 本文以基于成像光谱仪、推扫工作方式的超光谱 DOAS 系统为研究目标, 介绍了该系统的构成、反演算法, 报道了实验室样品池测量与城市道路上空 NO₂ 气体等的测量实验, 通过实验, 验证了算法的正确性, 证实了该系统具有污染气体二维成像解析的功能. 希望通过本项工作, 促进超光谱被动 DOAS 系统的发展, 解决相应的反演算法, 在为环境监测提供实时、有效的光学遥感方法的同时为实现该技术的平台搭载奠定基础.

2. 测量原理

2.1. 超光谱成像

一般物体成像包含二维空间信息, 而超光谱成像在包含空间信息的基础上同时记录了像元随波长变化而变化的辐射强度信息, 像元具有三维的信息,

* 国家高技术研究发展计划(863)批准号: 2007AA12Z109)和中国科学院知识创新工程重大项目(批准号: KZCX1-YW-06-01)资助的课题.

† E-mail: sifuqi@aiofm.ac.cn

即空间维 x, y 与光谱维 λ 。

目前通常采用二种技术获取超光谱成像,因获取三维信息的时间序列不同而有所区别。基于线阵探测器的摆扫方式一次只能获取单个空间像元的信息,剩下的二维信息均需要扫描来获取,这种工作方

式的时间分辨率较低,利用面阵探测器的推扫方式,一次可将一个空间方向成像,如图 1 所示的垂直方向,只需要对剩下的一维方向进行扫描(图中的水平方向)就可以完成超光谱成像测量,大大减少了总的测量时间。

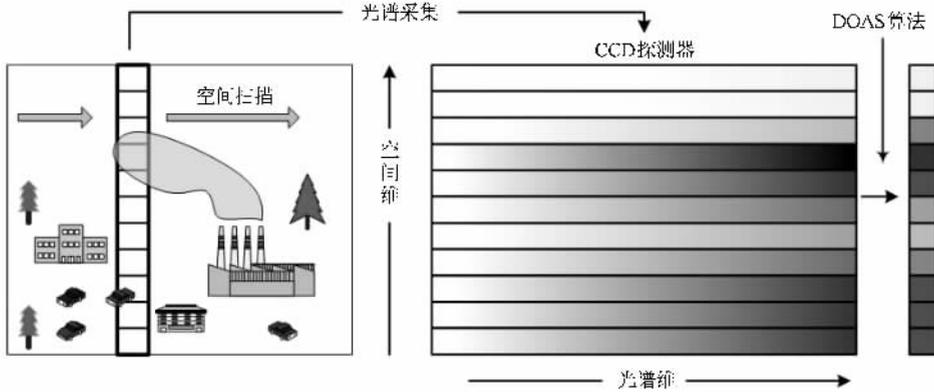


图 1 超光谱成像测量原理(一次测量将垂直方向成像在面阵 CCD 探测器上进行色散,然后通过扫描完成水平方向信息的采集工作,最终实现物体的超光谱测量)

2.2. DOAS 反演算法

DOAS 技术基于痕量气体的指纹吸收原理反演痕量气体浓度,操作中将大气光学厚度分为快变化与慢变化部分,通过多项式拟和等去除由于瑞利散射、米散射等造成的慢变化部分,并将余下的由痕量气体造成快变化部分与标准截面进行拟和,得到痕量气体浓度。

DOAS 系统接收到的光谱信号,根据 Lambert-beer 吸收定律,有

$$K(\lambda) = I_0(\lambda) \cdot e^{-\sum_i \sigma_i(\lambda) \text{SCD}_i} g(\lambda), \quad (1)$$

其中 $K(\lambda)$ 为经过大气吸收后的接收光强, $\sigma_i(\lambda)$ 是第 i 种气体分子的吸收截面, SCD_i 是第 i 种气体分子的斜柱浓度, $g(\lambda)$ 代表大气中的瑞利散射、米散射以及光学系统等造成的光强衰减。

