

中阶梯光栅光谱仪谱图还原技术发展展望(特邀)

崔涛, 尹禄, 梁培, 孙亚楠, 王乐*

中国计量大学光学与电子科技学院, 浙江 杭州 310018

摘要 中阶梯光栅光谱仪凭借高光谱分辨率在各领域应用日益广泛, 已经成为主要的光谱分析仪器之一。谱图还原技术是中阶梯光栅光谱仪数据处理的核心, 通过建立波长和成像位置间的对应关系实现二维图像到一维谱图的快速还原。谱图还原的精度直接决定了中阶梯光栅光谱仪的性能, 是仪器开发的重点和难点。鉴于此, 本文综述谱图还原技术的发展, 将其演变过程归纳为光线追迹、模型化和标定法等 3 个阶段, 重点介绍各阶段谱图还原算法的核心思路与代表方法的原理。最后针对中阶梯光栅光谱仪谱图还原技术, 归纳其发展历程、预测其发展趋势、展望其发展方向。

关键词 中阶梯光栅光谱仪; 谱图信息处理; 谱图还原算法; 光线追迹; 光谱标定

中图分类号 TH741

文献标志码 A

DOI: 10.3788/LOP231373

Development and Prospects of Spectral Reduction Technology of Echelle Spectrometer (Invited)

Cui Tao, Yin Lu, Liang Pei, Sun Yanan, Wang Le*

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

Abstract The echelle spectrometer is a major spectroscopic instrument with its high spectral resolution in a wide range of applications. The spectral reduction technique is the core of the data processing of the echelle spectrometer, which realizes the rapid reduction of two-dimensional images to one-dimensional spectra by establishing the correspondence between wavelength and imaging position. The performance of the echelle spectrometer is directly determined by the accuracy of spectral reduction, which is the most important point and greatest difficulty in instrument development. In view of this, the development of the spectral reduction technique is reviewed, and its evolution is classified into three stages: ray tracing, modeling, and calibration methods. The core ideas and principles of spectral reduction algorithms in each stage are discussed in detail. Finally, the development history is summarized, the development trend is predicted, and the outlook of the development direction for the echelle spectrometer spectral reduction technology is discussed.

Key words echelle spectrometer; spectrogram information processing; spectral reduction algorithm; ray tracing; spectral calibration

1 引言

光谱仪器是利用光在与物质相互作用时的折射、散射和干涉等属性, 将复杂的光按一定的规律分解成光谱的光学仪器^[1-4], 光谱作为物质的“指纹”可以用于唯一确定其化学成分。凭借光谱检测的功能, 光谱仪器发展至今, 已经被应用到多个领域, 广泛应用于工业(化工、石油、冶金)、航空航天、医疗、食品、农业以及资源勘测等领域^[5-9]。为了提升光谱仪的光谱分辨率^[10], 需要通过增加系统焦距或者更高的光栅刻线密度来提高光谱分辨

率, 但是光栅刻线密度受限于光栅制备技术, 而长焦距会增大仪器体积违背小型便携化发展趋势, 使得传统光谱仪的发展遭遇了瓶颈^[11]。与此同时, 随着光谱仪检测目标和领域的复杂化和多样化, 对测试仪器的光谱范围、光谱分辨率、灵敏度等的要求越来越高。

传统光谱仪无法同时满足高分辨率、高色散和小型化的需求, 中阶梯光栅光谱仪的问世为光谱仪器向着高分辨率发展提供了新的思路。它是一类分辨率较高的交叉色散光谱仪, 其中, 垂直色散元件为中阶梯光栅, 横向色散元件为低色散棱镜或光栅, 通过横向色散元件

收稿日期: 2023-05-25; 修回日期: 2023-07-04; 录用日期: 2023-08-01; 网络首发日期: 2023-08-11

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

通信作者: *calla@cju.edu.cn

将原本因中阶梯光栅工作在高衍射级次下而重叠的光谱交叉色散开。中阶梯光栅作为主色散元件,具有刻线密度低、衍射角大、全波段闪耀、衍射级次高等特点,因此以中阶梯光栅作为主色散元件的中阶梯光栅光谱仪具有高分辨率、小型化、全谱瞬态直读等优点。因为中阶梯光栅成品制作困难、光谱信息处理方法局限的影响,其发展进程缓慢,较少的研究成果主要应用于天文学领域^[12-17],直到最近几年,关于中阶梯光栅光谱仪的研究才有了很大的进展。到目前为止中阶梯光栅光谱仪可应用在吃穿用、工农医和国防天文等诸多领域^[18-20]中。中阶梯光栅光谱仪凭借其超高的光谱分辨率常用于发射光谱分析、元素类别和含量鉴定及同位素区分中。发射光谱一般通过激光和高温灼烧等手段激发待测物的发射光谱,以激光诱导等离子体光谱技术^[21-25]和电感耦合等离子体技术^[26-29]最具代表性,中阶梯光栅光谱仪是这两种技术中使用最多的光谱分析仪器。

中阶梯光栅光谱仪采用面阵相机成像,每次采集都获得一个二维数字矩阵图像,水平和垂直坐标代表探测器中相应的像元位置,矩阵图像中的数值代表该位置处的光强度值。并非所见即所得,直观的一维光谱曲线由二维图像转化而成。采用任意中阶梯光栅结构的光谱仪,都可根据光线几何原理计算出不同波长的光在探测器上的成像位置,从而在光斑图像的坐标和波长之间建立对应关系,构建这种对应关系的方法被称作谱图还原算法,它是中阶梯光栅光谱仪谱图信息处理的核心^[30]。利用谱图还原算法构建的对应关系可以快速将面阵相机拍摄的二维图像转化为传统的一维光谱曲线,但是中阶梯光栅光谱仪相比于传统光谱仪数据量大、对外界环境更加敏感,这都增加了光谱标定和数据处理的难度^[31-32]。而中阶梯光栅光谱仪高光栅分辨率主要依赖于谱图还原算法,到目前为止,算法经历了从光线追迹、模型化到标定法的发展,发展趋势可以归纳为更高精度、更高速度和更高普适性方法的开发。本文重点梳理国内外的谱图还原算法,阐述它们各自的主要工作原理,对其思路和发展进行总结并对中阶梯光栅光谱仪谱图还原算法的发展进行展望。

2 中阶梯光栅光谱仪的原理

2.1 光路结构

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。光学系统采用最广泛应用的单色器结构形式——Czerny-Turner 结构,该结构可以有效抑制系统彗差,消除垂轴像差并获得二维平像场^[33]。由于中阶梯光栅具有高衍射效率的特点,会出现许多具有相同衍射角的波长,即重叠现象。因此色散组件采用交叉色散,由垂直色散部件中阶梯光栅和低色散率的横向色散部件构成,通过色散组件后重叠的光谱横向展开。其中,横向色散部件可以选择光栅或者棱镜,前者色散均匀但效率低且杂散光难以完全抑制,后者虽然色散不均匀但效率高且杂散光较低,因此横向色散元件大多选择棱镜,同时通过组合光学元件实现均匀的色散率也是中阶梯光栅光谱仪设计的一个热门研究课题。光栅色散方向决定了中阶梯光栅光谱仪的高分辨率,横向色散元件则负责分开整个光谱并充满探测器的整个图像平面。

中阶梯光栅光谱仪光路结构主要分为反射式棱镜和透射式棱镜两种,其中,主要区别在于棱镜的作用不同,前者棱镜第一面透射、第二面反射,后者棱镜两个面均透射。透射式结构准直光线先经过棱镜后经过光栅,使得光栅入射角随波长变化而改变,增加了谱图还原算法的复杂度,虽然具有更小的仪器体积但优势并不明显。因此目前棱镜反射式结构应用比较广泛。两种光路结构如图 1 所示,不难看出,中阶梯光栅光谱仪以 C-T 结构为主要架构,具有相对简单的结构且无移动部件,在此基础上还会在入射端和探测端引入透镜组用于优化准直光和校正像差,图 1 给出的是一种在探测端引入柱透镜的光路。

