

文章编号: 1672-8785(2021)05-0028-05

## 基于温度补偿的光谱仪波长 定标方法研究

吴 威 刘 磊 李志增 张 冰 刘加庆 宋 平 聂建华

(中电科仪器仪表有限公司, 山东 青岛 266555)

**摘 要:** 温度变化时的热胀冷缩会造成光谱仪中光学元件位置的变化, 从而导致波长产生较大的偏移。针对这个问题, 进行了适用于不同温度的波长定标方法研究。提出了一种基于温度补偿的波长定标理论模型与方法。将温度作为变量, 建立了波长、像元位置和温度的三维函数关系理论模型。采用标准汞氩灯进行了定标实验。通过三次多项式曲面拟合确定了多项式的系数, 验证了高低温环境下的定标精度。该方法有效地修正了由温度导致的电荷耦合器件(Charge Coupled Device, CCD)响应值大小的变化和光路中光学元件位置的偏移, 提高了波长校正系数容错能力以及温度变化时的波长精度, 并提升了光谱仪的环境适应性。

**关键词:** 光谱仪; 温度补偿; 波长定标; 曲面拟合

**中图分类号:** TN21 **文献标志码:** A **DOI:** 10.3969/j.issn.1672-8785.2021.05.005

## Research on Wavelength Calibration Method of Spectrometer Based on Temperature Compensation

WU Wei, LIU Lei, LI Zhi-zeng, ZHANG Bing, LIU Jia-qing, SONG Ping, NIE Jian-hua

(China Electronics Technology Instruments Co., Ltd., Qingdao 266555, China)

**Abstract:** When the temperature changes, the position of optical elements in the spectrometer will change due to hot expansion and cold contraction, resulting in a large deviation of wavelength. In response to this problem, the wavelength calibration method suitable for different temperatures was studied. A method of wavelength calibration based on temperature compensation was proposed, using temperature as a variable to establish a theoretical model of three-dimensional functional relation between wavelength, pixel position and temperature. A standard mercury-argon lamp was used for calibration experiments. The coefficients of the polynomials were determined by cubic polynomial surface fitting, which verified the calibration accuracy under high and low temperature environments. This method can effectively correct the change of charge coupled device response and the deviation of optical path structure caused by temperature, improve the fault tolerance of wavelength correction coefficient and the wavelength accuracy when the temperature changes, and improve the environmental adaptability of the spectrometer.

**Key words:** spectrometer; temperature compensation; wavelength calibration; surface fitting

收稿日期: 2020-12-18

作者简介: 吴威(1988-), 男, 安徽六安人, 工程师, 硕士, 主要从事光电探测技术研究。

E-mail: wu3944387@163.com

## 0 引言

微型光谱仪通常采用固定式光栅与线阵 CCD 探测器相结合的原理。光信号经光栅分光后,分布在线阵 CCD 光敏面上。但由于环境因素,光谱带并不均匀分布在线阵 CCD 光敏面上。因此,需要对光波长与探测器像元位置进行精确标定,即确定像元与波长的对应关系<sup>[1]</sup>。温度是影响光谱仪指标的一个重要因素。温度变化导致的热胀冷缩,会使光学元件的位置发生变化,从而影响整个光路结构以及光谱仪的波长精度<sup>[2]</sup>。

传统的波长定标方法利用多组已知特征波长与像元位置,先拟合出波长与像元关系的函数曲线,然后将所有像元代入公式,得到每个像元对应的波长。但现有的波长定标方法都是在一定温度下进行的。通常在常温下定标好的光谱仪的波长准确度等性能指标,容易受温度变化的影响,对温度的适应性较差<sup>[3]</sup>。

因此,本文提出了一种基于温度补偿的光谱仪波长定标方法。将温度作为定标参数,建立理论模型,并进行试验和数据分析。该方法有效地修正了由温度环境因素导致的 CCD 响应值变化和光路中光学元件位置的偏移,保证了谱线位置在波长坐标上的准确度,提高了光谱仪的环境适应性,从而使光谱仪可以适应各种复杂环境。

## 1 基本原理

线阵 CCD 式光谱仪采用固定光栅进行衍射分光,主要由分光模块、数据采集模块、控制与分析模块组成,如图 1 所示。入射光经过分光模块后达到线阵 CCD 像元表面,光信号将会被转换成模拟电信号;该信号经放大、滤波及模数转换后变换成数字电信号,现场可编程门阵列(Field-Programmable Gate Array, FPGA)用于控制模数转换电路进行采样以及产生 CCD 驱动时序;数据上传上位机后,进行光谱数据的实时显示与分析处理。

