

文章编号 1004-924X(2016)06-1242-06

中阶梯光栅光谱仪自动化波长提取算法

崔继承¹, 张锐^{1,2*}, 杨晋^{1,2}, 撒芃芃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: 基于质心提取的线性拟合法, 提出了一种自动化快速处理中阶梯光栅光谱仪谱图的方法, 解决了中阶梯光栅光谱仪无法直接通过交叉色散形成的二维光谱图标定入射光波长的问题。根据中阶梯光栅光谱仪光谱图背景光的分布特点, 采用背景扣除法处理光谱图, 提高了后续光谱图光斑提取算法的运算效率。利用基于质心的曲线拟合中心定位算法, 将光斑位置的提取精度提高到亚像素量级。建立了中阶梯光栅光谱仪理论谱图与实际二维谱图的自动匹配模型, 并根据光栅的线性色散特性, 采用插值法计算谱图还原模型中未列出的坐标位置处的波长。实验结果表明: 该算法对整个谱图的处理时间不超过 3 s, 波长提取精度达 10^{-2} nm, 不仅实现了中阶梯光栅光谱仪波长的自动化提取, 还提高了波长提取精度。

关键词: 中阶梯光栅光谱仪; 二维光谱图; 波长提取; 质心提取; 自动匹配

中图分类号: TH744.1 **文献标识码:** A **doi:** 10.3788/OPE.20162406.1242

Wavelength calibration algorithm for echelle spectrograph

CUI Ji-cheng¹, ZHANG Rui^{1,2*}, YANG Jin^{1,2}, HAN Peng-peng¹

(1. *Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics, Chinese Academy of Sciences, Changchun 130033, China;*
2. *University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China*)
* *Corresponding author, E-mail: zhangrui_grating@163.com*

Abstract: An automatic algorithm to rapidly process the spectrogram of the echelle grating spectrometer was proposed based on the linear fitting method of centroid extraction, solving the problem that the echelle grating spectrometer can not calibrate wavelength of incident rays through the two-dimensional spectrogram which was formed by cross dispersion. The background correction method is adopted to process the spectrogram based on the distribution characteristics of background light of the spectrogram of echelle grating spectrometer, thereby the calculation efficiency of the optical spot extraction algorithm of the follow-up spectrogram of echelle grating spectrometer was improved. The curve fitting center positioning algorithm based on centroid was employed to improve the extraction precision of the optical spot position to the sub-pixel magnitude. The auto-match model of the theoretical spectrogram of echelle grating spectrometer and the actual two-dimensional spectrogram were es-

收稿日期: 2016-01-21; 修订日期: 2016-03-10.

基金项目: 国家重大科学仪器设备开发专项 (No. 2014YQ120351); 国家重大科研装备研制项目 (No. ZDYZ2008-1); 吉林省科技发展计划资助项目 (No. 20140203011GX)

tablished and the method of interpolation was adopted to calculate the wavelength at the coordinate position, which is not listed in the recovery model of the spectrogram based on the linear dispersion characteristics of optical grating. The result shows that: the processing time of the whole spectrogram by this algorithm does not exceed 3 s and the wavelength extraction precision is up to 10^{-2} nm, not only achieving the automatic wavelength extraction of the echelle grating spectrometer but also improving the wavelength extraction precision.

Key words: echelle grating spectrometer; two-dimensional spectrogram; wavelength extraction; centroid extraction; auto-match

1 引 言

作为中阶梯光栅光谱仪的主色散元件,中阶梯光栅是具有高光谱分辨率、高衍射效率、全波段闪耀等优点的低刻线密度光栅^[1]。与传统光谱仪器相比,中阶梯光栅光谱仪具有体积小、分辨率高、全谱瞬态直读^[2-5]等特点,不仅代表着先进光谱仪器的发展方向,还是光谱仪器研究领域中的主要研究内容之一。但是,由于探测器发展水平及谱图处理技术的限制,直至二十世纪九十年代,中阶梯光栅光谱仪才开始得到广泛的研究。目前,中阶梯光栅光谱仪在物质探测、环境检测、宇宙探索等领域都有很广阔的应用前景^[6-9],所以其研究已经向产业化的方向发展。