光线经过入射孔径的空间调制,经准直镜准直入射到中阶梯光栅上进行主方向的色散,由于中阶梯光栅的高衍射水平,其各级自由光谱区很窄且高度重叠。经过低色散反射棱镜的色散后,具有重叠级次的光谱被横向延展开来,最后通过成像镜在探测器上形成一个二维光谱图。

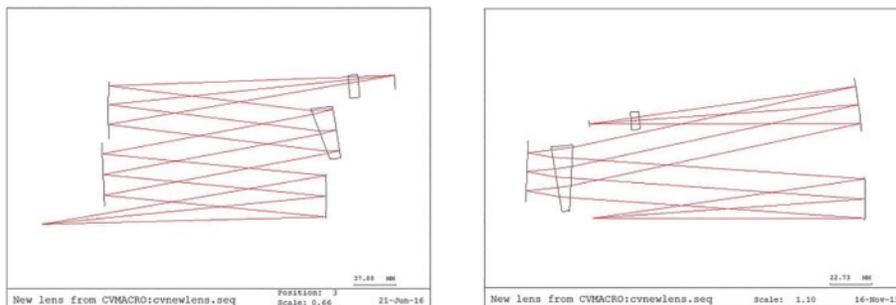


图 1 中阶梯光栅光谱仪光路结构(反射式结构和透射式结构)

Fig. 1 Echelle spectrometer path structure(reflective and transmissive structures)

2.2 二维谱图

为了处理光谱级次重叠的问题,中阶梯光栅光谱

仪利用交叉色散的形式在 CCD 像面上形成二维谱图。相比于传统应用±1 级的普通光栅,中阶梯光栅衍射

级次较高,不同的波长闪耀级次不同,故引入自由光谱区的概念进行描述。自由光谱区定义为每一个级次对应的闪耀波长的区域,其具有相邻级次自由光谱区波长首尾相接的特点,即相邻的两个级次之间无重叠的区间,故而满足:

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

式中: m 代表波长级次; λ 代表波长; $\Delta\lambda$ 代表波长差。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内包含所有或大部分的自由光谱区范围,因此其有效工作波长衍射效率非常高,可以实现全波段闪耀。自由光谱区呈扇区形状分布,短波区域较窄,往长波区域逐渐变宽,探测器的位置可以接收全波段的自由光谱区。图2为中阶梯光栅光谱仪自由光谱区内的二维谱图示意图^[34],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,每个级次上有多个波长。

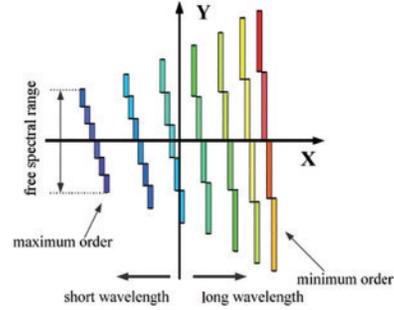


图2 自由光谱区内的二维光谱示意图^[34]
Fig.2 Schematic diagram of the two-dimensional spectrum in the free spectral region^[34]

探测器采集的原始图像包含强度和图像坐标之间的对应关系,谱图还原模型可以获取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唯一找到一个波长数值,依据一致的坐标将

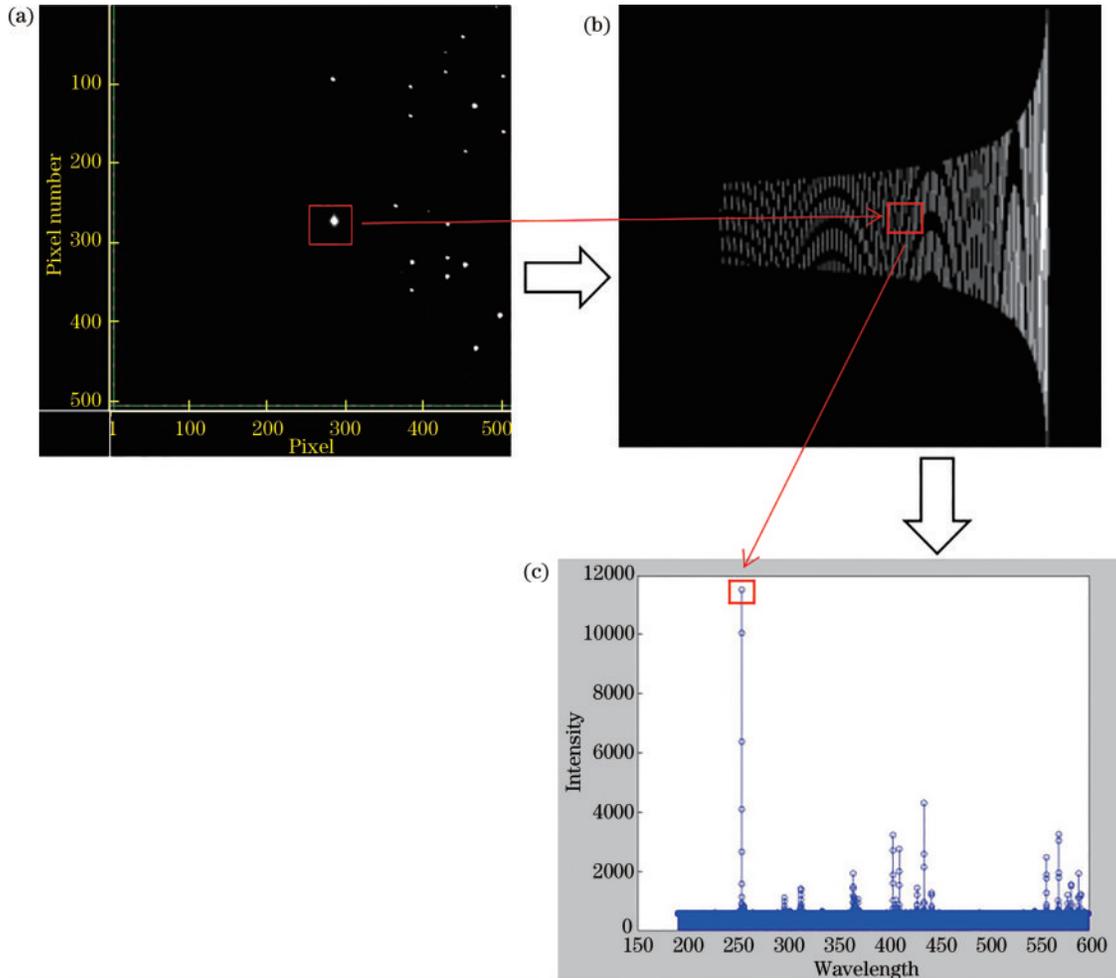


图3 谱图还原过程示意图。(a)原始谱图,包含光强度和位置坐标的对应关系;(b)谱图还原模型,包含波长和位置坐标的对应关系;(c)光谱校准结果,光强度(垂直方向)和波长(水平方向)的对应关系,红色箭头表示某一光斑对应波长的还原过程
Fig.3 Schematic diagrams of the spectral reduction process. (a) Original spectra, containing the correspondence between light intensity and position coordinates; (b) spectral reduction model, containing the correspondence between wavelength and position coordinates; (c) spectral calibration results, correspondence between light intensity (vertical direction) and wavelength (horizontal direction), the red arrow indicates the reduction process for a spot corresponding to the wavelength

谱图还原模型的波长和原始谱图的光强相结合能够很快得到波长与强度的对应关系(其对应关系如图 3 所示)。谱图还原模型作为桥梁,可用于确定波长和强度的对应关系得到一维光谱曲线。谱图还原模型的建立依靠谱图还原算法,建模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频率。

3 谱图还原算法发展现状

中阶梯光栅光谱仪谱图还原算法的发展过程是不断追求提升模型精度和建模速度的过程,其中,精度是主要考虑的指标。谱图还原算法发展过程是精度和速度相互制约交替提升的过程,作者在此将其发展阶段归纳为光线追迹、模型化(偏差法和数学模型法)和标定法。本小节对此 3 类算法的原理和特点进行综述。