DOAS 光谱探测技术核心是采用差分的思想,将痕量气体分子的吸收截面变为随波长作慢变化的部分 $\sigma_b(\lambda)$ 和快变化部分 $\sigma'_i(\lambda)$, 即

$$\sigma_i(\lambda) = \sigma_b(\lambda) + \sigma'_i(\lambda). \quad (2)$$

因此(1)式可以表示为

$$K(\lambda) = I_0(\lambda) \cdot \exp\left[-\sum(\sigma'_i(\lambda) \text{SCD}_i + \sigma_b(\lambda) \text{SCD}_i)\right] \cdot g(\lambda). \quad (3)$$

定义变量 $I'_0(\lambda)$ 表示慢变化部分

$$I'_0(\lambda) = I_0(\lambda) \cdot \exp\left[-\left(\sum(\sigma_b(\lambda) \text{SCD}_i)\right)\right] \cdot g(\lambda). \quad (4)$$

那么,差分光学厚度 D' 为

$$D' = \ln(I'_0(\lambda) / K(\lambda)) = \sum(\sigma'_i(\lambda) \text{SCD}_i). \quad (5)$$

通过数字滤波去除随波长作慢变化的宽带光谱结构,保留光谱中的快变化部分,并与气体分子的标准参考光谱进行非线性最小二乘法拟合,从而得到各种气体的斜柱浓度(即污染气体沿光程的积分浓度)。

在被动 DOAS 技术中,采用太阳散射光作为光源,需对太阳辐射的特征结构、大气效应等进行处理,以准确的获取污染气体斜柱浓度。被动 DOAS 技术中主要考虑的是太阳光夫琅和费结构与大气的 Ring 效应。

由于太阳光球原子的选择性吸收与发射造成的夫琅和费结构在太阳散射光中占重要的地位,尤其是在紫外和可见波段(300—600 nm)。在被动 DOAS 系统中夫琅和费结构占吸收光谱的 30% 左右^[11],会给污染气体的反演结果造成很大的影响,因此必须选择合适的方法加以消除,一般采用除以夫琅和费光谱来减少夫琅和费结构的影响。

当太阳辐射在大气传输时,由于旋转拉曼散射造成散射光的夫琅和费结构变浅的现象称为 Ring 效应,尽管 Ring 效应对光学厚度只会造成百分之几

的影响,但是,如果只单独的考虑夫琅和费结构,而对 Ring 效应不做处理,则不能将夫琅和费结构的影响完全去除,会给反演结果带来偏差,特别是对浓度较低的污染气体.因此,测量光谱中如何考虑 Ring 效应的影响也是本项目的一项研究内容.本文采用 Fish 推荐的方法获取 Ring 光谱^[21],然后将它作为一种大气成分,在进行浓度反演时一同加以考虑,通过这种处理方法,降低 Ring 效应的影响.

3. 实验系统

超光谱成像 DOAS 系统结构如图 2 所示,系统由 ATCON 光谱仪、PI 探测器、商用镜头、扫描镜片及计算机等组成.太阳散射光经过扫描镜片反射后被商用镜头接收,在镜头内完成汇聚、像差校正后经过入射狭缝进入 ATCON-2300i 光谱仪中,最终成像在 PI 面阵 CCD 上(512 × 2048 像元),完成光信号到电信号转换及数字化后通过 USB2.0 传输到计算机中,同时该计算机具有控制扫描、改变积分时间等功能.

系统使用的 C-T 结构的 ACTON/PI 光谱探测系统可以工作光谱与成像模式下,当探测器垂直于光谱仪时(如图 2 所示)光谱探测系统工作在光谱模式,此时系统拥有最佳的光谱分辨率(1200 线光栅,约 0.3 nm),而成像效果一般,由中间向两边效果逐渐变差,通过改变光谱仪与探测器的夹角可以获得最佳的成像效果.在系统测试中,我们发现,在光谱模式下约有 10 nm 范围内的光谱具有很好的成像效果,满足对 NO₂ 的分析要求,因此,系统并没有另外设计转接装置来改善成像效果,在以后的实验中,系统将使用转接装置来获取较佳的成像光谱,以便同时解析更多的污染气体.

