

中阶梯光栅光谱仪的多谱线联合在线定标方法

尹 禄^{1,2} 卢禹先^{1,2} 巴音贺希格¹ 杨 晋^{1,2} 崔继承¹

¹中国科学院长春光学精密机械与物理研究所, 吉林 长春 130033

²中国科学院大学, 北京 100049

摘要 为了提高中阶梯光栅光谱仪光谱定标的效率和精度, 基于谱图还原算法, 提出了利用汞灯多条特征谱线联合定标的思想, 设计了中阶梯光栅光谱仪的在线定标算法。以汞灯为定标光源进行光谱定标实验, 结果表明该算法在谱图偏差超过限定范围时可以自动修正谱图还原模型, 选择的定标波长越多、分布越均匀, 定标精度越高。对于 250~600 nm 波段内的中阶梯光栅光谱仪, 选择 5 个以上的定标波长可以使定标精度达到仪器理论分辨率 0.01 nm。该方法实现了中阶梯光栅光谱仪的自动化光谱定标, 使光谱仪在保证高光谱分辨率的前提下更具实用性, 具有工程应用价值。

关键词 光谱学; 光谱定标; 中阶梯光栅光谱仪; 优化; 谱图还原; 在线定标

中图分类号 O433.4; TH744.1 **文献标识码** A

doi: 10.3788/AOS201636.0930001

Online Spectral Calibration by Multiple Wavelengths for Echelle Spectrometer

Yin Lu^{1,2} Lu Yuxian^{1,2} Bayanheshig¹ Yang Jin^{1,2} Cui Jicheng¹

¹Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics, Chinese Academy of Sciences, Changchun, Jilin 130033, China

²University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China

Abstract In order to improve the speed and accuracy of spectral calibration for echelle spectrometers, an automatic spectral calibration method by multiple characteristic wavelengths of mercury lamp is designed based on the spectrum retrieval algorithm. Spectral calibration experiments are conducted with a mercury lamp as the calibration light source. The results show that the spectral retrieval model is automatically corrected as long as the algorithm is within the range of the spectrum deviation. Choosing more calibration wavelengths and more uniformly distributed calibration wavelengths results in higher calibration accuracy. For the echelle spectrometer with wavelength range from 250 nm to 600 nm, choosing more than five calibration wavelengths will make the calibration accuracy be 0.01 nm, which is the theoretical resolution of the spectrometer. The automatic spectral calibration method makes echelle spectrometers more practical and valuable in engineering applications.

Key words spectroscopy; spectral calibration; echelle spectrometer; optimization; spectral retrieval; online calibration

OCIS codes 300.6170; 300.6320; 120.6200

1 引 言

中阶梯光栅光谱仪凭借其在光谱分辨率和全谱直读特性上的优势, 在天文、质检、冶金、矿物分析甚至太空物质探测等领域具有广泛应用^[1-4]。近几年中阶梯光栅光谱仪多作为电感耦合等离子体(ICP)分析系统^[5]和激光诱导等离子体(LIPS)分析系统^[6-9]的核心分光系统, 进行复杂混合物的高精度实时探测与分析。

收稿日期: 2016-04-12; **收到修改稿日期:** 2016-05-10

基金项目: 国家重大科学仪器设备开发专项(2014YQ120351)、国家自然科学基金(61505204)、国家 973 计划(2014CB049500)

作者简介: 尹 禄(1989—), 男, 博士研究生, 主要从事光谱仪器及其谱图处理方面的研究。

E-mail: yinlu890622@163.com

导师简介: 巴音贺希格(1962—), 男, 博士, 研究员, 主要从事光栅理论、光栅制作技术及光谱技术等方面的研究。

E-mail: bayin888@sina.com(通信联系人)

由于具有极高的光谱分辨率且多应用于极近谱线的区分与探测,中阶梯光栅光谱仪对于仪器状态的微小变化、环境改变、搬运以及探测器拆卸等十分敏感,需要经常进行光谱定标以保证其波长探测的准确性。因此,中阶梯光栅光谱仪光谱定标方法的研究是其研发的难点和重点,提升光谱定标的效率和精度具有非常重要的意义。

