



中华人民共和国国家计量技术规范

JJF XXXX—XXXX

地基污染气体超光谱靶向成像遥感监测 仪校准规范

Calibration Specification for Ground-Based Hyperspectral Imaging

Remote Sensing Monitors for Pollutant Gases

(征求意见稿)

XXXX - XX - XX 发布

XXXX - XX - XX 实施

国家市场监督管理总局 发布

地基污染气体超光谱靶向 成像遥感监测仪校准规范

JJF XXXX—XXXX

Calibration Specification for Ground-Based Hyperspectral Imaging Remote Sensing Monitors for Pollutant Gases

归口单位：全国生态环境监管专用计量测试技术委员会

主要起草单位：中国科学技术大学

中国环境监测总站

中国计量科学研究院

中国科学院合肥物质科学研究院

参加起草单位：广东省广州生态环境监测中心站

云南省生态环境监测中心

本规范委托全国生态环境监管专用计量测试技术委员会负责解释

本规范主要起草人：

参加起草人：

目 录

引 言.....	III
1 范围.....	1
2 引用文件.....	1
3 术语和定义.....	2
3.1 术语.....	2
3.2 计量单位.....	3
4 概述.....	3
5 计量特性.....	3
5.1 检出限.....	3
5.2 浓度示值误差.....	3
5.3 浓度测量重复性.....	3
5.4 波长（波数）示值误差.....	3
5.5 光谱分辨力.....	3
5.6 接收视场角.....	4
5.7 空间响应一致性.....	4
6 校准条件.....	4
6.1 环境条件.....	4
6.2 测量标准装置及配套设备.....	4
7 校准项目和校准方法.....	6
7.1 波长（波数）示值误差.....	6
7.2 光谱分辨力.....	7
7.3 检出限.....	8
7.4 浓度示值误差.....	9
7.5 浓度测量重复性.....	9
7.6 接收视场角.....	9

7.7 空间响应一致性.....	10
8 校准结果表达.....	11
9 复校时间间隔.....	12
附录 A.....	13
附录 B.....	17
附录 C.....	19
附录 D.....	20

引 言

JJF 1001—2011《通用计量术语及定义》、JJF 1071—2010《国家计量校准规范编写规则》、JJF 1059.1—2012《测量不确定度评定与表示》共同构成支撑本规范制定工作的基础性系列规范。

本规范为首次发布。

地基污染气体超光谱靶向成像遥感监测仪校准规范

1 范围

本规范适用于采用二维成像方式、面向固定或准固定污染源开展目标污染气体观测的地基超光谱靶向成像遥感监测仪（以下简称“仪器”）的校准。

仪器采用被动遥感观测方式，以太阳光作为观测光源。超光谱遥感监测是指采用连续或高密度光谱采样方式获取目标区域光谱信息，并具有足够光谱分辨能力识别目标物质特征光谱结构的监测方法。

主动式、机载和星载仪器不属于本规范的直接适用范围。

对于浓度类校准，本规范适用于 NO_2 、 SO_2 、 HCHO 、 CO 、 HCl 、 NH_3 等具有明确吸收特征且具备有证标准物质或其他有效计量溯源途径的目标气体。对于其他满足量值溯源要求、且在相应工作波段具有可用吸收特征的气体，可参照本规范规定的方法进行校准。

2 引用文件

本规范引用了下列文件：

GB 3095—2026 环境空气质量标准

GB 37822—2019 挥发性有机物无组织排放控制标准

GB/T 6379.1—2004 测量方法与结果的准确度

GB/T 6040—2019 红外光谱分析方法通则

HJ/T 55—2000 大气污染物无组织排放监测技术导则

HJ 130—2019 规划环境影响评价技术导则 总纲

HJ 168—2020 环境监测分析方法标准制修订技术导则

HJ/T 416—2007 环境信息术语

HJ 1011—2018 环境空气和废气 挥发性有机物组分便携式傅里叶红外监测仪技术要求及检测方法

HJ 1330—2023 固定污染源废气 氨和氯化氢的测定 便携式傅立叶变换红外光谱法

JJG 178—2007 紫外、可见、近红外分光光度计

JJG 681—2025 色散型红外分光光度计检定规程

JJF 1001—2011 通用计量术语及定义

JJF 1319—2011 傅立叶变换红外光谱仪校准规范

T/AHEPI 0002—2023 痕量气体超光谱靶向成像遥感监测技术指南

凡是注日期的引用文件，仅注日期的版本适用于本规范；凡是不注日期的引用文件，其最新版本（包括所有的修改单）适用于本规范。

3 术语和定义

3.1 术语

下列术语适用于本规范。

3.1.1 浓度示值误差 concentration indication error

被校仪器给出的目标气体浓度示值与对应参考浓度值之差。本规范采用相对形式表示时，应以参考浓度值为分母计算相对示值误差。

[来源：JJF1001—2011，7.20，有修改]

