

# 短波红外平场光谱仪的波长定标

李 新 张国伟 寻丽娜 谢 萍 洪 津 郑小兵

(中国科学院安徽光学精密机械研究所, 安徽 合肥 230031)

**摘要** 针对自行研制的短波红外平场光谱仪, 讨论了波长定标的原理和方法。短波红外平场光谱仪由两个分光探测单元组成, 探测单元以平场凹面光栅分光, 处于焦平面上的线阵列探测器探测, 波长定标分为两个波段进行。为了实现准确的波长定标, 针对短波红外平场光谱仪的特点设计了波长定标步骤。双单色仪可以输出光谱仪波长范围内任意波长单色光, 选用双单色仪作为光谱定标光源, 双单色仪的输出单色光光谱分辨力为 1.5 nm, 经过光谱仪的分光会聚后成像在线阵列探测器像元上, 采用重心法计算出给定波长对应的像元精确位置, 通过多项式拟合得出两个探测单元的波长定标系数。定标结果表明, 在 900~2400 nm 波长范围内, 定标曲线拟合误差小于 0.5 nm, 波长定标不确定度优于 0.6 nm。

**关键词** 光谱仪; 波长定标; 重心法; 单色仪; 线阵列探测器; 短波红外

**中图分类号** O438 **文献标识码** A

## Wavelength Calibration of Shortwave Infrared Flat Spectroradiometer

Li Xin Zhang Guowei Xun Lina Xie Ping Hong Jin Zheng Xiaobing

(Anhui Institute of Optics and Fine Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Hefei, Anhui 230031, China)

**Abstract** The wavelength calibration methods were investigated for shortwave infrared (SWIR) flat spectroradiometer. The shortwave infrared spectroradiometer includes two measurement units. The unit based on a concave holograph grating, has a flat focal plane along which a photodiode array (PDA) is placed. The wavelength calibration is performed in each respective band. In order to calibrate more accurately, calibration process is designed in accordance with the spectroradiometer characters. For wavelength calibration, the light source of fine spectral line becomes important. We select monochromator as light source which outputs light with spectral resolution of 1.5 nm in shortwave range. In this way, we preliminarily decide which pixel a spectral line is located at. Next, the position of the peak wavelength is determined by the center of gravity method. Then, the coefficients of polynomial curve are decided through data fitting. The calibration results show that in the range of 900~2400 nm the fitting error is less than 0.5 nm and calibration uncertainty better than 0.6 nm.

**Key words** spectroradiometer; wavelength calibration; the center of gravity method; monochromator; photodiode array (PDA); shortwave infrared (SWIR)

## 1 引 言

短波红外 (SWIR) 是遥感应用的一个重要波段<sup>[1,2]</sup>, 通过对地物目标的短波红外光谱测量实现遥感目的。采用平场凹面光栅分光、线阵列探测器探测研制完成了短波红外平场光谱仪。线阵列探测器可以在空间同时探测一定波长范围的色散光<sup>[3~5]</sup>。当

探测器处于平场光谱仪的焦平面位置时, 线阵列探测器同时采集数据<sup>[6,7]</sup>。相对于单元探测器扫描方式光谱仪, 可以更好地节省时间、简化结构并提高可靠性。光谱仪分两个波段采用了两个线阵列焦平面探测器探测。短波红外 1 波段采用 256 个像元 InGaAs 探测器, 像元宽 50  $\mu\text{m}$ 。短波红外 2 波段采用 256 个像元

收稿日期: 2007-10-29; 收到修改稿日期: 2007-11-13

作者简介: 李 新(1975—), 男, 安徽人, 博士研究生, 主要从事精密仪器设计及遥感辐射定标等方面的研究。

E-mail: xli@aiofm.ac.cn

导师简介: 郑小兵(1969—), 男, 新疆人, 研究员, 博士生导师, 主要从事光学精确测量的先进方法与仪器、卫星光学传感器的高精度定标、光学遥感和海洋光学等方面的研究。E-mail: xbzhang@aiofm.ac.cn

扩展 InGaAs 探测器,像元宽  $50\ \mu\text{m}$ 。光谱仪的工作波段范围  $900\sim 2400\ \text{nm}$ ,光谱分辨力(Full width at half maximum)优于  $12\ \text{nm}$ 。

波长定标是仪器的辐射定标<sup>[8]</sup>、确定仪器光谱范围、检测光谱分辨力等性能指标的前提,通过波长定标将探测器像元的输出信号转化为波长信号。本文结合自行研制的短波红外平场光谱仪,讨论了波长定标的原理、方法,对光谱仪进行了波长定标,得出仪器的波长定标方程,并分析了定标结果。

