

基于全像面拟合的中阶梯光栅光谱仪谱图还原算法

崔涛¹, 尹禄^{1*}, 孙亚楠¹, 陈建军², 周洋东¹, 韩龙飞¹, 王乐^{1**}¹中国计量大学光学与电子科技学院, 浙江 杭州 310018;²青岛理工大学信息与控制工程学院, 山东 青岛 266520

摘要 谱图还原算法是中阶梯光栅光谱仪高分辨的保障,其精度和速度的优化是推动仪器发展的关键。提出一种基于全像面拟合的谱图还原算法,将光谱标定融入到建模过程中的方式同时解决了环境改变和仪器扰动对模型精度的影响问题。首先建立初始模型,利用光线追迹结果进行全像面拟合,获得标准模型。再利用 Hg- Ar 灯的特征谱线对标准模型进行二次拟合以修正偏差,从而完成光谱标定。最后采用多种元素灯的特征谱线对所提建模方法的精度进行验证。实验结果表明,所建立的谱图还原模型的全像面误差在 2 pixel 内,全波段波长平均提取误差为 0.01 nm。所提方法将建模过程与标定技术相结合,使标定常态化,简化了建模流程,为中阶梯光栅光谱仪的应用推广提供了算法基础。

关键词 光谱学; 中阶梯光栅光谱仪; 谱图还原算法; 全像面拟合; 光谱标定

中图分类号 TH741 文献标志码 A

DOI: 10.3788/CJL231469

1 引言

中阶梯光栅光谱仪采用交叉色散结构解决中阶梯光栅带来的级次重叠问题,光线经过交叉色散元件后,在电荷耦合器件(CCD)相机上出现二维光谱。CCD 相机所采集到的原始图像包括了光强度和位置坐标之间的关系,但无法直接提供波长和光强的一维对应关系,因此,对原始图像进行处理需要采用特定的方法,一般称将二维原始图像转换为一维谱图的方法为谱图还原算法^[1-2]。谱图还原算法作为决定中阶梯光栅光谱仪波长分辨率的关键,其精度和速度直接影响整个中阶梯光栅光谱仪的波长提取精度和工作效率,谱图还原算法的革新是中阶梯光栅光谱仪开发的关键所在。

由于中阶梯光栅光谱仪采用交叉色散的结构形式,其谱图的转换相较于传统光谱仪更为复杂。最初谱图还原算法采用光线追迹的方法^[3-5],该方法考虑覆盖光谱范围内的所有波长,在此范围内取样波长并依据几何光学规则追迹计算这些波长在像面上的位置。在波长取样间隔较大时,该方法无法详细描述这种关系,而若取样波长间隔较小则会导致极大的计算量。后来人们又提出了更简化的光线追迹方法,引入数学方法(如插值和拟合^[6])和遗传算法^[7-8]来

评估整个图像平面的关系。这些方法在提高算法速度方面取得了进展,但仍未能达到所需的精度水平。模型化方法克服了光线追迹算法复杂和速度较慢的问题,其基本原理是通过建立一个简化的光学模型来计算波长与像素位置之间的对应关系,光学参数作为输入,谱图还原模型作为输出。在模型化方法中,最具代表性的有偏差法^[9-10]和数学模型法^[11-14]。前者利用等效偏转角计算到像平面中心的偏移距离,假设等效偏转角等于主射线的偏移角。尽管该方法建模速度快,但其精度较差,此外,它仅适用于带有离轴抛物面镜的中阶梯光栅光谱仪,当使用球面反射镜替代离轴抛物面反射镜或出现非对称结构时,模型误差显著增加。数学模型法将功能处理与光线追踪技术相结合,更为详细地考虑了光路,并且考虑了反射棱镜的谱线弯曲,以弥补算法的误差。在不降低计算速度的前提下,显著提高了算法的精度。然而,当环境变化和仪器内部光学元件姿态微小扰动引发误差时,其难以快速响应实际误差。为了应对环境变化这一重要问题,标定法被提出。标定法的思路主要包括建模后标定^[15]和建模过程中^[16]标定,这两者都有效地节省了调整模型或重新建模的时间,提高了建模速度。此外,标定法相较于模型化方法和光线追踪法在模型精度上略有提高,但其普适性较差。综上所述,谱图

收稿日期: 2023-12-01; 修回日期: 2024-01-05; 录用日期: 2024-01-16; 网络首发日期: 2024-01-26

基金项目: 国家自然科学基金(51832005, 62075203, 1210042018)、国家自然科学基金青年基金(62305320)、国家重点研发计划(2021YFC3340400)、浙江省科技计划(2022C01127, 2021C05005)、浙江省自然科学基金(LQ23A040007)、山东省自然科学基金(ZR2021QF113)

通信作者: *yinlu890622@163.com; **calla@cjlu.edu.cn

还原算法的优化一直在追求高精度和高效率,同时,我们也要考虑环境和应用等因素的影响。因此,开发一种兼具各方面优势的谱图还原算法具有重要意义。

鉴于此,本文提出了一种简单的全像面拟合谱图还原算法,采用了一种非传统的思路,首先着眼于提高建模速度,然后再通过结合光谱标定提高精度。其思路如下:先利用偏差法建模速度快的优势快速建立一个初始模型,随后将初始模型与光线追迹软件追迹的理论模型进行全像面拟合以得到标准模型,然后将标定融入到建模过程中,对标准模型与元素灯谱图数据组成的实际模型进行拟合,经过这一步可以得到最终模型,之后对元素灯二维谱图进行去噪处理,完成波长提取。最后选用五种元素灯作为测试光源,检测本文的算法精度。经过验证可以得出本文的谱图还原算法在模型精度和速度方面都有不错的优势。建模过程中标定的方式巧妙地解决了环境改变和仪器扰动对模型精度的影响问题,整个建模过程简单普适,利于应用推广。

2 中阶梯光栅光谱仪基本原理

2.1 中阶梯光栅光谱仪

中阶梯光栅光谱仪主要由入射针孔、准直镜、色散组件、聚焦镜、柱面镜和面阵 CCD 组成。光学系统采用了最广泛使用的单色器结构形式,即 Czerny-Turner 结构。该结构具有可有效抑制系统彗差、消除垂轴像差以及获得二维平像场的特性^[17-21]。本文采用反射式棱镜光路结构^[22-23],如图 1 所示。

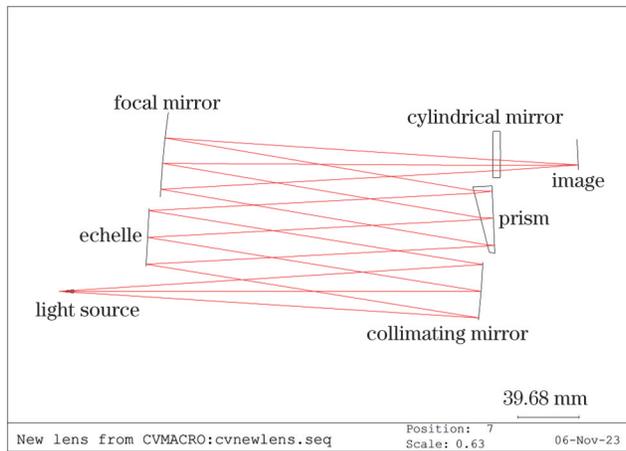


图 1 中阶梯光栅光谱仪光路结构

Fig. 1 Echelle spectrometer optical path structure

光线通过入射针孔进入系统,随后经过准直镜进入交叉色散结构。光束在交叉色散后,经过反射镜和柱面镜的矫正色散,最终成像在后端的 CCD 像面上。本文中阶梯光栅光谱仪的技术参数如表 1 所示。

表 1 中阶梯光栅光谱仪的技术参数

Table 1 Technical specifications of echelle spectrometer

Parameter	Numerical value
Spectral range /nm	200–800
Spectral resolution /nm	0.02
Grating density / (line·mm ⁻¹)	54.5
Detector image surface size / (pixel×pixel)	1024×1024
Pixel size / (μm×μm)	13×13

2.2 二维光谱图

中阶梯光栅光谱仪采用交叉色散的光路结构形式,会在 CCD 像面上形成二维谱图^[24-25]。Hg-Ar 灯二维谱图如图 2(b)所示。相比于普通光栅,中阶梯光栅衍射级次较高,不同的波长闪耀级次不同,引入自由光谱区的概念以进行深入的阐释。自由光谱区被定义为每个级次对应的闪耀波长范围,其独特之处在于相邻级次的自由光谱区波长形成平滑的过渡,即相邻两个级次的自由光谱区无交叠。故而满足

$$(m'+1)\lambda = m'(\lambda + \Delta\lambda), \quad (1)$$

式中: m' 为级次; λ 为波长; $\Delta\lambda$ 为相邻级次的波长间隔。

由式(1)可以得到自由光谱区表达式为

$$\Delta\lambda = \frac{\lambda}{m'}. \quad (2)$$

中阶梯光栅单缝衍射强度分布的最大包络包含了所有或大部分的自由光谱区,因此其有效工作波长下的衍射效率非常高,可以实现全波段闪耀。自由光谱区呈扇形分布,短波区域较窄,向长波区域逐渐拓展,探测器位置范围覆盖了整个波段的自由光谱区范围。图 2(a)为中阶梯光栅光谱仪自由光谱区内的二维谱图示意图^[9],其中,棱镜色散方向为 X 方向, Y 方向为光栅色散方向,每条光谱线条对应一个光谱级次,每个级次对应多个波长。