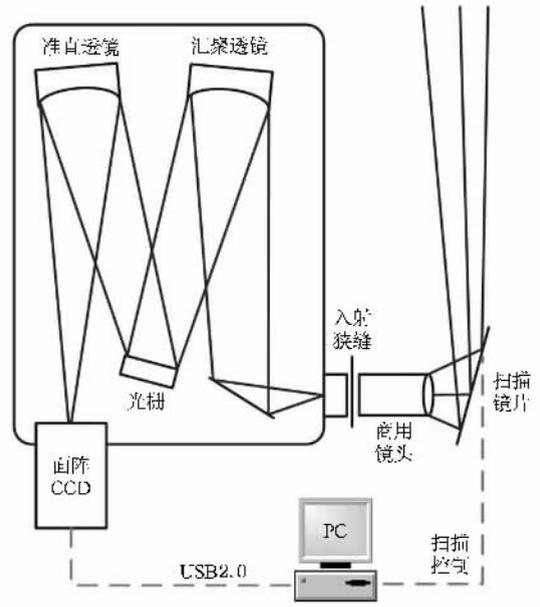


图 2 超光谱成像 DOAS 系统结构示意图

系统采用商用数码相机镜头作为光学导入系统收集散射光,该镜头焦距及视场角可调,在实验中,我们将垂直视场角调整到 45°并固定,此时水平视场角约为 1°.

4. 结果与讨论

4.1. 实验室样品池实验

在实验室,系统在没有适用扫描装置的情况下对样品池进行了一维测量,得到 NO₂ 浓度随高度变化的柱状图.实验中将超光谱成像 DOAS 系统置于稳定的平台上,在其前方 47 cm 处放置用支撑架固定的圆形 NO₂ 标气样品池(浓度 0.9%),如图 3(a)

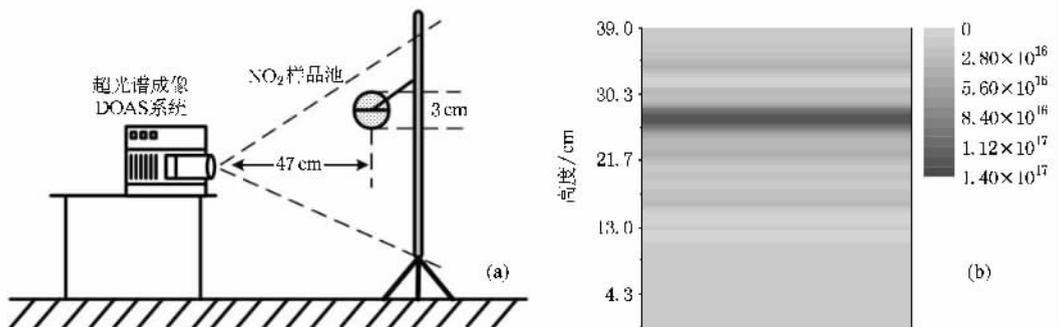


图 3 (a) 实验室测量系统示意图 (b) NO₂ 浓度反演结果

所示,该样品池直径 3 cm,厚度 0.6 cm,中心与商用镜头的中心高度相差 8 cm.