3.1 光线追迹

中阶梯光栅光谱仪采用交叉色散的结构形式,因此它的像面面积比较大,而且由于横向色散元件(多为棱镜)会有非线性色散等问题,最后收集到的二维图像用普通的光谱校准方法很难获得探测器像元和波长之间的关系。最开始对于二维谱图的分析,国内外学者做了大量研究,但主要还是采用光线追迹的方法^[35-37],对于每一个已知波长的单色波,可以根据光学设计软件追迹出准确的成像位置^[38-39]。光线追迹在全波段范围进行,追迹越多数值越符合实际情况,但是其追迹运算量也会变得越大。

为了简化光线追踪过程,减少采样点的数量,基于光线追迹的插值法被提出。中阶梯光栅光谱仪经过色散后呈现梳妆二维谱图,每条斜线表示一个级次波长的成像位置,任一级次上存在许多波长,在每一级次上选择两个或更多的波长,通过光线追踪确定其成像位置,然后通过插值拟合获取所有级次的相应波长位置,所有位置的集合就是中阶梯光栅光谱仪整个光谱图的谱图还原关系^[40-41]。这种方法效率更高。后来标准进化算法被引进,即探求波长与坐标的最佳对应关系,一般使用一个多项式来拟合像素和波长的对应关系^[42-43],这使得差值拟合的系数更加精确,提高了谱图还原算法的精度。

朱继伟等^[44-45]采用基于光线追迹的多项式拟合方法分别对中阶梯光栅光谱仪的棱镜垂直色散方向和光栅横向色散方向上光斑位置坐标进行拟合,建立像面与波长之间的函数关系。为减小光线追迹数量,同时采用级次间拟合的方式建立谱图还原模型,依据棱镜与光栅色散相互独立的特性,在 X 方向和 Y 方向上分别建立拟合方程。拟合原理如图 4 所示。

在棱镜色散方向上选择 N 个不同级次的中心波长,追迹出这些波长的 X 方向位置,最后根据坐标点

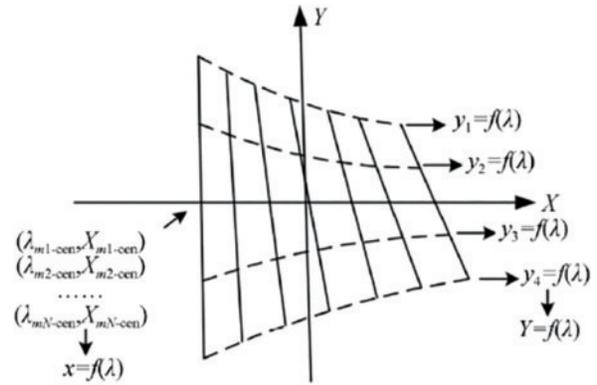


图 4 谱图还原过程拟合原理^[45]

Fig. 4 Fitting principle of spectral restoration process^[45]

(波长级次, X 位置)拟合出多项式 $x = f(\lambda)$, 由此可获得各个波长在像面上的 X 坐标。

在光栅色散方向上采用级次间拟合的方式,首先确定 1 个级次自由光谱区内的 5 个波长值,然后追迹出这 5 个波长的 Y 坐标,从而可知任意级次的 5 个波长的 Y 坐标,得到每个级次的 5 个坐标点(波长级次, Y 位置)后进行级次间拟合,取 M 个级次。通过上述过程可获得每个级次内 5 个点的 Y 坐标位置,最后在级次内对这些点进行多项式拟合,可得到 $y = f(\lambda)$, 进而可获得任意波长的 Y 坐标。

基于光线追迹的多项式拟合算法,通过级次间拟合的方式,只需少量的光线追踪就可以获得整个谱段内波长位置的图像,该方法建立的模型可确保精度。其波长精度高于仪器的光谱分辨率指标,灵活性较强,并且不会由于光路的复杂性而受到影响,适用于各种类型的中阶梯光栅光谱仪。

但是中阶梯光栅光谱仪波段范围内有很多级次,很难在所有级次上都找到正确的单色谱线进行实验,所以只能采用光线追迹来找出所有级次上取样波长在探测器上的位置。因此所有类型的光线追迹方法都需要花费较长时间,特别是当要求中阶梯光栅光谱仪波段范围更宽与分辨率更高时,要对系统结构参数和谱图特征进行调整,过程复杂耗时。

综上所述,该方法可追迹光线的实际运行轨迹,有较高的模型精度,然而模型构建速度较慢且工作量大,难以满足实际应用需求,因此人们开始寻求其他的谱图还原方法。

3.2 模型化

模型化方法就是在几何光学的基础上建立数学模型函数,以中阶梯光栅光谱仪的光学参数作为输入、谱图还原模型作为输出。光线追迹是模型化的数学依托,但输出形式为数据库,即构建对应面阵探测器像面的波长分布矩阵,通过光斑位置查表得以快速分析出该光斑对应的波长数值。模型化方法克服了光线追迹算法复杂、工作速度较慢的缺点,因此现在中阶梯光栅光谱仪的研究人员主要采用该方法进行谱图还原,其

中建立数学模型的方法大同小异。

3.2.1 偏差法

陈少杰等^[34, 46-55]就基于偏差法提出一种快速谱图还原方法。偏差法是一种近似算法,用数学近似思路来求光线经过色散元件后的成像位置,一般取通过色散元件后的任一出射角为基准,把基准角在光路中的成像位置作为基准点,把基准点作为像面中心,与其他点进行对比。任意波长通过色散元件后相较于基准角的角度偏差造成的相对于基准点的位置偏差可以近似写成

$$\Delta l = f \cdot \tan(\alpha - \alpha_0), \quad (3)$$

式中: α_0 为基准角; α 为散射角; f 为聚焦系统的焦距; Δl 是位置的偏差。其示意图如图 5 所示,图 5(a)显示了光线实际运行光路图,衍射角为 α_0 的光线成像位置落在距离中心 Δl 的位置(此处沿色散方向),图 5(b)是计算任意波长成像位置的近似模型。

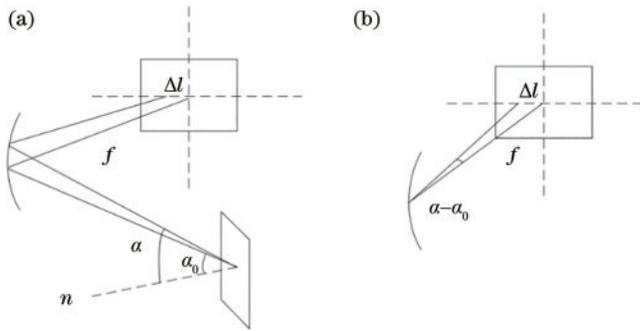


图 5 偏差法示意图。(a)实际光路图;(b)等效模型光路图

Fig. 5 Schematic diagrams of deviation method. (a) Actual optical path diagram; (b) equivalent model light path diagram

最后利用色散方程求出任意波长经过色散元件后的色散角就可以求出此波长对应的成像位置。其中,交叉色散元件互不影响,相对于像面中心的偏移可以分别计算,全部集合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。基于偏差法的模型化方法可以快速建立一个初始模型,提高了建模速度,但是精度较低。

3.2.2 数学模型法

尹禄等^[30, 56-71]提出基于偏差法的数学模型法,后来在天津大学李洋等^[72-78]、吉林大学姜闻宇等^[79-80]的优化研究下性能逐渐提升。数学模型法使用与偏差法相同的方法来设定图像平面中心的位置,同样根据波长计算出射角再计算相对于像面中心的偏移距离,不同点在于不再将色散角与基准角的偏差等效为聚焦角,而是根据几何光学计算波长实际的成像角度。

以聚焦镜为探索对象分析光栅色散方向(Y)的光线移动情况,建立的数学模型如图 6 所示。入射、出射、法平面在同一平面内, O 为球面反射镜球心, A 为入射光线始点(光栅位置前表面), B 是反射光线延长

