

周方,漆成莉,陆其峰,等,2020. FY-3D/HIRAS 光谱定标精度评估中的最佳光谱区域选择[J]. 气象,46(6):733-744. Zhou F, Qi C L, Lu Q F, et al, 2020. Optimal spectral region selection for FY-3D/HIRAS spectral calibration accuracy evaluation[J]. Meteor Mon, 46(6):733-744(in Chinese).

FY-3D/HIRAS 光谱定标精度评估中的 最佳光谱区域选择^{*}

周 方¹ 漆成莉^{2,3} 陆其峰^{2,3,4} 徐寒列^{2,3}

1 中国气象科学研究院,北京 100081

2 国家卫星气象中心,北京 100081

3 中国气象局中国遥感卫星辐射测量和定标重点开放实验室,北京 100081

4 中国气象科学研究院灾害天气国家重点实验室,北京 100081

提 要: 光谱定标精度的精确评估和监测,是红外高光谱数据应用之前的重要工作。光谱定标精度评估常用“互相关”方法,即通过平移观测谱使得观测谱与参考基准谱之间满足最大相关或最小标准差条件。考虑到计算耗时,无须在全谱段检测频偏,而用部分光谱区域评估光谱定标精度。为全面评估“互相关法”对光谱区域选择的依赖程度,初步选择光谱区域依据理论模拟光谱(只考虑仪器离轴效应)的敏感性分析,最佳光谱区域选择基于实际观测光谱的敏感性分析。基于模拟光谱的敏感性分析表明:光谱精度评估方法对光谱区域的选择在中波波段不敏感,在长波和短波波段比较敏感,其敏感性与光谱区域内吸收带的包络特征、辐射能量的大小有关;选择不同光谱区域引入的绝对误差在长波和短波波段最大分别可达 3.05 和 3.35 ppm(1 ppm=10⁻⁶);因此,当光谱区域选择在辐射能量较大,大气成分含量稳定的大气分子吸收带,能有效减小“互相关法”引入的误差。进一步基于风云三号 D 星红外高光谱大气探测仪(FY-3D/HIRAS)观测光谱,研究提出了 HIRAS 光谱精度评估的最佳参考光谱区域:长波波段为[716, 766] cm⁻¹,中波波段为[1270, 1320] cm⁻¹,短波波段为[2159, 2209] cm⁻¹,基于上述光谱区域评估的 HIRAS 光谱偏差平均值均优于 2 ppm,长波和中波的标准差优于 2 ppm,短波的标准差约为 4 ppm。研究结果对其他红外干涉仪的光谱定标精度评估和频率长期稳定性监测也具有参考作用。

关键词: 互相关法,光谱区域选择,HIRAS

中图分类号: P412

文献标志码: A

DOI: 10.7519/j.issn.1000-0526.2020.06.001

Optimal Spectral Region Selection for FY-3D/HIRAS Spectral Calibration Accuracy Evaluation

ZHOU Fang¹ QI Chengli^{2,3} LU Qifeng^{2,3,4} XU Hanlie^{2,3}

1 Chinese Academy of Meteorological Sciences, Beijing 100081

2 National Satellite Meteorological Centre, Beijing 100081

3 Key Laboratory of Radiometric Calibration and Validation for Environmental Satellites, CMA, Beijing 100081

4 State Key Laboratory of Severe Weather, Chinese Academy of Meteorological Sciences, Beijing 100081

Abstract: Accurate evaluation and monitoring of spectral frequency accuracy is significant for an hyperspectral infrared (IR) interferometer before data application. A “cross-correlation method” is commonly used to evaluate the accuracy of the spectral accuracy, which allows the maximum correlation, or minimum

^{*} 国家重点研发计划(2016FYB0500704、2018FYB0504700、2018FYB0504703)、国家自然科学基金项目(41505029)和“万人计划”领军人才(批号 187)共同资助

2019 年 4 月 10 日收稿; 2020 年 3 月 9 日收修定稿

第一作者:周方,主要从事红外高光谱仪器光谱定标精度验证研究. Email:zhoufang_w@yeah.net

通讯作者:漆成莉,主要从事卫星红外探测仪器定标预处理及精度验证研究. Email:qieli@cma.gov.cn

standard deviation condition, to be met between an observed and a simulated spectrum by shifting the observed spectrum. From the perspective of the time-consuming calculation, it is not necessary to detect the frequency offset in the entire spectrum, but to evaluate the accuracy of the spectral calibration with a part of the spectral region. To comprehensively evaluate the dependence of the “cross-correlation method” on spectral regions, a preliminary selection of spectral regions was carried out based on the sensitivity analysis of the simulated spectra (with only the off-axis effect of the instrument considered), and the optimal spectral region was selected based on the sensitivity analysis of the on-orbit data. The results based on simulated spectra showed that spectral region selection is sensitive to the evaluation method in long-wave (LW) and short-wave (SW) bands, but insensitive in mid-wave (MW) band. In addition, the sensitivity is related to the envelope characteristics and to the radiation energy of the absorption line in the spectral regions. The absolute errors for selecting different spectral regions can reach 3.05 and 3.35 ppm ($1 \text{ ppm} = 10^{-6}$) in LW and SW bands, respectively. Selecting high-radiation-energy and stable atmospheric composition regions can effectively reduce the error introduced by the “cross-correlation method”. The results using on-orbit data of high-spectral-resolution infrared atmospheric sounder (HIRAS), which was firstly carried on the Fengyun 3D (FY-3D) satellite, showed that the instrument observation error and radiative transfer model simulation error are also needed to be considered in practical data applications to achieve the best spectral regions. Finally the best reference spectral regions for HIRAS spectral accuracy evaluation were obtained, located in $716-766 \text{ cm}^{-1}$ for LW band, $1270-1320 \text{ cm}^{-1}$ for MW band and $2159-2209 \text{ cm}^{-1}$ for SW band, respectively. The mean spectral bias results based on the selected best reference spectra regions for HIRAS are all less than 2 ppm for the three bands, spectral bias standard deviations are less than 2 ppm for LW and MW bands, and about 4 ppm for SW band. The obtained best spectral regions are also applicable to the spectral frequency accuracy evaluation and long-term frequency monitoring of other infrared interference instruments.

Key words: cross-correlation method, spectral region selection, high-spectral-resolution infrared atmospheric sounder (HIRAS)

引 言

对于具备高光谱分辨率的红外探测仪,需要满足很高的光谱定标精度和辐射定标精度才能投入使用(董超华等,2013)。光谱定标精度和辐射定标精度相互制约和影响,仪器光谱定标精度不够也会影响辐射定标的精度。Chen et al(2013b)在光谱定标精度为 1、2、3 ppm($1 \text{ ppm} = 10^{-6}$)时进行光谱定标,取定标后 $650 \sim 770 \text{ cm}^{-1}$ 处的光谱与目标亮温 287 K 作为差值,结果分别为 0.05、0.1、0.15 K,可以看出 1 ppm 的光谱定标精度对应最小的亮温差。根据参照光谱不同,光谱定标精度计算方法(互相关法)又分为绝对法和相对法,二者分别以模式模拟的光谱和更高精度仪器观测的光谱为参照(Strow et al,2013;漆成莉等,2012)。光谱定标精度有很多误差源:仪器观测系统误差;激光频率的不稳定、探