探测器采集的原始图像包含了波长强度和位置的对应关系,如图 3(a)所示,其谱图数据可以用一个矩阵表达:

$$I = \begin{bmatrix} I_{11} & I_{12} & \cdots & I_{1n} \\ I_{21} & I_{22} & \cdots & I_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ I_{m1} & I_{m2} & \cdots & I_{mn} \end{bmatrix}, \quad (3)$$

式中: I 为 1024×1024 光强度值矩阵; I_{mn} 为光强度值; m 和 n 分别为行数和列数,在本文中其大小都为 1024。

此矩阵的行和列分别对应面阵 CCD 靶面上的完整像元坐标,而矩阵中的数值则表示各像元位置上的光斑强度。谱图还原模型如图 3(b)^[26]所示,此模型相当于一个波长矩阵:

$$\lambda = \begin{bmatrix} \lambda_{11} & \lambda_{12} & \cdots & \lambda_{1n} \\ \lambda_{21} & \lambda_{22} & \cdots & \lambda_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \lambda_{m1} & \lambda_{m2} & \cdots & \lambda_{mn} \end{bmatrix}, \quad (4)$$

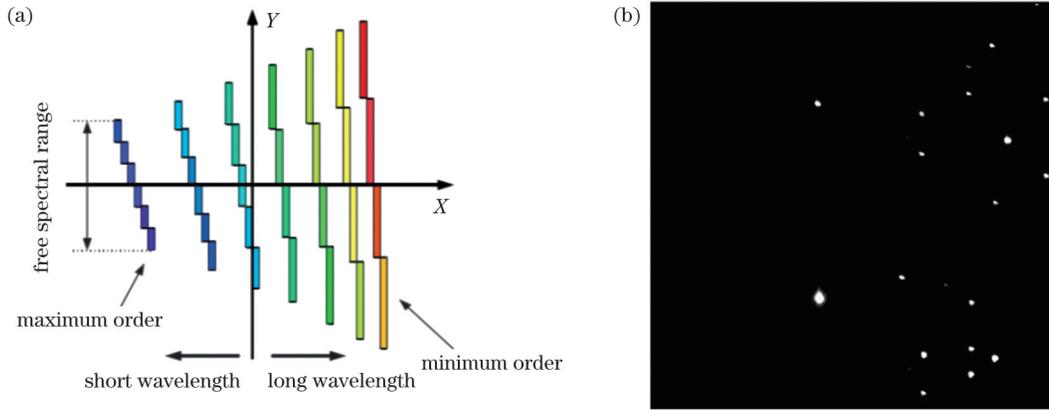


图 2 二维光谱模型。(a)自由光谱区内的二维光谱示意图^[9];(b)Hg-Ar灯二维谱图示意图

Fig. 2 Two dimensional spectral model. (a) Schematic of two-dimensional spectrum in free spectral range^[9]; (b) schematic of two-dimensional spectrum of Hg-Ar lamp

式中： λ 为 1024×1024 波长矩阵； λ_{mn} 为波长。

式(4)包含了所有自由光谱区,可以得到波长与坐标的对应关系。根据光斑中心的坐标可以在谱图还原模型

相应位置找到唯一一个波长数值,依据一致的坐标,通过结合谱图还原模型的波长和原始谱图的光强,能够很快得到波长与强度的对应关系。一维谱图如图 3(c)所示。

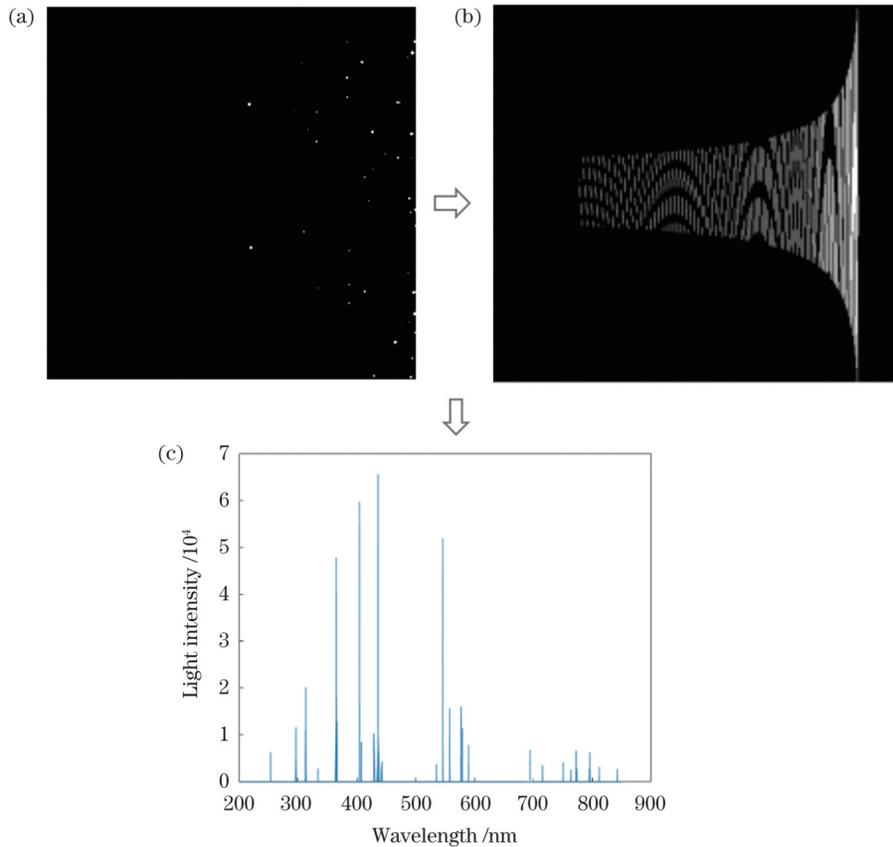


图 3 谱图还原过程示意图。(a)原始谱图;(b)谱图还原模型^[26];(c)一维谱图

Fig. 3 Schematics of spectrogram reconstruction process. (a) Original spectrum; (b) spectrogram reconstruction model^[26]; (c) one-dimensional spectrum

3 谱图还原与波长提取

整体的工作流程包括谱图还原和波长提取两个大部分,在这里本文分两节介绍,总体谱图还原算法流程如图 4 所示。

3.1 谱图还原

传统的偏差法^[9-10]采用数学近似的方法计算光线通过色散元件后的成像位置。一般以光线通过色散元件后的任一出射角为基准,以基准角在光路中的成像位置作为基准点,一般把基准点作为像面中心,与其他

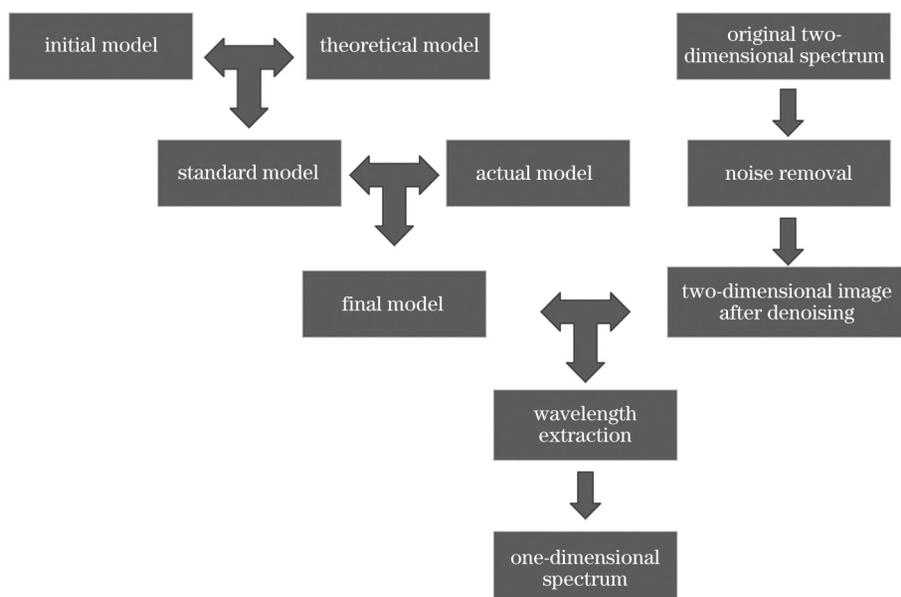


图 4 谱图还原算法流程示意图

Fig. 4 Workflow diagram of spectrum reconstruction algorithm

点作对比。任意波长光线通过色散元件后的出射角相对于基准角的角度偏差会造成相对于基准点的位置偏差,其可以近似写为

$$\Delta l = f \tan(\alpha - \alpha_0), \quad (5)$$

式中: α_0 为基准角; α 为散射角; f 为聚焦系统的焦距; Δl 为相对于像面中心的偏移量。偏差法示意图如图 5 所示^[11], 图 5(a) 显示了光线实际传输光路图, 衍射角为 α_0 的光线沿色散方向成像在距离中心 Δl 的位置。图 5(b) 是计算任意波长成像位置的近似模型。

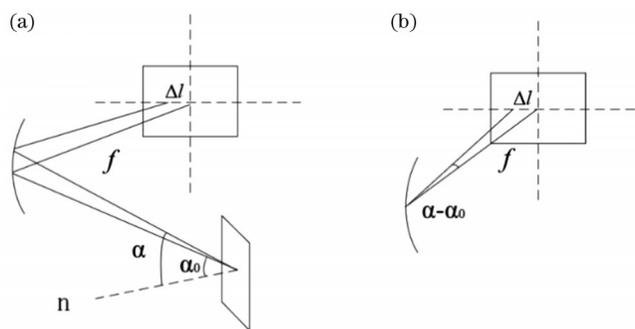


图 5 偏差法示意图^[11]。(a) 实际光路图; (b) 等效模型光路图
Fig. 5 Schematics of deviation method^[11]. (a) Actual optical path diagram; (b) optical path diagram of equivalent model