3.1.2 浓度测量重复性 repeatability of concentration measurement

在相同测量条件下，对同一目标气体、同一参考浓度进行重复测量所得结果之间的一致程度。本规范采用相对标准偏差（RSD）表征。

[来源：GB/T 6379.1—2004，3，有修改]

3.1.3 接收视场角 receiving field of view angle

仪器对不同入射方向的光辐射产生有效接收响应的角度范围。本规范以相对响应为最大响应的 50%所对应的两个边界方向之间的夹角表征。

3.1.4 空间响应一致性 spatial response uniformity

在相同输入和测量条件下，仪器不同空间采样位置测量结果之间的一致程度。本规范采用各空间采样位置测量结果的相对标准偏差表征。

3.1.5 靶向成像遥感 targeted imaging remote sensing

本规范所称靶向成像遥感，是指利用超光谱遥感设备针对固定或准固定污染源进行定向观测，并通过摆扫、推扫或等效方式形成二维空间、一维光谱数据，以获取目标污染气体空间分布及浓度等信息。

[来源：T/AHEPI 0002—2023，3.3]

3.2 计量单位

本规范当前浓度类校准方法采用质量浓度表示，单位为 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 。

4 概述

地基污染气体超光谱靶向成像遥感监测仪，一般由前置光学系统、高精度俯仰角电机、俯仰角传感器、主控系统、光纤、分光计和探测器等组成。主控系统控制俯仰角电机选取观测视场，太阳光透过石英玻璃罩进入前置光学系统，经反射、准直、聚焦和光谱分光（或干涉调制）后由探测器接收。

5 计量特性

5.1 检出限

气体种类	典型反演波段（示例）	检出限/（ $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ）
NO_2	338–370 nm	10
SO_2	312–326 nm	10
HCHO	336–359 nm	20
CO	2315–2375 nm	20
NH_3	10300–10800 nm	20
HCl	5249–5277 nm	30

注：表中所列反演波段仅为常用示例，不构成本规范适用范围或仪器工作波段的限制；其他波段只要具有可用吸收特征并满足量值溯源要求，均可采用本规范规定的方法进行校准。

5.2 浓度示值误差

优于 15%。

5.3 浓度测量重复性

$\leq 5\%$ 。

5.4 波长（波数）示值误差

a) 紫外至近红外波段：优于 0.1 nm；

b) 中红外波段：优于 0.2 cm^{-1} 。

5.5 光谱分辨力

a) 紫外至近红外波段：优于 0.5 nm；

b) 中红外波段：优于 1.0 cm^{-1} 。

5.6 接收视场角

校准结果应给出接收视场角实测值，单位为 $^{\circ}$ 。

5.7 空间响应一致性

$\leq 5\%$ 。该特性适用于探测器具有独立空间维、能够同时获取多个空间采样位置光谱信息的超光谱成像遥感监测仪。对于探测器阵列仅用于光谱色散、空间信息完全通过扫描获得的仪器，该特性不适用。

注：以上计量特性指标不用于符合性判别，仅供参考。

6 校准条件

6.1 环境条件

地基污染气体超光谱靶向成像遥感监测仪的校准应在如下工作环境中展开：

- a) 环境温度：(15~30) $^{\circ}\text{C}$ ；
- b) 相对湿度： $\leq 85\%$ ；
- c) 大气压：(50~106) kPa；
- d) 应满足设备正常工作的供电要求，220 V 交流电接地；
- e) 校准时应分别测量并记录气室内（或气室代表位置的）气体温度、绝对压力，以及校准环境相对湿度。温度、压力用于气室参考浓度的状态换算。

6.2 测量标准装置及配套设备

6.2.1 光谱参考源

紫外、可见、近红外波段可使用原子谱线灯（如氖灯、汞灯、氩灯）的原子发射谱线，其绝对波数值作为自然基准，可通过国际标准表查得。

色散型中红外仪器采用有证红外波长标准滤光片；按照 JJG 681—2025，滤光片在空气中的波数扩展不确定度应不大于被校仪器波数示值误差最大允许值绝对值的 $1/3$ 。傅立叶变换中红外仪器采用经国家计量行政部门批准的有证聚苯乙烯红外波长标准物质，并按照 JJF 1319—2011 使用。气体吸收池仅在具有有效定值证书时作为补充参考，不得用理论数据库值或制造商标称峰位代替证书量值。