元离轴位置误差、由于地球旋转导致的频率偏差、噪声等(Chen et al,2013b);定标处理算法误差,如重采样矩阵采样间隔的误差等;以及估算光谱定标精度的方法本身的误差(Chen et al,2017)、少量的云对样本的影响、星载仪器不均匀的对地观测视场、所用廓线的时间空间匹配度等。光谱精度的估算是以精度较高的光谱为参照,在某个选定的光谱区域内平移待评估光谱,当二者满足最大相关性,光谱移动量即为估计的频率偏移量。用这种方法计算得到的光谱定标精度依赖于光谱区域的选择,区域的选择不当造成的精度误差可达 ppm 的量级。本研究通过敏感性试验分析互相关法本身带来的误差,试验所用的模拟谱主要考虑仪器的探元位置偏差,忽略其他仪器效应。

2017 年 11 月 15 日风云三号 D 星(FY-3D)成功发射,这是在极轨卫星平台上首次搭载我国的红外高光谱大气探测仪,其英文名为 high-spectral

resolution infrared atmospheric sounder (HIRAS)。HIRAS 除了用于探测大气温、湿廓线,作为星载红外辐射基准外,其观测资料对改进数值预报具有里程碑的意义。仪器开机后,经过 4 个月左右的在轨测试,于 2018 年 6 月底转入业务试运行,2019 年 1 月正式进入业务运行阶段。GIIRS (geostationary interferometric infrared sounder) 搭载于新一代地球静止气象卫星 FY-4A 上,GIIRS 也是一种基于傅里叶变换原理的迈克尔逊干涉仪,探元按照 32×4 排列。由于静止卫星平台距离地球约 36 000 km,探元离轴角度非常小。在光谱定标中,忽略各个探元的离轴效应,考虑激光波长的变化,利用标准大气吸收谱线和地球晴空大气模拟光谱对发射前光谱定标系数进行更新。而 HIRAS 载于极轨卫星平台,具有激光稳频系统,在激光波长误差小于 1 ppm 的条件下,主要针对离轴效应进行光谱定标。在光谱定标精度评估中,定标的光谱曲线的选取很重要,GIIRS 在轨光谱定标的长波和中波波段的的光谱区域选择分别为 $700 \sim 718$ 和 $2050 \sim 2100 \text{ cm}^{-1}$,其光谱定标精度达到 10 ppm (冯绚等, 2019)。在 HIRAS 的在轨测试阶段,参考了 Chen et al (2017) 所选的光谱区域,进行光谱定标精度的评估工作,三个红外波段的光谱区选择分别为 $704 \sim 754$ 、 $1264 \sim 1314$ 和 $2160 \sim 2210 \text{ cm}^{-1}$ 。但光谱评估选取光谱区域是否可以任意一段,评估方法对不同的光谱区域选择是否敏感,对光谱精度评估结果会

产生多大差异,以及敏感程度和哪些因素有关等都是值得深入研究的问题。

本研究首先设计了基于理论模拟的有频偏光谱和实际观测光谱,分析互相关法对光谱区域选择的敏感性的研究方案,根据模拟谱的敏感性分析结果先确定初选光谱范围,缩小范围以后再进行观测谱的敏感性研究,对所选范围进一步筛选,最后给出结论和讨论。

1 数据与方法

1.1 仪器及数据介绍

本研究的数据来自红外干涉仪器 HIRAS,其设计采用了干涉分光技术。仪器搭载在卫星上的扫描方式为跨轨并行扫描,广泛的覆盖范围是由多探元组成的面阵实现的。探元的瞬时视场约为 16 km,一行扫描共 33 步,其中探测黑体定标源占 2 步,探测冷空间占 2 步,剩下的 29 步是对地观测。一个步进扫描 (FOR) 由四个像素视场 (FOVs) 组成,扫描周期为 10 s (漆成莉等, 2016a; 2016b)。四个探元的排列位置如图 1 所示,这类不在中心位置的探元被称为离轴探元。需要注意的是,因为缺少中心位置探元,所以离轴探元不能对标中心位置,这给光谱定标增加了难度。HIRAS 光谱特征参数如表 1 所示。

表 1 HIRAS 的 FSR 和 DSR L1 产品规格

Table 1 Specification for HIRAS FSR and DSR L1 products

波段名称	波段光谱范围/(cm^{-1})	光谱分辨率/(cm^{-1})		通道数/个	
		FSR	DSR	FSR	DSR
短波	2155~2550	0.625	2.500	637	163
中波	1210~1750	0.625	1.250	869	437
长波	650~1135	0.625	0.625	781	781

HIRAS 采用双边采集数据的方式,从负的最大光程差 (MPD),经过零光程差位置,到正的 MPD 处。稳频激光系统产生一束中心波长为 852.35702 nm 的准直激光束,处于仪器光路的中心位置。仪器在工作时,激光束也发生干涉,随之产生激光干涉信号。每产生一个信号,启动一次干涉图数据的采集,所以如果激光波长不准,干涉图采样间隔会改变。但是考虑到 HIRAS 的激光器频率精度达到了 1 ppm,精度满足仪器设计指标,故本研究忽略激光的误差。HIRAS 预处理产品的两套光谱分辨率如表 1 所示,三个波段的光谱分辨率均为 0.625 cm^{-1}

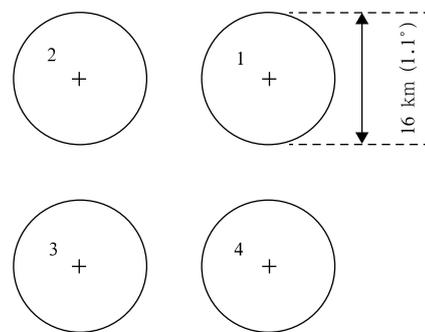


图 1 四个探元地面视场图示 (2×2 FOVs)

Fig. 1 Ground footprints of nominal nadir containing the 2×2 FOVs

的是全光谱分辨率(FSR),三个波段的光谱分辨率有区别的是设计光谱分辨率(DSR),业务产品为FSR格式,DSR产品为根据需求进行离线运行。FSR具有更高的光谱分辨率,即拥有两千多个通道,所以本研究使用的数据选择FSR。

1.2 光谱定标精度计算方法:互相关法

干涉仪的频偏表现为频率位置的压缩或伸展,直接简单对比谱无法做到光谱精度的精确评估。互相关法是精确评估光谱精度的有效手段,该方法视参考谱的频率位置不变,观测谱相对于参考谱移动,只要满足观测谱足够精细的条件,便可以用相关程度来量化频率的偏移。此外,由于光谱频率定标误差量级为ppm,互相关法应用之前需要将待评估的观测光谱处理为高采样光谱分辨率的光谱,即不改变光谱分辨率,通过延长干涉图长度的方法提高其光谱采样分辨率。