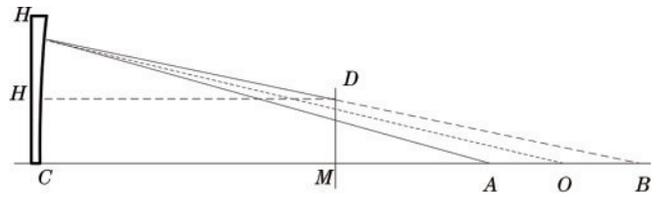


图 6 主色散方向数学模型

Fig. 6 Mathematical model of main dispersion direction

线与光轴交点, C 为球面反射镜前表面中心, D 为像面与反射光线的交叉点, DM 表示像面, $OH = R$,表示球面镜曲率半径。在这个模型中引入两点近似: $DH' = MC = f$; AC 为光栅中心通过棱镜中心至成像镜中心的几何距离 L ,则有 $\angle HAC = \beta_\lambda - \beta_0$ (这两个近似产生的误差在可接受范围内)。

依据主色散方向的数学模型,根据几何光学公式和角度关系推导,有

$$h_y = L \cdot \tan(\beta_\lambda - \beta_0) - f \cdot \tan \left[2 \arcsin \frac{L \cdot \tan(\beta_\lambda - \beta_0)}{R} - \beta_\lambda + \beta_0 \right], \quad (4)$$

式中: h_y 为成像位置偏离像面中心的距离; β_λ 表示波长为 λ 时光线的衍射角; β_0 为光栅入射角; f 为系统焦距,即成像镜到像面的距离。从式(4)可以看出, β_λ 可以唯一确定 h_y ,由此可以求出波长与 Y 方向坐标的一一对应关系。

横向色散关系与上述研究原理相似,以成像球面镜为探究对象分析棱镜色散方向(Y)的光线移动情况,建立的模型如图 7 所示:

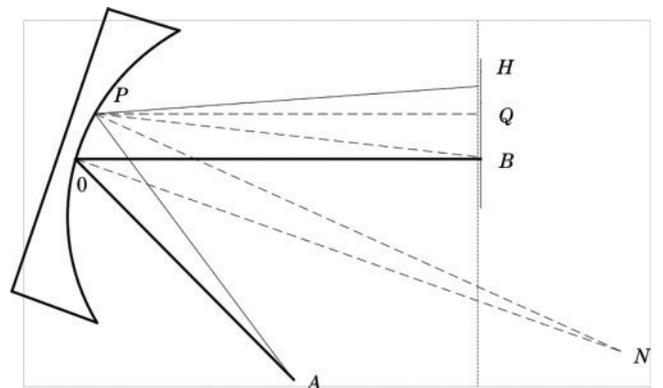


图 7 横向色散方向数学模型

Fig. 7 Mathematical model of transverse dispersion direction

在这个模型中, O 为球面反射镜中心, N 为球面反射镜球心, HB 为像面, $ON = PN = R$, $\angle AON = \angle BON = t$ 为已知的设计值, $\angle OAP = \theta - 2\omega$ 。在这里引入 3 点近似: AO 均为棱镜前表面中心至成像镜中心的几何距离 L ;认为 OP 分别为 $\triangle AOP$ 、 $\triangle NOP$ 、 $\triangle BOP$ 的一条直角边;认为 $PQ = OB = f$ 。

同主色散数学模型原理一样,可以推导出棱镜 X

色散方向公式为

$$h_x = L' \cdot \tan(\theta - 2\omega) + f \cdot \tan \left[\theta - 2\omega - 2 \arctan \left(\frac{L' \cdot \tan(\theta - 2\omega)}{f} \right) + 2t \right], \quad (5)$$

式中: h_x 为成像位置在 Y 方向到像面中心的距离; θ 为光线经过棱镜的偏转角; ω 为光栅偏置角。由此可以得到波长与 X 方向坐标的一一对应关系。

尹禄^[30]考虑到在两个方向上柱面镜对成像光线的偏折, 又对所得的结果进行修改, 得到了 h_y' 和 h_x' , 将两个结果除去像元尺寸再做相应的平移变换就可以得到 Y 和 X 坐标, 由这两个公式便可推导出波长和二维坐标的对应关系。

数学模型法比起偏差法精度显著提高, 算法计算的光斑成像位置与光线追迹结果高度吻合, 满足了高精度的要求, 但是其基于几何光学原理计算光束经过每一光学表面后的位置, 不仅过程复杂而且难以移植, 普适性较差。

3.3 标定法

通过数学模型法建立的模型与光线追迹结果也就是仿真值高度吻合, 但是, 实际情况下环境变化、振动、加工和装调误差都会导致仪器实际状态与设计值存在出入, 造成模型不匹配。为了解决这个问题, 国内外研究者考虑使用校准源来记录光线经过光谱仪色散后落在探测器上的位置, 通过实验建立波长和探测器上坐标对应关系的数据库。数据库方法考虑了外界环境和内部轻微移动因素的影响, 在谱图还原时, 可以根据探测器上光斑的坐标在数据库中找到相应的波长^[30]。

在建立数据库时, 测试光源的选择存在一定的局限, 而且数据库的建立过程比较繁琐, 当仪器状态或环境变化时需要重新建立数据库。为了简化操作过程, 国内外研究者考虑在原有建立的模型基础上采取一些措施进行校准, 来匹配因环境改变的实际模型, 查阅一些参考文献可知, 迭代方法可以用来改变输入参数并计算新的模型, 根据最小二乘原理^[81-83], 将这些模型的图像平面坐标与实际坐标进行比较。虽然该方法可以用于校准, 但这种方法还是很耗时。

中阶梯光栅光谱仪传统的使用过程都是先建立初始谱图还原模型, 然后利用汞灯直接进行标定, 达到修正初始模型的效果, 从而提升波长提取的精度。这种直接光谱标定的方法虽然流程简单, 但是存在较大弊端, 要么需要人工判断汞灯各特征光斑的波长, 要么需要自动识别算法依据初始模型自动判断光斑对应的特征波长数值, 前者费时费力, 后者极度依赖初始模型精度。因此, 直接光谱标定方法起初主要用于对环境、振动等外部因素引起的微弱扰动进行模型修正, 只要初始模型精度足够高而且外部扰动导致的偏差在一定范围内, 直接标定方法就能够起到较好的校正效果。后来, 标定法被直接应用于模型的构建过程, 将建模和标

定相结合, 既提高了模型精度又使标定过程常态化, 提升了仪器的实用性。

天津大学 Duan 等^[84]提出结合理论和实际的标定法, 在由数学模型推出标准模型的基础上, 使用最小二乘法将实际光谱图与理论模型相关联来校准光谱仪参数变化引起的误差, 最后为了补偿校准后的残余误差, 采用多项式拟合的方法进一步提高算法的精度。

首先利用光学方程获得波长校准模型, 建立波长和像素位置之间的关系。考虑到振动和温度等环境因素变化导致的光谱仪参数变化, 会导致光束路径出现偏差, 最终导致光斑移动, 由于每个光点的运动方向和长度相同, 实际光谱图可以被视为理论光谱图的平移和比例, 提取其中点坐标, 并通过平移和比例系数建立表达式。假设一波长 λ_i 的光点坐标在实际光谱图中为 (x_i, y_i) , 在理论光谱图中则为 (X_i, Y_i) , 以此设立的关系表达式为

$$x_i = aX_i + b, \quad (6)$$

$$y_i = cY_i + d, \quad (7)$$

式中: a, c 是比例系数; b, d 是平移系数。

选择汞灯来计算平移和比例系数, 因为其覆盖从紫外到可见的宽波长范围。理论坐标 (X_i, Y_i) 可根据初始建立的数学模型计算。考虑到光斑强度的不均匀性, 利用加权法来计算实际光谱图中斑点的质心 [实际坐标 (x_i, y_i)], 利用 LabVIEW 软件的 IMAQ 边缘检测模块计算光斑的边缘, 将边缘内像素的所有坐标和光强度值代入质心方程, 以获得质心坐标 (x, y) 。因为汞灯的光谱线已知, 可以根据几个特征波长计算出理论和实际坐标, 根据式 (6)、(7) 利用最小二乘原理, 计算出 a, b, c, d 的值。