6.2.2 宽带光源

波长范围：满足校准要求的工作波长；

输出光功率：满足校准要求的输出光功率；

稳定度：不超过 ± 0.03 dB 或 $\pm 0.5\%$ （15 min）。

6.2.3 标准气体

根据分析仪或用户要求选择国家有证气体标准物质，如 NO_2 、 SO_2 、 HCHO 、 CO 、 HCl 和 NH_3 等。气体标准物质的相对扩展不确定度不大于 3%（ $k=2$ ）。

稀释气（零气）采用纯度为 99.999% 的高纯氮。

6.2.4 气体动态稀释仪

使用气体动态稀释仪时，稀释比引入的扩展不确定度应不大于 1%， $k=2$ 。

6.2.5 气室

气室应满足以下要求：

- a) 气室窗口材料和透射范围应覆盖校准使用谱段；通入零气后取得的背景光谱不应出现影响目标气体特征吸收识别的吸收结构或干涉条纹；
- b) 气室的几何光程或多次反射有效光程应经校准，扩展不确定度应不大于 0.05 mm， $k=2$ ；
- c) 气室材料不应与被测气体发生吸附和反应，如不锈钢或聚四氟乙烯等。

6.2.6 测距仪

测量范围应不小于（0~10）m，分辨力不大于 1 mm。

6.2.7 点光源装置

点光源装置应满足下列要求：

- a) 发射波长应位于被校仪器相应工作波段内；
- b) 发光面等效直径不大于 3 mm；
- c) 连续工作 15 min 内输出光强相对变化不超过 $\pm 0.5\%$ ；
- d) 点光源位于接收视场中心时，应保证被校仪器能够获得稳定光谱信号，且探测器不得出现饱和。

7 校准项目和校准方法

7.1 波长（波数）示值误差

校准前，启动被校仪器和相应光谱参考装置，按使用说明书规定预热，待工作状态稳定后进行测量。被校仪器在正常观测时可使用太阳直射光、散射太阳光或反射太阳光，但太阳光不作为本条规定的波长（波数）参考标准。

7.1.1 紫外、可见、近红外波段

紫外波段采用汞灯等具有已知离散发射谱线的原子谱线灯作为波长标准器；近红外波段采用具有已知吸收线位置的标准气体吸收池作为波长参考。校准前，启动被校仪器及相应光源，按照仪器使用说明书规定进行预热，待系统工作状态稳定后进行测量。

紫外波段将原子谱线灯的出射光耦合至被校仪器，采集其发射光谱；近红外波段采用稳定的宽带近红外光源照射标准气体吸收池，分别采集参考光谱和标准气体吸收光谱，获得标准气体的特征吸收谱。各波段应在被校仪器有效工作范围内选择参考波长已知、信噪比较高、相互分离且能够覆盖相应工作波段的特征谱线作为校准波长点。至少选择 3 个波长点。

7.1.2 中红外波段

a) 色散型中红外仪器：按照 JJG 681—2025，开机预热 30 min，狭缝置于窄档，在起始波数处校正透射比 0 和 100%；插入有证红外波长标准滤光片，以正常扫描速度从高波数向低波数全范围扫描 3 次，读取 3027 cm^{-1} 、 2851 cm^{-1} 、 1601 cm^{-1} 、 1028 cm^{-1} 、 907 cm^{-1} 附近 5 个典型吸收峰，并以证书给出的标准值计算波数示值误差。

b) 傅立叶变换中红外仪器：按照 JJF 1319—2011，将扫描范围设为 $4000\text{ cm}^{-1}\sim 400\text{ cm}^{-1}$ 、分辨率设为 4.0 cm^{-1} 、扫描次数设为 15 次；仪器稳定后采集空气本底，扫描有证聚苯乙烯红外波长标准物质，读取 3027 cm^{-1} 、 2851 cm^{-1} 、 1601 cm^{-1} 、 1028 cm^{-1} 、 907 cm^{-1} 附近 5 个主要吸收峰，重复测量 3 次，并以证书给出的标准值计算波数示值误差。具有有效定值证书的气体吸收池可用于目标工作带的补充核查，但不得替代上述标准方法。

各谱段均采用被校仪器正常工作时的积分时间、增益和数据处理参数进行测量。每个校准点连续测量 3 次，记录各次波长或波数示值并计算算术平均

值。校准时不得利用本次参考谱线重新拟合或修改被校仪器内部的像元—波长（波数）关系。以波长为光谱坐标时，各校准点的波长示值误差按式（1）计算：

$$\Delta\lambda = \bar{\lambda} - \lambda_s \quad (1)$$

式中：

$\Delta\lambda$ ：波长示值误差，nm 或 μm ；

$\bar{\lambda}$ ：被校仪器对同一标准谱线 3 次波长测量值的算术平均值，nm 或 μm ；

λ_s ：光谱参考装置给出的特征谱线参考波长，nm 或 μm 。以波数为光谱坐标时，将式（1）中的 λ 替换为 $\tilde{\nu}$ ，按 $\Delta\tilde{\nu} = \bar{\tilde{\nu}} - \tilde{\nu}_s$ 计算波数示值误差，单位为 cm^{-1} 。各校准点结果应分别报告。