中阶梯光栅光谱仪采用面阵探测器接收被二维色散的光谱,根据谱图还原算法建立模型矩阵,得到波长和探测器成像坐标的对应关系^[10-12],从而根据探测器上各成像光斑的坐标分析得出光源中所包含的波长。中阶梯光栅光谱仪的光谱定标就是通过更新模型矩阵来保证这种对应关系始终准确的过程。由于仪器的微小改变都会影响波长和坐标的对应关系,使用仪器进行分析探测前需要通过光谱定标获得准确的模型矩阵,以满足对波长提取精度的要求。目前,国外对中阶梯光栅光谱仪的研发相对成熟,应用十分广泛,但却没有对其光谱定标方法的详细报道。国内仅有少数几家公司和研究机构具有自主研制中阶梯光栅光谱仪的能力,但鲜有定标功能,光谱定标都是在出厂时由专业人员完成,随着仪器的使用,波长提取误差将逐渐增大,最终需要返厂由专业人员重新定标,费时费力。鉴于此,本文提出了一种基于汞灯多谱线联合定标的方法,首先识别汞灯特征谱线的坐标与波长,然后迭代模型矩阵的输入参数,寻找与汞灯谱线偏差最小的模型完成定标。该定标过程自动完成,操作无需专业知识且具有实时性,可以满足光谱仪器在线定标的需求,具有操作简单、精度高、效率高等优点,适合应用于工程开发和产业化。

2 谱图还原模型

中阶梯光栅光谱仪利用中阶梯光栅的高色散力特点配合低色散力的色散元件进行交叉色散,将经中阶梯光栅色散后重叠的光谱分开。整个光谱范围内的光线经过交叉色散后会落到像面上的不同位置,如果连续光源入射将会形成图 1 所示的梳状光谱。这种二维梳状谱图难以直接读取光谱信息,需将二维谱图还原为横纵坐标分别为波长和光强的一维光谱,该过程称为谱图还原。谱图还原实际上就是构造谱图还原模型、建立成像坐标与波长一一对应关系的过程^[10]。

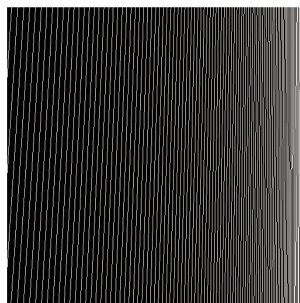


图 1 中阶梯光栅光谱仪梳状光谱

Fig. 1 Comb-like spectrum of echelle spectrometer

目前,国内外中阶梯光栅光谱仪的结构基本可以按照横向色散元件的选择和使用方式进行分类。横向色散元件一般为棱镜和低色散率光栅。棱镜虽然色散率不均匀,但是在较宽的波长范围内都能保持较高的能量传输效率,且杂散光低;低色散率光栅受制于能量传输效率和非使用级次引起的杂散光,一般用在近红外等特定的长波波段。普遍使用的棱镜一般有反射式棱镜^[13]和透射式棱镜^[14]两种,如图 2 所示。反射式棱镜的结构光线首先通过中阶梯光栅,对不同波长的光都有相同的光栅偏置角,算法简化,装调简单。透射式棱镜的结构光线首先通过棱镜进行横向色散,再进入光栅时不同的波长偏置角不同,算法相对复杂,装调难度增大,但是仪器结构更加紧凑,相同分辨率条件下体积更小。

无论哪一种光路结构,在已知入射光波长的情况下,都可以根据色散元件和仪器的设计指标计算得到理论成像位置^[13-15]。将探测器像面中心置于中间级次中心波长的成像位置,此时光栅和棱镜均可等效为平面反射镜,对于其他任意波长有

$$d_x = f \tan \theta_x, \quad (1)$$

$$d_y = f \tan \theta_y, \quad (2)$$

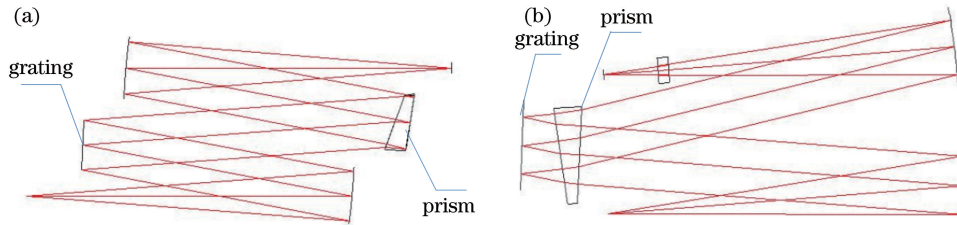


图 2 中阶梯光栅光谱仪的结构对比。(a)选用反射式棱镜;(b)选用透射式棱镜

Fig. 2 Structure contrast of echelle spectrometer. (a) With reflecting prism; (b) with transmitting prism