然而,中阶梯光栅通常工作在高衍射级次状态下,色散后会出现严重的级次重叠现象,无法进行光谱识别与分析。为了分开重叠级次,在其后端需要放置低色散横向分光元件(光栅或棱镜)进行交叉色散^[10-15]。所以,中阶梯光栅光谱仪会得到不同于一般光谱仪的二维谱图,该光谱图无法直接标定入射光波长。因此,二维谱图处理技术的研究是中阶梯光栅光谱仪的重要研究内容之一,也是实现中阶梯光栅光谱仪产业化的先决条件。目前,国外对于中阶梯光栅光谱仪的研究已经较为成熟,而国内的相关研究却起步较晚。其中,北京电子科技职业学院^[11]、天津大学^[13]、国家天文台南京天文光学技术研究所^[15]等科研单位对光谱仪的光学设计进行了仿真分析;长春光机所则对中阶梯光栅光谱仪的光机系统设计和二维谱图处理算法进行了比较深入的研究。陈少杰等人^[16]通过建立谱图还原数据模型,得到了中阶梯光栅光谱仪中波长与像元位置之间的关系。何森^[17]和尹禄^[18]等人在此基础上分别提出了两种

不同的光斑信息提取思路,即质心提取算法及有效波长提取算法。但是,他们都只建立了单像元位置与波长之间的关系,将波长提取精度停留在一个像素上,并未报道后续真实谱图与理论还原模型的匹配。本文提出了一种基于质心提取的线性拟合法(插值法),自动一体化地完成了从谱图光斑位置信息提取到特征光斑波长标定等一系列工作。该算法可快速、精确地完成中阶梯光栅光谱仪的波长提取,并满足中阶梯光栅光谱仪谱图处理技术的要求。

2 中阶梯光栅光谱仪

2.1 中阶梯光栅光谱仪结构

如图 1 所示,本文的中阶梯光栅光谱仪采用 Czerny-Turner(C-T)结构,光栅作为主色散元件,完成光线在 Y 方向上的色散,而为了消除光栅色散所带来的严重级次重叠,后端棱镜在 X 方向上对光线进行交叉色散。最终,会聚镜将色散之后的光线会聚于面阵 CCD 靶面上,得到二维光谱图像。图 2 为汞灯的中阶梯光栅光谱仪谱图。

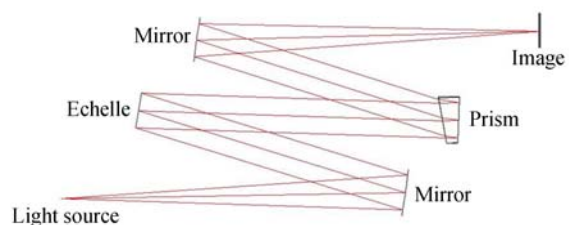


图 1 中阶梯光栅光谱仪及其切尼-特纳对称结构示意图
Fig. 1 Schematic diagram of echelle spectrograph and C-T systemic structure

2.2 中阶梯光栅光谱仪谱图还原

中阶梯光栅光谱仪得到的谱图数据的矩阵表

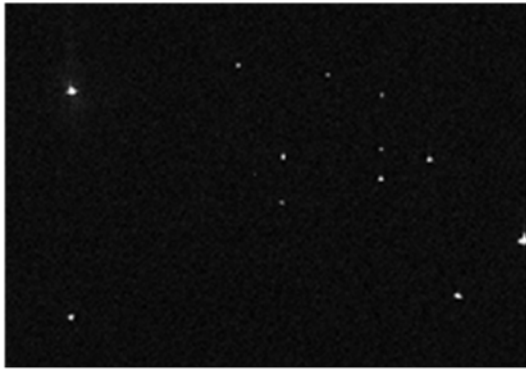


图 2 中阶梯光栅光谱仪 Hg 灯谱图

Fig. 2 Spectrum of Hg lamp in echelle spectrograph

达式为:

$$\mathbf{I}_{x,y} = \begin{bmatrix} I_{X_1 Y_1} & I_{X_1 Y_2} & \cdots & I_{X_1 Y_q} \\ I_{X_2 Y_1} & I_{X_2 Y_2} & \cdots & I_{X_2 Y_q} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ I_{X_p Y_1} & I_{X_p Y_1} & \cdots & I_{X_p Y_q} \end{bmatrix}. \quad (1)$$