实验中使用 430—440 nm 解析 NO_2 浓度,同时采用移走样品池时的散射光作为参考光谱来去除夫朗和费线的影响.图 3(b)为 NO_2 柱浓度图,从图上可以清楚看出由于样品池造成的高浓度区域.样品池与测量系统距离为 47 cm,垂直视场角 45° ,因此,水平测量高度为 39 cm,对应中心 19.5 cm,从图 3(b)可以看出,测量结果的最大值位于 27.5 cm 附近,与实际样品池与镜头的高度差一致.根据最大测量结果 $1.26 \times 10^{17} \text{ mol/cm}^2$,与样品池厚度 0.6 cm,计算得

到样品池浓度 $8.4 \times 10^3 \text{ ppm}$,误差 6.7%.

4.2. 城市道路上方 NO_2 监测实验

2007 年 7 月 19 日,超光谱成像 DOAS 系统在德国海德堡大学环境物理研究所的楼顶对城市道路上方的 NO_2 进行了扫描测量,如图 4 所示.在结合扫描装置的情况下,系统对距离 100 m 的 Berliner 路进行了测量,扫描距离约 750 m.为了增加时间分辨率,系统采用一次测量不加多次平均的工作方式,时间分辨率为 2 s,本次实验以道路上方 NO_2 为监测目标,对应的垂直分辨率 1.6 m,水平分辨率 2 m.

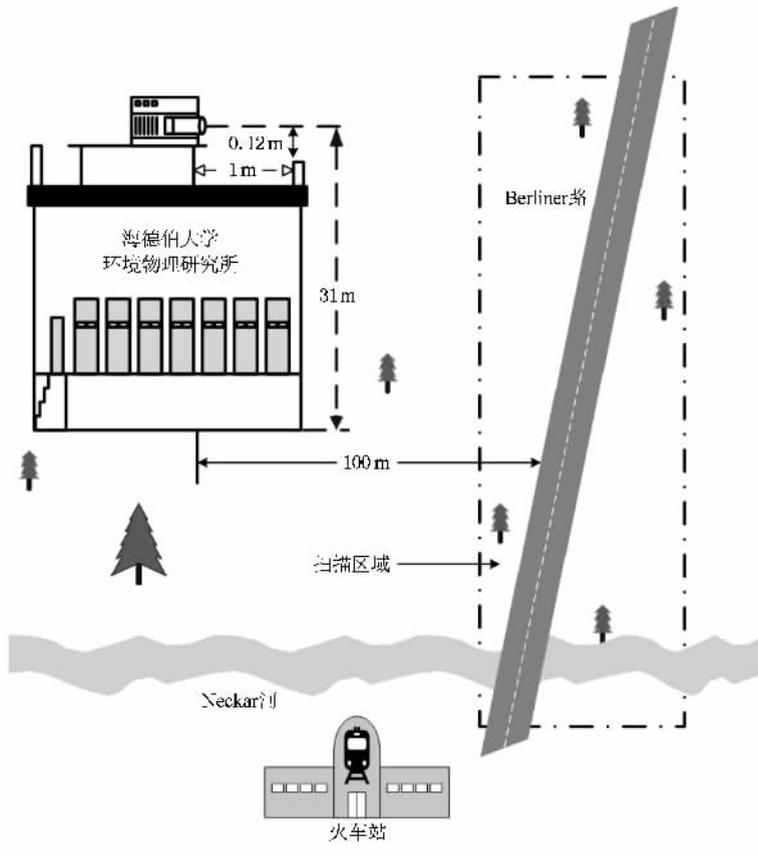


图 4 道路上方 NO_2 监测实验示意图

超光谱成像系统安装距离地面大约 31 m,距离公路 100 m,根据垂直视场角 45° ,可得理论测量高度为 82.8 m,但是因为探测系统安装距离 31 m 的限制,导致测量高度降为 72.4 m,探测器最下面的 12 个像元没有探测到有效信号.测量系统位于海德堡大学环境物理研究所楼顶,该建筑在楼顶的四周安装有 1 m 高的水泥防护墙,测量系统放置于离防护墙 1 m 的地方,其透镜高度比防护墙高约 0.19 m.防护墙的存在,限制了仪器的垂直视场角,导致近地

面的散射光无法到达探测系统,经计算,道路上方 12 m 以下的散射光无法被探测系统接收.