通过利用色散方程, 偏差法能够计算任意波长光线经过色散元件后的色散角, 从而得出相应波长光线的成像位置。在此过程中, 交叉色散元件之间相互独立, 相对于像面中心的偏移量可以分别计算, 全部偏移量经过相应计算后就是成像光斑在图像平面上的二维坐标, 由此可以求出波长与二维坐标的一一对应关系。偏差法建立的模型在接近像面边缘时偏差增

大, 同时在某些特定光路结构中也表现出较大的偏差, 且其建模速度快但是精度不够。鉴于此, 本文提出了一种新的建模方法。首先, 充分利用偏差法建立模型快速性优势, 迅速获得一个初始模型。随后, 对齐初始模型的数据与光线追迹软件追踪的理论数据并进行拟合, 得到一个更为精确的标准模型。具体操作如下。

取初始模型中的任意 11 个点, 取点规律如图 6 所示, 其中每一个圆圈代表一个取样波长点。需要注意的是, 为了避免相邻级次误差的干扰, 一般在某个波长级次的上下边缘处取样。

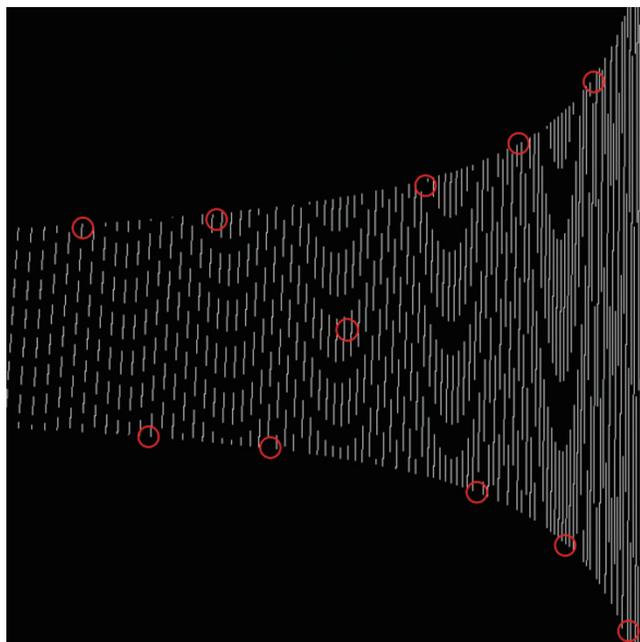


图 6 初始模型中 11 个取样波长点的示意图
Fig. 6 Schematic of 11 sampling wavelength points in initial model

由于中阶梯光栅光谱仪采用了交叉色散的结构, 需要在中阶梯光栅方向(Y方向)和棱镜方向(X方向)上分别进行分析。表 2 详细列出了所选取的点波长与坐标位置偏差之间的对应关系(这里位置偏差 ΔY 和 ΔX 指两个模型相同波长处两个方向位置的差值)。从表 2 可以看出, 初始模型在 X 方向上的位置偏差达到 41 pixel, Y 方向上的位置偏差达到 31 pixel。如果把初始模型直接作为实验所用的最终谱图还原模型, 则会导致数据不准确, 且会对后面波长提取产生很大影响, 造成多个级次偏差。因此在保留建模速度快的特点的基础上需要对初始模型进行优化, 使位置偏差尽量缩小以贴合理论模型。为了提高初始模型精度, 对初始模型与理论模型进行全像面拟合, X 方向上的取样点曲线如图 7(a) 所示, 为了缩小误差, 对 X 方向上的曲线进行四次基本拟合, 残差控制在 1 左右。同理 Y 方向上的取样图如图 7(b) 所示, 对 Y 方向上的曲线进行线性基本拟合, 残差依然控制在 1 左右。

在 Y 方向上, 因为中阶梯光栅的色散近似呈线性, 所以采用线性拟合, 拟合后的像面位置偏差如图 8(a) 所示, 像面偏差基本都在 1 pixel 以内。对于 X 方向, 由于谱线弯曲和棱镜折射率非线性的影响, 这个方向采用多项式拟合。对于拟合次数的选取, 本文采用交叉验证中的留出方法, 即将选取的数据划分为实验组和验证组两部分, 其中实验组用于拟合模型, 而验证组用于评估模型性能。通过反复尝试不同次数的多项式,

表 2 中阶梯光栅/棱镜方向理论模型数据与初始模型数据的差值

Table 2 Differences between theoretical model data and initial model data along echelle/prism directions

Wavelength /nm	ΔY /pixel	ΔX /pixel
200.016	-9.325	31.796
210.958	11.893	16.937
219.742	-12.895	10.194
233.265	12.770	2.749
242.910	-0.402	0.058
271.586	-15.016	-6.638
317.068	16.522	-11.457
370.337	-19.647	-15.806
460.439	23.658	-21.176
581.955	-30.028	-28.201
836..886	31.064	-41.008

选择在验证组上表现最佳的多项式次数。本文选取的实验组和验证组数据均不同, 且数据分布在 200~850 nm 波段内。二次、三次、四次拟合后误差曲线如图 8(b)~(d) 所示, 四次拟合后的位置偏差基本都在 2 pixel 以内, 满足标准模型要求。拟合次数过多, 数据量过大会降低运算速度, 鉴于此本文在 X 方向上采用四次多项式进行拟合。

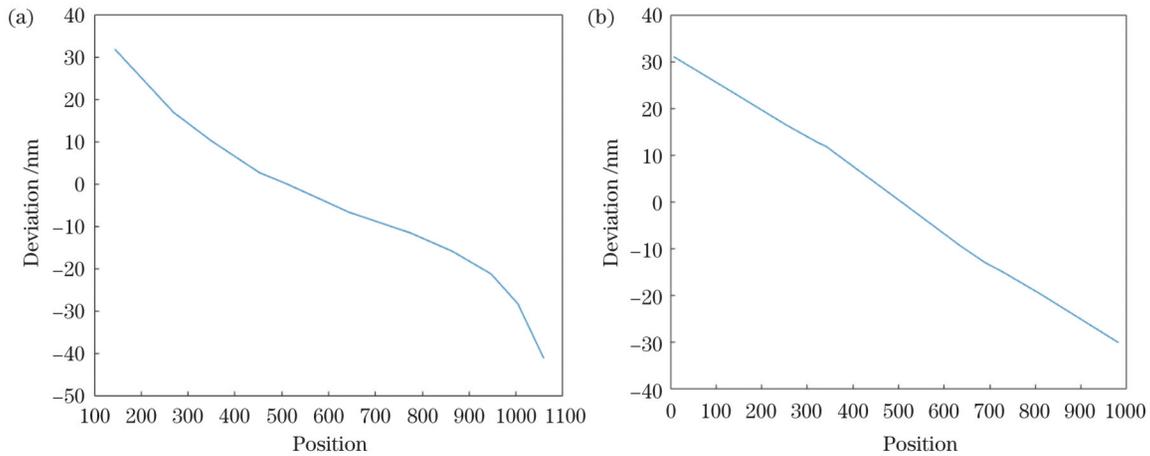


图 7 编程软件曲线图。(a) X 方向取样点曲线; (b) Y 方向取样点曲线

Fig. 7 Programming software curves. (a) Curve of sampling points in X-direction; (b) curve of sampling points in Y-direction

利用编程软件自带的基本拟合工具在 X 和 Y 方向上完成了初始模型和理论模型的拟合, 两个不同方向上的拟合公式分别为

$$X_1 = Ax_1^4 + Bx_1^3 + Cx_1^2 + Dx_1 + E, \quad (6)$$

$$Y_1 = Fy_1 + G, \quad (7)$$

式中: A, B, C, D, E, F, G 为系数, 由拟合公式得到 $A = -2.92 \times 10^{-10}, B = 5.029 \times 10^{-7}, C = -0.000209, D = -0.07635, E = 45.36, F = -0.06435, G = 32.46; Y_1$ 为

中阶梯光栅方向上的坐标位置偏差(理论模型中的波长坐标位置相对于初始模型中相同波长处的坐标位置的偏差); y_1 为初始模型中波长点在中阶梯光栅方向上的坐标位置; X_1 为棱镜方向上的位置偏差(理论模型中波长位置相对于初始模型中相同波长处的坐标位置的偏差); x_1 为初始模型中波长点在棱镜方向上的坐标位置。经过拟合, 我们可以获得标准模型。拟合的目的是使算法模型更接近光线追迹的理论模型, 进一步