分光模块采用基于切尔尼-特纳(Czerny-Turner, C-T)结构的光路方案,如图 2 所示。

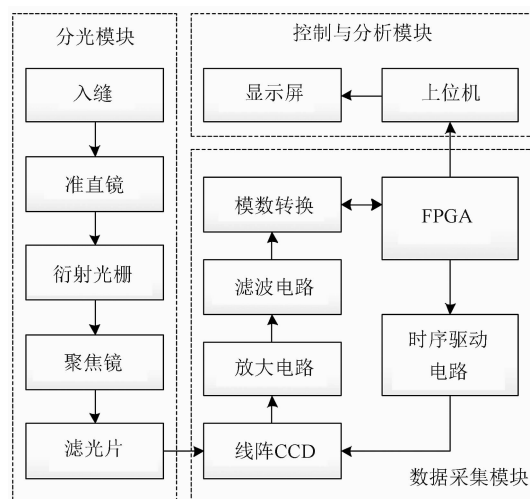


图 1 光谱仪的原理框图

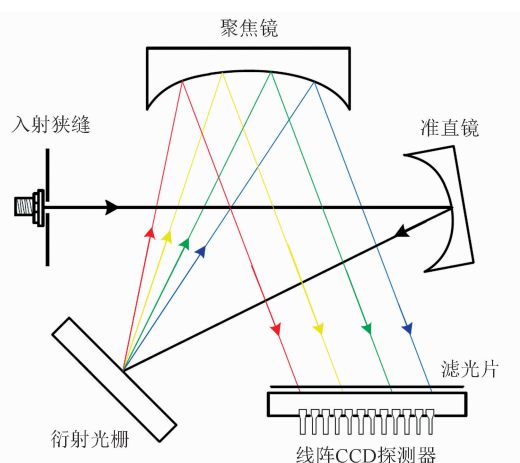


图 2 基于折叠 C-T 结构的光路

其准直镜和聚焦镜的曲率中心重合,能有效避免二次衍射以及多次衍射,因此具有较高的分辨率和较少的杂散光,并且加工简单、装调方便<sup>[4-5]</sup>。使用线阵 CCD 探测器在成像谱面上采集光谱信号,并在 CCD 探测器表面窗镜上镀制消二级光谱薄膜,以有效抑制二级光谱<sup>[6]</sup>。

光谱仪所测得的光谱曲线是由分光模块的特性与 CCD 像元之间的相对位置决定的。因此,需要确定每个 CCD 像元所对应的标准波长值,从而确定所测光谱曲线的波长准确性<sup>[7]</sup>。而波长标定就是要确定探测器各像元与标准波长的对应关系。图 3 为光谱波长定标实验系统的示意图。测得特征谱线峰值所对应的探测器像元编号,进行多项式拟合,确定波长与像元的关系<sup>[8]</sup>。

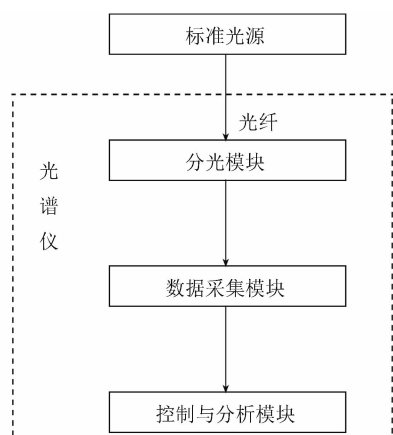


图 3 光谱波长定标实验系统的示意图

## 2 基于温度补偿的波长定标方法

在高低温环境下，分光模块中光学元件的位置因热胀冷缩产生变化。所以在波长标定时，除了要考虑光谱波长在探测器像元的非线性分布误差之外，还需要考虑温度造成的波长漂移。本文提出了一种基于温度修正的光谱仪波长定标方法。针对温度造成的光谱分布误差，将温度作为定标变量，因此光源特征峰波长与温度、对应像元位置的关系为

$$\lambda(x, T) = a_0(T) + a_1(T)x + a_2(T)x^2 + \dots + a_n(T)x^n \quad (1)$$

式中， $x$  为探测器的像元序号， $T$  为温度变量， $n$  为多项式阶数， $\lambda(x, T)$  为第  $x$  个像元对应的波长值。本文中， $\lambda(x, T)$  受光谱分布误差和温度的共同影响。因此，本文提出的基于温度补偿的波长定标方法，就是确定波长、探测器像元和温度的三维函数关系。