设有光谱 $S_1(\sigma)$ 和 $S_2(\sigma)$, σ 是波数,选定光谱区域 (σ_1, σ_2) ,固定 $S_1(\sigma)$,移动 $S_2(\sigma)$,计算移动过程中的相关系数 $R(S_1, S_2)$ 和标准差 $D(S_1, S_2)$,从中找出相关性程度最大的谱,相应的光谱移动量即为频率偏移量。 $R(S_1, S_2)$ 和 $D(S_1, S_2)$ 表达式如下(Chen et al, 2013b):

$$R(S_1, S_2) = r_{S_1 S_2} = \frac{\sum_{i=1}^n (S_{1,i} - \bar{S}_1)(S_{2,i} - \bar{S}_2)}{(n-1)D_{S_1 S_2}} = \frac{\sum_{i=1}^n (S_{1,i} - \bar{S}_1)(S_{2,i} - \bar{S}_2)}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (S_{1,i} - \bar{S}_1)^2 (S_{2,i} - \bar{S}_2)^2}} \quad (1)$$

$$D(S_1, S_2) = D_{S_1 S_2} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n [(S_{1,i} - \bar{S}_1) - (S_{2,i} - \bar{S}_2)]^2}{n-1}} \quad (2)$$

式中: n 是通道号; \bar{S} 和 D 分别是光谱 S 的平均值和标准差。频率偏移量与光谱区域中心波数之比为光谱偏差。

光谱区域 (σ_1, σ_2) 的移动,遍历了多个吸收带,所以互相关法本身是存在误差的,并且误差的大小依赖于光谱区域的选择。为了得到代表性良好的光谱区域,本文重点研究方法自身带来的误差。

用逐线积分模式考虑所有波数的贡献,计算一个波段内的辐射谱,其气体吸收线中心位置的精度

非常高,足以作为标准,不同于与其他同类红外高光谱仪器的交叉比对,通过模拟光谱的方式,可以对全球范围内的观测和模拟光谱进行评估(Alvarado et al, 2013)。本研究在模拟参照光谱时选择了计算精度高、应用广泛的逐线积分辐射传输模式(LBLRTM)(Clough et al, 2005)。

1.3 晴空视场检测方案

资料同化或反演应用都需要做晴空通道观测,通常基于阈值法、红外卫星云图或结合微波观测作云检测(邓松等, 2017; 朱文刚等, 2013; 陈靖等, 2011; 卢乃锰等, 2017),而准确估计光谱定标精度要求视场内有大范围的水面晴空,挑选出可信度最高的晴空样本,保证光谱精度评估的可靠性。有研究表明,有些云产品是基于高空间分辨率成像仪的数据,利用这些云产品进行晴空检测的效果较好(官莉和王振会, 2007),这对本研究有很好的借鉴,所以与HIRAS同平台的中分辨率光谱成像仪(MERSI-II)是一个很好的选择,并且国家卫星气象中心产品生成系统业务生成了MERSI-II云检测产品,该产品是综合利用可见和红外通道观测,针对陆地、海洋、极地以及白天夜间进行了多阈值的分类处理,提高不同下垫面的云检测质量,确定像元的有云和晴空判识。云检测产品可以判识有云、可能有云、可能晴空和晴空,为HIRAS提供了很好的晴空检测手段。

为了得到HIRAS晴空样本,本研究的晴空视场检测方案如下:基于同平台仪器的匹配算法(Wang et al, 2016),首先对每个HIRAS像元计算其投影范围,根据HIRAS与MERSI-II仪器参数和观测特征计算观测矢量,建立像元匹配矩阵。MERSI-II的空间分辨率高于HIRAS,判断MERSI-II的像元是否位于HIRAS像元内,判别依据为两个同平台仪器观测矢量的夹角必须小于样本视场张角的一半。完成空间匹配之后,遍历样本视场内的MERSI-II的像元,只有满足视场内所有像素点均指示晴空的条件,才能将该样本视作晴空样本。然后循环对所有样本依次遍历,得到一系列的晴空样本,同时提取HIRAS晴空样本的数据信息。基于两个同平台的仪器,样本数量是可观的。

为了直观地看到晴空样本的分布,在MERSI-II热红外图上重点标记出HIRAS晴空样本的位置信息,如图2所示,图中展示的样本时次为2018年3月5日19:40 UTC(世界时,下同)。MERSI-II的

云检测产品,云产品将云覆盖的情况细化成七类,这七类分别为有云、可能有云、陆地晴空、可能的陆地晴空、水面晴空、可能的水面晴空和太阳耀斑。图 3 中深蓝色表示水面晴空,从图 2 中的红色十字标记了 HIRAS 像元中心位置。通过比较图 2 和图 3,说明基本筛选出了 HIRAS 水面晴空样本。

2 光谱区域选择的敏感性分析研究方案

当探元与主光轴不相交时,会产生离轴效应,导致光谱偏差。模拟谱的离轴参数误差可人为设置,并可理论推导出精确值,主要用于分析绝对光谱偏差值;实际观测光谱包含噪声,但其优势是有大量样本,利于分析光谱区域选择的稳定性。敏感性分析的试验设计包含:频率偏差值的理论推导、光谱区域

的遍历方案设计、光谱区域的初步选择以及最终选定。结合模拟谱与观测谱的敏感性分析,以获得最合适的光谱区域。

2.1 频率偏差的理论推导

仪器制造工艺的误差,卫星升空时巨大的推力,卫星升空后长时间绕地球运行等等,都会使得探元离轴距离发生未知的微小变化。基于傅里叶变换的干涉仪,其离轴距离的改变量与频偏有一定的物理关系,在频域表现为光谱的压缩或伸长,假设一个离轴距离改变量可以理论推导出频偏,同样也可以用频偏理论推导出离轴距离的改变量(Kauppinen and Saarinen,1992)。假设探元是点元,并且探元半径 R_0 趋近于 0,有关系式:

$$\sigma = \sigma_0 \cos(R_c) \quad (3)$$

对式(3)进行微分、近似、移项后,得到关系式如下:

$$d\sigma/\sigma_0 = -R_c^2 dR_c/R_c \quad (4)$$

式中: R_c 是探元中心到主光轴的距离, σ_0 是初始频率位置。

依据 HIRAS 在研制阶段测得的探元相对位置,有 $R_c=0.02426$ rad,取 $dR_c/R_c=0.01$,理论上由式(4)可得其光谱精度理论值为 $d\sigma/\sigma_0 = -5.885476 \times 10^{-6} \approx -5.9$ ppm。不考虑激光频率的误差,假设这一 5.9 ppm 的误差全部来自于探元位置误差。模拟两个离轴谱分别用 S_1 和 S_2 表示。 S_1 的 R_{c1} 取 0.02426 rad。 R_{c1} 和 R_{c2} 满足关系: $dR_c/R_{c1} = (R_{c2} - R_{c1})/R_{c1} = 1\%$,故 S_2 的 R_{c2} 为 0.02484 rad。

2.2 光谱区域的遍历方案

基于理论模拟谱,计算不同光谱区域下的相对误差,其表达式如下:光谱定标精度相对误差=(计算值-理论值)/理论值。相对误差小,则说明与-5.9 ppm 非常接近;反之,则与理论值相差大。以相对误差的大小为依据,初步选取光谱区域。

在光谱区域遍历方案的设计中,对于 0.625 cm^{-1} 的光谱分辨率而言, 50 cm^{-1} 范围内有很多条吸收线,考虑计算量和资源消耗,方案设计光谱区域长度为 50 cm^{-1} ,光谱区域移动步长为 1 cm^{-1} 。光谱区域起始位置遍历的长波波段为 $650 \sim 1049 \text{ cm}^{-1}$,共计 400 个光谱区域;遍历的中波波段为 $1214 \sim 1713 \text{ cm}^{-1}$,共计 450 个光谱区域;遍历的短波波段为