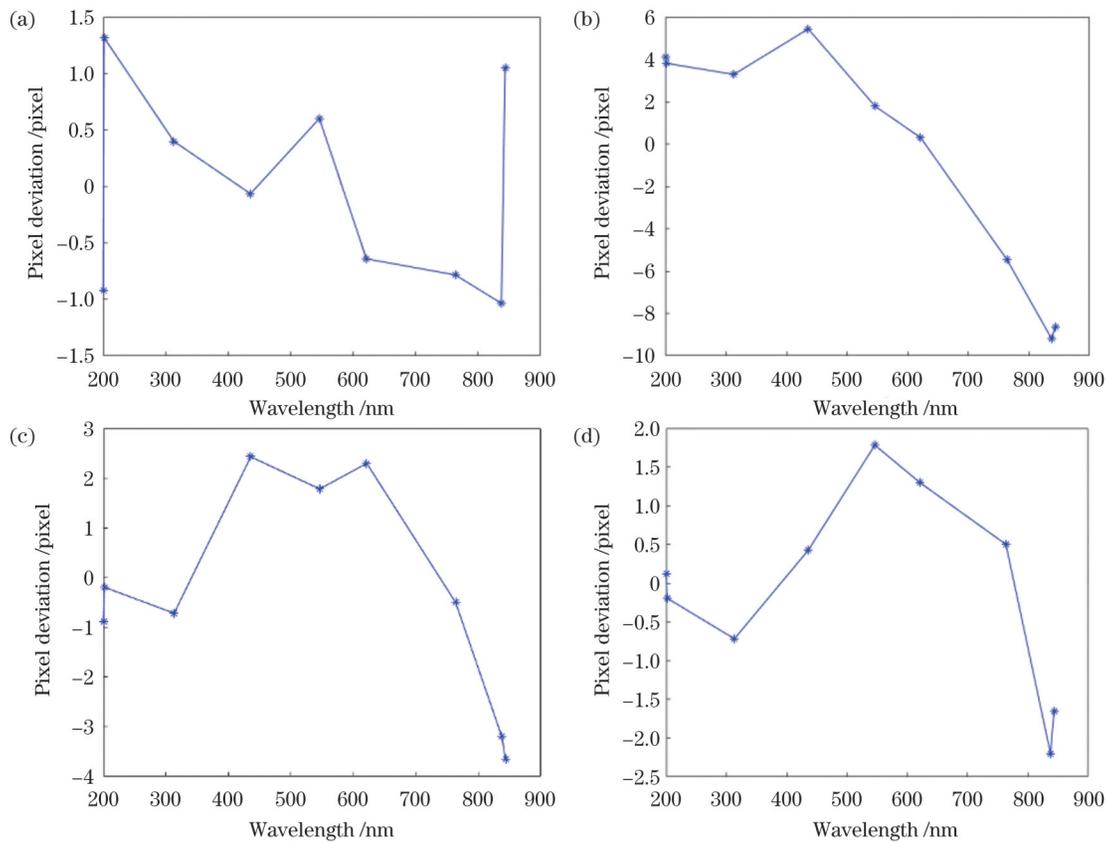


图 8 拟合误差曲线图。(a) Y 方向线性拟合后的误差图; (b) X 方向二次拟合后的误差图; (c) X 方向三次拟合后的误差图; (d) X 方向四次拟合后的误差图

Fig. 8 Fitting error curves. (a) Error after linear fitting in Y-direction; (b) error after quadratic fitting in X-direction; (c) error after cubic fitting in X-direction; (d) error after fourth-order fitting in X-direction

减小误差,提高精度。为了使数据更具体,取拟合后的最边缘点和一些随机取样点,实验结果如表 3 所示(这里位置偏差 ΔY_1 和 ΔX_1 指两个模型相同波长处两个不同方向位置的差值)。经过实验验证得出 Y 方向最大偏差在 1 pixel 左右, X 方向只有图像边缘处的最大偏差达到 2 pixel 左右,其余偏差很小。说明拟合后的标准模型和理论模型是十分接近的,在误差允许的范围

内是可行的。在建立标准模型之后,环境的变化(如气温、压强、湿度等)以及仪器的搬运都可能导致仪器内部参数微小的变动,从而引起模型与拍摄的谱图不匹配,坐标位置存在偏差。传统的中阶梯光栅光谱仪通常在建模完成后进行标定,然而这种方式无法应对环境变化和仪器搬动的影响。为了解决这一问题,我们采用了一种在建模过程中进行标定的方式。具体而言,我们使用拍摄的汞-氙灯谱图作为实际模型,选取汞灯的一部分特征波长数据与标准模型中对应的波长数据进行拟合,使标准模型更好地贴合实际模型。

本文选取汞-氙灯的 9 个特征波长点作为拟合点,图 9 中所标注的数据波长点即为所选取的 9 个波长点。在标准模型中读取这 9 个波长对应的 Y 和 X 坐标位置,然后从拍摄的汞-氙灯谱图(实际模型)中读

表 3 中阶梯光栅/棱镜方向理论模型数据与标准模型数据的差值

Table 3 Differences between theoretical model data and standard model data along echelle/prism directions

Wavelength /nm	ΔY_1 /pixel	ΔX_1 /pixel
201.294	1.317	-0.192
200.044	-0.924	0.118
843.318	1.045	-1.652
837.539	-1.035	-2.198
253.656	-0.431	-0.442
296.731	-0.095	0.165
313.165	0.399	-0.717
407.787	-0.037	0.151
546.085	0.601	1.782
621.353	-0.641	1.296
706.726	0.918	0.732
772.406	0.710	0.904

取实际的 Y 和 X 坐标位置,如图 9 所示,并计算实际模型与标准模型之间的坐标位置偏差。如果在计算

后发现 X/Y 方向的位置偏差很大, 达到几百个像素, 则须考虑模型和相机坐标系的原点位置吻合的问题, 需要对标准模型进行翻转以匹配实际模型。例如, 在本文中, 253.65 nm 波长点在标准模型中的坐标为 (564, 660), 而在汞-氙灯谱图中相应波长点的坐标为 (568, 365)。由此可知, 标准模型在 Y 方向上需要进行翻转, 翻转后的坐标为 (564, 364)。进而计算得到 Y 和 X 方向上的位置偏差分别为 1 pixel 和 4 pixel。通过类似的方式, 可以计算出其他 8 个特征波长点的位置偏差。

对于标准模型和实际模型, 同样采用上面介绍的拟合原理, 在 Y 方向上依然采用线性拟合方式, 拟合后的像面误差在 1 pixel 以内。在 X 方向上利用留出法进行多次拟合验证, 结果发现在三次拟合后像面误差都在 3 pixel 以内, 但是四次拟合后出现了过拟合现象, 即实验组拟合后的误差比较小, 验证组误差很大。另外, 在后续输出特征波长时, 三次拟合后的模型可以输出 Hg-Ar 灯 200~800 nm 工作波段的所有波长, 而四次拟合后有一部分特征波长无法输出。因此在 X 方向上采用三次多项式进行拟合。X 和 Y 方向的拟合公式分别为

$$X_2 = ax_2^3 - bx_2^2 + cx_2 - d, \quad (8)$$

$$Y_2 = ey_2 - f, \quad (9)$$

式中: a, b, c, d, e, f 为系数, 由拟合公式得到 $a=7.2 \times 10^{-7}$ 、 $b=-0.001474$ 、 $c=0.9558$ 、 $d=-194.2$ 、 $e=0.009692$ 、 $f=-4.007$; Y_2 为中阶梯光栅方向的坐标位置偏差; y_2 为标准模型中 Y 方向的坐标位置; X_2 为棱

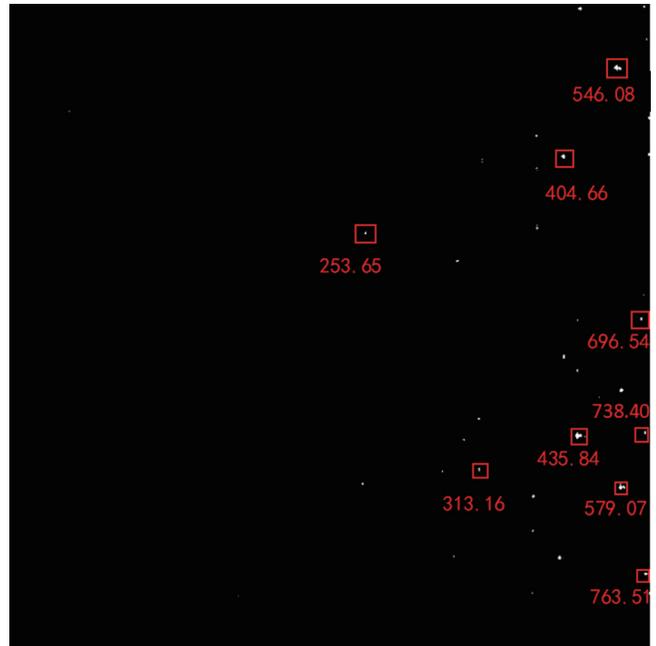


图 9 实验室拍摄的汞-氙灯谱图, 方框标注为选取的 9 个特征波长点

Fig. 9 Mercury-argon lamp spectrum taken in laboratory with selected 9 characteristic wavelength points marked by boxes

镜方向的坐标位置偏差; x_2 为标准模型中 X 方向的坐标位置。将标准模型的 Y 方向反转后, 再代入拟合公式 [式 (6)、(7)], 即完成模型的转化, 最终模型更贴合实际模型, 克服了环境变化和仪器搬动的影响。本文选择拟合波长和一部分特征波长验证最终模型的数据准确性, 结果如图 10 所示。