式中 d_x 和 d_y 分别为该波长在 X 和 Y 方向相对像面中心的偏移量, f 为系统焦距, θ_x 和 θ_y 分别为该波长的光线经过横向色散元件和主色散元件后与中心波长的角度偏差, 可以根据波长和仪器设计参数确定,

$$\theta_x = F [\alpha_p, \omega, n(\lambda)], \quad (3)$$

$$\theta_y = F (\alpha_g, d, \delta), \quad (4)$$

式中 α_p 为棱镜入射角, ω 为棱镜顶角, $n(\lambda)$ 为某一入射波长 λ 下的棱镜折射率, α_g 为光栅入射角, d 为光栅常数, δ 为光栅偏置角。最后, 根据 d_x 和 d_y 可以确定 X 、 Y 轴坐标为

$$X = \frac{N}{2} \pm \frac{d_x}{a}, \quad (5)$$

$$Y = \frac{N}{2} \pm \frac{d_y}{a}, \quad (6)$$

式中 a 为探测器像元尺寸, N 为单边像元个数。由于仪器设计参数已知, 可以根据(1)~(6)式建立入射光波长与其在探测器上成像坐标之间一一对应的函数关系, 从而构建谱图还原模型。该函数关系的自变量是入射波长, 因变量是成像光斑坐标, 其反函数即谱图还原函数。根据谱图还原函数, 只要分析探测器上光斑的坐标即可提取波长。

3 在线定标方法

随着仪器状态和外界条件的改变, 初始确定的谱图还原模型所建立的波长与坐标对应关系会出现偏差, 在仪器使用前需要进行光谱定标, 确定谱图还原模型的准确性。提出的定标算法可以利用汞灯的特征谱线进行在线定标, 保证中阶梯光栅光谱仪光谱定标的自动化与实时性。

中阶梯光栅光谱仪具有很高的光谱分辨率, 对光机结构加工误差要求很高, 且对光学像差的影响较敏感。这些因素引起的偏差难以利用算法进行补偿, 而在线定标算法通过拍摄并识别汞灯特征谱线, 迭代谱图还原函数的输入参数, 寻找与汞灯谱图最接近的谱图还原模型, 最大程度上补偿了加工误差和像差的影响。这其中最关键的是汞灯谱图的识别和模型矩阵的匹配。

3.1 汞灯谱图的识别

为了寻找与实际谱图最吻合的谱图还原模型, 需要通过波长和坐标都已知的数据作为基准修正谱图还原函数, 建立新的谱图还原模型。汞灯的特征谱线覆盖波段范围广, 经过中阶梯光栅光谱仪后在面阵探测器上成像的特征光斑分布合理且易于区分识别, 利用汞灯的多条特征谱线进行定标可以保证新模型的精度。

如果探测器单边像元个数为 N , 初始模型在使用波段覆盖像元数为 $m \times n$, 则仪器在使用过程中造成的谱图平移效应在 $(N-m) \times (N-n)$ 像元以内时无需机械调整 (不考虑缩放带来的微小误差), 只需要改变谱图还原函数的输入参数使新模型与实际谱图匹配即可。

中阶梯光栅光谱仪在初始装调完毕时拍摄汞灯特征谱图, 根据仪器设计参数建立还原模型矩阵, 微调仪器状态使汞灯最靠近像面中心的特征光斑与模型完全匹配, 此时的状态满足在线定标算法的使用条件。记录各波长的初始坐标, 识别汞灯谱图时以各波长初始坐标像素点为中心, 搜索 $[\pm(N-m)/2] \times [\pm(N-n)/2]$ 矩形范围内的像元, 如图 3 所示。汞灯特征谱线的相对位置保证了平移 $(N-m) \times (N-n)$ 像元范围内有且仅有一个特征光斑, 即位于识别矩形中心的特征波长本身。如果识别矩形内没有光斑或者不止一个光斑, 说明仪器状态的改变使模型的变化超出了算法可以承受的范围, 需要进行机械调整, 整个汞灯谱图识别流程如图 4 所示。