7.2 光谱分辨力

7.2.1 紫外、可见、近红外波段

在被校仪器相应工作波段内选择谱线宽度满足校准要求的原子谱线灯；紫外波段可使用汞灯，近红外波段可使用氪灯。为了对仪器进行精确的校准，首先启动光源并确保其稳定发光，然后将仪器与光源对接。选择一个光源的特征谱线作为定标的参考谱线。使用仪器测量该特征谱线的光谱数据，记录下峰值波长处的强度。在测量得到的光谱数据中，找到峰值强度的一半，即半高值。

7.2.2 中红外波段

傅立叶变换中红外仪器按照 JJF 1319—2011：在 7.1 取得的聚苯乙烯谱图中记录 $3200\text{ cm}^{-1} \sim 2800\text{ cm}^{-1}$ 范围可分辨吸收峰数，并测量 2851 cm^{-1} （峰）与 2870 cm^{-1} （谷）、 1583 cm^{-1} （峰）与 1589 cm^{-1} （谷）的分辨深度；将仪器设为最佳分辨率和 15 次扫描，采集空气本底，测量空气中水汽 1554.4 cm^{-1} 吸收峰的半高全宽。

对发射线和窄带单色光响应扣除局部基线，对吸收线采用吸光度谱；确定特征响应最大值及其半高值，并用半高值相邻采样点线性插值确定两侧对应的波长或波数，按式（2）计算半高全宽（ $FWHM$ ）：

$$FWHM = \lambda_2 - \lambda_1 \quad (2)$$

式中：

λ_2 (或 $\tilde{\nu}_2$)：扣除局部基线后，特征响应半高位置右侧对应的波长 (或波数)，单位为 nm 或 cm^{-1} ；

λ_1 (或 $\tilde{\nu}_1$)：扣除局部基线后，特征响应半高位置左侧对应的波长 (或波数)，单位为 nm 或 cm^{-1} 。

每个参考点重复测量 6 次，分别计算半高全宽，取 6 次测量结果的算术平均值作为该参考点处的光谱分辨力，按式 (3) 计算。各参考点结果应分别报告，不得用单一平均值替代各谱段、各位置的实测结果：

$$R = \frac{1}{6} \sum_{i=1}^6 FWHM \quad (3)$$

式中：

R ：该参考点处以半高全宽表示的光谱分辨力，单位为 nm 或 cm^{-1} ；

$\Delta\lambda_i$ (或 $\Delta\tilde{\nu}_i$)：第 i 次测量所得特征响应的半高全宽，单位为 nm 或 cm^{-1} 。

7.3 检出限

地基污染气体超光谱靶向成像遥感监测仪开启后，在光路中放置校准气室，将零气通入校准气室，待浓度、温度和压力稳定后，连续测量透过率谱，重复 11 次，记录各气体浓度示值。计算各气体浓度的标准偏差，并记录配气流量、气室温度和压力。仪器的检出限 (MDL) 由气体浓度值标准偏差的三倍计算得到，如公式 (4) 所示，其结果应满足要求。

$$MDL=3s=3\sqrt{\frac{1}{n-1}\sum_{k=1}^n(T_k-\bar{T})^2} \quad (4)$$

式中：

MDL ：检出限， $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ；

s ：标准偏差， $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ；

n ：测量次数；

T_k ：第 k 次测量值， $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ；

$\bar{T}$ ：测量平均值， $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 。

7.4 浓度示值误差

地基污染气体超光谱靶向成像遥感监测仪开启后,选取浓度分别约为满量程的 0% (零气)、1%、10%、20%、50%、80% 的标准气体,通入校准气室,待浓度、温度和压力稳定后,每个浓度测量 6 次,记录连续 6 次的测量结果与标准气体浓度、配气流量、气室温度和压力。求其算术平均值,按公式 (5) 计算示值误差,其结果应不超过 $\pm 15\%$ 。

$$A = \frac{\bar{C} - C_s}{C_s} \times 100\% \quad (5)$$

式中:

A : 示值误差,无量纲;

$\bar{C}$: 测量平均值, $\mu\text{g}/\text{m}^3$;