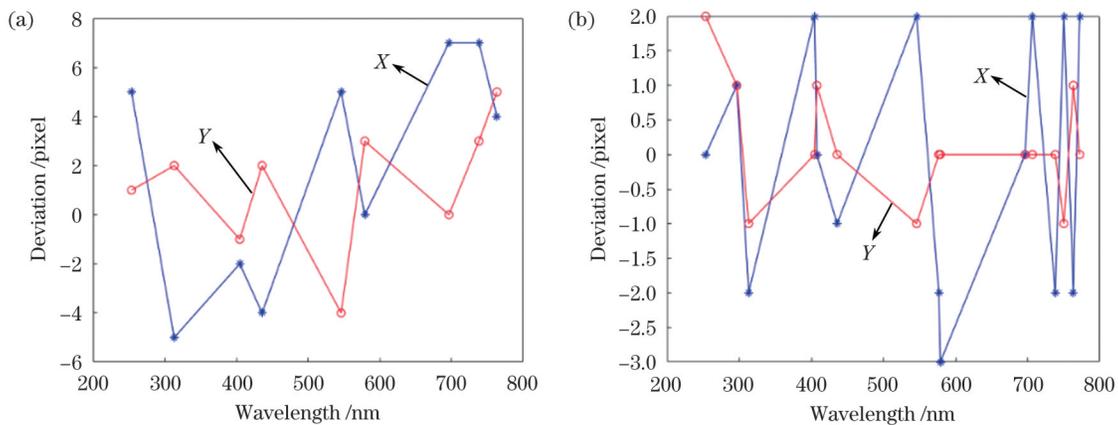


图 10 拟合前后的误差曲线图。(a) 拟合之前的误差曲线; (b) 拟合之后的误差曲线

Fig. 10 Error curves before and after fitting. (a) Error curves before fitting; (b) error curves after fitting

通过对图 10 进行对比分析, 可以得知拟合后的最终模型在中阶梯光栅方向上的位置偏差保持在 1 pixel 以内, 而在棱镜方向上的位置偏差在 3 pixel 以内, 最终模型结果十分贴合实际情况。至此, 谱图还原模型建立完成。由于偏差法^[9-10]在众多谱图还原算法中的建模速度最快, 因此本文充分利用偏差法快速建模的优势先建立初始模型, 然后再用简单的方式进

行全像面拟合以弥补精度方面的不足, 最后通过将标定融入到建模过程中也进一步提高了最终模型的精度。本文模型在建模速度方面高于光线追迹法^[3-5], 因为在建模后利用简单的方式进行了精度的提高, 所以速度略低于偏差法, 但精度方面高于偏差法。本文采用数学模型法^[11-14]的思路, 以偏差法为基础构建模型, 但是相比于数学模型法, 后续建模方式相对简单

高效,因此在速度方面更占优势。标定法^[15-16]是谱图还原算法中较为完美的算法,但是本文快速建模和简单修正精度的方式使建模速度更快,而且在精度方面相当。本文建模时长为 0.94 s,过去一些谱图还原算法的建模时间量级为 2 s 左右,进一步说明了本文快速建模的优势。

3.2 波长提取

波长提取是将拍摄的原始图像中的光强信息提取出来,通过与设计的谱图还原模型进行结合,输出波长和强度的对应关系,即利用谱图还原模型将二维图像转换为一维谱图。

中阶梯光栅光谱仪在工作过程中受到电子噪声、环境光、热噪声、光源不稳定性的影响,会给拍摄的原始谱图带来噪声影响。虽然可以通过缩短曝光

时间、在黑暗环境下工作(避免杂散光影响)等方式在相机拍摄前抑制部分噪声,但是工作条件过于苛刻且有些噪声是无法避免的,例如在持续测量中热噪声和光源不稳定所带来的噪声,因此要对二维原始谱图进行去噪处理。本文在进行波长提取之前,对二维图像进行了分析,在确保有效信号的像素灰度值真实性的前提下,识别背景像素处的灰度值并将其设为零,这有助于降低噪声对波长提取过程的干扰。

通过对原始二维图像进行分析,我们发现元素灯的单个有效光斑占据了很多像素点,而背景噪声一般只占 1 pixel (图 11);元素灯有效光斑占探测器像素总数的比例远远小于噪声的比例;有效光斑的光强度较高,而背景噪声相对较低。

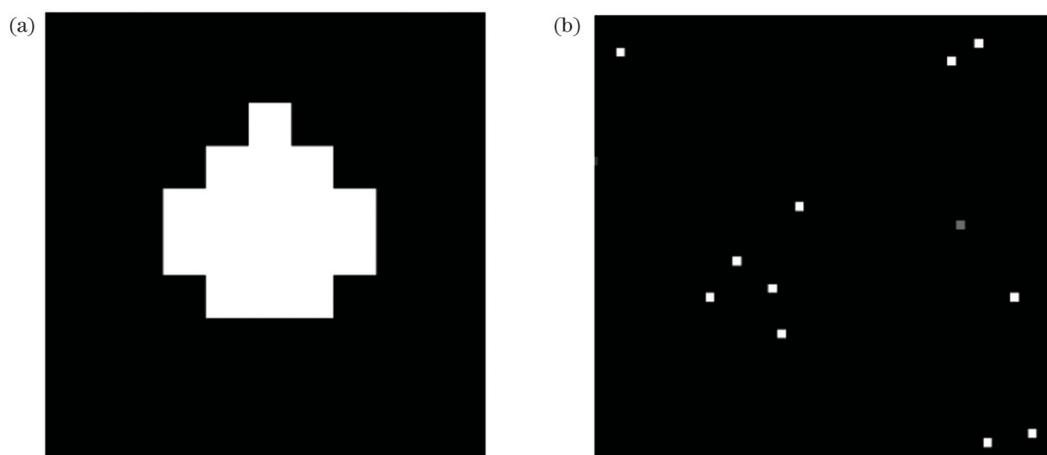


图 11 原始二维图像。(a)有效光斑亮点;(b)背景噪声亮点

Fig. 11 Original two-dimensional images. (a) Bright spots of effective light spot; (b) bright spots of background noise

基于上述特点,本文在去噪过程中采用了以下步骤:首先,设定一个全局阈值,用于初步对图像进行二值化处理,可去除一部分强度值显著低于信号值的噪声,有助于减少后续的工作量;接着对二值图像进行标签化处理,计算标签图像特征,具体而言,计算每个区域的面积,设置面积阈值,该阈值用于过滤二值化遗漏的强度高于信号的噪声;最后,通过将二值图像映射回原始图像,达到去除背景噪声的目的。在整个去噪过程中,本文采用最小误差法选取最佳阈值并将其作为二值化中的全局阈值,在面积阈值方面,我们一般选取 1~2 pixel 作为阈值,这样既可以去除大部分噪声也能将较弱的信号保留。整个算法的流程图如图 12 所示。

通过拍摄汞-氙元素灯进行去噪效果验证,去噪前后的图像如图 13 所示。可以看出,有效光斑得以保留,而单个背景噪声亮点则被成功去除。这种噪声的去除不仅减少了数据处理中的无效操作,而且提高了谱图还原的效率。

经过降噪处理后,有效光斑得以保留,噪声基本被完全消除,利用去噪图像信息结合谱图还原模型可以

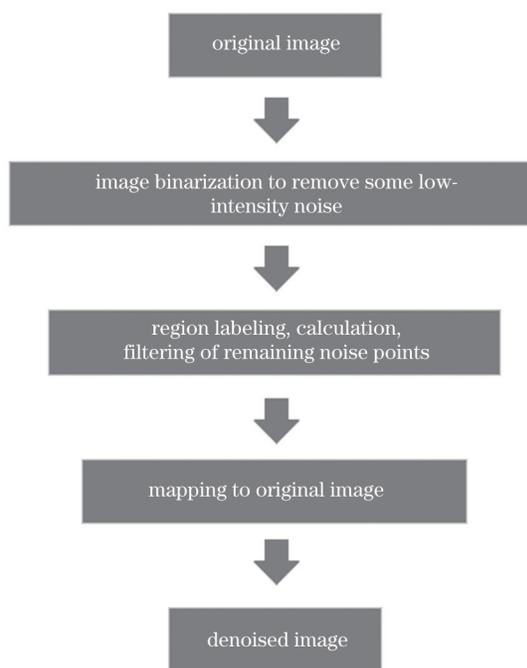


图 12 去噪算法流程图

Fig. 12 Flow chart of denoising algorithm

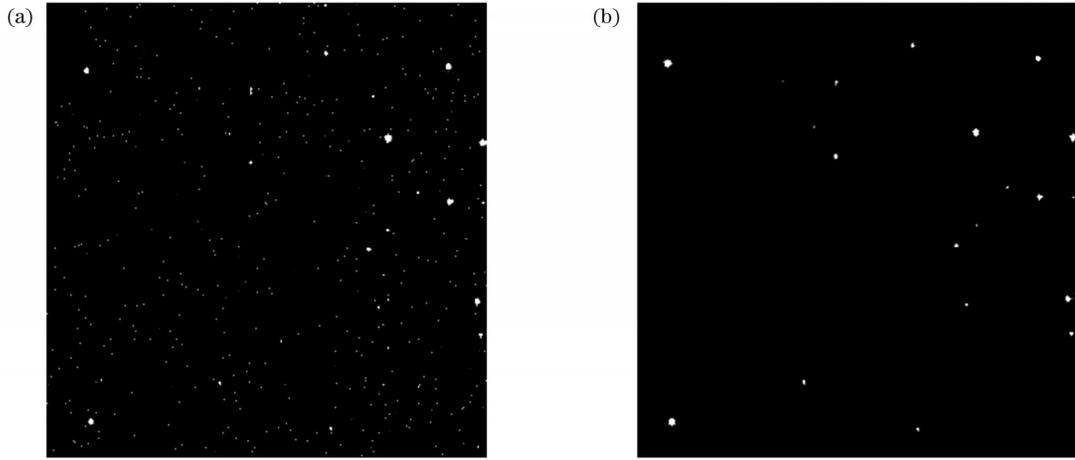


图 13 汞-氩灯局部二维谱图。(a)去噪前局部谱图;(b)去噪后局部谱图

Fig. 13 Local two-dimensional spectra of mercury-argon lamp. (a) Local spectrum before denoising; (b) local spectrum after denoising