在利用最小二乘法校准之后, 发现仍然存在残余误差, 于是 Duan 等^[84]又提出一种补偿算法。 λ 的残余误差 Δi 可以表示为

$$\Delta x_i = aX_i + b - x_i, \quad (8)$$

$$\Delta y_i = cY_i + d - y_i. \quad (9)$$

代入参数计算, 比较计算数据后发现 $\Delta x_i, \Delta y_i$ 和 λ_i 之间的关系可以近似为二次函数关系, 在二次函数中出现的系数 A, B, C, D, E 和 F 可再次使用上述用于计算校准系数的波长, 并在 LabVIEW 软件上使用多项式拟合方法计算。至此可以获得所有的校准和补偿系数, 所以在环境改变后的 λ_i 的实际坐标 (x_i, y_i) 可以表示为

$$x_i = aX_i + b - (A + B\lambda_i + C\lambda_i^2), \quad (10)$$

$$y_i = cY_i + d - (D + E\lambda_i + F\lambda_i^2). \quad (11)$$

华中科技大学 Shen 等^[85]也同样提出应对环境变化的标定法, 不同点在于前者是在数学建模后标定, 而后者是在建模过程中标定。后者的关键核心是对光谱图而不是光谱仪进行建模, 这使得算法更适合不同的

设计,其基本思路为:对光谱图建模,然后输入已知的参考数据(单色光束和相应的坐标),最后将模型动态调整到准确位置。

首先基于光栅方程和棱镜方程可知,每个像素的位置 X 映射一个特定的阶梯衍射角,映射关系如式(12)所示,然后对光栅方程进行级数展开,可以求出 x 和 λ 的对应关系,如式(13)所示。

$$\beta_\lambda = F(x), \quad (12)$$

$$m\lambda = P(x) = \sum_{i=0}^N p_i x^i, \quad (13)$$

式中: p_i 是这个多项式函数的常数。

同理,对于棱镜方向的色散, y 和 λ 的对应关系为

$$\lambda = Q(y) = \sum_{i=0}^M q_i y^i, \quad (14)$$

式中: q_i 为常数。

由上述两个公式便建立了每个像素位置 (x, y) 和波长 λ 的关系。波长和坐标之间的关系可以由一系列常数给出,计算每个像素的波长就等价于计算 $P = \{p_0, \dots, p_N\}$ 和 $Q = \{q_0, \dots, q_M\}$ 的正确值。

在给定上面描述的中阶梯光栅模型后,两种单色光(λ 和 λ_0)的光谱图如图 8 所示:

相同的波长,级次不一样,色散仅由中阶梯光栅引起,基于图 8 可以求出的两个相邻光点 x 和 λ 之间的关系式;相同衍射角的两个不同波长的光斑,色散由棱镜引起,同理可以求出两个相邻光点的 y 和 λ 的关系式。根据 x 和 λ 之间的关系式和 y 和 λ 的关系式,取几个已知光点的坐标和它们的波长,通过计算可得出 P 和 Q 的指定值。

为了进一步提高精度,补偿简化模型和实际模型之间的差异,引入 $U(x, y)$ 和 $V(x, y)$, $U = \{u_{0,0}, \dots, u_{J,J}\}$, $V = \{q_{0,0}, \dots, q_{J,J}\}$, 以两个常量集作为 x 和 y 的耦合补偿部分。最终有

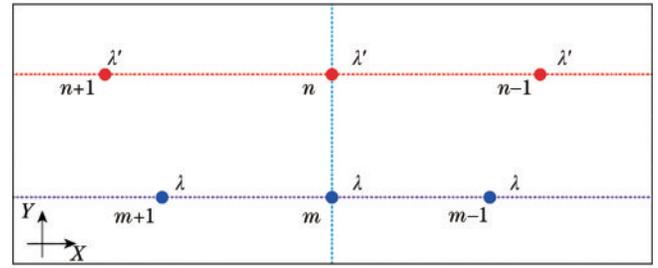


图 8 两种单色光的光谱图^[85](水平方向代表不同波长级次,垂直方向代表不同波长)

Fig. 8 Spectral diagram of two monochromatic light^[85](horizontal direction represents different wavelength levels, vertical direction represents different wavelengths)

$$m\lambda = P(x) + U(x, y) = \sum_{i=0}^N p_i x^i + \sum_{i=0}^J \sum_{j=0}^J u_{ij} x^i y^j, \quad (15)$$

$$\lambda = Q(x) + V(x, y) = \sum_{i=0}^M q_i y^i + \sum_{i=0}^J \sum_{j=0}^J v_{ij} x^i y^j. \quad (16)$$

使用迭代计算方法求出 P 、 Q 、 U 和 V 的值,通过不断重复迭代过程,最终估计出具有高精度的谱图模型。

修改后的标定算法不依赖于特定的组件参数,这使得该算法更适合不同的光学设计,并且更易于执行,而且,因为引入动态调整程序,光谱的稳定性和绝对线强度得到了提高。

以上两种不同方式的标定法,都克服了环境改变或者光谱仪内部器件的微小移动导致的光谱仪参数微小变化问题,标定法的模型精度高,建模速度略低于模型化中的偏差法,整体兼具高的精度和速度,该算法可以更好与硬件结合投入应用当中,是目前性能最优的谱图还原算法之一。

谱图还原算法建立的目的是提高建模精度和速度,进而提高整个中阶梯光栅光谱仪的工作效率,上述 3 类算法在建模精度和速度方面各有自己的优势,整体的建模精度和速度对比如表 1 所示。

表 1 算法建模精度和速度的对比

Table 1 Comparison of accuracy and speed of algorithm modeling

Algorithm	Light tracing	Deviation method	Mathematical modeling method	Calibration method
Precision	Moderate	Low	Moderate	High
Speed	Low	High	Moderate	Moderate

4 总结和展望

4.1 总结

中阶梯光栅光谱仪凭借高分辨率、宽波段检测范围、小型化等优势,成为高分辨率光谱仪领域的重要发展方向。为提高中阶梯光栅光谱仪性能,谱图信息处理中的谱图还原算法的优化和改进成为研究重点,谱图还原算法的核心就是求出波长和谱图上坐标的一一对应关系,即把面阵探测器获取的二维图像信息转化

为纵横坐标分别为波长和光强的一维光谱信息。

在谱图还原算法的研究过程中,起初人们多采用光线追迹方法,该方法虽然精度高但是需要追迹大量的光线,时间花费很多,效率不高,后来通过插值法、遗传算法、多项式拟合等手段不断减少光线追迹的数量,经过优化后的光线追迹方法提高了工作速度,但是当要求中阶梯光栅光谱仪具有更宽的波段范围与更高的分辨率时,要对系统结构参数与谱图特征进行更为全面的计算,往往需要反复调整才能确定系统参数。光

线追迹在整体上速度太慢,适应性不强,而且装调仪器的误差、像差和环境变化带来的影响都无法简单用计算机模拟。后来模型化方法被提出,在几何光学的基础上建立数学模型,以中阶梯光栅光谱仪的光学设计参数作为输入,输出波长和坐标的对应关系模型。模型化方法体现了偏差法到数学模型法的转变:最初偏差法采用近似原则,其建模速度很快,但是模型精度较低;数学模型法在基于偏差法的基础上不再将色散角相对于基准角的偏差等效为聚焦角而是根据几何光学计算实际的成像角度,数学模型法经过了许多科研工作者的优化和改进,相比偏差法精度显著提高,但是其以几何光学原理为基础,建立光束通过每个光学元件后相对于光轴位置的位置变化,从算法设计到软件程序实现,流程复杂,特别是对于内部组件较多的光学结构,应用难度较大且建模速度较慢。模型化方法相比于光线追迹创造性地提出了建模查表的方法来简化光线追迹的工作量,但是当模型构建完成后,环境改变和仪器内部器件微小移动都会引起误差,数学模型难以快速对实际误差作出响应。为了克服环境改变这一大问题,标定法被提出。文中介绍了两种标定算法,一种为建模后标定,另一种为在建模过程中标定,这两种方法都克服了环境改变或者光谱仪内部器件的微小移动导致的光谱仪参数微小变化问题。标定法节省了调整模型或者重新建模的时间,提高了建模速度,而且模型精度比模型化方法和光线追迹法也略有提高,其更有利于中阶梯光栅光谱仪类的仪器投入应用中。