选择具有多个特征谱线的光源，能够覆盖波长范围  $[\lambda_L, \lambda_H]$ ，以便选取较多的定标点，从而提高拟合精度。然后将光谱仪放置在可设置温度的高低温环境箱内。温度调节范围为  $[T_L, T_H]$ ，变化量为  $\Delta T = (T_H - T_L) / (M - 1)$ ，其中  $M$  为温度校准点数，如图 4 所示。 $\Delta T$  越小，精度越高，温度适应性也就越强。

根据不同温度下已知特征谱线标准波长与 CCD 上响应对应像元的位置，建立基于温度补偿的多项式关系：

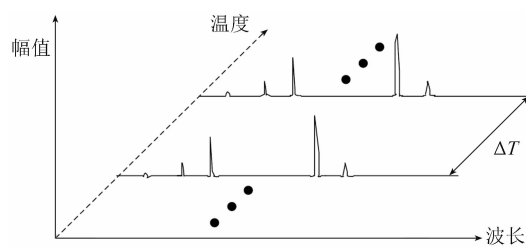


图 4 特征谱线与温度设定

$$\begin{bmatrix} \lambda(x, T_1) \\ \lambda(x, T_2) \\ \vdots \\ \lambda(x, T_M) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_0(T_1) & a_1(T_1) & \dots & a_n(T_1) \\ a_0(T_2) & a_1(T_2) & \dots & a_n(T_2) \\ \dots & \dots & \ddots & \vdots \\ a_0(T_M) & a_1(T_M) & \dots & a_n(T_M) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ x \\ x^2 \\ \vdots \\ x^n \end{bmatrix} \quad (2)$$

可以看到，波长与像元关系的多项式系数与温度相关，并且随温度的变化而连续变化。因此，本文拟合波长、探测器像元和温度的三维函数关系时所采用的三次多项式曲面拟合方法为

$$\lambda(x, T) = c_0 + c_1x + c_2T + c_3x^2 + c_4xT + c_5T^2 + c_6x^3 + c_7x^2T + c_8xT^2 + c_9T^3 \quad (3)$$

式中， $c_0 \sim c_9$  为多项式系数。根据不同温度下的多组波长与对应像元数据，利用最小二乘法求解式(3)中的  $c_0 \sim c_9$ ，得到波长定标曲面，最终确定像元位置、波长、温度的三者关系，如图 5 所示。

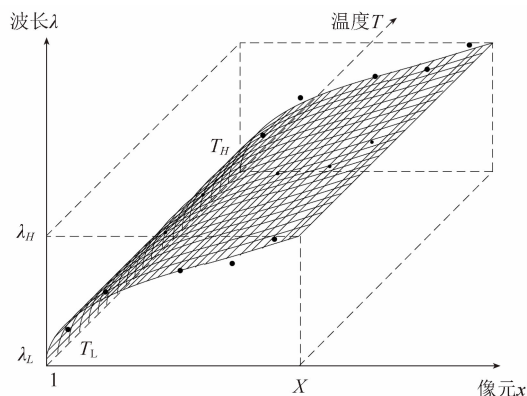


图 5 波长定标曲面的示意图

## 3 实验结果与分析

本文选用的定标光源是汞氙灯，其发射特

征谱线覆盖 253~1700 nm (可见光至近红外波段)<sup>[9]</sup>。定标流程(见图 6)如下:

(1)定标开始时,将光谱仪置于温度箱中,并设置  $T=T_L$ 。每个温度点定标结束以后,温度依次增加  $\Delta T$ 。

(2)进行波长定标时,接入标准光源,然后选择对应的温度定标点  $T$ ,并记录温度  $T$  下的特征谱线峰值波长所对应的像元位置。

(3)判断所有温度点是否都已测试过,如是,则结束温度定标的循环,进入曲面拟合过程;如否,则增加温度  $\Delta T$ ,继续进行。

(4)进行三次多项式的曲面拟合,拟合出波长定标曲线  $\lambda(x, T)$ ,得到多项式系数  $c_0 \sim c_9$ ,从而完成了基于温度补偿的波长定标。