实现波长提取。具体地,首先在谱图还原模型中寻找非零波长点的位置,接着在去噪谱图强度矩阵中找到该波长点位置的强度数值,最后,按照波长值从小到大的次序对波长和光强数据进行排列,完成波长提取。

在提取光强度值时,CCD 相机捕捉到的是一个光斑,该光斑涵盖了多个像素,此处对模型和图像的整数坐标展开讨论,认为光斑中强度最高的像元位置代表了该光斑真实的坐标位置,需要采用质心提取方法确保获得每个光斑对应的准确坐标。本文采用的提取方法如下。首先从谱图还原模型矩阵中获取非零波长点的位置 (m,n) ,然后选择光强矩阵中的 I_{mn} 。具体选取为

$$I_{mn} = I_{\max(m \pm i, n \pm j)}, \quad (10)$$

式中: $i = -1, 0, 1; j = -2, -1, 0, 1, 2$ 。选择光强矩阵中强度值最大的数值 I_{mn} 与 λ_{mn} 对应,最后按照波长值的升序对数据进行排序。

波长提取的准确性对仪器最终的性能具有重要影响。由于像差、环境等因素的存在,理论上在像面上形成的光斑大小因为弥散效应会扩散至3~4倍理论面积。在谱图还原模型中,相邻级次的距离呈非线性关系,靠近长波波段的相邻级次距离仅为3~4 pixel,若光斑弥散现象显著,可能导致在相邻级次上提取到假峰,从而影响波长提取的准确性。尽管通过优化光学设计能够改善这一现象,但无法完全避免。图 14 为长波段相邻级次提取时假峰的示意图。

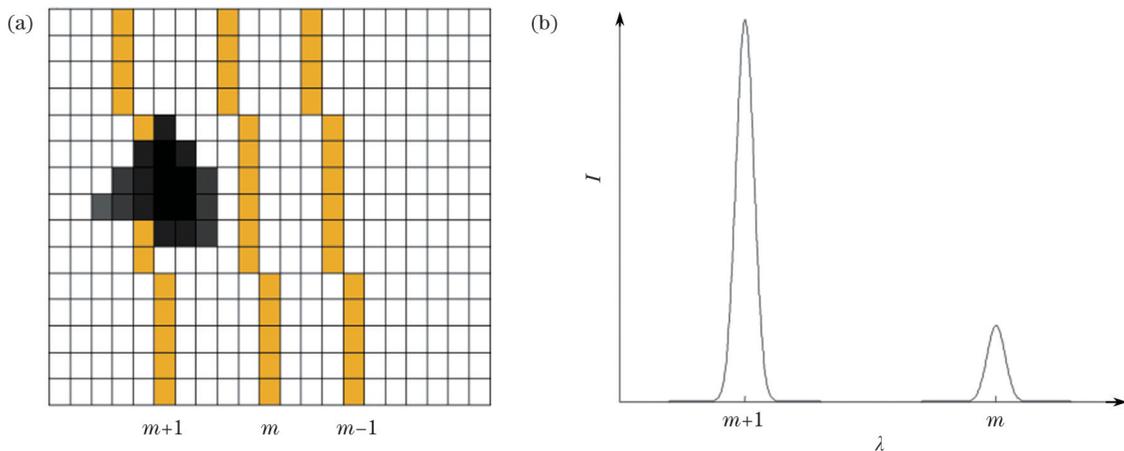


图 14 提取时的假峰示意图。(a)长波段相邻级次示意图;(b)假峰示意图

Fig. 14 Schematics of false peaks during extracting. (a) Schematic of adjacent levels in long wavelength band; (b) schematic of fake peak

本文使用的波长提取方法在成像偏差不超过 3 pixel 的情况下能正确提取所有有效波长,但可能会导致出现假峰。假峰的强度受光斑中心偏离模型的距离和模型中对应波长处相邻级次的距离的影响。为确保假峰强度明显低于真实峰,需要尽

量降低模型偏差,并通过优化仪器设计确保模型上相邻级次的距离大于 3 pixel。在 Hg-Ar 灯原始谱图去噪后进行波长提取,获取的一维谱图如图 15 所示,最后程序实现了特征波长的自动提取和输出。

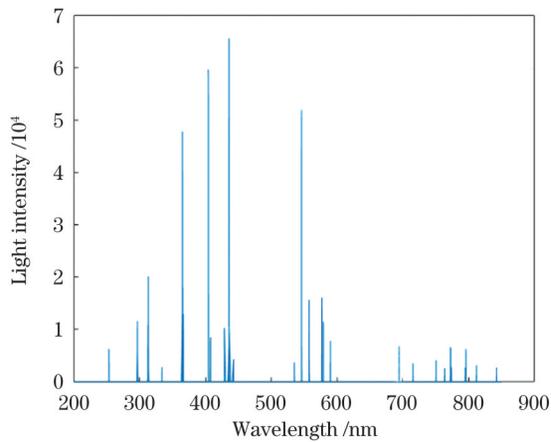


图 15 特征波长与光强度的一维谱图

Fig. 15 One-dimensional spectrum of characteristic wavelength and light intensity

4 测试实验

中阶梯光栅光谱仪的原理在于巧妙地辨识特征波长,以明确元素的类别。为验证本模型的准确性和精度,我们选用了汞-氩(Hg-Ar)、铜(Cu)、钠(Na)、锂(Li)以及锶(Sr)5种元素灯作为测试光源。在谱图还原后获取了一维谱图,随后对比了这5种元素灯挑选出的特征波长与实际的特征波长。

本文选取的工作波段为 200~800 nm,选择后的5种测试光源的特征波长遍布在这个波段范围内,具体特征波长选择如表4所示。

本文选取42个数据点,这42个特征波长覆盖了200~800 nm的工作波段范围,避免了偶然因素的影响,使数据更为严谨。提取一维谱图值与5种元素灯的特征波长进行比较,结果如表5所示。

由表5可知,在所选取的42个特征波长中,平均提取误差为0.01 nm,出现的最大提取误差为0.031 nm。各波段偏差均满足波长提取的精度要求。传统谱图还原算法的提取精度数量级在0.03 nm左右,本文平均提取误差为0.01 nm,精度更高,且建模速度更快。在本文的谱图还原模型中,不同波段处相邻像素的中心波长差值是不一样的,像面像素偏差可以更直观地反映谱图还原的精度。不同波段处相邻像素所对应的波长差值(这里波长差值为选取波段内取样的平均数)如表6所示。

由表6可知,在200~300 nm波段,相邻像素的中心波长差值为0.007 nm。具体指的是:在建立的谱图还原模型中,每个波长都有对应的坐标位置,自由光谱区波长按从小到大的顺序呈扇形分布在区域内,每个像素都对应一个中心波长,每个波长经过四舍五入都会对应一个像素坐标(整数),两个波长之间对应坐标的差值即为本文所提的像素偏差,例如210.267 nm波长点的坐标位置为(254,539),而210.274 nm波长点的位置为(254,540),两个波长在同一级次上,Y方向

表4 不同波段范围内的特征波长

Table 4 Characteristic wavelengths in different wavelength ranges

Wavelength /nm	Element lamp	Band /nm
253.652	Hg-Ar	200-300
296.728	Hg-Ar	200-300
223.008	Cu	200-300
244.090	Cu	200-300
248.592	Cu	200-300
282.425	Cu	200-300
256.231	Li	200-300
274.118	Li	200-300
302.150	Hg-Ar	300-400
313.155	Hg-Ar	300-400
365.010	Hg-Ar	300-400
324.754	Cu	300-400
327.396	Cu	300-400
333.782	Cu	300-400
338.071	Sr	300-400
404.656	Hg-Ar	400-500
407.780	Hg-Ar	400-500
435.835	Hg-Ar	400-500
413.262	Li	400-500
407.771	Sr	400-500
416.180	Sr	400-500
421.552	Sr	400-500
460.733	Sr	400-500
546.074	Hg-Ar	500-600
576.961	Hg-Ar	500-600
579.067	Hg-Ar	500-600
510.550	Cu	500-600
521.820	Cu	500-600
515.330	Cu	500-600
578.200	Cu	500-600
588.995	Na	500-600
589.592	Na	500-600
610.362	Li	600-700
670.784	Li	600-700
696.540	Hg-Ar	600-700
706.720	Hg-Ar	700-800
727.290	Hg-Ar	700-800
738.400	Hg-Ar	700-800
750.390	Hg-Ar	700-800
763.510	Hg-Ar	700-800
772.400	Hg-Ar	700-800
794.820	Hg-Ar	700-800

表 5 元素灯的特征波长对比及偏差

Table 5 Comparison and deviations of characteristic wavelengths of elemental lamps