该矩阵的行列数分别对应于面阵 CCD 靶面上的整像元坐标,矩阵中的值代表各像元位置上的光斑强度。二维谱图无法直接提取入射光所含波长,需要将它还原为一维光谱信息。通过分析光谱仪的结构特点及交叉色散特性,可以建立中阶梯光栅光谱仪的谱图还原模型。该模型的矩阵表达式为:

$$\lambda_{x,y} = \begin{bmatrix} \lambda_{X_1 Y_1} & \lambda_{X_1 Y_2} & \cdots & \lambda_{X_1 Y_q} \\ \lambda_{X_2 Y_1} & \lambda_{X_2 Y_2} & \cdots & \lambda_{X_2 Y_q} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \lambda_{X_p Y_1} & \lambda_{X_p Y_1} & \cdots & \lambda_{X_p Y_q} \end{bmatrix}. \quad (2)$$

该矩阵的行列数分别对应于面阵 CCD 靶面上的整像元坐标,矩阵中的值代表该位置处的波

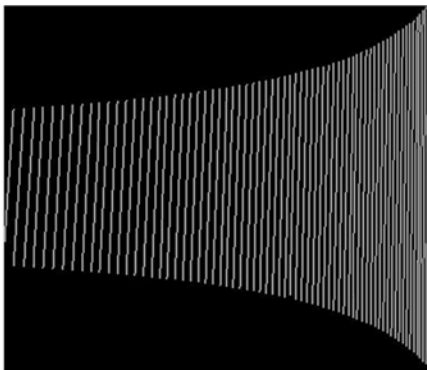


图 3 谱图还原算法模型图

Fig. 3 Model image of spectral retrieval algorithm

长。因此,由该矩阵可得到整个像面对应面阵 CCD 的 X 轴和 Y 轴坐标位置与各波长的对应关系。二维谱图还原模型如图 3 所示。

结合 $\mathbf{I}_{x,y}$ 与 $\lambda_{x,y}$ 矩阵,可获得面阵 CCD 谱图上光斑位置所对应的光线波长。因此光斑位置的快速、准确提取,以及根据谱图还原模型精确提取波长成为中阶梯光栅光谱仪光谱信息处理技术的主要研究内容之一。

3 中阶梯光栅光谱仪波长的精确提取

3.1 光斑位置信息的精确提取

谱图信号光斑位置的精确提取是中阶梯光栅光谱仪波长精确提取的前提条件,而传统谱图光斑位置提取的方法是直接寻找信号光斑灰度值最大处的像素位置坐标,它的最小分辨率为一个像元,但是该精度早已不能满足实际测量需要。因此,将光斑位置信息提取精度提高到亚像素量级变得尤为重要。而基于质心的曲线拟合中心定位算法认为光斑灰度图像中的重心为光斑能量拟合曲线的峰值位置,它不再被 CCD 整像元分辨率限制,可将计算精度提高到亚像元量级。但是,该定位算法的运算数据量很大,运算速度相对缓慢;并且背景光的数据常常满足该算法的判断条件,最终导致光斑位置信息提取错误从而降低稳定性。为避免上述问题,在提取中阶梯光栅光谱仪谱图的光斑位置信息前先对光谱图进行预处理,消除背景光对该算法的影响。因此,根据中阶梯光栅光谱仪的光谱图背景光灰度值选择合适的谱图阈值,将谱图中大于等于阈值的灰度值设为 1,小于阈值的灰度值定为 0,建立二值化矩阵 $\mathbf{A}_{x,y}$ 。将数据矩阵 $\mathbf{I}_{x,y}$ 与二值化矩阵 $\mathbf{A}_{x,y}$ 取交集,获得去除背景光的新的数据矩阵 $\mathbf{I}'_{x,y}$,该矩阵中有效位置的光强值不会改变。对 $\mathbf{I}'_{x,y}$ 不为零的区域进行质心提取运算,此时,该算法在减少数据量增加计算速度的同时还避免了无效点的提取。由此可得到具有亚像素定位精度的有效光斑位置坐标。

$$X_m = \frac{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n X_i I'(X_i, Y_j)}{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n I'(X_i, Y_j)}, \quad (3)$$

$$Y_m = \frac{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n Y_i I'(X_i, Y_j)}{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n I'(X_i, Y_j)}, \quad (4)$$