纵观谱图还原算法的优化和改进历程,从光线追迹到模型化,再到标定法,都是在不断追求模型精度或保持模型精度提高建模速度,并在此基础上又兼顾环境变化的影响。从最初的修改初始模型匹配理论模型到改进实际模型匹配理论模型,也是一个不断优化和改进模型算法的过程。过去的一些算法往往在追求精度的基础上不断提高速度,由精度再到速度,这个过程可能会出现确保算法精度提高后,无法或者很难提高建模速度的情况。未来算法改进不妨从速度到精度入手,可以在算法建模过程中,先快速建立一个初始模型,允许可控范围内误差的存在,主要追求建模速度,然后在初始模型基础上提高模型精度,将之前的偏差逐渐缩小到接受范围内或者完全消除,至此可以得到一个兼具速度和精度的模型。模型精度的优化可以考虑与标定技术相结合,将标定融入建模过程中,将标定常态化,每次开机运行前快速标定。

4.2 展望

中阶梯光栅光谱仪代表了先进光谱仪的发展方向,相同体积的光谱仪器横向比较,中阶梯光栅光谱仪具有最高的光谱分辨率,因此攻克其光机结构设计、谱图还原算法、成本优化等难点痛点后必将开拓出更加广阔的应用前景。

中阶梯光栅光谱仪不同的光路结构可能会有不同

的性能特点,例如棱镜透射式结构相比于棱镜反射式结构拥有更小的体积,但谱图信息处理复杂,小型化作为中阶梯光栅光谱仪的发展趋势之一,通过紧凑的光路结构设计配合相应的谱图还原算法可以进一步缩小同性能下仪器的体积。

在谱图信息处理方面,近年来模型精度和建模速度不断提高,但精度和速度的综合性能还存在较大的提高空间,尤其是具有更高普适性的算法亟待开发。中阶梯光栅光谱仪不同波长点扩散函数、弥散斑形状与质心也会对上述算法精度产生影响,其影响主要在汞灯强度图中,在确定强度和坐标位置时,形成的是弥散斑,其形状大小不同,需要对质心进行有效提取。虽然现在已有一些质心提取算法,但准确度方面还有待提高,这也是算法精度提高的一个重要方面。中阶梯光栅光谱仪具有多种光路结构,而且像面前的像差校正透镜千差万别,普适性的算法显得尤为重要。如前面所述,可以考虑将模型构建与模型标定相结合。在建立初始模型时,算法模型和理论模型匹配后,环境的改变或者移动过程中光谱仪内部器件姿态的微小变化都会使成像结果偏离理论模型,因此中阶梯光栅光谱仪的实时标定很重要,虽然现在已有应对环境改变的标定算法,但其中还有很多值得研究的内容。关于兼具精度、速度并具有实时校正环境误差功能的谱图还原算法将是中阶梯光栅光谱仪图像处理技术的重要研究方向。

参 考 文 献

- [1] 李全臣, 蒋月娟. 光谱仪器原理[M]. 北京: 机械工业出版社, 1989: 3-15.
Li Q C, Jiang Y J. Principle of spectroscopic instruments [M]. Beijing: Machinery Industry Press, 1989: 3-15.
- [2] 鞠挥, 吴一辉. 微型光谱仪的发展现状[J]. 光学精密工程, 2001, 9(4): 372-376.
Ju H, Wu Y H. The state of the art of micro spectrometers[J]. Optics and Precision Engineering, 2001, 9(4): 372-376.
- [3] 赵力强. 基于干涉散斑图的多模光纤光谱仪[D]. 成都: 电子科技大学, 2018.
Zhao L Q. Multimode fiber spectrometer based on interference speckle pattern[D]. Chengdu: University of Electronic Science and Technology of China, 2018.
- [4] 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): 0912003.
Zhu S Y, Wu P H, Lu Z Z, et al. Fourier transform spectrometer based on spectral reconstruction theory[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2023, 60(9): 0912003.
- [5] Korablev O, Montmessin F, Trokhimovsky A, et al. Compact echelle spectrometer for occultation sounding of the Martian atmosphere: design and performance[J]. Applied Optics, 2013, 52(5): 1054-1065.
- [6] 夏成樑. 便携式消像散 Czerny-Turner 光谱仪的光学设计