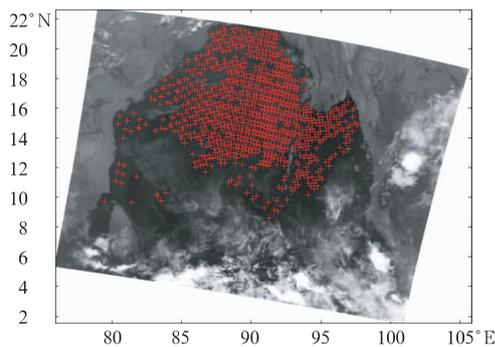


图 2 MERSI-II 热红外图叠加 HIRAS 晴空样本点
Fig. 2 Superimposed image of the HIRAS clear sky pixel center point and the MERSI-II thermal infrared image

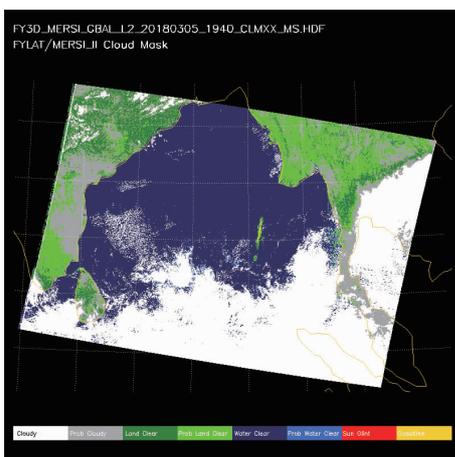


图 3 MERSI-II 云产品图像
Fig. 3 MERSI-II cloud mask product

2155~2454 cm^{-1} , 共计 300 个光谱区域。

3 敏感性结果分析

假设互相关方法本身不引入误差, 在评估光谱定标精度时随意选取波段, 其频率偏差与理论值 (-5.9 ppm) 应该保持一致, 但实际上它随光谱区域而变化, 所以必须考虑互相关法带来的误差。基于模拟谱在全谱段上计算频率偏差结果与理论值的相对误差, 依据相对误差的大小初步选出一部分光谱区域; 为了选出最佳光谱区域、考察光谱区域的稳定性, 基于观测谱的敏感性研究包含了实际大气状态的信息, 并且重点分析样本的统计结果。本研究把相对误差、评估结果的平均值(或被称为光谱偏差平均值)和评估结果的标准差(或被称为光谱偏差标准差)作为敏感性分析指标。

3.1 长波段分析

3.1.1 基于模拟光谱的敏感性分析

在长波段遍历的光谱区域包含 $14.7 \mu\text{m}$ (680 cm^{-1}) 的二氧化碳强吸收带、 $14.1 \mu\text{m}$ (709 cm^{-1}) 和 $9.6 \mu\text{m}$ (1042 cm^{-1}) 的臭氧强吸收带、 $8\sim 12 \mu\text{m}$ ($1250\sim 833 \text{ cm}^{-1}$) 的水汽弱吸收带和大气窗区。

图 4a 展示了不同光谱区域的相对误差。当光谱区域遍历到大气窗区时, 相对误差起伏大, 相对误差可达 51.7% , 对应绝对误差为 3.05 ppm (绝对误

差 = 相对误差 \times 理论值, 理论值为 $|-5.9 \text{ ppm}|$), 当光谱区域遍历吸收带时, 相对误差小且平稳, 分别在 0.4% 和 0.6% 之间波动, 0.6% 对应的绝对误差为 0.0354 ppm 。因此光谱区域不能选择在大气窗区, 选择在气体吸收带的光谱区域是合适的。

此外, 选择相对误差较小, 并且随光谱区域的移动很平稳的区域, 在二氧化碳强吸收带以及其与臭氧吸收带的重叠区域, 进一步选择光谱区域, 并把它放大来看(图 4b)。这些光谱区域的起始波数以 1 cm^{-1} 为间隔, 从 688 cm^{-1} 开始, 共有 32 个, 对应图 4b 中光谱区域中心波数为 $713\sim 744 \text{ cm}^{-1}$, 其相对误差小于 0.7% 。从图 4 也可以看出, 总体和局部的表现都是一致的, 说明不论是基于 $D(S_1, S_2)$ 还是基于 $R(S_1, S_2)$ 的方法都是可以的, 故本研究不作区分, 视为同样有效的光谱定标精度。图 5 所示的红线和灰点线分别为离轴谱 S_1 和 S_2 。以 S_1 为参考谱, S_2 的频率精度为 -5.9 ppm 。从离轴谱的谱形来看, 有明显的吸收线的特征。综上所述, 基于模拟光谱的敏感性分析的初选结果为: 光谱区域起始波数从 688 cm^{-1} 到 719 cm^{-1} , 共有 32 个。

3.1.2 基于在轨实测光谱的敏感性分析

为了避免由于地球旋转导致的频偏(Chen et al, 2013b)和白天太阳辐射的贡献(Chen et al, 2013a), 研究选择热带区域夜间海洋无云视场。本研究选取的 2018 年观测样本如表 2 所示, 共计 620 个样本。

模拟参考光谱步骤(Chen et al, 2017): (1) 模拟

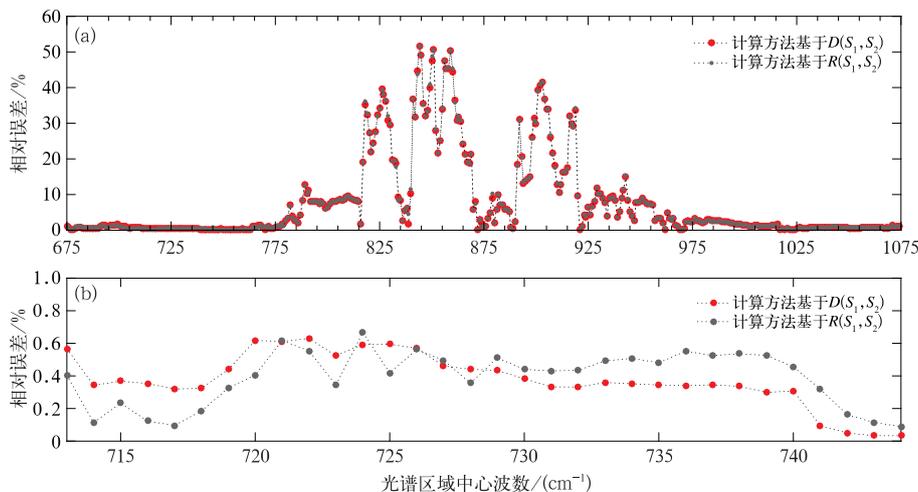


图 4 长波波段的相对误差(a)和放大 $713\sim 744 \text{ cm}^{-1}$ 范围的横坐标的相对误差(b)

Fig. 4 Relative error in each spectral region for FOV 1 at Band 1 (LW) (a) and a zoomed view of Fig. 4a at frequency $713\sim 744 \text{ cm}^{-1}$ (b)