其中: X_i 和 Y_j 是不为零区域内的任意点坐标, $I'(X_i, Y_j)$ 为 (X_i, Y_j) 点处的光斑强度。 (X_m, Y_m) 即为提取出的光斑位置坐标。经过背景光去除的质心提取算法的运算速度快且稳定性较好,可精确提取出光斑位置信息。

3.2 中阶梯光栅光谱仪波长的精确提取

仅精确提取中阶梯光栅光谱仪谱图的光斑位置信息是无法实现谱图中波长的提取,还需要将提取出的光斑位置信息与上述的谱图还原模型相匹配。因此,本文研究了一种既可以实现光斑质心在亚像素量级上的提取,又能自动化完成光斑位置信息与谱图还原模型波长匹配的算法。中阶梯光栅光谱仪谱图还原模型如图 3 所示,横向为棱镜色散方向即 X 方向,纵向为光栅色散方向即 Y 方向。其中 X, Y 坐标值都为整数,相应 X, Y 坐标位置处的值为波长值,零值表示理论上不会有任何波长的光斑落在该位置上。

由光栅和棱镜的色散特点可知,光栅色散率较棱镜色散率大,棱镜的色散能力与其在不同波长处的折射率有关,因此,棱镜在短波处的色散能力最强。通过棱镜色散规律可计算出其分辨率可达 0.16 nm 。当波长值间隔小于等于 0.16 nm 时,不同波长拥有同一 X 坐标,因此,建立的自动匹配模型在 X 方向上只需要完成质心提取的 X 坐标值与谱图还原模型 X 坐标值的匹配;在 Y 方向上需要在完成有效点的寻找与匹配的同时,计算出 Y 坐标在亚像素量级上对应的值。光栅的色散是线性的,所以可通过线性拟合插值法得到亚像素量级上对应的波长值,完成亚像素量级的波长提取。

综上,本文提出的通过自动匹配及线性拟合完成亚像素量级波长提取的具体步骤为:①利用上述质心提取算法提取出信号光斑的位置坐标 (X_m, Y_m) ;②将提取出的 Y_m 坐标取整为 Y_0 ;③在谱图还原模型中相应 Y_0 坐标下寻找与 X_m 坐标最接近的有效点整数坐标 X_0 ,该整数坐标 X_0 为有效光斑的 X 坐标;④对 Y_m 上下取整分别得到坐标 Y_{ceil} 及 Y_{floor} ;⑤在谱图还原模型中确定相应

坐标为 (X_0, Y_{ceil}) 及 (X_0, Y_{floor}) 的波长值;⑥利用插值法计算出 (X_0, Y_m) 坐标下对应的波长值。

计算公式如下:

$$\frac{Y_{\text{ceil}} - Y_m}{Y_m - Y_{\text{floor}}} = \frac{\lambda_{\text{ceil}} - \lambda_m}{\lambda_m - \lambda_{\text{floor}}}, \quad (5)$$

$$\lambda_m = \frac{(Y_m - Y_{\text{floor}}) \times \lambda_{\text{ceil}} + (Y_{\text{ceil}} - Y_m) \times \lambda_{\text{floor}}}{Y_{\text{ceil}} - Y_{\text{floor}}}, \quad (6)$$

其中: Y_m 为质心提取出的有效光斑 Y 的坐标位置值; Y_{ceil} 与 Y_{floor} 为 Y_m 向下向上取整得到的坐标值; λ_{ceil} 与 λ_{floor} 为光斑位置坐标为 (X_0, Y_{ceil}) 与 (X_0, Y_{floor}) 时的波长值; λ_m 为 (X_0, Y_m) 坐标下的波长值,即在亚像素量级上提取出的特征光斑对应的波长值。所以通过上述步骤可在亚像素量级上计算出谱图特征光斑对应的波长值。

