doi:10.3788/gzxb20154410.1030002

基于惠更斯点扩散函数的光谱响应函数仿真

高震宇^{1,2},方伟¹,宋宝奇¹,姜明¹,王玉鹏¹

(1中国科学院长春光学精密机械与物理研究所,长春 130033)(2中国科学院大学,北京 100049)

摘 要:针对实验方法获取光谱响应函数存在时效性差和过程复杂的特点,提出了一种基于惠更斯点扩散函数仿真光谱响应函数及光谱分辨率的方法,该方法综合考虑衍射及像差信息,在光学设计阶段即可获得任意标称波长处的精细光谱响应函数及光谱分辨率.对自行设计的工作范围为1000 nm~2500 nm的光栅光谱仪进行单波长及全谱段光谱响应函数仿真,并以几何光线追迹法作为对比.结果表明,基于惠更斯点扩散函数仿真的光谱响应函数带宽始终大于后者获得的带宽,在全波段范围内二者偏差介于2%~5%,且前者变化会同时受衍射及像差影响.两种方法对数坐标表示的光谱响应函数比较表明,相对强度在10⁻²~10⁻⁵时,衍射效应明显,而低于10⁻⁵时仿真结果中衍射的影响可以忽略.该方法对分辨率为10 nm 的光谱仪仿真过程中产生不确定度为 0.25 nm.

关键词:光学设计;光谱响应函数;点扩散函数;光谱分辨率;仿真

中图分类号:O433;TH744 文献标识码:A 文章编号:1004-4213(2015)10-1030002-6

Simulation of Spectral Response Function based on Huygens Point Spread Function

GAO Zhen-yu^{1,2}, FANG Wei¹, SONG Bao-qi¹, JIANG Ming¹, WANG Yu-peng¹ (1 Changchun Institute of Optics, Fin Mechanics and Physics, Chinese Academy of Sciences, Changchun 130033, China) (2 University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)

Abstract: As acquiring spectral response function by experimental method is always time limited and with a complicate process, a simulation of spectral response function and spectral resolution based on huygens point spread function was suggested. Taking into account the effects of optical aberration and diffraction, the fine spectral response function curves and spectral resolution at any nominal wavelength of the full spectral range can be calculated as early as in the design phase. A grating spectrograph with a spectral ray tracing method as a comparison, the spectrograph's spectral response function at single wavelength and full spectral range are simulated by huygens point spread function method. The results demonstrate that the full width at half maximum of spectral response function acquired by huygens point spread function method is greater than the result of geometrical ray tracing method at any wavelength. The relative deviation changes from 2% to 5% for the full spectral range. Both optical aberration and diffraction and diffraction affect the result of huygens point spread function method. At last, the comparison of spectral response function curves acquired by the two methods is shown with logarithmic scale for the y-axis. The results show that the effect of diffraction is dominant when relative response between 10^{-2} and 10^{-5} and can be neglected below 10^{-5} . The uncertainty of the simulated process for the spectrograph with a 10nm

基金项目:国家自然科学基金(No. 41474161)资助

第一作者:高震宇(1988-),男,博士研究生,主要研究方向为光谱仪器设计与定标等.Email:lnsygzy@126.com

导 师:方伟(1965-),女,研究员,博士,主要研究方向为空间太阳辐射绝对测量和遥感定标等. Email:fangw@ciomp. ac. cn

通讯作者:王玉鹏(1972-),男,副研究员,博士,主要研究方向为空间遥感技术、精密太阳跟踪、太阳光谱及总辐射测量等. Email: wangyp @ciomp. ac. cn

收稿日期:2015-06-17;录用日期:2015-08-25

spectral resolution is 0.025 nm.