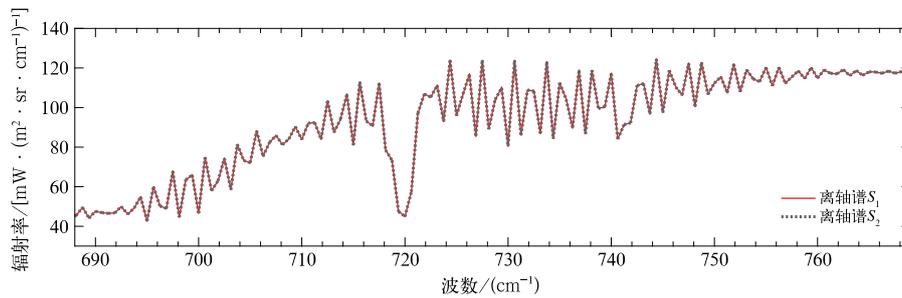


图 5 长波波段的离轴谱

Fig. 5 Two simulated off-axis spectra of Band 1 (LW)

表 2 与 MERSI 云产品匹配的 2018 年 HIRAS 晴空检测样本

Table 2 Number of HIRAS clear-sky test samples in 2018 matched with MERSI cloud products

时间/(月-日-时-分, UTC)	样本数量/个
5-15-17-10	129
5-14-17-35	65
5-10-17-05	97
4-29-15-30	59
4-28-15-50	55
4-27-19-35	47
4-23-17-30	76
4-21-16-25	92

光谱是分辨率为 0.001 cm^{-1} 的辐射谱, 模式输入的水汽、温度廓线是经过时空匹配的欧洲中期天气预报中心 (ECMWF) 预报场, 甲烷、一氧化碳等大气分子吸收线均为 LBLRTM v12.1 (Clough et al, 2005) 默认廓线; (2) 通过逆 FFT 变换到干涉图域, 进行干涉图的截断; (3) 通过 FFT 变换到光谱域, 得到

0.625 cm^{-1} 分辨率下的参考光谱。

图 6 为 32 个初选光谱区域的样本统计结果。图 6a 结果显示, 每个初选光谱区域的光谱偏差平均值均小于 3 ppm 。图 6b 是光谱偏差标准差的统计结果, 结果显示随着光谱区域的改变, 光谱偏差标准差下降了, 然后稳定在 1.7 ppm 左右。中心波数小于 730 cm^{-1} 的光谱区域, 其标准差较大, 说明臭氧和二氧化碳吸收重叠的区域受噪声影响很大, 是不稳定的光谱区域, 大于 730 cm^{-1} 的光谱精度平均估计值在 -0.5 ppm 以内, 标准差为 $1.6 \sim 1.7 \text{ ppm}$, 并且相对误差较小、辐射能量较大, 所以更为合适。

4—5 月, HIRAS 正处于在轨测试, 评估定标精度时依据了经验的光谱区域, 即 $704 \sim 754 \text{ cm}^{-1}$ 。该光谱区域的长度为 50 cm^{-1} , 其中心位置的波数为 729 cm^{-1} 。考虑到本研究暂不区分 $D(S_1, S_2)$ 和 $R(S_1, S_2)$, 选择基于 $D(S_1, S_2)$ 方法的结果来作分析。虽然基于 $D(S_1, S_2)$ 来讨论, 但是 $D(S_1, S_2)$ 和

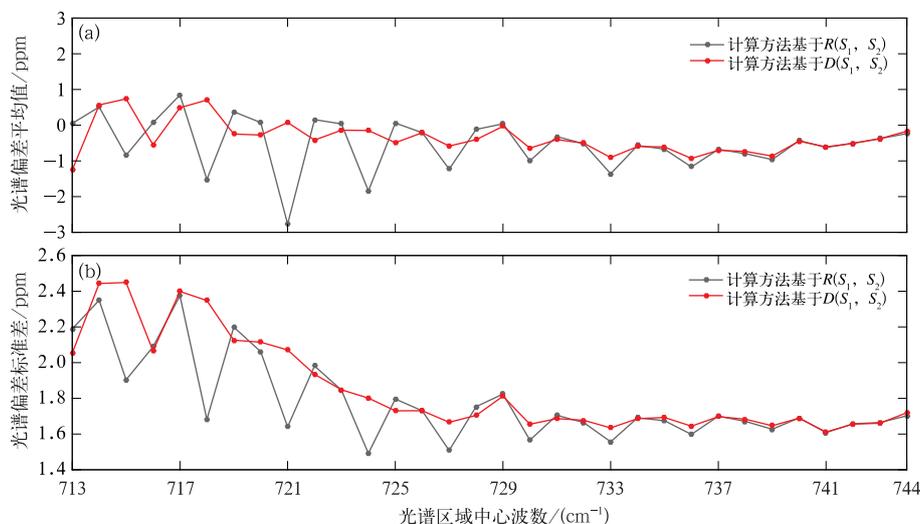


图 6 长波段光谱偏差评估结果的平均值(a)和标准差(b)的样本统计

Fig. 6 Sample statistics of average (a) and standard deviation (b) of the evaluation results for Band 1 (LW)

$R(S_1, S_2)$ 在图中分别用红色和灰色做了标识。在经验光谱区域评估光谱定标精度,会得到图 6 中横坐标为 729 cm^{-1} 对应的评估结果,其平均值为 -0.0312 ppm ,标准差为 1.8119 ppm 。但是从图 6b 可以看出中心波数位于 740 cm^{-1} 附近的光谱区域,标准差较小,会更加稳定,参考的价值更高。由此,基于上述敏感性分析,综合考虑选择起始波数在 $716 \sim 719 \text{ cm}^{-1}$ 的光谱区域为最优选择。

3.2 中波波段分析

3.2.1 基于模拟光谱的敏感性分析

对中波波段的分析方法与长波波段是一样的,只是换了评估的光谱,所以用于评估的光谱区域也要做相应的分析,给出适用于中波波段评估的光谱区域。模拟谱的相对误差展示在图 7 中。同样,红点线和灰点线有很好的一致性。考虑计算的时间成本,在众多相对误差小于 0.2% 的光谱区域中选择了 36 个

光谱区域。初选结果如图 7b 所示,划分成三个范围,每个范围包含若干个光谱区域,共 36 个光谱区域。范围一:起始波数遍历 $1258 \sim 1273 \text{ cm}^{-1}$,对应图 7b 中光谱区域中心波数为 $1283 \sim 1298 \text{ cm}^{-1}$,气体吸收带有甲烷、一氧化二氮和水汽;范围二:起始波数遍历 $1370 \sim 1380 \text{ cm}^{-1}$,对应图 7b 中光谱区域中心波数为 $1395 \sim 1405 \text{ cm}^{-1}$,包含水汽吸收带,范围三:起始波数遍历 $1543 \sim 1551 \text{ cm}^{-1}$,对应图 7b 中光谱区域中心波数为 $1568 \sim 1576 \text{ cm}^{-1}$,位于水汽的强吸收带。在中波波段,特别是水汽的强吸收位置,其相对误差很小。从图 8 的辐射谱可见,中波波段在水汽的强吸收带辐射能量较小。

3.2.2 基于在轨实测光谱的敏感性分析

图 9 为 36 个初选光谱区域的样本统计结果。当在范围 1 内逐步遍历时,光谱区域中心靠近较宽吸收包络时,通常是多种气体吸收线重合后呈现的不规则形状,即范围一内的光谱区域中心波数为