## 2 波长定标原理和方法

### 2.1 波长定标原理

自行研制的短波红外光谱仪以平场凹面光栅为分光会聚器件,将入射光分光会聚在一个平面上,线阵列探测器的光敏面和这一平面重合,构成了平场光谱仪。入射光经过分光以后不同的波长会聚位置不同,对平场光谱仪进行波长定标就是要确定探测器像元和波长之间的对应关系。

由于探测器像元有一定的宽度,波长定标实际上是确定出每个像元的中心位置对应的波长,把这一波长看作是探测器像元输出的中心波长,探测器像元宽度对应的光谱宽度称为光谱取样间隔。由于光谱色散是连续的,而探测器像元和入射狭缝都有一定的宽度,同时还有像差的存在,因此,即使采用无穷多的谱线直接确定出每个像元和光谱的对应关系也是很困难的。对平场光谱仪的波长定标是通过有限数量的谱线与像元的位置对应关系标定出全部像元的波长对应关系。

定标光源、谱线中心位置计算、定标曲线拟合是影响波长定标精度的主要因素。波长定标首先需要精确确定定标谱线对应的像元位置,利用它们的对应关系进行拟合,得出仪器的波长定标方程,使得像元和波长之间的关系用数学关系式表达,这就需要定标谱线(本文中包括单色光)波长尽可能多且覆盖仪器探测波长范围,同时减小定标曲线拟合带来的误差,保证波长定标满足一定的精度。

### 2.2 谱线中心位置计算

定标光源的谱线经过光学系统后,其狭缝的像会聚在探测器像元上。由于光栅的色散作用,不同谱线的狭缝像位置不同。准确的波长定标需要精确的确定谱线中心对应的像元位置。探测器输出信号以像元为单位,当单色光成像覆盖不超过一个像元时,中心波长位置精度由像元宽度决定,当覆盖多个像元时可以采用算法较高精度地确定波长中心位置<sup>[9]</sup>。谱

线中心位置算法包括峰值法、曲线拟合法、重心法等,定标应用需要根据光谱仪本身的特点选用。

峰值法以线阵列探测器的最大输出像元位置(像元序号)为谱线中心位置,这种方法比较简单直观,但以整数像元为单位会带来半个像元宽度的不确定度。

在知道光谱仪的线扩展函数的前提下,采用曲线拟合探测器像元的输出可以较高精度地确定谱线中心位置<sup>[10]</sup>。线扩展函数(探测器的输出)是光谱仪的狭缝函数与像元响应的卷积。狭缝函数由光学系统决定,像元响应通常认为是矩函数。可以根据上述函数的类型确定线扩展函数曲线类型,用此类型曲线拟合探测器输出,则曲线的中心即为谱线中心位置,拟合结果的精度取决于采用的曲线类型与实际曲线的接近程度。这种算法要求谱线的狭缝像既要覆盖多个像元(一般不少于 5 个数值点)以减小像元不均匀性带来的影响,又要保证仪器的带宽不致太宽,以免线扩展函数曲线外形的确定更困难。由于此算法约束条件较多,并且线扩展函数的确定与光栅类型、狭缝大小、探测器响应的均匀性都有关系,需要做较多的假设,定标结果的不确定因素增多,本次波长定标未采用。

重心法的应用范围广泛,受覆盖像元的限制更小,即使覆盖很少的像元也可以应用,并且具有很高的精度。待定标的仪器光谱分辨力为 3 至 4 个像元,适合采用重心法计算,计算过程简单并可减小对仪器理想性假设带来的不确定度。

重心法的计算公式<sup>[11]</sup>为

$$C_{\text{gravity}} = \sum iS_i / (\sum S_i), \quad (1)$$

式中  $S_i$  为像元输出信号, $i$  为像元序号。

### 2.3 波长定标曲线拟合

光谱仪的分光探测原理如图 1 所示。平场凹面光栅将入射狭缝的光谱图像会聚到一个平面上,由线阵列探测器同时探测到各光谱的强度信号。

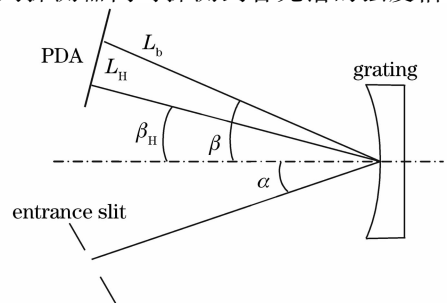


图 1 分光探测原理图

Fig. 1 Principle of diffraction and detection

光栅方程为

$$\sin \alpha + \sin \beta = 10^{-6} K n \lambda, \quad (2)$$

式中  $K$  为衍射极次,  $n$  为光栅刻线密度,  $\lambda$  为分光波长。光谱仪探测的为正一极衍射光,  $K$  取 1, 得出平场凹面光栅的角色散及线色散方程:

$$\frac{d\beta}{d\lambda} = \frac{10^{-6} n}{\cos \beta}, \quad (3)$$

$$\frac{d\lambda}{dx} = \frac{10^6 \cos \beta \cos(\beta_H - \beta)}{nL_b}, \quad (4)$$

$$\frac{d\lambda}{dx} = \frac{10^6 \cos \beta \cos^2(\beta_H - \beta)}{nL_H}, \quad (5)$$

由此可知光栅的色散非线性, 线阵列探测器的每个单元覆盖的光谱范围都是不同的。同时, 由于光学器件本身的缺陷以及装配误差的存在, 分光会聚也是非理想的。对其进行光谱定标时, 采用多项式近似拟合定标曲线更接近真实值<sup>[12,13]</sup>。

### 3 波长定标实验装置

谱线灯、单色仪、滤光片、谱线吸收材料的发射谱线或吸收谱线, 都可以作为特征谱线对仪器进行波长定标。选用定标光源要求光源的谱线可以覆盖仪器的较大波长范围而不应集中在较小的范围, 用于定标拟合的谱线一般不少于 4 条; 谱线带宽较窄、且位置精确高, 仅就本条而言, 低压谱线灯常作为首选; 谱线强度既不使仪器响应饱和又能满足一定的信噪比。

待定标的仪器由于受到光栅有效波长范围和探测器响应波长范围的限制, 在 900~2400 nm 探测范围内采用两个相同结构的分光探测单元, 光谱仪波长定标时分为两个波段进行, 要求较多数目的谱线, 一般的定标光源难以满足定标要求。单色仪光源可以在较宽的波段范围内输出任意波长的单色光, 并且带宽、强度可调、波长精度高、使用方便、满足定标要求。

图 2 为实验装置的光路图。采用的单色仪是美国 CVI Laser 公司生产的 DK-242 双单色仪。该单色仪内有两组相同的光栅台, 可以看作是两个完全相同的单光栅单色仪串联而成<sup>[14]</sup>。计算机控制单色仪的精密步进驱动电机和狭缝的大小实现波长的自动扫描和分辨力的设定。单色仪有三组光栅供选择使用, 分别覆盖不同的光谱范围。

对短波红外光谱仪波长定标时选用了第三组光栅, 单色仪输出波长范围为 800~3000 nm。系统自动保持恒定的分辨力, 本次定标设定单色仪系统的

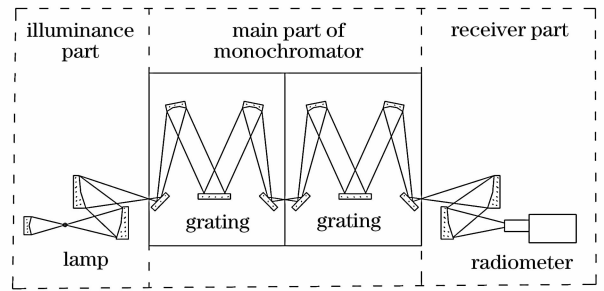


图 2 波长定标光路图

Fig. 2 Optical path of wavelength calibration

光谱分辨力为 1.5 nm, 光谱仪的增益设置为 3, 仪器输出在饱和输出的一半左右。单色仪的扫描范围设置为 950~2350 nm, 波长间隔 50 nm 进行自动扫描。

## 4 数据处理和分析

### 4.1 实验数据处理

假设像元的响应度一致, 光谱仪的两个波段像元序号均从 0 开始, 对输出超过十分之一峰值的像元进行计算, 去除包含坏像元的波长点, 计算结果如表 1、表 2 所示。

表 1 短波红外 1 谱线中心坐标

Table 1 Spectral-line center coordinate of SWIR1

Wavelength /nm	Pixel position	Wavelength /nm	Pixel position
950	14.08	1350	132.46
1050	43.79	1400	147.04
1100	58.68	1450	161.90
1150	73.48	1500	176.40
1200	88.29	1550	191.09
1250	103.01	1600	205.75
1300	117.60		