Key words: Optical design; Spectral response function; Point spread function; Spectral resolution; Simulation

OCIS Codes: 300.6190; 120.4820; 280.4788

0 引言

光谱仪器对单色光谱辐射的响应随波长的变化特 性可用光谱响应函数(Spectral Response Function, SRF)(或称为仪器响应函数、仪器函数^[1-2])来描述.光 谱仪波长定标是获取仪器的 SRF 线型,并由此确定探 测器像元的中心响应波长和光谱带宽.波长定标是辐 射定标的前提,波长定标与辐射定标共同构成了高准 确度定量化反演被测目标光谱辐射特性的基础,另外, 为进行不同分辨率光谱数据的比对,由光谱定标获得 的 SRF 还是实现光谱数据分辨率匹配的卷积核函 数[3-5],传统光谱仪器的光谱定标主要使用特征谱线灯 光源法,高分辨率单色仪或可调谐激光扫描等实验方 法^[6-8]获得,针对成像光谱仪还有白光干涉法^[9]、掺杂 漫反射面板法^[10]等.但以上实验方法都必须等到仪器 加工装调完成后才可通过实验方式实施,并且不能进 行全波长、全参量测量,时效性和数据完整性不足.在 光学设计阶段实现光谱分辨率的预估一般只能通过棱 镜或光栅方程简单计算[11-12]获得,然而这种方法计算 获得的光谱分辨率不包含像差及衍射信息,与实际设 计结果可能具有较大的偏差.

针对以上问题,本文提出了基于惠更斯点扩散函数(Point Spread Function, PSF)的光谱仪器光谱响应 函数和光谱分辨率的计算机仿真方法,并基于该方法 对一台自行设计的近红外光谱仪光谱响应函数及光谱 分辨率进行仿真,在仪器的光学系统设计阶段实现对 系统光谱特性的评价与预估.利用几何光线追迹方法 作为对比,实现对基于惠更斯点扩散函数的仿真方法 可行性与准确性的验证,同时分析了衍射效应的影响. 另外,由于探测器的响应效率及温度特性相对独立于 仪器自身固有的色散特性,可以根据不同条件单独分 析,因此本文并未考虑在内.

1 光谱响应函数仿真原理

探测器像元接收到的积分光谱功率可看作像元对 入射狭缝各单色像平移叠加的响应^[13],其过程等价为 探测器像元响应函数与入射狭缝的像函数的卷积,其 中卷积函数的积分面积即为光谱功率的值,而卷积函 数在像元响应波段内随波长的分布即为此像元的光谱 响应函数.上述过程中,探测器像元响应函数一般是矩 形门函数;入射狭缝的像是入射狭缝与光学系统点扩 散函数的迭加积分;如果光学系统满足空间不变条件, 则迭加积分也可写成卷积形式.综上,光谱仪器的光谱 响应函数是基于色散方向(设为子午方向)的函数,使 用子午线扩散函数(Line Spread Function, LSF)计算 入射狭缝的像,选取入射狭缝和探测器像元宽度相同 且均为 *a* 时,上述线性空不变光学系统的光谱响应函 数为

$$\operatorname{SFR}(y) = \left[\operatorname{rect}\left(\frac{y}{a}\right) * \operatorname{LSF}_{T}(y)\right] * \operatorname{rect}\left(\frac{y}{a}\right)$$
 (1)

式中,*代表卷积;两个矩形函数,前者代表入射狭缝 函数,后者为探测器像元响应函数;y为像面子午方向 坐标;LSF_T(y)为对应 y位置处的线扩散函数,通过相 同 y坐标的点扩散函数对狭缝长度方向积分获得.在 光谱成像系统中,如果 LSF_T 半高全宽(Full Width at Half Maximum, FWHM)与狭缝或像元尺寸相比很 窄,即可认为 LSF_T 为理想狄拉克函数,光谱响应函数 轮廓为三角函数,其 FWHM 值近似等于 a;如果 LSF_T 带宽大小与像元尺寸接近或比之更大时,则光谱响应 函数轮廓接近于高斯函数,并且其 FWHM 值将略大 于狭缝尺寸a^[14].

式(1)不能直接获得对应像元位置的光谱响应函数,经过式(1)处理的结果是固定探测器像元对成像在 色散方向上不同坐标位置的单色像的响应.为了获得 光谱响应函数,式(1)的计算结果需要进行一次坐标映 射,将横坐标的位置信息转换为波长信息.该过程通过 拟合大量单色光波长及其对应的像面中心位置坐标建 立映射关系来实现,其中像面中心位置通过读取点扩 散函数的中心获得.在映射关系中,称中心位置坐标对 应的中心波长为该位置的标称波长,中心波长对应的 中心位置坐标为该波长的标称坐标.位置坐标是均匀 线性的,而由于光栅和棱镜等色散元件的存在,波长在 全波段范围内分布是非严格均匀线性的,因此上述映 射除了可以获得光谱响应函数之外,还可以解决非严 格线性色散的问题.