- [D]. 苏州: 苏州大学, 2022.
- Xia C L. Optical design of portable astigmatic Czerny-Turner spectrometer[D]. Suzhou: Soochow University, 2022.
- [7] 董怡青, 杨清华, 余梅, 等. 基于便携式近红外光谱仪的陈皮真伪无损鉴别[J]. 中国果菜, 2022, 42(9): 33-39.
- Dong Y Q, Yang Q H, Yu M, et al. Nondestructive identification of Chenpi based on portable near infrared spectrometer[J]. China Fruit & Vegetable, 2022, 42(9): 33-39.
- [8] 刘明博, 王英倩, 倪子月, 等. 国产顺序扫描式波长色散 X 射线荧光光谱仪在铁基合金分析中的应用[J]. 冶金分析, 2023, 43(1): 1-7.
- Liu M B, Wang Y Q, Ni Z Y, et al. Application of domestic sequential scanning wavelength dispersive X-ray fluorescence spectrometer in iron-based alloy analysis[J]. Metallurgical Analysis, 2023, 43(1): 1-7.
- [9] Kane R, Beasley M, Green J, et al. The opto-mechanical design of the Colorado high-resolution echelle stellar spectrograph (CHESS)[J]. Proceedings of SPIE, 2011, 8145: 81450P.
- [10] 刘晓林, 刘勋, 李维, 等. 天基光丝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.
- [11] 刘云启, 姜晨, 刘祖耀, 等. 长周期光纤光栅[J]. 激光与光电子学进展, 2023, 60(9): 0900001.
- Liu Y Q, Jiang C, Liu Z Y, et al. Long-period fiber gratings[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2023, 60(9): 0900001.
- [12] Gutiérrez H O A, Farah A S, Echevarria R J M, et al. Design and integration of a mechanism for focusing and alignment of the Echelle spectrograph for the telescope of 2.1 meters of the National Astronomic Observatory[J]. Proceedings of SPIE, 2014, 9147: 91474Y.
- [13] Hoadley K, France K, Nell N, et al. The assembly, calibration, and preliminary results from the Colorado high-resolution Echelle stellar spectrograph (CHESS)[J]. Proceedings of SPIE, 2014, 9144: 914406.
- [14] Kane R, Beasley M, Green J, et al. The opto-mechanical design of the Colorado high-resolution echelle stellar spectrograph (CHESS)[J]. Proceedings of SPIE, 2011, 8145: 81450P.
- [15] Tala M, Berdja A, Jones M, et al. FIDEOS: a high resolution echelle spectrograph for the ESO 1 m telescope at La Silla[J]. Proceedings of SPIE, 2014, 9147: 914789.
- [16] Sakanoi T, Kasaba Y, Kagitani M, et al. Development of infrared Echelle spectrograph and mid-infrared heterodyne spectrometer on a small telescope at Haleakala, Hawaii for planetary observation[J]. Proceedings of SPIE, 2014, 9147: 91478D.
- [17] 朱永田. 8~10 m 级光学/红外望远镜的高分辨率光谱仪[J]. 天文学进展, 2001, 19(3): 336-345.
- Zhu Y T. High resolution spectrographs for 8-10 m class optical/IR telescopes[J]. Progress in Astronomy, 2001, 19(3): 336-345.
- [18] Korabiev O, Montmessin F, Trokhimovsky A, et al. Compact echelle spectrometer for occultation sounding of the Martian atmosphere: design and performance[J]. Applied Optics, 2013, 52(5): 1054-1065.
- [19] Tousey R, Purcell J D, Garrett D L. An echelle spectrograph for middle ultraviolet solar spectroscopy from rockets[J]. Applied Optics, 1967, 6(3): 365-372.
- [20] Guo H L, Xiao G Z, Mrad N, et al. Echelle diffractive grating based wavelength interrogator for potential aerospace applications[J]. Journal of Lightwave Technology, 2013, 31(13): 2099-2105.
- [21] Lee Y, Oh S W, Han S H. Laser-induced breakdown spectroscopy (LIBS) of heavy metal ions at the sub-parts per million level in water[J]. Applied Spectroscopy, 2012, 66(12): 1385-1396.
- [22] Ismaël A, Bousquet B, Michel-Le Pierrès K, et al. *In situ* semi-quantitative analysis of polluted soils by laser-induced breakdown spectroscopy (LIBS) [J]. Applied Spectroscopy, 2011, 65(5): 467-473.
- [23] Panne U, Neuhauser R E, Haisch C, et al. Remote analysis of a mineral melt by laser-induced plasma spectroscopy[J]. Applied Spectroscopy, 2002, 56(3): 375-380.
- [24] Yun J I, Klenze R, Kim J I. Laser-induced breakdown spectroscopy for the on-line multielement analysis of highly radioactive glass melt. part I: characterization and evaluation of the method[J]. Applied Spectroscopy, 2002, 56(4): 437-448.
- [25] Fichet P, Menut D, Brennetot R, et al. Analysis by laser-induced breakdown spectroscopy of complex solids, liquids, and powders with an echelle spectrometer[J]. Applied Optics, 2003, 42(30): 6029-6035.
- [26] Karanassios V, Horlick G. Spectral characteristics of a new spectrometer design for atomic emission spectroscopy [J]. Applied Spectroscopy, 1986, 40(6): 813-821.
- [27] Sabsabi M, Detalle V, Harith M A, et al. Comparative study of two new commercial echelle spectrometers equipped with intensified CCD for analysis of laser-induced breakdown spectroscopy[J]. Applied Optics, 2003, 42(30): 6094-6098.
- [28] 李帆, 范健. ICP-AES 分析中干扰及其校正方法的进展 (I)[J]. 光谱学与光谱分析, 1998, 18(3): 325-328.
- Li F, Fan J. Recent development of studies on the interferences and their correction methods in ICP-AES(I) [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 1998, 18(3): 325-328.
- [29] 黄林玉, 邵宏翔. 新一代光谱仪器: Leeman ICP/Echelle [J]. 光谱学与光谱分析, 1991, 11(1): 70-80.
- Huang L Y, Shao H X. A new ICP spectrometer technique: ICP/echelle[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 1991, 11(1): 70-80.
- [30] 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 and Precision Mechanics and Physics, Chinese Academy of Sciences, 2017.
- [31] Sun Y C, Huang C, Xia G, et al. Accurate wavelength calibration method for compact CCD spectrometer[J]. *Journal of the Optical Society of America A*, 2017, 34(4): 498-505.
- [32] Ballester P, Rosa M R. Modeling echelle spectrographs[J]. *Astronomy and Astrophysics Supplement Series*, 1997, 126(3): 563-571.
- [33] 唐玉国, 宋楠, 巴音贺希格, 等. 中阶梯光栅光谱仪的光学设计[J]. *光学精密工程*, 2010, 18(9): 1989-1995.
Tang Y G, Song N, Bayanheshig, et al. Optical design of cross-dispersed echelle spectrograph[J]. *Optics and Precision Engineering*, 2010, 18(9): 1989-1995.
- [34] 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.
- [35] Moore F L, Furst B. Echelle calibration and wavelength calculation[J]. *Journal of the Optical Society of America*, 1972, 62(6): 762-766.
- [36] 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.
- [37] 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.
- [38] 杨飞, 曲宏松, 金光, 等. 基于光线追迹逐点匹配的航天时间延迟积分 CCD 相机机动成像快速几何校正算法[J]. *光学学报*, 2015, 35(5): 0511002.
Yang F, Qu H S, Jin G, et al. Fast geometric correction of space time delayed and integration CCD camera dynamic imaging based on ray tracing point matching[J]. *Acta Optica Sinica*, 2015, 35(5): 0511002.
- [39] 翁志成, 陈志勇. 光学设计软件发展的回顾与展望[J]. *光学机械*, 1992(4): 1-6.
Weng Z C, Chen Z Y. Review and prospect on optical design software[J]. *Optics and Precision Engineering*, 1992(4): 1-6.
- [40] Finkelstein N A. The measurement of wavelength in echelle spectra[J]. *Journal of the Optical Society of America*, 1953, 43(2): 90-96.
- [41] McNeill J J. Wavelength measurement in echelle spectra[J]. *Journal of the Optical Society of America*, 1959, 49(5): 441-445.
- [42] 秦瀚钦. LAMOST 二维数据处理方法研究[D]. 合肥: 中国科学技术大学, 2010.
Qin H Q. Research on LAMOST 2D data processing method[D]. Hefei: University of Science and Technology of China, 2010.
- [43] 薛续磊. LAMOST 波长定标和在线数据处理系统的研究[D]. 合肥: 中国科学技术大学, 2009.
Xue X L. Research on LAMOST wavelength calibration and online data processing system[D]. Hefei: University of Science and Technology of China, 2009.
- [44] 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.
- [45] 孙慈, 杨晋, 朱继伟, 等. 超宽波段高分辨率中阶梯光栅光谱仪的光学设计[J]. *光学精密工程*, 2021, 29(1): 45-53.
Sun C, Yang J, Zhu J W, et al. Optical design of echelle spectrometer with ultra-wide wavelength range and high resolution[J]. *Optics and Precision Engineering*, 2021, 29(1): 45-53.
- [46] 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.
- [47] 宁春丽, 齐向东, 陈少杰, 等. 轻小型中阶梯光栅光谱仪光学设计及性能分析[J]. *光谱学与光谱分析*, 2012, 32(12): 3406-3410.
Ning C L, Qi X D, Chen S J, et al. Optical design and performance analysis of light and small echelle spectrograph[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2012, 32(12): 3406-3410.
- [48] 何淼, 唐玉国, 陈少杰, 等. 中阶梯光栅光谱仪信号光斑位置的质心提取算法[J]. *光谱学与光谱分析*, 2012, 32(3): 849-853.
He M, Tang Y G, Chen S J, et al. Position acquiring of signal spots in the echelle spectrograph[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2012, 32(3): 849-853.
- [49] 陈少杰, 崔继承, 刘玉娟, 等. 高分辨率中阶梯光栅光谱仪精确装调与标定[J]. *光谱学与光谱分析*, 2012, 32(8): 2280-2285.
Chen S J, Cui J C, Liu Y J, et al. A method of precise adjustment and calibration for high-resolution echelle spectrograph[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2012, 32(8): 2280-2285.
- [50] 刘玉娟, 崔继承, 巴音贺希格, 等. 凸面光栅成像光谱仪的研制与应用[J]. *光学精密工程*, 2012, 20(1): 52-57.
Liu Y J, Cui J C, Bayanheshig, et al. Design and application of imaging spectrometer with convex grating[J]. *Optics and Precision Engineering*, 2012, 20(1): 52-57.
- [51] 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.
- [52] 陈少杰, 齐向东, 巴音贺希格, 等. 用于激光诱导等离子体光谱分析的便携式中阶梯光栅光谱仪设计[J]. *发光学报*, 2013, 34(5): 672-677.