表 2 短波红外 2 谱线中心坐标

Table 2 Spectral-line center coordinate of SWIR2

Wavelength /nm	Pixel position	Wavelength /nm	Pixel position
1700	12.52	2050	136.18
1750	30.37	2100	153.91
1800	47.94	2150	171.60
1850	65.70	2250	206.50
1900	83.27	2300	224.27
1950	101.14	2350	241.80
2000	118.62		

由于采用了较多波长点进行定标, 拟合多项式可以取得较高的指数, 使得拟合结果接近实际曲线。考虑到实际应用要求与方便性, 拟合指数一般不应

太高,我们设定的目标为拟合误差不超过 1 nm。根据表 1、表 2 数据分别取多项式指数  $n=2,3$  进行多项式拟合。拟合结果如表 3、表 4 所示。

表 3 短波红外 1 拟合结果

Table 3 Fitting results of SWIR1

Wavelength /nm	2nd order fit error /nm	3th order fit error /nm
950	-0.098	0.035
1050	-0.095	-0.152
1100	0.133	0.047
1150	0.129	0.045
1200	0.231	0.172
1250	0.099	0.079
1300	-0.403	-0.380
1350	0.083	0.144
1400	0.312	-0.227
1450	0.317	0.404
1500	-0.211	-0.152
1550	-0.020	-0.030
1600	0.139	0.012
Sum of error square	0.5475	0.4684

表 4 短波红外 2 拟合结果

Table 4 Fitting results of SWIR2

Wavelength /nm	2nd order fit error /nm	3th order fit error /nm
1700	0.146	0.080
1750	-0.235	-0.241
1800	0.136	0.163
1850	-0.068	-0.032
1900	0.227	0.254
1950	-0.365	-0.361
2000	0.108	0.082
2050	0.318	0.257
2100	0.007	-0.087
2150	-0.229	-0.350
2250	0.551	0.412
2300	-0.027	-0.146
2350	0.041	-0.034
Sum of error square	0.7557	0.6820

从拟合结果可知,两个波段的 2 次、3 次拟合都

达到了较高精度,综合比较 3 次拟合精度更高,拟合误差优于 0.5 nm。取 3 次拟合系数作为波长定标系统,得到两个波段的定标方程分别为

短波红外 1:

$$\lambda = 902.91123 + 3.34247x + 3.1748 \times 10^{-4}x^2 - 4.65299 \times 10^{-7}x^3, \quad (6)$$

短波红外 2:

$$\lambda = 1664.66886 + 2.81415x + 1.19388 \times 10^{-4}x^2 - 1.46891 \times 10^{-7}x^3, \quad (7)$$

式中  $x$  的取值范围均为  $0 \sim 255$ 。

## 4.2 不确定度分析

对不确定度进行分析<sup>[15]</sup>,得出如表 5 所示波长定标不确定度,其中不确定度因素来源主要由以下三部分组成。

1) 定标谱线中心波长:由单色仪系统本身的特性决定,根据单色仪生产厂家的标称得知波谱中心不确定度为 0.07 nm。

2) 谱线中心对应像元位置:主要由光学系统的非理想性、探测器像元响应的非一致性、像元之间的间隙、算法等方面形成。根据文献[6,7],采用中心法计算的不确定度优于 0.05 个像元,为增强可靠性,取其不确定度为 0.1 个像元。另外,实验前探测器响应的非一致性未进行平场消除,需要对其进行评估。根据器件本身的响应非均匀性优于 5%,可以确定由响应非一致性带来的不确定度小于 0.05 个像元宽度。由此,可以计算得出谱线位置总的不确定度为 0.112 个像元。根据光栅的光谱色散系数可知仪器的光谱取样间隔小于 3.6 nm,则谱线位置总的不确定度优于 0.403 nm。

3) 波长定标曲线拟合:由拟合曲线与真实值之间的差异决定,采用拟合误差评价拟合结果。

表 5 定标不确定度分析

Table 5 Analysis for calibration uncertainties

Uncertainty sources	Uncertainty /nm	Reasons
Center wavelength of spectral line	0.07	Double monochromator
Pixel position of central wavelength	0.403	Space between pixels, nonuniform of pixel responses, noise, and the center of gravity method
Curve fit	0.412	Fit errors
Total uncertainty	0.581	

## 5 结 论

针对短波红外平场光谱仪的特点,确定了波长定标方案。采用单色仪作为定标光源可以输出任意波长谱线(单色光),解决了定标要求波长范围大、波长点多的问题。采用重心法精确计算波长中心对应像元位置大大降低了定标不确定度。利用已知谱线与像元位置关系采用3次多项式拟合出波长定标曲线,拟合误差小于0.5 nm,定标波长不确定度优于0.6 nm。