C_s : 气室内目标气体参考质量浓度值, $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 。

7.5 浓度测量重复性

地基污染气体超光谱靶向成像遥感监测仪开启后,在光路中放置校准气室,将浓度约为工作范围 40% 的标准气体通入校准样品池,待浓度、温度和压力稳定后,测量 6 次,记录 6 次的测量结果与标准气体浓度、配气流量、气室温度和压力,按公式 (6) 计算各气体浓度结果的相对标准偏差,其结果应 $\leq 5\%$ 。

$$RSD = \frac{\sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{k=1}^n (T_k - \bar{T})^2}}{\bar{T}} \times 100\% \quad (6)$$

式中:

n : 测量次数;

T_k : 第 k 次测量值, $\mu\text{g}/\text{m}^3$;

$\bar{T}$: 测量平均值, $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 。

7.6 接收视场角

将点光源置于被校仪器前方,调整点光源位置,使其位于仪器接收视场中心附近。保持被校仪器位置和工作参数不变,沿水平方向逐步改变点光源位置,测量点光源中心相对于仪器参考轴的横向偏移量 x_i ,并记录各位置对应的仪器响应信号 S_i 。各测量位置对应的入射角按式 (7) 计算:

$$\theta_i = \arctan\left(\frac{x_i}{L}\right) \quad (7)$$

式中：

θ_i ：第*i*个测量位置对应的入射角，（°）；

x_i ：第*i*个测量位置处点光源中心相对于仪器参考轴的横向偏移量，mm；

L ：点光源中心所在平面至仪器参考面的距离，mm。

以接收视场中心附近的最大响应信号 $S_{\max}$ 为参考，各测量位置的相对响应按式（8）计算：

$$R_i = \frac{S_i}{S_{\max}} \quad (8)$$

式中：

R_i ：第*i*个测量位置的相对响应；

S_i ：第*i*个测量位置的仪器响应信号；

$S_{\max}$ ：接收视场中心附近的最大响应信号。

分别向接收视场两侧移动点光源，测量范围应覆盖相对响应降至 0.5 以下的区域。由相对响应曲线确定 $R = 0.5$ 时对应的左、右边界角 θ_L 和 θ_R ；当边界位于相邻测量点之间时，可采用线性插值确定。水平方向接收视场角按式（9）计算：

$$\theta_H = \theta_R - \theta_L \quad (9)$$

按相同方法沿垂直方向测量，确定下、上边界角 θ_D 和 θ_U ，垂直方向接收视场角按式（10）计算：

$$\theta_V = \theta_U - \theta_D \quad (10)$$

式中：

θ_H ：水平方向接收视场角，（°）；

θ_V ：垂直方向接收视场角，（°）；

θ_L 、 θ_R ：左、右边界角，（°）；

θ_D 、 θ_U ：下、上边界角，（°）。

仪器响应信号可采用目标波段内的积分信号强度、特征谱线峰值强度或其他能够稳定表征接收响应的量。校准时应记录点光源类型、测量距离、仪器主要采集参数及边界判定方法。

7.7 空间响应一致性

地基污染气体超光谱靶向成像遥感监测仪开启后，在光路中放置校准气室，将浓度约为工作范围 40% 的标准气体通入校准气室，测量 6 次，记录 6 次的测

量结果。沿探测器原生空间维选取 m 个代表性空间采样位置，应覆盖有效空间维的中心、中间位置及两侧区域；在能够获取全部有效空间采样单元结果时，宜采用全部有效空间采样单元进行评价。对于边缘存在无效像元、遮挡像元或制造商明确规定不参与测量的区域，不纳入评价范围。空间响应一致性可采用各位置测量结果的相对标准偏差表示：

$$RSD_{sp} = \frac{\sqrt{\frac{1}{m-1} \sum_{i=1}^m (C_i - \bar{C})^2}}{\bar{C}} \times 100\% \quad (11)$$

式中：

RSD_{sp} 为空间响应一致性的相对标准偏差，%， RSD_{sp} 越小，空间响应一致性越好；

m 为选取的空间位置数；

C_i 为第 i 个空间位置的测量结果；

$\bar{C}$ 为各空间位置测量结果的平均值。

8 校准结果表达

校准结果应在校准证书上反映。校准证书应至少包括以下信息：

- a) 标题：“校准证书”；
- b) 实验室名称和地址；
- c) 进行校准的地点（如果与实验室的地址不同）；
- d) 证书的唯一性标识（如编号），每页及总页数的标识；
- e) 客户的名称和地址；
- f) 被校对象的描述和明确标识；
- g) 进行校准的日期，如果与校准结果的有效性和应用有关时，应说明被校对象的接收日期；
- h) 如果与校准结果的有效性和应用有关时，应对被校样品的抽样程序进行说明；
- i) 校准所依据的技术规范的标识，包括名称及代号；
- j) 本次校准所用测量标准的溯源性及有效性说明；
- k) 校准环境的描述；