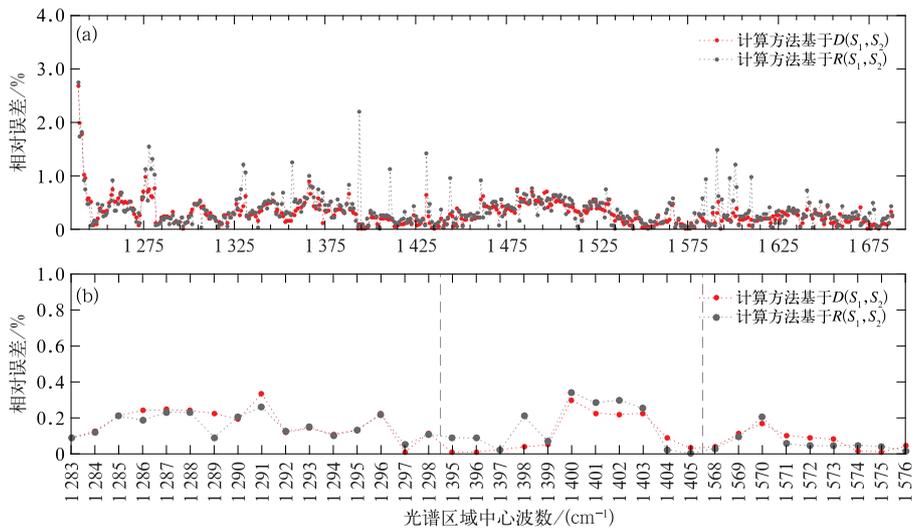


图 7 中波波段的相对误差(a)和初选光谱区域的相对误差(b)

Fig. 7 Relative error (a) and relative error of initial selection of spectral region (b) in each spectral region for FOV 1 at Band 2 (MW)

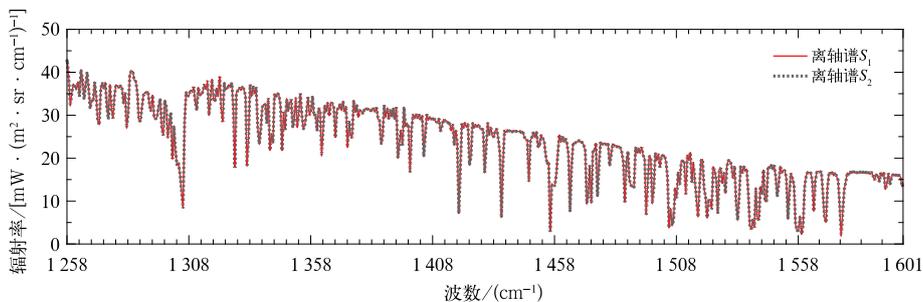


图 8 同图 5,但为中波波段

Fig. 8 Same as Fig. 5, but for the Band 2 (MW)

1292~1298 cm⁻¹, 标准差稳定在 2 ppm 内, 平均值在 ±1 ppm 内; 当在范围二和范围三内遍历时, 在靠近水汽的强吸收带时, 标准差增大至 3~5 ppm, 模拟离轴谱敏感性试验的相对误差较小, 是由于水汽具有明显的时空分布不均匀的特征, 是非常不稳定的大气成分, 在红外波段有强烈的吸收作用。模拟的光谱没有加入廓线误差, 这是为了方便讨论理想的情况, 从 3.2.1 节模拟结果的相对误差可以看出, 在水汽强吸收线的区域进行计算可以很好地捕捉到光谱的频率偏移。然而, 将这套评估方法应用到实际观测谱上, 中波波段的频偏显示较大, 图 9 中显示的情况表明评估结果的标准差越小, 评估结果的平均值越小; 反之, 评估结果的标准差越大, 光谱频偏的平均值越大。这种较大标准差对应的光谱区域用于评估光谱频偏是不合适的, 然而在模拟谱上该光谱区域表现出的相对误差很小。这是由于水汽的强吸收作用的直接表现是对辐射量的影响。一方面吸收作用越强, 探测器接收到的辐射能量越小; 另一方面水汽不稳定, 廓线的误差大。这说明在光谱上水汽吸收非常强的区域反而不适合做光谱频偏的计算。

HIRAS 在测试阶段评估中波波段时, 也依据了经验的光谱区域, 即 1264~1314 cm⁻¹。为了控制变量, 该光谱区域的长度也设置成了 50 cm⁻¹, 与长波波段的区域长度一致。图 9a 中横坐标的 1289 cm⁻¹ 对应的就是评估结果的平均值, 图 9b 中横坐标 1289 cm⁻¹ 对应的是评估结果的标准差。经验光谱区域在范围一中, 其评估结果的标准差超过 2 ppm, 并且不是最小的, 这说明通过调整光谱区域, 不仅让结果稳定性更好, 而且光谱偏差平均值更

小。综上所述, 范围三由于标准差超过 4 ppm 显然是不合适的, 起始波数为 1267~1273 cm⁻¹ 的光谱区域为最优选择。

3.3 短波波段分析

3.3.1 基于模拟光谱的敏感性分析

将第 2 节光谱区域选择的敏感性分析研究方案同样应用到短波波段的分析中, 结果展示在图 10 中。相对误差很高的光谱区域位于大气窗区, 故也是不合适的光谱区域, 这和长波大气窗区的结果一样。在短波波段也分别取了三个范围, 每个范围包含若干个光谱区域, 所选范围内的光谱区域总数为 36 个。与中波波段不同的是, 相对误差的阈值设置在 10%。其分布的情况展示在图 10b 中。范围一: 起始波数遍历 2159~2164 cm⁻¹, 对应图 10b 中光谱区域中心波数为 2184~2189 cm⁻¹, 位于一氧化碳强吸收带和水汽强吸收带翼; 范围二: 起始波数遍历 2189~2213 cm⁻¹, 对应图 10b 中光谱区域中心波数为 2214~2238 cm⁻¹, 位于一氧化二氮和二氧化碳强吸收带; 范围三: 起始波数遍历 2333~2337 cm⁻¹, 对应图 10b 中光谱区域中心波数为 2358~2362 cm⁻¹, 位于二氧化碳强吸收带, 辐射量很小。

三个范围的相对误差大小关系为: 范围一 > 范围三 > 范围二, 说明在强吸收带的评估表现最好。结合图 11 所示的短波离轴谱, 从能量的角度来分析, 能量较大但是吸收带平缓的, 其相对误差较大; 能量较小但是吸收带形状起伏大的, 其相对误差越小; 能量减小到超过一定程度, 相对误差反而会增大。

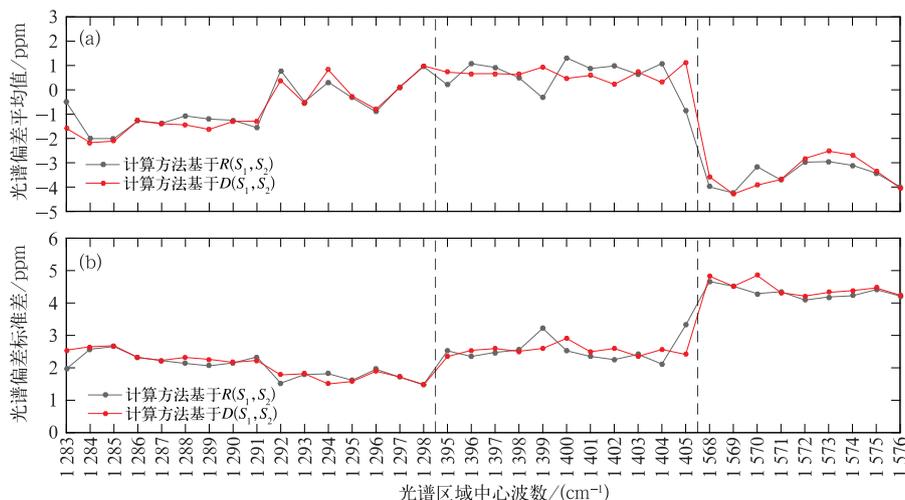


图 9 同图 6, 但为中波波段

Fig. 9 Same as Fig. 6, but for sample statistics for Band 2 (MW)