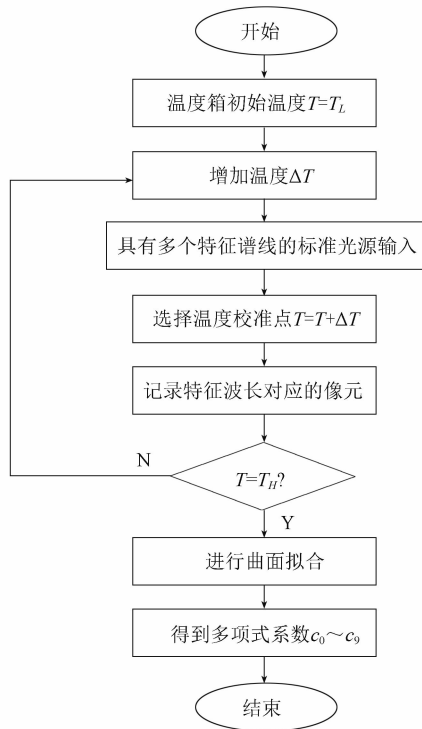


图 6 波长定标的流程图

本文的光谱仪波长范围为 350~1000 nm,线阵 CCD 探测器的像元总数为 3648 个。波长定标时,均匀选取汞氩灯的特征谱线。试验中选取了 365.02 nm (Hg)、435.83 nm (Hg)、546.07 nm (Hg)、763.51 nm (Ar)和 965.78 nm (Ar)。温度范围为 0 °C~40 °C,温度变化间隔设置为 10 °C。表 1 列出了不同温度下标准波长所对应的探测器像元位置。

采用基于最小二乘法的三次多项式拟合方法求解多项式系数,得到  $c_0 = 343.1$ ,  $c_1 = 0.1935$ ,  $c_2 = -0.06109$ ,  $c_3 = 3.352 \times 10^{-6}$ ,  $c_4 = 4.15 \times 10^{-5}$ ,  $c_5 = 1.083 \times 10^{-4}$ ,  $c_6 = -3.889 \times 10^{-10}$ ,  $c_7 = -1.626 \times 10^{-9}$ ,  $c_8 = -2.01 \times 10^{-7}$ ,  $c_9 = 6.522 \times 10^{-6}$ 。拟合后的均方根 RMSE=0.2012,拟合曲面如图 7 所示。

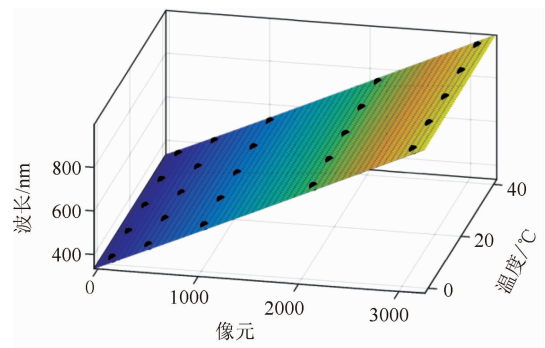


图 7 基于温度补偿的拟合曲面

对波长定标完成后的光谱仪进行测试。分别在低温 0 °C 和高温 40 °C 下测量了定标后光谱仪的测试峰值波长,并将其与标准波长进行了差值计算,得到了表 2 中的波长误差。

可以看出,在 0 °C 和 40 °C 下,光谱仪测到的峰值点位置 365.02 nm、435.83 nm、546.07 nm、763.51 nm、965.78 nm,与标准波长的偏差在 0.17 nm 以内。而只进行波长与

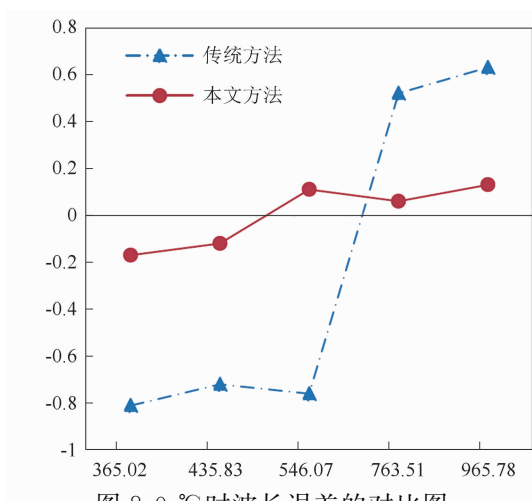
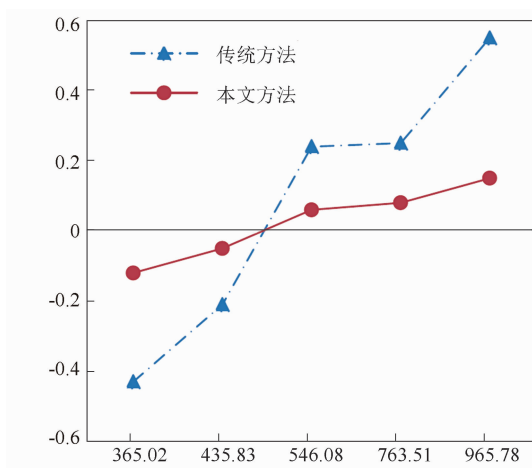
表 1 不同温度下的波长及相应像元位置