Characteristic wavelength /nm	Extracted wavelength /nm	Extraction deviation /nm
223.008	223.015	0.007
244.090	244.099	0.009
248.592	248.601	0.009
253.652	253.659	0.007
256.231	256.238	0.007
274.118	274.108	0.011
282.425	282.430	0.005
296.728	296.730	0.002
302.150	302.155	0.005
313.155	313.150	0.005
324.754	324.754	0
327.396	327.399	0.003
333.782	333.790	0.008
338.071	338.060	0.011
365.010	365.009	0.001
404.656	404.643	0.013
407.771	407.770	0.001
407.780	407.773	0.007
413.262	413.275	0.013
416.180	416.196	0.016
421.552	421.550	0.002
435.835	435.813	0.022
460.733	460.745	0.012
510.550	510.542	0.008
515.330	515.312	0.018
521.820	521.817	0.003
546.074	546.053	0.021
576.961	576.940	0.021
578.200	578.204	0.004
579.067	579.061	0.006
588.995	588.990	0.005
589.592	589.580	0.012
610.362	610.361	0.001
670.784	670.753	0.031
696.540	696.524	0.016
706.720	706.706	0.014
727.290	727.271	0.019
738.400	738.391	0.009
750.390	750.360	0.030
763.510	763.492	0.018
772.400	772.391	0.009
794.820	794.790	0.028

表 6 不同波段中相邻像素的中心波长差值

Table 6 Central wavelength differences between adjacent pixels in different wavelength bands

Band /nm	200-300	300-500	500-600	600-800
Wavelength difference /nm	0.007	0.010	0.015	0.020

相差一个像素,两个波长相差 0.007 nm。其他波段同理,结合表 5 和表 6 就可以更直观看出特征波长的像素偏差。不同波段特征波长的像素偏差如图 16 所示,可以看出:在 200~300 nm 波段偏差不超过 1 pixel;在 300~500 nm 和 500~600 nm 波段偏差最大为 2 pixel;在 600~800 nm 波段偏差不超过 2 pixel。观察整个工作波段(200~800 nm),最大像面偏差约为 2 pixel。本文提取的平均波长误差为 0.01 nm,实际应用要结合每个波段的像面像素偏差。经过上面分析可知在 200~800 nm 波段,像面最大偏差为 2 pixel。结合建立的谱图还原模型可知,谱图还原模型中长波段级次间的最短间隔为 3~4 pixel,2 pixel 的偏差不会造成级次误读(级次误读理论在前文 3.2 节波长提取处有详细介绍),可以有效提取所有真实波长,满足实际应用的精度要求。上述 5 种元素灯测试实验表明,本文的谱图还原算法在精度上表现出色,同时具有很高的速度,满足实际工程的要求。

5 结 论

提出一种基于全像面拟合的中阶梯光栅光谱仪谱图还原算法。在建模过程中,先关注建模速度,再追求模型精度。首先,利用偏差法迅速建立一个初始模型(结合实验室仪器设备),通过对初始模型与理论模型(光学追迹软件中对实际光路的光线追迹数据)进行拟合,得到标准模型。然后对标准模型与实际模型(在实际环境下拍摄的汞-氙灯谱图)进行拟合,得到最终模型。至此,模型建立完成,模型建立所需要的时间为 0.94 s,中阶梯光栅方向(Y 方向)的位置偏差不超过 1 pixel,而棱镜方向(X 方向)的位置偏差不超过 3 pixel。在模型建立后,对波长进行提取。首先通过二值化,小区域标记阈值以去噪。然后将谱图还原模型与拍摄谱图合并提取特征波长,因为在 1024×1024 区域内强度和波长是一一对应的(前提是在误差允许范围内),程序自动输出一维谱图即特征波长和光强度的对应关系。最后,选择了汞-氙、铜、钠、锂以及铯 5 种元素灯作为测试光源,以验证模型的精度。经过验证,得知平均波长的提取误差为 0.01 nm。在 200~800 nm 的工作波段内像面像素偏差在 2 pixel 以内。经过实验验证,所提谱图还原算法在建模速度和模型精度方面都表现出不错的优势。过去的一些谱图还原算法通常是在建模后进行标定的,当环境变化或者仪器移动时仪器内部部件会发生微小偏移,从而引

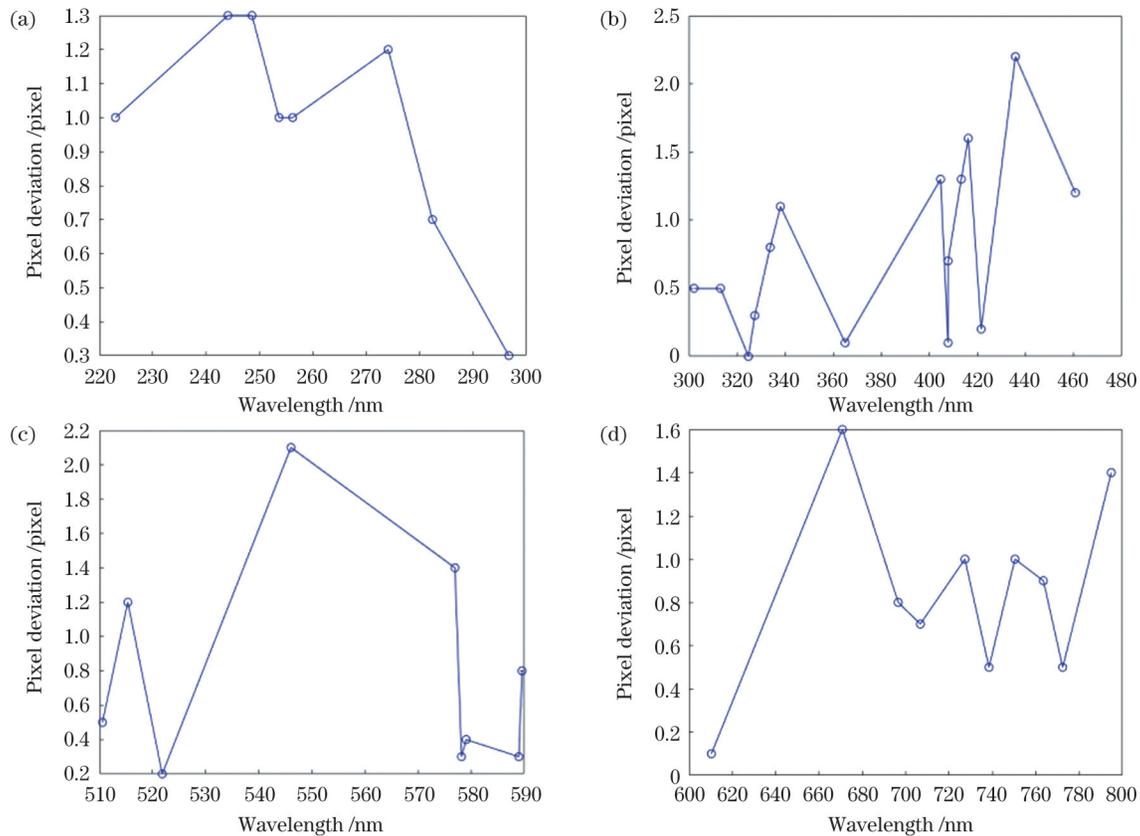


图 16 不同波段特征波长的像素偏差。(a) 200~300 nm 波段像素偏差; (b) 300~500 nm 波段像素偏差; (c) 500~600 nm 波段像素偏差; (d) 600~800 nm 波段像素偏差

Fig. 16 Pixel deviations of characteristic wavelengths in different wavelength bands. (a) Pixel deviation in 200–300 nm wavelength band; (b) pixel deviation in 300–500 nm wavelength band; (c) pixel deviation in 500–600 nm wavelength band; (d) pixel deviation in 600–800 nm wavelength band

起模型的偏差,有时仪器需要重新标定甚至拆封装调。所提算法在建模过程中进行标定,这在一定程度上克服了这些影响,从而节约了资源和时间成本。此外,该算法操作简便且通用,更利于生产实践中的广泛应用。研究结果对于中阶梯光栅光谱仪的性能和实用性提升具有非常重要的意义。

参 考 文 献

- [1] 唐玉国, 陈少杰, 巴音贺希格, 等. 中阶梯光栅光谱仪的谱图还原与波长标定[J]. 光学精密工程, 2010, 18(10): 2130-2136.
Tang Y G, Chen S J, Bayanheshig, et al. Spectral reducing of cross-dispersed echelle spectrograph and its wavelength calibration [J]. Optics and Precision Engineering, 2010, 18(10): 2130-2136.
- [2] 陈少杰, 巴音贺希格, 潘明忠, 等. 中阶梯光栅光谱仪快速设计与谱图分析的数学模型[J]. 光学学报, 2013, 33(10): 1030001.
Chen S J, Bayanheshig, Pan M Z, et al. Efficient algorithms for echelle spectrograph design and cross-dispersed spectra analysis[J]. Acta Optica Sinica, 2013, 33(10): 1030001.
- [3] Moore F L, Furst B. Echelle calibration and wavelength calculation [J]. Journal of the Optical Society of America, 1972, 62(6): 762-766.
- [4] Sadler D A, Littlejohn D, Perkins C V. Automatic wavelength calibration procedure for use with an optical spectrometer and array detector[J]. Journal of Analytical Atomic Spectrometry, 1995, 10(3): 253-257.
- [5] Liu K L, Hieftje G M. Investigation of wavelength calibration for an echelle cross-dispersion spectrometer[J]. Journal of Analytical Atomic Spectrometry, 2003, 18(10): 1177-1184.
- [6] 朱继伟, 孙慈, 杨晋, 等. 基于多项式拟合的中阶梯光栅光谱仪谱图还原[J]. 光学精密工程, 2020, 28(8): 1627-1633.
Zhu J W, Sun C, Yang J, et al. Spectrogram reduction for echelle grating spectrometer based on polynomial fitting[J]. Optics and Precision Engineering, 2020, 28(8): 1627-1633.
- [7] Finkelstein N A. The measurement of wavelength in echelle spectra[J]. Journal of the Optical Society of America, 43(2): 90-96.
- [8] Meneill J J. Wavelength measurement in echelle spectra[J]. Journal of the Optical Society of America, 49(5): 441-445.
- [9] 陈少杰. 宽波段中阶梯光栅光谱仪设计与标定方法研究[D]. 长春: 中国科学院长春光学精密机械与物理研究所, 2013.
Chen S J. Method for wide spectral coverage echelle spectrograph design and calibration[D]. Changchun: Changchun Institute of Optics and Precision Mechanics and Physics, Chinese Academy of Sciences, 2013.
- [10] Chen S J, Tang Y G, Bayanheshig X, et al. A new type of wide spectral coverage echelle spectrometer design for ICP-AES[J]. Proceedings of SPIE, 2012, 8557: 85571M.
- [11] 尹禄. 中阶梯光栅光谱仪谱图信息处理方法研究[D]. 长春: 中国科学院长春光学精密机械与物理研究所, 2017.
Yin L. The method of spectrum data processing for echelle spectrometer[D]. Changchun: Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics, Chinese Academy of Sciences, 2017.
- [12] Zhang R, Bayanheshig, Yin L, et al. Wavelength calibration model for prism-type echelle spectrometer by reversely solving prism's refractive index in real time[J]. Applied Optics, 2016, 55(15): 4153-4158.