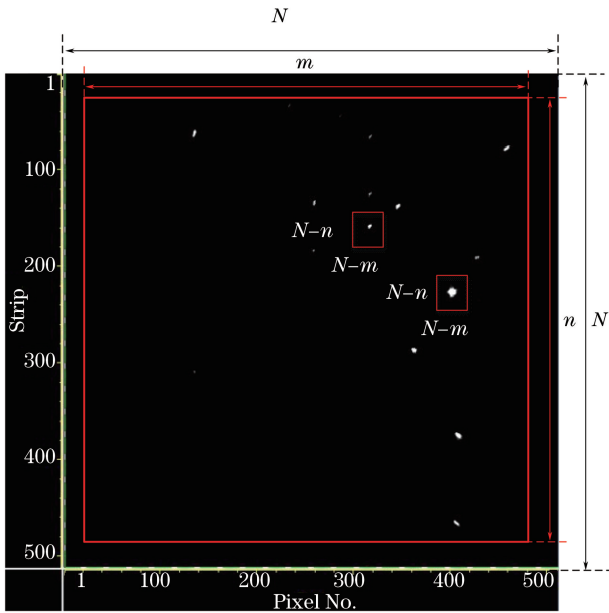


图 3 汞灯谱图识别示意图

Fig. 3 Recognition of mercury lamp spectra

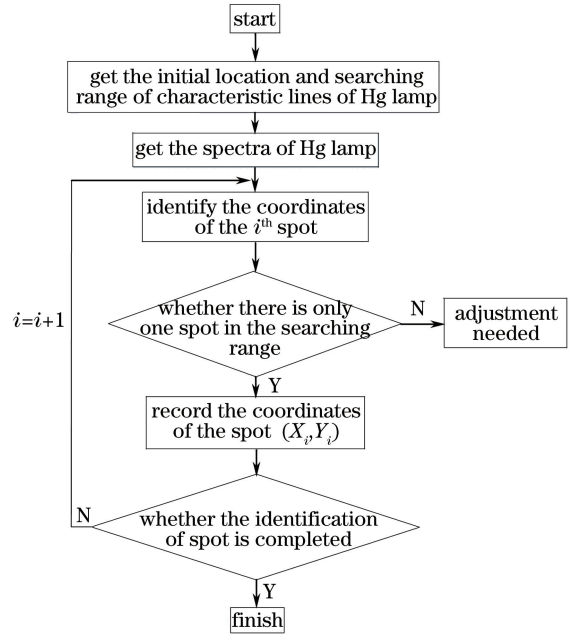


图 4 汞灯谱图识别流程图

Fig. 4 Flow chart of mercury lamp spectrum recognition

3.2 模型矩阵的匹配

利用所识别的汞灯特征谱线及其坐标寻找最吻合的模型以完成在线定标。实际的谱图还原模型可以看作初始模型经过平移、扩大与收缩变换得到的结果,改变谱图还原函数输入参数中的焦距 f 、棱镜入射角 α_p 以及光栅入射角 α_g 可得到新的谱图还原矩阵。

通过初始模型尺寸与探测器尺寸的关系可以得到三个参数 (f, α_p, α_g) 的变化区间,参数在此区间外所得到的模型将超出探测器的接收范围,需要辅以机械调整;以模型平移和缩放变化不大于一个像元为标准设置三个参数的变化步长。以变化步长为间隔,用迭代法在变化区间内依次改变输入参数计算谱图还原模型,将得到的一系列模型与汞灯谱图进行比对。当满足判别条件 $X_i - x_i < 2$ 时,记录坐标误差和 R ,

$$R = \sum_i k_1 |X_i - x_i| + k_2 |Y_i - y_i|, \quad (7)$$

式中 k_1 和 k_2 分别为横坐标误差系数和纵坐标误差系数, i 代表汞灯的特征波长编号, (x_i, y_i) 为汞灯第 i 个特征波长在模型中的坐标, (X_i, Y_i) 为汞灯第 i 个特征波长经探测器成像后的坐标,该坐标为光斑各像元光强值的加权中心精确到小数点后一位^[16],即

$$X_i = \frac{\sum_{S_i} x \cdot I(x, y)}{\sum_{S_i} I(x, y)}, Y_i = \frac{\sum_{S_i} y \cdot I(x, y)}{\sum_{S_i} I(x, y)}, \quad (8)$$