3.3.2 基于在轨实测光谱的敏感性分析

从评估结果的平均值大小来看,范围一和范围二的光谱偏差平均值均优于 1 ppm,而范围三展示的评

图 12 为 36 个初选光谱区域的样本统计结果。

图 12 为 36 个初选光谱区域的样本统计结果。

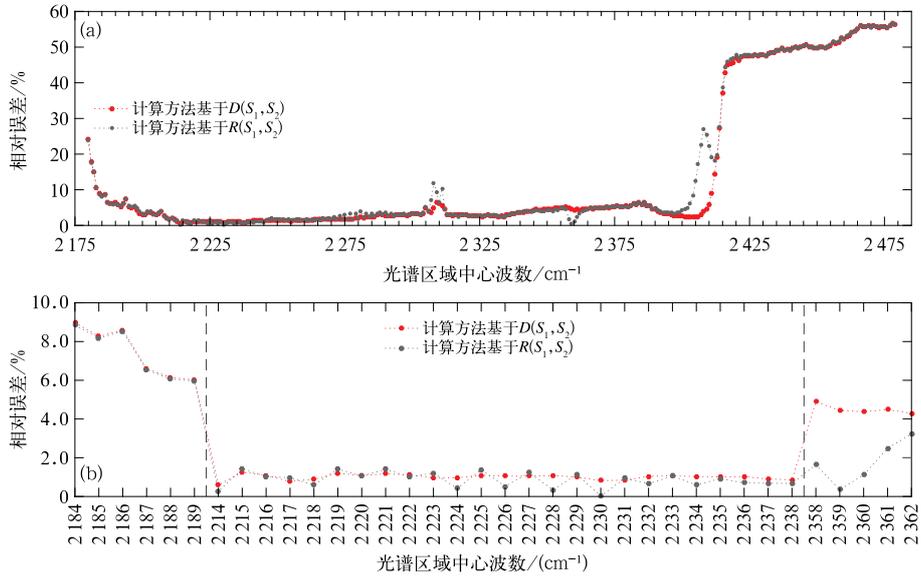


图 10 同图 7, 但为短波波段

Fig. 10 Same as Fig. 7, but for FOV 1 at Band 3 (SW)

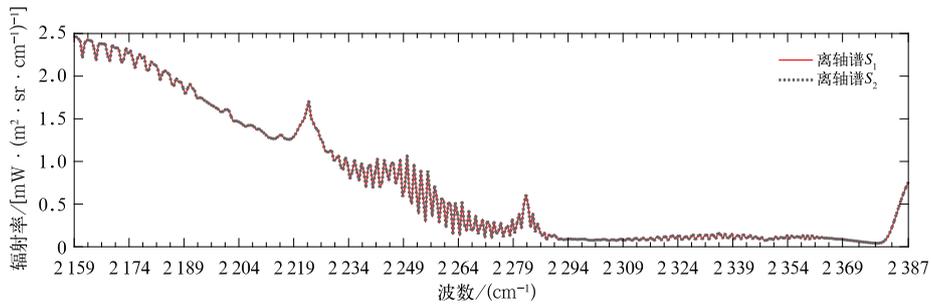


图 11 同图 5, 但为短波波段

Fig. 11 Same as Fig. 5, but for Band 3 (SW)

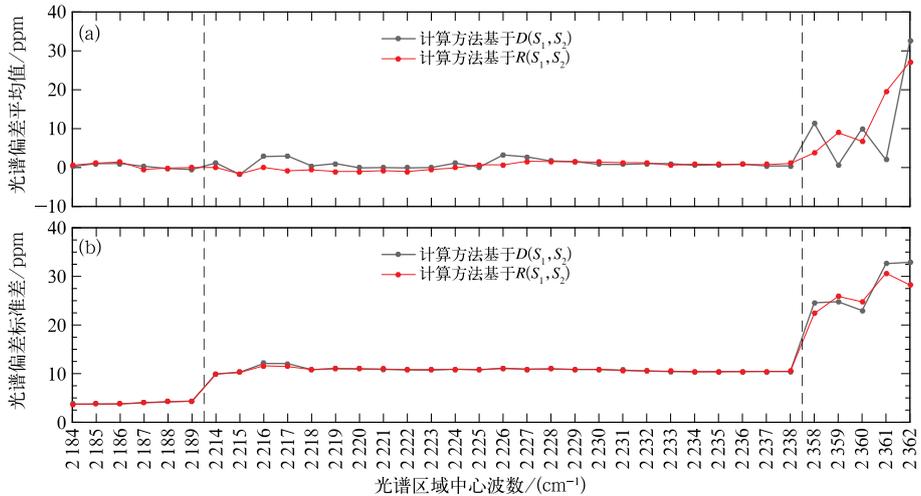


图 12 同图 6, 但为短波波段

Fig. 12 Same as Fig. 6, but for sample statistics for Band 3 (SW)

估结果的平均值明显偏大。从评估结果的标准差大小来看,范围一的标准差是最小的,虽然分别用范围一和范围二的光谱区域评估光谱偏差得到的平均值相近,并且3.3.1节敏感性分析指出范围二的相对误差是最小的,但是范围二的稳定性表现不好。说明范围二评估的光谱定标精度结果受实际大气的影响比范围一大,是不可忽略的。综合分析,范围一为最佳选择,而且要尽量避开短波波段的强吸收带。HIRAS在测试中,评估光谱定标精度时依据的经验光谱区域为 $2160\sim 2210\text{ cm}^{-1}$,光谱区域长度也为 50 cm^{-1} ,对应光谱区域中心波数为 2185 cm^{-1} 。评估结果的平均值为 1.015 ppm ,评估结果的标准差为 3.745 ppm 。探测器接收到的短波波段的辐射很小,又加上强吸收带的影响,本研究表明,经验光谱区域及其邻近区域在众多初选光谱区域中表现最好。

4 结论与讨论

随着卫星高光谱大气探测的发展,高光谱仪器的发展很有前景,用户对高光谱数据的需求越来越多。仅仅依靠经验光谱区域去评估光谱定标精度,不能满足高光谱仪器对光谱定标精度越来越高的需求。本研究介绍了光谱定标精度的评估方法,讨论了光谱区域选择对光谱定标精度评估方法的影响,针对光谱区域选择进行了敏感性分析,并将光谱区域应用到仪器实测的光谱定标中。本研究给出的最佳光谱区域对精确评估光谱定标精度有很重要的应用意义。此外,讨论频率评估方法对光谱区域选择的敏感性,以及敏感程度和哪些因素有关,对于深入理解观测光谱的频率偏差有很好的参考意义。