图 5 为本次外场扫描实验的测量结果,由图上可以清楚地看出 NO_2 的垂直分布.由于楼顶防护墙的影响,限制了系统视场角,无法解析近地面的污染气体浓度,所以在 12 m 以下的的数据不能反映道路上的情况,该数据仅能有限地反映楼顶情况,因为楼顶散射被探测器接收的光,在被楼顶散射以前,经过了长距离传输,如果所经历的路径相似,可以反映,

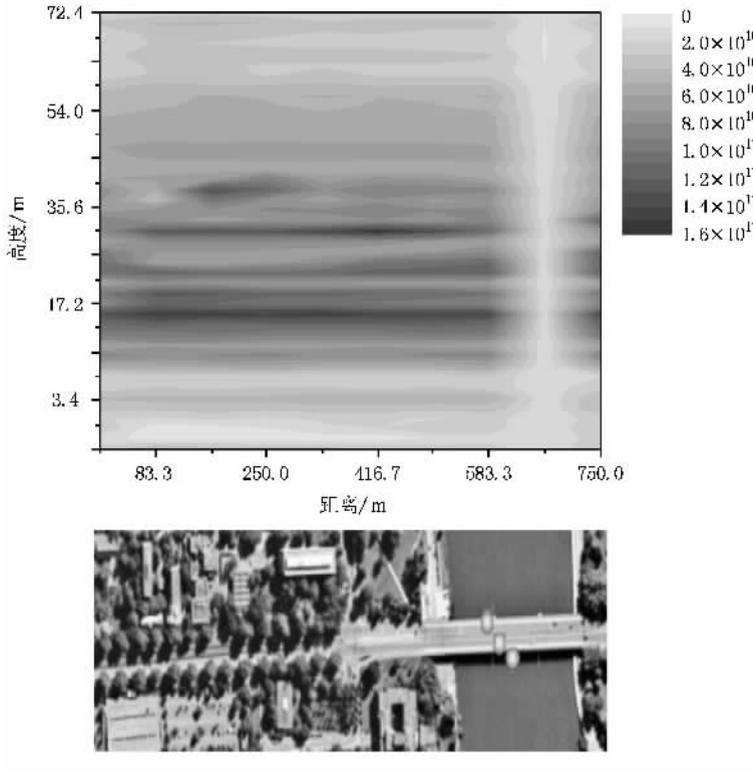


图5 道路上方 NO_2 测量结果与扫描区域鸟瞰地图

反之则不行. 从 12 m 以上, 从图上可以看出 NO_2 的浓度随高度的增加而降低, 大约在 15 m 左右达到其峰值. 另外, 我们看到在水平方向 666 m 处, NO_2 相比其余位置其浓度较低, 在这里, 我们想是 Neckar 河造成的影响, 因为该处扫描正好通过这条河流. 汽车在桥上时, 大多快速通过, 而在其他地方, 由于红绿灯的影响, 很多时候处于等待状态, 排放较河流桥上多. 另外, 测量结果并不全是公路的贡献, 公路周围的设施也有贡献. 相对河流周围无排放的情况, 周边道路的情况较复杂, 一般存在并行道路或交叉道路的情况. 这也是造成河流上排放低的原因. 该处 12 m 以下的的数据也较其余地方偏低的原因, 是因为该处的反射光经过河流上空, 河流上方的 NO_2 浓度相比其他地方低, 因此 666 m 处 12 m 以下 NO_2 浓度也低于其他地方. 实验时间为德国当地时间 13 时, 测量在雨后进行, 风速 1.48 m/s, 方向北偏东 70° . 因此, 造成污染物在低空测量的水平方向(南

北)扩散不明显.