对于点扩散函数的获得,由于一般棱镜或光栅型 光谱仪的光学系统往往会有表面倾斜,并且整体结构 为非中心对称,因此出瞳波前复振幅的快速傅里叶变 换(Fast Fourier Transform, FFT)法计算的系统 PSF 和 LSF_T 往往会存在较大偏差,而使用惠更斯子波直 接积分法可以获得准确度更好的结果.一般情况下, LSF_T 是波长和空间坐标的非常函数,难以通过直接计 算获得,因此本文对通过光学设计软件(Zemax)提取 的 PSF 数值数据进一步积分运算获得,其准确度受狭 缝长度方向上采样密度影响.

2 仿真实例分析

对自行设计的基于凸面光栅的近红外光谱仪进行 仿真.光谱仪光学结构及部分设计参量分别如图 1 和 表 1,该光谱仪色散部分由两片球面反射镜和一片凸 面光栅构成,入射狭缝尺寸为 2.5 mm×50 µm,选用 1×256像元的线阵探测器,探测器像元尺寸与入射狭 缝 相 同,为 2.5 mm×50 µm,光 栅 刻 线 密 度 为 100 g/mm.该光谱仪的光谱范围为1000nm~2500nm, 光谱分辨率为 10 nm.图 2 为该光栅光谱仪点列图的 均方根(Root-Mean-Square, RMS)半径随波长变化的 曲线,图中值较大且单调上升曲线为衍射极限.该光谱 仪在全波段范围内点列图 RMS 半径均小于 2 µm,具 有较好的像差校正,其全视场谱线弯曲优于 0.4%,对 光谱响应函数的影响几乎可以忽略.

表 1 光谱仪设计参量 Table 1 Parameters of the designed spectrograph









2.1 单色光的像分析

针对上述系统,应用几何光线追迹方法模拟单色

光入射到探测器像面上的光斑分布,针对每一单波长 追迹 5 000 条光线,且每条光线的视场及孔径角均在 设计要求范围内随机产生,将其结果做成统计图如图3. 图中 X 轴是以对应波长主光线像面交点为 0 的相对坐 标,Y 轴是对应坐标位置处像点频率统计.由图 3 可 知,在全波段范围内,光线到达像面的光斑基本都在一 个探测器像元尺寸范围内.光线追迹包含系统的像差 信息,图 3 中 2 500 nm 的光斑 Y 方向分布略差于 1 000 nm和 1 750 nm 处,这与光学设计的点列图 RMS 半径结果相符.然而,由于几何光线追迹的方法并不包 含衍射信息,随着波长的增加,与真实狭缝的像的能量 分布之间的偏差也会增大.



图 3 全孔径单色光几何光线追迹光斑分布 Fig. 3 Monochromatic images by full aperture ray tracing

与几何光线追迹相比,点扩散函数同时包含系统 的像差信息和衍射信息,在宽光谱范围情况下也可以 更准确地获得狭缝的像能量分布.根据式(1)仿真的狭 缝的像在色散方向的能量分布如图 4,由图可见,狭缝 的像的能量分布呈矩形函数状,并且能量主要分布在 一个像元尺寸范围内.与光线追迹不同的是,由于系统 的衍射效应,随着波长增加,像的边缘逐渐变平滑,并 且顶部逐渐变窄、底部变宽,甚至在下降过程中产生次极大,像函数的FWHM也有少量的增大.