## 参 考 文 献

- Feng Yu, Zheng Xiaobing, Zhang Wei *et al.*. Optical radiometric calibration based on correlated photons[J]. *Acta Optica Sinica*, 2007, **27**(3): 457~460  
冯 瑜,郑小兵,张 伟 等. 基于相关光子的光辐射定标方法研究[J]. *光学学报*, 2007, **27**(3): 457~460
- Li Shuang, Wang Ji, Zhang Junping *et al.*. Highly accurate calibration of optical radiation based on cryogenic radiometer at visible and near infrared spectrum[J]. *Acta Optica Sinica*, 2005, **25**(5): 609~613  
李 双,王 骥,章骏平等. 可见-近红外(488~944 nm)基于低温辐射计的高精度光辐射绝对定标研究[J]. *光学学报*, 2005, **25**(5): 609~613
- M. Diem, Fran Adar, Roy Grayzel. A simple algorithm to convert diode array spectral data to linear wavelength or wavenumber scales [J]. *Comp. Enhanced Spectrosc.*, 1986, **3**(1): 29~33
- Stephen Scopatz, Gary Neel, Eric Romesburg *et al.*. Calibrating a detector array based spectroradiometer with sub-pixel precision [C]. *Proc. SPIE*, 1989, **1055**: 306~313
- Feng Zhiqing, Bai Lan, Li Futian. A flat field spectrograph for measuring 290~450 nm spectrum[J]. *Acta Optica Sinica*, 2004, **24**(3): 393~396  
冯志庆,白 兰,李福田. 用于290~450 nm光谱测量的平场光谱仪[J]. *光学学报*, 2004, **24**(3): 393~396
- Pedro E. Berlo, Guillermo A. Locascio. Ultraviolet-visible photodiode array spectrophotometer wavelength calibration method. A practical computer algorithm[J]. *Analyst.*, 1991, **116**: 313~316
- Junghwan Cho, Paul J. Gemperline, Dwight Walker. Wavelength calibration method for a CCD detector and multichannel fiber-optic probes[J]. *Appl. Spectrosc.*, 1995, **49**(12): 1841~1845
- Jia Hui, Li Futian. Analysis of factors affecting spectral radiance calibration by applying a diffuse plane[J]. *Acta Optica Sinica*, 2004, **24**(3): 383~387  
贾 辉,李福田. 影响光谱辐亮度标定因素的分析[J]. *光学学报*, 2004, **24**(3): 383~387
- H. K. Roscoe, D. J. Fish, R. L. Jones. Interpolation errors in UV-visible spectroscopy for stratospheric sensing: implications for sensitivity, spectral resolution and spectral range[J]. *Appl. Opt.*, 1996, **35**(3): 427~432
- Gordon R. Hopkinson, Teresa M. Goodman, Stuart R. Prince. *A Guide to the Use and Calibration of Detector Array Equipment* [M]. SPIE, Washington: Sira Technology Ltd. NPL, 2004. 123~136
- James J. Sullivan, Bruce D. Quimby. Characterization of a computerized photodiode array spectrometer for gas chromatography-atomic emission spectrometry [J]. *Anal. Chem.*, 1990, **62**(10): 1034~1043
- Xu Zhongmin, Yu Bingxi. Wavelength calibration for PC20002PC/104 spectrometer [J]. *Optics and Precision Engineering*, 2004, **12**(1): 11~14  
徐中民,禹秉熙. 对PC20002PC/104型光谱仪的波长定标[J]. *光学精密工程*, 2004, **12**(1): 11~14
- Shen Hangcheng, Pan Jianggen, Feng Huajun *et al.*. Calibration of the fast scan multichannel spectrometer [J]. *Optical Instruments*, 2006, **28**(2): 51~55  
沈杭城,潘建根,冯华君等. 多通道快速光谱仪的波长定标[J]. *光学仪器*, 2006, **28**(2): 51~55
- Zhang Junping. A study on broad radiometric calibration based on standard detectors [D]. Anhui Institute of Optics and Fine Mechanics, Chinese Academy of Sciences, 2004  
章骏平. 基于标准探测器的宽光谱辐射定标方法研究[D]. 合肥: 中科院安徽光机所, 2004
- Taylor B N, Kuyatt C E. Guideline for evaluating and expressing the uncertainty of NIST measurement results. <http://physics.nist.gov/pubs/guidelines>