4 实验及结果分析

利用本课题组自主研发的中阶梯光栅光谱仪拍摄 Bi 灯和 Se 灯的元素光谱,并采用本文提出的质心提取算法提取出光斑谱图,分别如图 4 与图 5 所示。采用该方法可准确地提取出光谱图中的光斑信息,提取时间不超过 2 s ,实现了全谱瞬态提取。

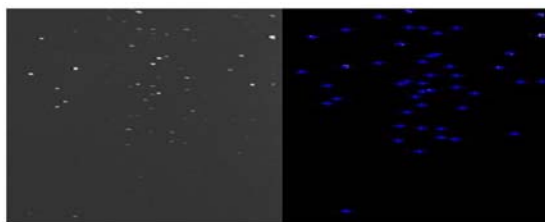


图 4 中阶梯光栅光谱仪 Bi 灯谱图及质心提取谱图
Fig. 4 Spectra of Bi lamp(left) and centroid extraction(right) captured by echelle spectrograph

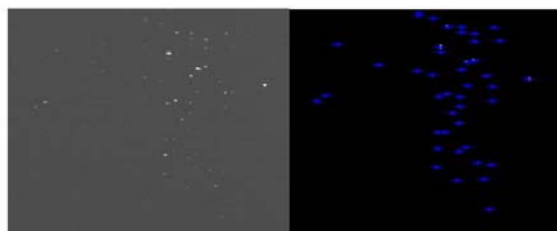


图 5 中阶梯光栅光谱仪 Se 灯谱图及质心提取谱图
Fig. 5 Spectra of Se lamp(left) and centroid extraction(right) captured by echelle spectrograph

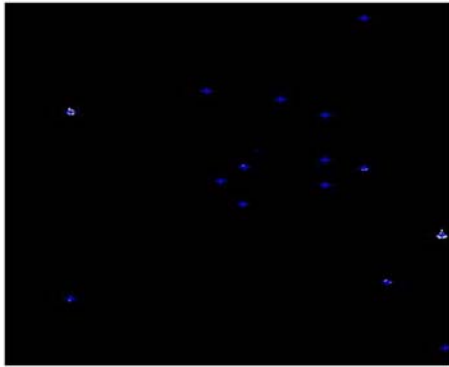


图 6 中阶梯光栅光谱仪 Hg 灯质心提取谱图

Fig. 6 Spectra of Hg lamp with centroid extraction captured by echelle spectrograph

这里利用 Hg 灯标准谱图来验证基于自动匹配及线性拟合的波长提取精度。中阶梯光栅光谱仪拍摄的汞灯标准谱图如图 1 所示,质心提取算法提取出的 Hg 灯光斑谱图如图 6 所示。各光斑波长的提取精度如表 1 所示。

表 1 波长提取精度

Tab. 1 Accuracies of wavelength calibration (nm)

标准波长	提取波长	波长提取误差
253.652	253.655 4	3.4×10^{-3}
296.728	296.7192	8.8×10^{-3}
312.567	312.567 6	6×10^{-4}
313.155	313.164 4	1.39×10^{-2}
365.015	365.018 0	3×10^{-3}
404.656	404.659 3	3.3×10^{-3}
435.833	435.850 6	1.76×10^{-2}
546.075	546.094 6	1.96×10^{-2}

参考文献:

- [1] FURXHI O, MARKS D L, BRADY D J. Echelle crossed grating millimeter wave beam scanner[J]. *Optics Express*, 2014, 22(13):16393-16407.
- [2] BYKOV S V, SHARMA B, ASHERBYKOV S A. High-throughput, High-resolution echelle deep-UV raman spectrometer[J]. *Applied Optics Spectroscopy*, 2013, 67(8): 873-883.
- [3] KORABLEV O, MONTMESESSIN F, TROKHI-MOVSKY A. Compact echelle spectrometer for occultation sounding of the Martain atmosphere: design and performance[J]. *Applied Optics*, 2013, 52(5): 1054-1065.