Fig. 4 Intensity distribution of monochromatic images in dispersion direction

2.2 SRF 曲线仿真

将所得的狭缝的像函数根据式(1)进行进一步计 算,并将结果进行坐标映射后得到对应波长位置的光 谱响应函数,图5为上述光栅光谱仪在1000 nm 位置 和 2 500 nm 位置的光谱响应函数,图中上下两个横坐 标坐标轴分别表示波长坐标以及空间位置坐标,其中 波长坐标括号外对应于1000 nm 的曲线,括号内对应 于 2 500 nm 的曲线. 波长坐标和空间位置坐标通过三 次多项式拟合关系的坐标映射一一对应,拟合残差如 图 6,坐标映射过程产生的拟合残差在全光谱范围内 优于 0.000 4 nm,对分析及评价产生的影响几乎可以 忽略.一般情况,对数据使用高斯拟合后的峰值即为探 测器所在位置的实际中心波长[15],但由图中可见, 1000 nm位置处光谱响应函数接近与三角函数,而由 于衍射效应的原因,在2500 nm 处光谱响应函数则更 加平滑,轮廓介于三角函数与高斯函数之间.显然,使 用高斯拟合的方法获得中心波长及 FWHM 将会产生 较大的偏差,所以本文使用重心法计算函数的中心波 长,得到在1000 nm 和2 500 nm位置处中心波长分别 为1000.05 nm 和2499.95 nm,他们与标称波长有微 小的偏移,这是光学系统非旋转对称的必然结果,由于 偏差数值较小,对定标结果影响可以忽略.使用积分法 计算光谱响应函数的 FWHM 值,可得在1000 nm和 2 500 nm处,该光栅光谱仪光谱带宽分别为 10.01 nm 和 10.45 nm, 一般认为光谱响应函数的带宽等于光谱 分辨率[16],可见前者波长处的光谱分辨率优于后者. 另外,由于像差及衍射的存在,导致在探测器像元位置 处,标称波长的能量也没有被该探测器像元完全接收, 而是有部分能量落在了相邻探测器像元上,因此图中 的相对响应的峰值都没有达到1.随波长增加,衍射影 响加大,峰值会进一步下降,与之相对应的是该探测器 像元也会接收到相邻像元中心标称波长的部分能量, 导致光谱带宽加宽.





2.3 全谱段光谱分辨率仿真

改变入射光波长,使用基于惠更斯点扩散函数的 方法仿真全波段的光谱响应函数,用积分法求其 FWHM,可得光谱分辨率随波长的变化关系如图 7,图 中除了基于惠更斯点扩散函数仿真的光谱分辨率之外 还有几何光线追迹仿真的光谱分辨率以及二者的相对 偏差随波长变化的曲线.其中,光线追迹法仿真先通过 在标称波长位置附近均匀选取 101 个波长,对每个波 长追迹 3000 条光线,之后使 101 个波长的全部追迹光 线分别对固定在中心波长标称位置处的探测器像元函 数进行积分,得到对应波长的在该探测器像元的响应, 最后,将探测器响应随波长变化关系绘制曲线得到标 称位置的光谱响应函数. 偏差曲线是基于惠更斯点扩 散函数和几何光线追迹仿真的光谱分辨率的绝对偏差 与二者平均值之比.由图可知,由于包含了衍射效应的 影响,基于惠更斯点扩散函数仿真的光谱分辨率数值 在全波段均大于几何光线追迹结果,二者偏差介于 2%~5%. 将图 7 与图 2 进行比较,可见几何光线追迹 的结果几乎完全符合点列图 RMS 半径的变化趋势,而 基于惠更斯点扩散函数模拟的光谱分辨率变化曲线与 衍射极限曲线趋势相同,数值均随波长增加而增大.与 衍射极限曲线不同的是,基于惠更斯点扩散函数模拟 的光谱分辨率变化曲线随点列图的 RMS 半径具有一 定程度的变化,且通过偏差曲线可知,其变化小于只受 像差影响的几何光线追迹法的变化,可知该方法模拟 的光谱分辨率是衍射效应与像差共同作用的结果,比 几何光线追迹方法更具有优势.



图 7 惠更斯点扩散函数法及光线追迹法仿真的光谱分辨率 及二者相对偏差

Fig. 7 Plots of spectral resolutions by Huygens PSF and ray tracing method and their relative deviation