5. 结 论

本文介绍了基于成像光谱仪的超光谱成像 DOAS 系统的原理及构成, 并报道了利用该系统进行的实验室样品池实验与城市上方 NO_2 排放扫描监测实验. 通过实验初步验证了该系统对污染气体的二维成像解析功能. 通过本项研究, 促进了超光谱被动 DOAS 系统的发展, 初步解决了相应的反演算法, 为环境监测提供实时、有效的光学遥感方法, 同时也为实现该技术的平台搭载奠定了一定的基础.

同时, 超光谱成像 DOAS 系统在遥感测量领域有着较为广泛的应用, 如可见烟羽的扫描测量(烟窗、火山等); 工厂、设备泄漏的测量; 在已知风廓线的情况下, 点源、面源污染气体排放通量的精确解析; 机载、星载遥感测量等.



- [3] Qi F , Liu W Q , Zhou B *et al* 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 2197 (in Chinese) [齐 峰、刘文清、周 斌等 2003 物理学报 **52** 2197]
- [4] Si F Q , Liu J G , Xie P H *et al* 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 3165 (in Chinese) [司福祺、刘建国、谢品华等 2006 物理学报 **55** 3165]
- [5] Konovalov I B , Beekmann M R , Vautard J P *et al* 2005 *Atmos. Chem. Phys.* **5** 169
- [6] Jacobi H , Kaleschke L , Richter A *et al* 2006 *J. Geophys. Res.* **111** D15309
- [7] Afe O T , Richter A , Sierk B *et al* 2004 *Geophys. Res. Lett.* **31** 124113
- [8] Boersma K F , Eskes H J , Veeffkind J P 2006 *Atmospheric Chemistry and Physics Discussions* **6** 12301
- [9] Falko L , Gerd H , Ulrich P 2004 *Applied Optics* **43** 4711
- [10] Bobrowski N , Honninger G , Lohberger F *et al* 2006 *Journal of Volcanology and Geothermal Research* **150** 329
- [11] Honninger G , Friedeburg C , Platt U 2004 *Atmos. Chem. Phys.* **4** 231
- [12] Fish D , Jones R L 1995 *Geophysical Research Letters* **22** 811

Hyperspectral imaging differential optical absorption spectroscopy *

Si Fu-Qi^{1)†} Xie Pin-Hua¹⁾ Klaus-Peter Heue²⁾ Liu-Cheng³⁾
Peng Fu-Min¹⁾ Liu Wen-Qing¹⁾

1) *Key Laboratory of Environmental Optics & Technology , Anhui Institute of Optics and Fine Mechanics , Chinese Academy of Sciences , Hefei 230031 , China)*

2) *Institute of Environmental Physics (IUP) , University of Heidelberg , Heidelberg , Germany)*

3) *Satellite Group Mainz-Heidelberg , Max Planck Institut für Chemie , Mainz , Germany)*

(Received 27 September 2007 ; revised manuscript received 20 January 2008)

Abstract

The technique of passive differential optical absorption spectroscopy (DOAS) is based on fingerprint absorption of probed gas species , which enables simultaneous monitoring of a variety of pollutants found in the atmosphere using scattering light as light source. We describe an optical remote-sensing instrument which is based on imaging spectrometer that permits spatially resolved mapping of atmospheric trace gases by passive DOAS method. The applications of one spatial dimensional measurement of gas cell and imaging of the nitrogen dioxide over city main road were also reported in this paper. With scattered sunlight as the light source , the system based on imaging spectrometer simultaneously acquiring spectral information in one spatial dimension , the second spatial dimension is scanned by a moving mirror.

Keywords : passive DOAS , imaging spectrometer , polluted gases , imaging of two dimension

PACC : 8670L

* Project supported by the National High Technology Research and Development Program of China (863 Program) (Grant No. 2007AA12ZA109) and the Knowledge Innovation Program of the Chinese Academy of Sciences (Grant No. KZCX1-YW-06-01).

† E-mail : sifuqi@aiofm.ac.cn