- [13] 傅骁. LIBS 中阶梯光栅光谱仪实现技术及数据处理算法研究[D]. 天津: 天津大学, 2018.
Fu X. Implementation of LIBS echelle spectrometer and research on data processing method[D]. Tianjin: Tianjin University, 2018.
- [14] Li Y C, Jiang W Y, Li C S, et al. Spectral reduction model for an echelle spectrometer based on a digital micromirror device and photomultiplier[J]. *Applied Optics*, 2021, 60(29): 9101-9109.
- [15] Duan F J, Qin Y Q, Fu X, et al. Simple spectral reduction algorithm used for the echelle spectrometer[J]. *Applied Optics*, 2018, 57(30): 8921-8927.
- [16] Shen M, Hao Z Q, Li X Y, et al. New spectral reduction algorithm for echelle spectrometer in laser-induced breakdown spectroscopy[J]. *Optics Express*, 2018, 26(26): 34131-34141.
- [17] Allemand C D. Coma correction in Czerny-Turner spectrographs[J]. *Journal of the Optical Society of America*, 1968, 58(2): 159-163.
- [18] Howard J N. Coma correction for a Czerny-Turner monochromator: comment[J]. *Applied Optics*, 1982, 21(10): 1708.
- [19] Gil M A, Simon J M, Fantino A N. Czerny-Turner spectrograph with a wide spectral range[J]. *Applied Optics*, 1988, 27(19): 4069-4072.
- [20] Kraus M, Förster E, Bagusat V, et al. Realization of a compact cross-grating spectrometer and validating experimental tests[J]. *Applied Optics*, 2020, 59(5): 1338-1346.
- [21] 刘晓林, 刘勋, 李维, 等. 天基光纤激光雷达光谱仪光学系统设计[J]. *中国激光*, 2023, 50(7): 0708012.
- Liu X L, Liu X, Li W, et al. Optical system design of space-based filament LiDAR spectrometer[J]. *Chinese Journal of Lasers*, 2023, 50(7): 0708012.
- [22] Florek S, Haisch C, Okruss M, et al. A new, versatile echelle spectrometer relevant to laser induced plasma applications[J]. *Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy*, 2001, 56(6): 1027-1034.
- [23] Koch J, Okruss M, Franzke J, et al. Element-selective detection of gas chromatographic eluates by near infrared Echelle optical emission spectrometry on microwave-induced plasmas[J]. *Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy*, 2004, 59(2): 199-207.
- [24] Kraus M, Hönle T, Förster E, et al. Compact double-pass Echelle spectrometer employing a crossed diffraction grating[J]. *Optics Express*, 2022, 30(17): 31336-31353.
- [25] 朱书缘, 吴朋翰, 鲁贞贞, 等. 应用光谱重建理论的傅里叶变换光谱仪[J]. *激光与光电子学进展*, 2023, 60(9): 09120003.
Zhu S Y, Wu P H, Lu Z Z, et al. Fourier transform spectrometer using spectral reconstruction theory[J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2023, 60(9): 09120003.
- [26] 崔涛, 尹禄, 梁培, 等. 中阶梯光栅光谱仪谱图还原技术与展望(特邀)[J]. *激光与光电子学进展*, 2024, 61(3): 0330003.
Cui T, Yin L, Liang P, et al. Development and prospects of spectral reduction technology of echelle spectrometer (Invited)[J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2024, 61(3): 0330003.

Spectral Reduction Algorithm for Echelle Spectrometer Based on Full-Field Fitting

Cui Tao¹, Yin Lu^{1*}, Sun Yanan¹, Chen Jianjun², Zhou Yangdong¹, Han Longfei¹, Wang Le^{1**}

¹College of Optics and Electronic Science and Technology, China Jiliang University, Hangzhou 310018, Zhejiang, China;

²College of Information and Control Engineering, Qingdao University of Technology, Qingdao 266520, Shandong, China

Abstract

Objective The echelle spectrometer, with its high spectral resolution, is increasingly applied in various fields and has become one of the primary spectroscopic analysis instruments. Spectrum reconstruction technology is at the core of data processing in echelle spectrometers. It achieves rapid reconstruction from two-dimensional (2D) images to one-dimensional (1D) spectra by establishing a correspondence between the wavelength and imaging position. The accuracy of the spectrum reconstruction directly determines the performance of the echelle spectrometer, making it a key and challenging aspect of instrument development. Spectrum reconstruction algorithms have evolved from ray tracing, modeling (deviation method and mathematical modeling), and calibration methods. The evolution of algorithms is an ongoing process of continuous optimization and improvement. Each spectrum reconstruction algorithm has its advantages and disadvantages. However, a consistent mainstream approach is to achieve high accuracy and speed. Factors such as environmental conditions and application requirements must also be considered. Therefore, it is crucial to develop a spectrum reconstruction algorithm that combines these various advantages.

Methods This study proposes a convenient and widely applicable spectrum reconstruction algorithm, adopting a nontraditional approach that initially focuses on improving the modeling speed, followed by further enhancement of accuracy. The main research method involves leveraging the advantage of rapid modeling using the deviation method to establish an initial model quickly. Subsequently, the initial model is subjected to holographic surface fitting with the theoretical model traced using ray-tracing software to obtain a standard model. Calibration is thereafter incorporated into the modeling process, allowing the standard model to fit an actual model comprising elemental lamp spectrum data. Through this process, the final model is obtained, and a spectrum reconstruction model is established. Following this, denoising is applied to the 2D spectra of the elemental lamps, completing the wavelength extraction. Finally, five elemental lamps are selected as test light sources to validate the accuracy of the proposed algorithm.

Results and Discussions Holographic surface fitting is performed between the initial and theoretical models (Fig. 7). After holographic surface fitting, a standard model is obtained (Fig. 8). The error within the holographic surface of the standard model is within 2 pixel (Table 3). In the two-stage modeling process, the standard model is fitted with the actual model to obtain the final

model. The error within the holographic surface of the final model after fitting is within 3 pixel (Fig. 10). In the image denoising process, a denoising algorithm is developed based on the characteristics of the original 2D spectrum, accomplishing the denoising task and removing the majority of the noise (Fig. 13). Finally, by selecting five types of elemental lamps as test light sources (Table 4) and 42 characteristic wavelengths as test data (Table 5), experimental results exhibit an extraction error of 0.01 nm for the average wavelength within the selected wavelength range. The entire image surface deviation is validated by the spectrum reconstruction model (Table 6). Within the wavelength range of 200–800 nm, the image surface deviation is within 2 pixel (Fig. 16). The spectrum reconstruction algorithm presented in this paper demonstrates excellent accuracy.

Conclusions This study proposes a spectrum reconstruction algorithm for echelle spectrometers based on holographic surface fitting. The algorithm demonstrates notable advantages in both modeling speed and model accuracy. As concerns calibration during the modeling process, this algorithm overcomes the impact of environmental changes and instrument movements, thereby saving resources and time. This study shifts its focus to the modeling process, initially prioritizing modeling speed, and later pursuing model accuracy. The advantage of rapid modeling using the deviation method is leveraged to establish an initial model. Thereafter, the spectrum reconstruction model is constructed using holographic surface fitting, cleverly incorporating calibration into the modeling process. After model establishment, denoising is applied to the 2D original images, and wavelength extraction is completed. Finally, the accuracy of the model is validated using five types of elemental lamps. The experimental results indicate that within the entire wavelength range (200–800 nm), the average wavelength extraction error is within 0.01 nm, and the pixel deviation for extracting characteristic wavelengths within the holographic surface is 2 pixel, which does not lead to significant misinterpretations. The algorithm can correctly output 1D spectra of the characteristic wavelengths and intensities. These experimental results fully demonstrate the capability of the algorithm to meet precision requirements. Moreover, the algorithm is straightforward, versatile, and applicable, making it more conducive to widespread use in practical production. These aspects are significant for enhancing the performance and practicality of echelle spectrometers.

Key words spectroscopy; echelle spectrometer; spectral reduction algorithm; full-field fitting; spectral calibration