2.4 SRF 曲线对比

将基于惠更斯点扩散函数仿真得到的光谱响应函 数以对数坐标为纵坐标表示其相对响应,以相对光谱 响应函数中心波长的波长差作为横坐标,获得的曲线 如图 8,图中几何光线追迹获得的光谱响应函数作为 对比也被画出.由图可见,在强度为10-2到1的相对响 应时,本坐标视图中所有的光谱响应函数的轮廓几乎 重合,当相对响应降到10-2时,几何光线追迹获得的光 谱响应函数迅速下降为 0, 而基于惠更斯点扩散函数 的光谱响应函数出现了类似两肩形状的横向延伸,且 随着波长增加其"两肩"逐渐上移. 与该现象相比,几何 光线追迹法获得的光谱响应函数不受波长增加的影 响,在不同波长处其轮廓几乎相同.对基于惠更斯点扩 散函数及几何光线追迹获得的光谱响应函数重合的部 分进行积分,可得在1000 nm 到2500 nm 的光谱范围 内,二者面积的相对偏差从 0.15%增加到 0.34%, 衍 射影响增加.在相对响应小于10-5时,所有波长的光谱 响应函数的横向延伸均收起,之后重合并骤降为0.可 见衍射效应对光谱响应函数的影响最小只到 10⁻⁵ 量 级,且波长越长,影响越大.与上述结果不同,文献[4] 中实验方法获得的光谱响应函数,由于光的散射存在, 在相对强度低于10⁻⁵时再次出现新的横向延伸.基于 惠更斯点扩散函数仿真的光谱响应函数并不包含散射 信息,因此无法仿真出该结果,但在10⁻⁵以上强度时, 与实验结果符合较好.



- 图 8 纵坐标以对数表示的惠更斯点扩散函数及光线追迹 法仿真的光谱响应函数
- Fig. 8 SRFs acquired by Huygens PSF and ray tracing method with logarithmic scale for the y-axis

2.5 仿真准确度估计

本仿真基于离散数值化计算方法,通过等间隔采 样并对每个局部小区间进行独立运算获得光谱响应函 数,最终通过综合各局部信息获得全光谱的离散光谱 分布.仿真过程中产生的不确定度来源主要是采样过 程与坐标映射过程.对于采样过程,文中选取采样间隔 为 0.25 µm,狭缝宽度为 50 µm,在离散化采样造成的 峰值波长偏移为

$$\sigma(\Delta \lambda) = \frac{1}{2} \times \frac{\Delta y}{W_{\text{slit}}} \times \Delta \lambda_{\text{FWHM}} = \frac{1}{2} \times \frac{0.25}{50} \times \Delta \lambda_{\text{FWHM}} \approx$$

坐标映射造成的拟合残差如图 6,优于 0.000 4 nm,则 对设计的光栅光谱仪仿真过程的总不确定度为

$$u_{\text{Total}=} \sqrt{\sigma(\Delta \lambda)^2 + \sigma_{\text{map}}^2} = \sqrt{0.025^2 + 0.0004^2} \approx 0.025 \text{ nm}$$

3 结论

针对色散型光谱仪器设计阶段的光谱分辨能力评 价及辅助光学设计,本文提出了基于惠更斯点扩散函 数的光谱仪器光谱响应函数和光谱分辨率的计算机仿 真方法.基于该方法对一台自行设计的近红外光谱仪 光谱响应函数及光谱分辨率进行仿真,仿真过程产生 的不确定度约为 0.025 nm. 将仿真结果与使用光线追 迹方法获得结果进行对比,结果表明,基于惠更斯点扩 散函数的仿真方法同时包含像差及衍射信息,相比仅 包含像差信息的几何光线追迹方法,可以更好的反映 系统的光谱特性.进一步的对比显示,基于惠更斯点扩 散函数的光谱响应函数仿真可以定量反映相对强度在 10⁻²到 10⁻⁵之间的衍射效应对光谱响应函数的影响, 且结果与实验结果符合良好.随着波长增加,衍射效应 的影响变大,对衍射的分析将不可忽略.基于惠更斯点 扩散函数的光谱响应函数可以实现在设计阶段仿真像 差及衍射影响下光谱仪器的精细光谱响应函数及光谱 分辨率.