温度/°C	标准波长/nm				
	365.02	435.83	546.07	763.51	965.78
0	114	476	1031	2116	3111
10	116	478	1033	2115	3109
20	118	480	1035	2113	3107
30	120	482	1036	2112	3105
40	121	483	1036	2110	3104

表 2 高低温下波长误差的对比

测试波长/nm		365.02	435.83	546.07	763.51	965.78
$T=0\text{ }^{\circ}\text{C}$	曲线拟合误差/nm	-0.81	-0.72	-0.76	0.52	0.63
	曲面拟合误差/nm	-0.17	-0.12	0.11	0.06	0.13
$T=40\text{ }^{\circ}\text{C}$	曲线拟合误差/nm	-0.43	-0.21	0.24	0.25	0.55
	曲面拟合误差/nm	-0.12	-0.05	0.06	0.08	0.15

像元位置曲线拟合定标的光谱仪的最大波长偏差达到 0.81 nm。图 8 和图 9 是基于温度补偿的曲面拟合方法与传统曲线拟合方法的对比图。在  $0\text{ }^{\circ}\text{C}$  和  $40\text{ }^{\circ}\text{C}$  时, 本文方法在全光谱范围内的误差均能控制在很小的范围内。因此, 引入温度变量后, 波长精度得到了明显改善。

图 8  $0\text{ }^{\circ}\text{C}$  时波长误差的对比图图 9  $40\text{ }^{\circ}\text{C}$  时波长误差的对比图

#### 4 结论

波长定标是光谱仪研制过程中极其重要的部分, 定标精度决定了波长的准确度。本文提出的基于温度补偿的波长定标方法将温度因素

引入到波长校准曲线中; 针对温度设定, 选择温度变化范围和步距, 然后记录不同温度下特征峰值对应的像元位置, 并进行波长、像元、温度的曲面拟合, 计算出三次拟合的多项式系数。对定标完的光谱仪进行了验证。结果表明, 在  $0\text{ }^{\circ}\text{C}$  和  $40\text{ }^{\circ}\text{C}$  下, 波长精度得到了明显提升。因此, 通过引入温度变量来对波长进行复杂定标, 提高了光谱仪在高低温下的稳定性。下一步将继续优化三次多项式曲面拟合方法, 使拟合误差更小, 从而进一步提高波长定标精度。

#### 参考文献

- [1] 毛京京. 可见光-近红外微型光谱仪关键技术研究 [D]. 成都: 电子科技大学, 2020.
- [2] 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.
- [3] 鞠军委, 聂建华, 张志辉, 等. 线阵 CCD 紫外光谱仪的波长定标研究 [J]. 红外, 2017, 38(6): 24-29.
- [4] 王俊. 智能微型近红外光纤光谱仪研制 [D]. 上海: 复旦大学, 2011.
- [5] 杜杉, 张国玉, 韩欣欣, 等. 宽光谱高分辨率光谱分析系统设计 [J]. 激光与光电子学进展, 2019, 56(8): 083003.
- [6] 宫兴致. 宽波段微型光谱仪设计及其应用系统 [D]. 杭州: 浙江大学, 2011.
- [7] 马艳, 夏果, 黄禅, 等. 一种简单精确的 CCD 阵列光谱仪波长定标方法 [J]. 红外与激光工程, 2018, 47(S1): 147-153.
- [8] 崔继承, 朱继伟, 崔弘, 等. 基于元素灯的多通道光谱仪定标研究 [J]. 激光与红外, 2019, 49(5): 584-588.
- [9] 刘康. 微型光谱仪关键技术及其应用研究 [D]. 杭州: 浙江大学, 2013.