- l) 校准结果及其测量不确定度的说明;
- m) 对校准规范的偏离的说明;
- n) 校准证书签发人的签名、职务或等效标识;
- o) 校准结果仅对被校对象有效的声明;
- p) 未经实验室书面批准, 不得部分复制证书的声明。

9 复校时间间隔

仪器复校时间间隔由使用者根据仪器的使用情况、仪器本身性能等因素所决定, 推荐复校时间间隔不超过 1 年。在相邻两次校准期间, 如对仪器的检测数据有怀疑或更换主要部件及修理后应对仪器重新校准。

附录 A

校准原始记录参考格式

送校单位：_____ 证书编号：_____
 仪器型号：_____ 仪器编号：_____
 制造厂商：_____
 校准地点：_____ 校准环境温度：_____ °C 湿度：_____ %RH
 校准依据：_____
 校准员：_____ 核验员：_____ 校准日期：_____
 校准用测量标准及装置：

名称	测量范围/特性量值	不确定度/准确度等级/最大允许误差	证书编号	有效期

1. 波长（波数）示值误差

序号	标准值	测量值 1	测量值 2	测量值 3	平均值	示值误差

2. 光谱分辨力

序号	测量值 1	测量值 2	测量值 3	测量值 4	测量值 5	测量值 6	光谱分辨力

3. 检出限

气体 种类	仪器示值											s	MDL
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11		

4. 浓度示值误差

气体 种类	气体标准值	仪器示值						示值误差/ %	不确 定度
		1	2	3	4	5	6		

气体 种类	气体标准值	仪器示值						示值误差/ %	不确 定度
		1	2	3	4	5	6		

5. 浓度测量重复性

气体 种类	气体标准值	仪器示值						平均值	重复性/ %
		1	2	3	4	5	6		

6. 接收视场角

接收视场角	测量值 1	测量值 2	测量值 3	测量值 4
垂直接收视场 角 θ_V				
水平接收视场 角 θ_H				

7. 空间响应一致性

气体标准值	仪器示值						相对标准偏差 /%
	1	2	3	4	5	6	

附录 B

气室参考浓度计算与量值溯源

B.1 量值溯源链

气室参考浓度应由独立于被校仪器的量值链确定：国家有证标准物质（或具有明确溯源链的动态发生、传递标准）、动态稀释装置、气室温度和压力、气室参考浓度。校准记录应保留各输入量的证书、原始记录和不不确定度。不得以被校仪器的反演结果作为参考浓度。

B.2 动态稀释后的摩尔分数

单级动态稀释后的目标组分摩尔分数按式（B.1）计算：

$$x_{ref} = \frac{x_s \cdot q_s + x_0 \cdot q_0}{q_s + q_0} \quad (\text{B.1})$$

式中：

x_{ref} ：气室入口混合气中目标组分的摩尔分数，mol/mol；

x_s ：有证标准气体或动态发生标准中目标组分的摩尔分数，mol/mol；

x_0 ：零气中目标组分的摩尔分数，mol/mol；

q_s 、 q_0 ：在相同参考状态下的标准气体流量和零气流量，单位应一致。

当零气中目标组分含量相对于配制浓度可以忽略时，可取 $x_0 = 0$ ；不能忽略时，应采用有溯源依据的实测值。采用多级稀释时，应逐级应用式（B.1），并将各级输入量及其相关性纳入不确定度评定。

B.3 状态换算与质量浓度

本规范以气室实测温度 T 和绝对压力 p 下的测量状态作为浓度类校准的默认参考状态。按理想气体状态方程，气室参考质量浓度按式（B.2）计算：

$$c_{ref} = x_{ref} \cdot \frac{M \cdot p}{R \cdot T} \times 10^9 \quad (\text{B.2})$$

式中：

c_{ref} ：气室内目标气体参考质量浓度， $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ；

M : 目标气体摩尔质量, kg/mol;

p : 气室内气体绝对压力, Pa;

T : 气室内气体热力学温度, K;

R : 摩尔气体常数, $R=8.314 \text{ J}/(\text{mol} \cdot \text{K})$ 。

若需换算到约定状态(T_0, p_0), 应在结果中明确 T_0 和 p_0 的取值, 并按式(B.2)以 T_0 、 p_0 重新计算, 不得将测量状态结果与约定状态结果混用。当非理想气体效应不可忽略时, 应引入压缩因子并计入不确定度; 当气体湿度不可忽略时, 应明确干基或湿基, 并对水汽稀释影响进行修正。

B.4 测量不确定度

应根据实际量值模型评定气室参考浓度及浓度示值误差的测量不确定度。至少考虑标准物质质量值、零气目标组分含量、各流量通道、气室温度、绝对压力、测量重复性, 以及经影响分析确认显著的有效光程、窗口透过与反射损耗、密闭性、吸附或反应、相对湿度和反演算法等分量。有效光程仅在被校仪器的浓度反演模型使用该量时计入。