参考文献

- KUNZE H J. Introduction to plasma spectroscopy [M]. Heidelberg: Springer 2009, 49-51.
- [2] MOUROULIS P, SELLAR R G, WILSON D W, et al. Optical design of a compact imaging spectrometer for planetary mineralogy[J]. Optical Engineering, 2007, 46(6): 063001.
- [3] SKUPIN J, NOEL S, WUTTKE M W, et al. SCIAMACHY solar irradiance observation in the spectral range from 240 to 2380nm[J]. Advances in Space Research, 2005, 35(3): 370-375.
- [4] HARDER J, THUILLIER G, RICHARD E, et al. The SORCE SIM solar spectrum: comparison with recent observations[J]. Solar Physics, 2010, 263(1): 3-24.
- [5] HARDER J, FONTENLA J, LAWRENCE G, et al. The spectral irradiance monitor: Measurement equations and calibration[J]. Solar Physics, 2005, 230(1): 169-204.
- [6] ZHENG Yu-quan. Precise spectral calibration for hyperspectral imager[J]. Optics and Precision Engineering, 2010, 18(11): 2347-2354.
 郑玉权. 超光谱成像仪的精细光谱定标[J]. 光学精密工程, 2010, 18(11): 2347-2354.
- [7] SUN Xiao-xiao, HUANG Mei-zhen, WANG Yang. Development of miniature cmos fiber optic spectrometer[J]. Acta Photonica Sinica, 2013, 42(1):74-78 孙小小,黄梅珍,汪洋. 面阵 CMOS 光纤光谱仪研制[J]. 光子 学报, 2013, 42(1):74-78
- [8] LI Zhi-wei, XIONG Wei, SHI Hai-liang, et al. Study on laboratory calibration of spatial heterodyne spectrometer[J]. Acta Optica Sinica, 2014, 34(04): 0430002.
 李志伟,熊伟,施海亮,等. 空间外差光谱仪实验室定标技术 研究[J].光学学报, 2014, 34(04): 0430002.
- [9] KUMAR V N, RAO D N. Determination of the instrument function of a grating spectrometer by using white-light interferometry[J]. Applied Optics, 1997, 36 (19): 4535-4539.
- [10] YANG Yi. Spectral calibration technology for imaging

spectrometer[J]. *Infrared*, 2006, **27**(08): 24-26+32. 杨宜. 成像光谱仪光谱定标技术[J]. 红外, 2006, **27**(08): 24-26+32.

[11] PENG Xue-feng, WEI Kai-hua, LIU Yan-ping, et al. Optical system design of czerny-turner spectrometer with high resolution [J]. Acta Photonica Sinica, 2014, 43 (10): 1022003
彭雪峰,魏凯华,刘艳萍,等. 高分辨率 Czerny-Turner 光谱仪

步当噚,残乱平,刈把泙,守. 向方拼举 Czerny-1 unter 元谙仪 光学系统设计[J]. 光子学报, 2014, **43**(10):1022003.

- [12] CHEN Wei, ZHENG Yu-quan, XUE Qing-sheng. Optical system design of airborne wide field-of-view hyperspectral imager[J]. Acta Photonica Sinica, 2014, 43(10): 1022001.
 陈伟,郑玉权,薛庆生. 宽视场航空高光谱成像仪光学系统设计[J]. 光子学报, 2014, 43(10):1022001.
- [13] MOUROULIS P, GREEN R O, CHRIEN T G. Design of pushbroom imaging spectrometers for optimum recovery of spectroscopic and spatial information [J]. Applied Optics, 2000, 39(13): 2210-2220.
- [14] ZHANG Hao, FANG Wei, YE Xin, et al. Design of prism spectrometer with wide spectral coverage for solar spectrum measurement[J]. Acta Optica Sinica, 2013, 33(2): 178-186.
 张浩,方伟,叶新,等. 宽光谱棱镜型太阳光谱仪设计[J]. 光

学学报,2013, **33**(2):178-186. [15] CAO Hai-xia, WU Na, FENG Shu-long, *et al*. Cross-

- [15] CAO Harxia, woo Na, FERO Shirlong, et al. Cross-spectral calibration for monochromator and imaging spectrometer[J]. Optics and Precision Engineering, 2014, 22(10): 2585-2591.
 曹海霞,吴娜,冯树龙,等. 单色仪与成像光谱仪的交互光谱定标[J]. 光学精密工程, 2014, 22(10): 2585-2591.
- [16] ZHANG Hao, FANG Wei, YE Xin, et al. Dual-order overlapped offner imaging spectrometer in middle and long wave infrared regions[J]. Optics and Precision Engineering, 2015, 23(4): 965-974.
 张浩,方伟,叶新,等.中/长波红外双衍射级次共路 Offner 成像光谱仪[J].光学精密工程,2015, 23(4): 965-974.

Foundation item: The National Natural Science Foundation of China (No. 41474161)