式中 S_i 为第 i 个特征谱线成像光斑所覆盖的像元, x 和 y 分别为各像元的横、纵坐标, $I(x, y)$ 为该光斑的光强值分布。

横坐标的偏差将导致提取波长级次间的差别,对提取波长误差影响较大;纵坐标的偏差将导致提取波长分辨率级别的误差,对提取波长误差影响较小。因此一般选择较大的 k_1 和较小的 k_2 。确定误差系数后代入(7)、(8)式,使得 R 值最小的模型为最吻合实际情况的解。模型矩阵匹配的流程如图 5 所示。

4 实验验证

采用课题组研制的中阶梯光栅光谱仪进行在线定标算法的验证,仪器的设计参数如表 1 所示。

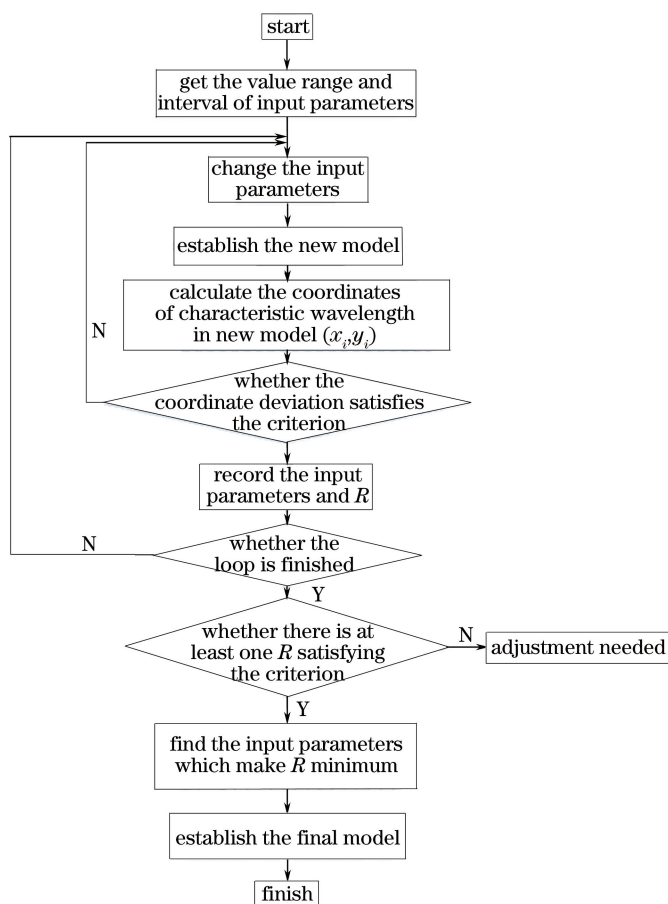


图 5 模型矩阵匹配流程图

Fig. 5 Flow chart of model matching

表 1 中阶梯光栅光谱仪参数指标

Table 1 Parameters of echelle spectrometer

Parameter	Value
Wavelength range	220-600 nm
Focus length f	262 mm
Incident angle of echelle α_g	46.6°
Incident angle of prism α_p	10.44°
Size of CCD N	512 pixel
Size of origin model $m \times n$	480 pixel \times 456 pixel

为了单次步进使模型变化不大于一个像元,系统焦距 f 、光栅入射角 α_g 、棱镜入射角 α_p 步长依次为设置为 1 mm、 0.003° 、 0.002° 。根据 N 与 m 、 n 的数值关系,同时考虑避免使多条汞灯特征谱线进入同一搜索范围,选择棱镜入射角 α_p 和光栅入射角 α_g 的搜索范围为 $(-15, 15)$ 和 $(-20, 20)$,若模型伸缩最大不超过 5 pixel,确定系统焦距 f 搜索范围为 $(-5, 5)$ 。

利用以上数据创建符合该中阶梯光栅光谱仪的在线定标算法,选择汞灯的 9 个特征波长作为定标波长和验证波长(表 2),微调仪器使之偏离设计值且不超出可在线定标的范围。考察定标误差系数、波长分布、定标波长数量对光谱定标精度的影响。

从图 6 可以看出,尽管横坐标精度要求高于纵坐标精度,但是误差系数比 $(k_1:k_2)$ 过高会导致纵坐标误差过大,一般选择 3:1 左右的误差系数比较为合适。因此,确定误差系数比 $k_1:k_2=3:1$ 来进行后续实验。

表 2 汞灯谱线

Table 2 Spectra of mercury lamp

Wavelength No.	1	2	3	4	5	6	7	8	9
Wavelength /nm	253.652	296.728	313.184	365.016	404.656	435.833	546.075	576.961	579.067