各输入量互不相关时, 合成标准不确定度按式(B.3)计算:

$$u_c^2(y) = \sum_{i=1}^n [c_i \cdot u(x_i)]^2 \quad (\text{B.3})$$

式中:

$c_i = \frac{\partial f}{\partial x_i}$ 为灵敏系数, $u(x_i)$ 为输入量 x_i 的标准不确定度。存在相关输入量时,

应计入协方差项。扩展不确定度按 $U = k u_c(y)$ 给出, 并同时报告包含因子 k 。

附录 C

证书内页参考格式

证书编号：××××—××××

环境温度：℃； 相对湿度：%； 其他：

校准结果：

1. 波长（波数）示值误差：

2. 光谱分辨力：

3. 检出限：

4. 浓度示值误差：

5. 浓度测量重复性：

6. 接收视场角：

7. 空间响应一致性：

浓度示值误差测量结果的扩展不确定度：

附录 D

浓度示值误差的测量不确定度评定示例

D.1 概述

D.1.1 校准方法

按照本规范 7.4 规定,在被校仪器工作状态稳定后,将目标气体标准气体通入校准样品池。对非零校准点分别连续测量 6 次,记录仪器浓度示值并计算算术平均值,以标准气体参考浓度为标准值,计算浓度相对示值误差。0% (零气) 点用于零点或背景检查,不参与相对示值误差计算。

D.1.2 校准用标准

采用有证气体标准物质,并根据需要使用配气装置获得各校准浓度点。气体标准物质和配气装置均应具有有效的量值溯源证书,其不确定度按相应证书给出的数值采用。

D.1.3 校准对象

地基污染气体超光谱靶向成像遥感监测仪。

D.2 测量模型

浓度相对示值误差按式 (D.1) 计算:

$$A = \frac{\bar{C} - C_s}{C_s} \times 100\% \quad (\text{D.1})$$

式中:

A ——浓度相对示值误差, %;

$\bar{C}$ ——同一校准点 n 次测量值的算术平均值, $\mu\text{g}/\text{m}^3$;

C_s ——标准气体参考浓度, $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 。

测量平均值按式 (D.2) 计算:

$$\bar{C} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n C_i, \quad n = 6 \quad (\text{D.2})$$

式中:

C_i 为第 i 次浓度测量值, $\mu\text{g}/\text{m}^3$; 本规范 $n = 6$ 。

当各输入量彼此不相关时,浓度示值误差的合成标准不确定度按式 (D.3)

计算：

$$u_c(A) = \sqrt{c_1^2 u^2(\bar{C}) + c_2^2 u^2(C_s)} \quad (\text{D.3})$$

灵敏系数分别为：

$$c_1 = \frac{100\%}{C_s}, \quad c_2 = -\frac{100\%\bar{C}}{C_s^2} \quad (\text{D.4})$$

注：A以百分数表示时，灵敏系数中保留“%”， c_1 、 c_2 的单位为 $\% / (\mu\text{g}/\text{m}^3)$ 。

D.3 不确定度来源及标准不确定度评定

D.3.1 标准气体参考浓度引入的标准不确定度 $u(C_s)$

标准气体参考浓度的不确定度主要来源于气体标准物质认定值以及配气过程。当标准气体由有证气体标准物质经配气装置稀释获得时，可将两部分不确定度合成。若气体标准物质认定值的相对扩展不确定度为 $U_{\text{rel},0}$ 、包含因子为 k_0 ，配气装置稀释比的相对扩展不确定度为 $U_{\text{rel},q}$ 、包含因子为 k_q ，则标准气体参考浓度的相对标准不确定度按式（D.5）计算：

$$u_{\text{rel}}(C_s) = \sqrt{\left(\frac{U_{\text{rel},0}}{k_0}\right)^2 + \left(\frac{U_{\text{rel},q}}{k_q}\right)^2} \quad (\text{D.5})$$

标准气体参考浓度的标准不确定度按式（D.6）计算：

$$u(C_s) = C_s u_{\text{rel}}(C_s) \quad (\text{D.6})$$

若直接使用未经稀释的有证气体标准物质，则式（D.5）中配气装置引入的分量可不计。当气体标准物质证书以物质的量分数给值，而校准结果以质量浓度表示时，应将物质的量分数向质量浓度换算过程中由温度、压力等测量量引入的不确定度计入 $u(C_s)$ ；若配气装置已直接给出在校准条件下具有量值溯源性的质量浓度，则不再重复计入。