本文首先对互相关法的误差进行系统分析,确定了从模拟谱和观测谱逐步进行光谱区域选择敏感性分析的研究方案。在假设仅有离轴参数误差的条件下,模拟了两个已知频偏的光谱。用互相关法去循环评估它们相对于彼此的频率偏差,每评估一次,光谱区域便移动一个波数。选择相对误差较小的光谱区域对HIRAS在轨测试数据进行光谱定标精度的评估,根据样本统计量的值,选择最稳定的光谱区域作为最佳光谱区域。模拟谱的敏感性分析表明光谱区域选择会影响光谱定标精度的评估,在评估时应该尽量选择气体吸收带,如果光谱区域内没有明显的吸收带,长波和短波的评估最大会有 3 ppm 的绝对误差;中波整个谱段处在水汽吸收区域,有明显

的吸收带,中波的评估小于 1 ppm 。在用互相关法评估实际光谱的定标精度时,必须考虑模式模拟谱和观测谱的亮温差,具有强烈吸收性的气体吸收带可能由于辐射能量太小、大气分子廓线的误差等,使得评估结果的标准差很大或者评估结果的平均值不达标。

在光谱定标精度的评估中,最佳光谱区域选择应分波段讨论。在长波波段,选择噪声较小、二氧化碳强吸收带带翼和水汽吸收带重叠的部分,即起始波数在 $716\sim 719\text{ cm}^{-1}$ 的光谱区域;在中波波段,选择包含甲烷强吸收带、一氧化二氮强吸收带的区域,或者水汽强吸收带的带翼,即起始波数在 $1267\sim 1273\text{ cm}^{-1}$ 的光谱区域;短波波段选择经验光谱区域即可。

综上所述,相对于经验光谱区域而言,本文提出了更具有参考价值的光谱区域,采用本研究的光谱区域可以提高光谱定标精度的评估效率和精度,对其他红外高光谱仪器的在轨光谱精度评估和长期监测同样具有重要的参考价值。

致谢:文中所用的FY-3D/MERSI-II云产品由国家卫星气象中心闵敏老师提供,在此表示感谢。

参考文献

- 陈靖,李刚,张华,等,2011.云检测在高光谱大气红外探测器辐射率直接同化中的应用[J].气象,37(5):555-563. Chen J, Li G, Zhang H, et al, 2011. Application of cloud detection to assimilation of AIRS radiance data[J]. Meteor Mon, 37(5):555-563(in Chinese).
- 邓松,李刚,张华,2017.高光谱红外云检测方案阈值的客观判定方法[J].气象,43(2):213-220. Deng S, Li G, Zhang H, 2017. Objective determination scheme of threshold in high-spectral-resolution infrared cloud detection[J]. Meteor Mon, 43(2):213-220(in Chinese).
- 董超华,李俊,张鹏,等,2013.卫星高光谱红外大气遥感原理和应用[M].北京:科学出版社:5-13. Dong C H, Li J, Zhang P, et al, 2013. The principle and application of satellite hyperspectral infrared atmospheric remote sensing[M]. Beijing: Science Press:5-13(in Chinese).
- 冯驹,韩昌佩,邹曜璞,等,2019.红外傅里叶光谱仪在轨光谱定标算法研究[J].光学学报,39(6):0630002. Feng X, Han C P, Zou Y P, et al, 2019. On-orbit spectral calibration algorithm of infrared Fourier transform spectrometer[J]. Acta Opt Sin, 39(6):0630002(in Chinese).
- 官莉,王振会,2007.用空间匹配的MODIS云产品客观确定AIRS云检测[J].气象科学,27(5):516-521. Guan L, Wang Z H, 2007. Objective determination of AIRS cloud mask using co-located MODIS cloud mask[J]. Sci Meteor Sin, 27(5):516-521(in Chi-

- nese).
- 卢乃锰,方翔,刘健,等,2017. 气象卫星的云观测[J]. 气象,43(3):257-267. Lu N M, Fang X, Liu J, et al, 2017. Understanding clouds by meteorological satellite[J]. Meteor Mon, 43(3):257-267(in Chinese).
- 漆成莉,胡秀清,张里阳,等,2012. 基于高光谱资料对 FY-1C/1D 气象卫星进行交叉定标[J]. 气象学报,70(4):892-901. Qi C L, Hu X Q, Zhang L Y, et al, 2012. Cross-calibration of FY-1C/1D satellite based on hyper-spectral data[J]. Acta Meteor Sin, 70(4):892-901(in Chinese).
- 漆成莉,顾明剑,胡秀清,等,2016a. 风云三号卫星红外高光谱探测技术及潜在应用[J]. 气象科技进展,6(1):88-93. Qi C L, Gu M J, Hu X Q, et al, 2016a. FY-3 satellite infrared high spectral sounding technique and potential application[J]. Adv Meteor Sci Technol, 6(1):88-93(in Chinese).
- 漆成莉,徐寒列,胡秀清,等,2016b. 风云三号气象卫星红外分光计在轨交叉定标精度监测系统[J]. 红外与毫米波学报,35(3):341-349. Qi C L, Xu H L, Hu X Q, et al, 2016b. Platform for monitoring accuracy of on orbit cross calibration; infrared atmospheric sounder onboard FY-3 satellite[J]. J Infrared Millim Waves, 35(3):341-349(in Chinese).
- 朱文刚,李刚,张华,等,2013. 高光谱大气红外探测器 AIRS 资料云检测及晴空通道应用技术初步研究[J]. 气象,39(5):633-644. Zhu W G, Li G, Zhang H, et al, 2013. Study on application technique of cloud detection and clear channels hyperspectral atmospheric infrared detector AIRS data[J]. Meteor Mon, 39(5):633-644(in Chinese).
- Alvarado M J, Payne V H, Mlawer E J, et al, 2013. Performance of the line-by-line radiative transfer model (LBLRTM) for temperature, water vapor, and trace gas retrievals: recent updates evaluated with IASI case studies[J]. Atmos Chem Phys, 13(14):6687-6711.
- Chen Y, Han Y, van Delst P, et al, 2013a. Assessment of shortwave infrared sea surface reflection and nonlocal thermodynamic equilibrium effects in the community radiative transfer model using IASI data[J]. J Atmos Oceanic Technol, 30(9):2152-2160.
- Chen Y, Han Y, Weng F Z, 2013b. Detection of earth-rotation Doppler shift from Suomi national polar-orbiting partnership cross-track infrared sounder[J]. Appl Opt, 52(25):6250-6257.
- Chen Y, Han Y, Weng F Z, 2017. Characterization of long-term stability of Suomi NPP cross-track infrared sounder spectral calibration[J]. IEEE Trans Geosci Remote Sens, 55(2):1147-1159.
- Clough S A, Shephard M W, Mlawer E J, et al, 2005. Atmospheric radiative transfer modeling; a summary of the AER codes[J]. J Quant Spectrosc Radiat Transf, 91(2):233-244.
- Kauppinen J, Saarinen P, 1992. Line-shape distortions in misaligned cube corner interferometers[J]. Appl Opt, 31(1):69-74.
- Strow L L, Motteler H, Tobin D, et al, 2013. Spectral calibration and validation of the cross-track infrared sounder on the Suomi NPP satellite[J]. J Geophys Res Atmos, 118(22):12486-12496.
- Wang L K, Tremblay D, Zhang B, et al, 2016. Fast and accurate collocation of the visible infrared imaging radiometer suite measurements with cross-track infrared sounder[J]. Remote Sens, 8(1):76.