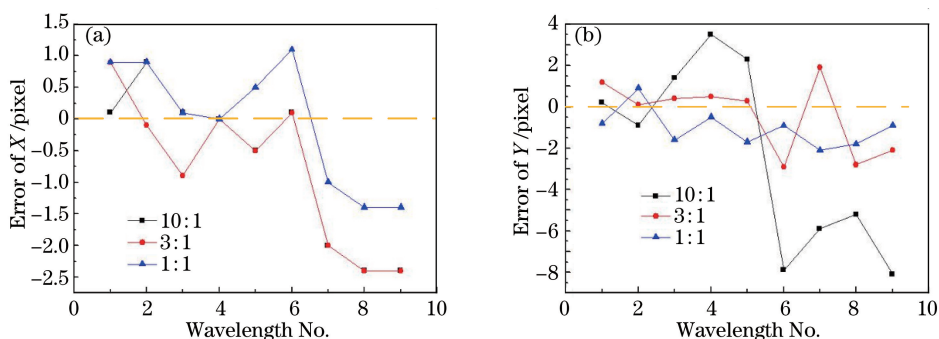


图 6 误差系数对定标精度的影响

Fig. 6 Influence of error coefficient on calibration accuracy

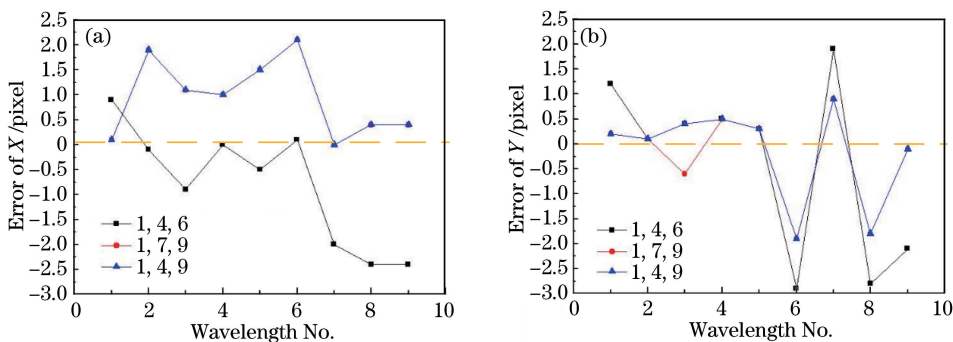


图 7 定标波长的分布对定标精度的影响

Fig. 7 Influence of wavelength distribution on calibration accuracy

从图 7 可以看出,定标波长的分布影响定标误差的分布。定标波长为 1, 4, 9 的误差(红色曲线)与定标波长为 1, 7, 9 的误差(蓝色曲线)基本一致,小于定标波长为 1, 4, 6 的误差(黑色曲线),而且定标波长周围的定标误差较小,越远离定标波长定标误差越大。因此,可以推断选择的定标波长分布间隔越小即定标波长在光谱范围内分布得越均匀、数量越多,整个波段范围内定标精度越高。

从图 8 可以看出定标波长的数量越多,定标精度越高,印证了上文的推论。选择 5 个定标波长时,横纵坐标误差都小于 1 pixel,定标精度优于理论分辨率。

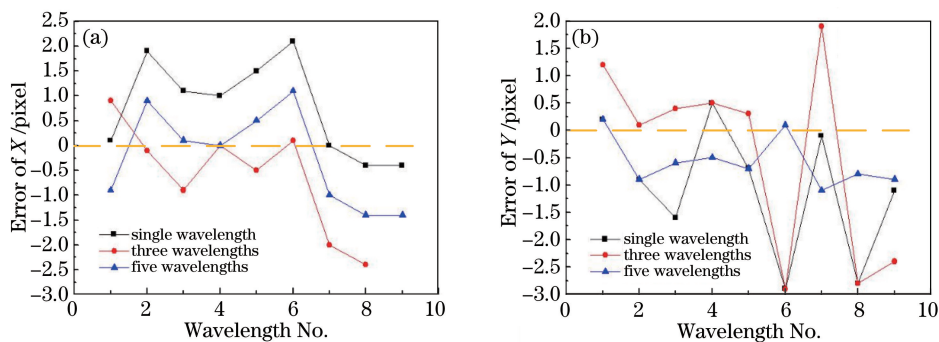


图 8 定标波长数量对定标精度的影响

Fig. 8 Influence of wavelength amount on calibration accuracy

综上所述,本文所述在线定标算法在一定范围内具有谱图还原模型的修复能力,在合理选择误差系数的前提下,定标波长越多、分布越均匀,定标精度越高。新模型与实际谱图吻合性较高,配合机械调整可以应用于光谱仪器的快速定标。