- Chen S J, Qi X D, Bayanheshig, et al. A portable echelle spectrograph design for laser-induced breakdown spectroscopy[J]. Chinese Journal of Luminescence, 2013, 34(5): 672-677.
- [53] Liu Y J, Tang Y G, Chen S J, et al. A nanometer scale alignment method of concentric spherical mirrors based on interferometry[C]//The 4th IEEE International NanoElectronics Conference, June 21-24, 2011, Taoyuan, Taiwan, China. New York: IEEE Press, 2011.
- [54] 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.
- [55] 潘明忠, 刘玉娟, 陈少杰, 等. 中阶梯光栅光谱仪 CCD 相机的设计[J]. 光学精密工程, 2012, 20(8): 1725-1731.
Pan M Z, Liu Y J, Chen S J, et al. Design of echelle spectrograph CCD camera[J]. Optics and Precision Engineering, 2012, 20(8): 1725-1731.
- [56] 尹禄, 巴音贺希格, 崔继承, 等. 基于谱图还原的中阶梯光栅光谱仪有效波长提取算法[J]. 光谱学与光谱分析, 2015, 35(3): 850-855.
Yin L, Bayanheshig, Cui J C, et al. An effective wavelength detection method based on echelle spectra reduction[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2015, 35(3): 850-855.
- [57] Yin L, Bayanheshig, Yang J, et al. High-accuracy spectral reduction algorithm for the échelle spectrometer[J]. Applied Optics, 2016, 55(13): 3574-3581.
- [58] 尹禄, 卢禹先, 巴音贺希格, 等. 中阶梯光栅光谱仪的多谱线联合在线定标方法[J]. 光学学报, 2016, 36(9): 0930001.
Yin L, Lu Y X, Bayanheshig, et al. Online spectral calibration by multiple wavelengths for echelle spectrometer[J]. Acta Optica Sinica, 2016, 36(9): 0930001.
- [59] 尹禄, 巴音贺希格, 姚雪峰, 等. 中阶梯光栅光谱仪谱图背景去除算法[J]. 光谱学与光谱分析, 2016, 36(6): 1925-1929.
Yin L, Bayanheshig, Yao X F, et al. Algorithm for background removal in spectral image of echelle spectrometer[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2016, 36(6): 1925-1929.
- [60] 杨晋, 尹禄, 姚雪峰, 等. 新型便携式中阶梯光栅光谱仪光学设计与消杂散光研究[J]. 光学学报, 2015, 35(8): 0812001.
Yang J, Yin L, Yao X F, et al. Optical design and stray light suppression of a new portable echelle spectrometer[J]. Acta Optica Sinica, 2015, 35(8): 0812001.
- [61] Yang J, Zhang R, Yin L, et al. Study on a wideband, variable aperture, high resolution scatterometer for planar diffraction grating stray light measurement[J]. Applied Optics, 2017, 56(2): 247-255.
- [62] 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.
- [63] 张锐, 巴音贺希格, 杨晋, 等. C-T 型棱镜透射式中阶梯光栅光谱仪谱图还原模型[J]. 光学学报, 2016, 36(7): 0723001.
Zhang R, Bayanheshig, Yang J, et al. Reduction model of the transmission prism echelle spectrometer with the C-T structure[J]. Acta Optica Sinica, 2016, 36(7): 0723001.
- [64] Lu Y X, Qi X D, Li X T, et al. Removal of all mosaic grating errors in a single-interferometer system by a phase-difference reference window[J]. Applied Optics, 2016, 55(28): 7997-8002.
- [65] 姚雪峰, 崔继承, 尹禄, 等. 中阶梯光栅光谱仪波段范围校正装置[J]. 光学精密工程, 2017, 25(2): 304-311.
Yao X F, Cui J C, Yin L, et al. Calibration devices for band range of echelle spectrometer[J]. Optics and Precision Engineering, 2017, 25(2): 304-311.
- [66] Zhang R, Bayanheshig, Li X T, et al. Establishment and correction of an Echelle cross-prism spectrogram reduction model[J]. Optics Communications, 2017, 403: 401-407.
- [67] 张锐, 潘明忠, 杨晋, 等. 基于数字微镜器件的中阶梯光栅光谱仪的光学系统设计[J]. 光学精密工程, 2017, 25(12): 2994-3000.
Zhang R, Pan M Z, Yang J, et al. Optical system of echelle spectrometer based on DMD[J]. Optics and Precision Engineering, 2017, 25(12): 2994-3000.
- [68] 张锐, 朱继伟, 刘建利, 等. 基于中阶梯光栅光谱仪的激光诱导等离子体分析系统研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2018, 38(5): 1605-1609.
Zhang R, Zhu J W, Liu J L, et al. Study on the laser-induced plasma spectroscopy based on the echelle spectrometer[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2018, 38(5): 1605-1609.
- [69] 崔继承, 张锐, 杨晋, 等. 中阶梯光栅光谱仪自动化波长提取算法[J]. 光学精密工程, 2016, 24(6): 1242-1247.
Cui J C, Zhang R, Yang J, et al. Wavelength calibration algorithm for echelle spectrograph[J]. Optics and Precision Engineering, 2016, 24(6): 1242-1247.
- [70] 段潮舒, 蔡文生, 邵学广. 多元光学计算与下一代光谱仪[J]. 分析化学, 2021, 49(4): 593-601.
Duan C S, Cai W S, Shao X G. Multivariate optical computing and next-generation spectrometer[J]. Chinese Journal of Analytical Chemistry, 2021, 49(4): 593-601.
- [71] 张锐. 中阶梯光栅光谱仪关键技术研究及其应用[D]. 长春: 中国科学院长春光学精密机械与物理研究所, 2018.
Zhang R. Research and application of key technologies of stepped grating spectrometer[D]. Changchun: Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics, Chinese Academy of Sciences, 2018.
- [72] 李洋, 段发阶, 傅骁, 等. 小型高分辨率中阶梯光栅光谱仪光学设计[J]. 传感技术学报, 2017, 30(8): 1139-1144.
Li Y, Duan F J, Fu X, et al. Optical design of small high resolution echelle spectrograph[J]. Chinese Journal of Sensors and Actuators, 2017, 30(8): 1139-1144.
- [73] Fu X A, Duan F J, Jiang J J, et al. Astigmatism-corrected echelle spectrometer using an off-the-shelf

- cylindrical lens[J]. *Applied Optics*, 2017, 56(28): 7861-7868.
- [74] Duan F J, Qin Y Q, Fu X A, et al. Simple spectral reduction algorithm used for the echelle spectrometer[J]. *Applied Optics*, 2018, 57(30): 8921-8927.
- [75] Fu X, Duan F J, Li Y. Design and implementation of a compact echelle spectrometer[EB/OL]. [2023-03-02]. <https://www.dpi-journals.com/index.php/dtetr/article/view/18370>.
- [76] 傅晓. 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. Research on realization technology and data processing algorithm of step grating spectrometer in LIBS [D]. Tianjin: Tianjin University, 2018.
- [77] 赵健. 小型中阶梯光栅光谱仪交叉色散光学系统设计[D]. 天津: 天津大学, 2017.
Zhao J. Design of cross-dispersion optical system for small stepped grating spectrometer[D]. Tianjin: Tianjin University, 2017.
- [78] 李洋. LIBS 小型中阶梯光谱仪光学设计及像质评价[D]. 天津: 天津大学, 2016.
Li Y. Optical design and image quality evaluation of LIBS small step spectrometer[D]. Tianjin: Tianjin University, 2016.
- [79] 姜闻宇. 基于 DMD 的中阶梯光栅光谱仪光谱信号处理方法及软件[D]. 长春: 吉林大学, 2022.
Jiang W Y. Spectral signal processing method and software of stepped grating spectrometer based on DMD [D]. Changchun: Jilin University, 2022.
- [80] 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.
- [81] Chen R P, Dai C Q. Vortex solitons of the (3+1)-dimensional spatially modulated cubic-quintic nonlinear Schrödinger equation with the transverse modulation[J]. *Nonlinear Dynamics*, 2017, 90(3): 1563-1570.
- [82] Zhang R, Bayanheshig, Li X T, et al. Establishment and correction of an Echelle cross-prism spectrogram reduction model[J]. *Optics Communications*, 2017, 403: 401-407.
- [83] Chen R P, Chen Z Z, Gao Y, et al. Flexible manipulation of the polarization conversions in a structured vector field in free space[J]. *Laser & Photonics Reviews*, 2017, 11(6): 1700165.
- [84] Duan F J, Qin Y Q, Fu X A, et al. Simple spectral reduction algorithm used for the echelle spectrometer[J]. *Applied Optics*, 2018, 57(30): 8921-8927.
- [85] 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.