D.3.2 测量重复性引入的标准不确定度 $u(\bar{C})$

仪器测量重复性包含环境条件短时变化、气体流量波动、样品池状态、光路调整以及被校仪器自身随机变动等因素的综合影响。对同一校准点连续测量 n 次，按贝塞尔公式计算实验标准偏差 s ：

$$s = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (C_i - \bar{C})^2}{n-1}} \quad (\text{D.7})$$

由于浓度示值误差采用 n 次测量值的算术平均值计算，测量平均值的标准不确定度为：

$$u(\bar{C}) = \frac{s}{\sqrt{n}} \quad (\text{D.8})$$

本规范 $n = 6$ 。若仪器显示分辨力或数据修约引入的影响相对于重复性分量不可忽略，应另行评定并与 $u(\bar{C})$ 合成。

D.4 标准不确定度汇总与合成

各主要标准不确定度分量及灵敏系数见表 D.1。

表 D.1 浓度示值误差的标准不确定度分量

输入量	标准不确定度来源	标准不确定度	灵敏系数	标准不确定度分量
$\bar{C}$	测量重复性	$\frac{s}{\sqrt{n}}$	$\frac{100\%}{C_s}$	$ c_1 u(\bar{C})$
C_s	气体标准物质、配气装置及必要时的温压换算	$C_s u_{\text{rel}}(C_s)$	$-\frac{100\%\bar{C}}{C_s^2}$	$ c_2 u(C_s)$

将各分量代入式 (D.3) 得到浓度示值误差的合成标准不确定度 $u_c(A)$ 。对于不同目标气体及不同校准浓度点，应分别采用相应的标准气体参考浓度、实际测量数据和溯源证书给出的不确定度进行计算。

D.5 扩展不确定度

取包含因子 $k = 2$ ，浓度示值误差的扩展不确定度按式 (D.9) 计算：

$$U = k u_c(A), \quad k = 2 \quad (\text{D.9})$$

校准结果可表示为 $A = A_m$ ， $U = U(A)$ ($k = 2$)，其中 A_m 为按式 (D.1) 计算得到的浓度相对示值误差。

D.6 评定示例

以下以某目标气体 500.0 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 校准点为例说明计算过程。该示例仅用于说明不确定度评定方法，正式校准时应采用实际标准气体证书、配气装置证书及被校仪器实测数据。

设气体标准物质相对扩展不确定度 $U_{\text{rel},0} = 3.0\%$ ($k_0 = 2$)，配气装置稀释比相对扩展不确定度 $U_{\text{rel},q} = 1.0\%$ ($k_q = 2$)。由式 (D.5) 得 $u_{\text{rel}}(C_s) = 1.58\%$ ，

因此 $u(C_s) = 7.91 \mu\text{g}/\text{m}^3$ 。

表 D.2 500.0 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 校准点测量数据

项目	数值
标准气体参考浓度 C_s	500.0 $\mu\text{g}/\text{m}^3$
6 次仪器示值 C_i	511, 508, 514, 510, 512, 513 $\mu\text{g}/\text{m}^3$
测量平均值 $\bar{C}$	511.33 $\mu\text{g}/\text{m}^3$
实验标准偏差 s	2.16 $\mu\text{g}/\text{m}^3$
测量平均值标准不确定度 $u(\bar{C})$	0.88 $\mu\text{g}/\text{m}^3$
浓度相对示值误差 A	2.27%

由式 (D.4) 得到 $c_1 = 0.2000\% / (\mu\text{g}/\text{m}^3)$, $c_2 = -0.2045\% / (\mu\text{g}/\text{m}^3)$ 。各分量见表 D.3。

表 D.3 500.0 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 校准点不确定度预算

输入量	标准不确定度来源	标准不确定度	灵敏系数	标准不确定度分量
$\bar{C}$	测量重复性	0.88 $\mu\text{g}/\text{m}^3$	0.2000 %/ $(\mu\text{g}/\text{m}^3)$	0.176%
C_s	气体标准物质+配气装置	7.91 $\mu\text{g}/\text{m}^3$	-0.2045 %/ $(\mu\text{g}/\text{m}^3)$	1.617%

由式 (D.3) 计算得到合成标准不确定度 $u_c(A) = 1.63\%$, 取 $k = 2$, 则扩展不确定度 $U = 3.3\%$ 。因此, 该校准点的浓度相对示值误差为 2.27%, 其扩展不确定度为 $U = 3.3\%$ ($k = 2$)。

注: 当被校仪器采用样品池有效光程或开放光路长度将柱浓度换算为体积质量浓度时, 若该长度量直接进入浓度计算模型, 则应参照相应溯源证书将光程长度的不确定度作为独立输入量计入测量模型; 若仪器直接输出与标准气体参考浓度同量纲的质量浓度且式 (D.1) 中不含光程长度, 则不应重复引入该分量。