5 结 论

中阶梯光栅光谱仪的在线光谱定标对仪器的性能和实用性提升具有非常重要的意义。提出了一种利用

汞灯多条特征谱线在线定标的算法,并进行了实验验证,得到如下结论:1)随着外界环境、使用条件和仪器状态的改变,中阶梯光栅光谱仪在使用前需要进行光谱定标,但是大多数情况下偏差较小,可以通过在线定标算法自动修正,从而免去拆封装调,节约资源和时间成本;2)实际谱图可以看作初始谱图进行平移和伸缩变换的结果,可以通过谱图还原函数输入参数的变化改变算法模型,使其与实际谱图再次精确匹配;3)汞灯谱图的特点使其可以用于中阶梯光栅光谱仪的光谱定标,选用定标波长越多、分布越均匀,定标精度越高;4)提出的在线定标算法满足精度要求,可以用于生产实践,为中阶梯光栅光谱仪产业化提供了技术支撑。

参 考 文 献

- Lavigne J F, Doucet M, Wang M, *et al.* Study of the image quality and stray light in the critical design phase of the Compact Echelle Spectrograph for Aeronomical Research (CESAR)[C]. SPIE, 2010, 7735: 773539.
- Xie Pin, Ni Zhengji, Huang Yuanshen, *et al.* Application research progress in the echelle grating[J]. Laser Journal, 2009, 30(2): 4-6.
谢 品,倪争技,黄元申,等.中阶梯光栅的应用研究进展[J].激光杂志,2009,30(2):4-6.
- Wu Xuhua, Zhu Yongtian, Wang Lei. Optical design of high resolution echelle spectrograph[J]. Optics and Precision Engineering, 2003, 11(5): 442-447.
武旭华,朱永田,王 磊.高分辨率阶梯光栅光谱仪的光学设计[J].光学精密工程,2003,11(5):442-447.
- 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.
- Karanassios V, Horlick G. Spectral characteristics of a new spectrometer design for atomic emission spectroscopy[J]. Applied Spectroscopy, 1986, 40(6): 813-821.
- 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.
- 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(2): 375-380.
- 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.
- Pan Congyuan. Research on online composition analysis of molten steel under vacuum by laser induced plasma spectroscopy[D]. Hefei: University of Science and Technology of China, 2015.
潘从元.基于激光诱导等离子体光谱的真空环境熔融金属成分在线检测技术研究[D].合肥:中国科学技术大学,2015.
- Tang Yuguo, Chen Shaojie, Bayanheshig, *et al.* Spectral reducing of cross-dispersed echelle spectrograph and its wavelength calibration[J]. Optics and Precision Engineering, 2010, 18(10): 2130-2136.
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.
- Chen Shaojie, Bayanheshig, Pan mingzhong, *et al.* Efficient algorithms for echelle spectrograph design and cross-dispersed spectra analysis[J]. Acta Optica Sinica, 2013, 33(10): 1030001.
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.
- Yin Lu, Bayanheshig, Cui Jicheng, *et al.* An effective wavelength detection method based on echelle spectra reduction [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2015, 35(3): 850-855.
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.
- Tang Yuguo, Song Nan, Bayanheshig, *et al.* Optical design of cross-dispersed echelle spectrograph[J]. Optics and Precision Engineering, 2010, 18(9): 1989-1995.
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.
- Zhang Yufeng, Wu Jianfen, Zhu Qingsong, *et al.* Optical design of high resolution two dimension echelle spectrometer [J]. Acta Optica Sinica, 2015, 35(4): 0422005.
张瑜峰,武建芬,朱青松,等.二维全谱高分辨率中阶梯光栅光谱仪光学系统设计[J].光学学报,2015,35(4):0422005.
- Yang Jin, Yin Lu, Yao Xuefeng, *et al.* Optical design and stray light suppression of a new portable echelle spectrometer

[J]. Acta Optica Sinica, 2015, 35(8): 0812001.

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.

- 16 He Miao, Tang Yuguo, Chen Shaojie, *et al.* Position acquiring of signal spots in the echelle spectrograph [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2012, 32(3): 849-853.

何 森, 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.