该方法匹配模型并计算波长的时间不超过 1 s, 计算精度可达 10^{-2} nm。因此, 本文方法在处理中阶梯光栅光谱仪谱图时, 可自动一体化地完成谱图去噪、信号光斑位置提取以及特征光斑波长匹配等一系列工作, 并且整个运算时间不超过 3 s。

5 结 论

本文提出了一种基于质心提取的快速处理中阶梯光栅光谱仪谱图的方法。首先, 采用背景去除算法对中阶梯光栅光谱仪谱图进行背景去除, 提高整个谱图处理算法的运算速度, 避免无效点提取对后续计算的干扰。然后, 将处理过的谱图进行精确的质心提取, 提取出精度达亚像素量级的光斑位置信息。根据中阶梯光栅光谱仪谱图还原模型与实际 CCD 谱图一一对应的特点, 建立了自动匹配模型, 将提取的光斑位置信息与已建立的谱图还原模型相匹配。最后, 根据光线沿光栅方向的色散是线性的, 通过线性拟合计算出整像元之间亚像元位置上所对应的波长值。实验结果表明, 全波段波长的提取时间不超过 3 s, 波长提取精度达到了 10^{-2} nm。本文方法在提高波长计算精度的同时, 实现了中阶梯光栅光谱仪波长提取的自动一体化。

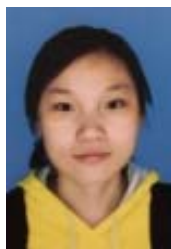
- [4] WOOD M P, LAWLER J E. Aberration-corrected echelle spectrometer for measuring ultraviolet branching fractions of ion-group ions[J]. *Applied Optics*, 2012, 51(35): 8407-8412.
- [5] STOCKETT M H, WOOD M P, NAGARAJAN S, et al.. Echelle spectrograph optimized for a diffuse interstellar band carrier search using synchrotron radiation[J]. *Applied Optics*, 2008, 47(29): 5390-5393.
- [6] ZHOU Y T, WU X H, WANG L, et al.. High resolution spectrograph R4 echelle for LAMOST[J]. *SPIE*, 2004, 5492:401-409.
- [7] PORTER M J. Spectroscopy on small telescopes:

- the echelle spectrograph [J]. *Astrophysics and Space Science*, 2000, 273(1-4):217-224.
- [8] SAKANOI T, KASABAAA Y, KAGITANIA M, *et al.*. Development of infrared echelle spectrograph and mid-infrared heterodyne spectrometer on a small telescope at Haleakala, Hawaii for planetary observation[J]. *SPIE*, 2014, 9147(91478D): 1-13.
- [9] REYNOLDS R O, LEE D. Adapting a very high resolution echelle spectrograph to an 8 meter class telescope[J]. *SPIE*, 2014, 9147(91477X):1-10.
- [10] 宁春丽, 齐向东, 陈少杰. 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 CH L, QI X D, CHEN SH J. Optical design and performance analysis of light and small echelle spectrograph[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2012, 32(12):3406-3410. (in Chinese)
- [11] 张瑜峰, 武建芬, 朱青松. 二维全谱高分辨中阶梯光谱仪光学系统设计[J]. *光学学报*, 2015, 35(4): 0422005.
ZHANG Y F, WU J F, ZHU Q S. Optical design of high resolution two dimension echelle spectrometer [J]. *Acta Optica Sinica*, 2015, 35(4): 0422005. (in Chinese)
- [12] 唐玉国, 宋楠, 巴音贺希格. 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. Optical design of cross-dispersed echelle spectrograph [J]. *Opt. Precision Eng.*, 2010, 18(9): 1989-1995. (in Chinese)
- [13] 张尹馨, 杨怀栋, 邓超. 高分辨率中阶梯光栅-棱镜交叉色散光路设计[J]. *光谱学与光谱分析*, 2013, 33(6):1706-1710.
ZHANG Y X, YANG H D, DENG CH. Optical design of high-resolution echelle-prism cross-dispersion[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2013, 33(6):1706-1710. (in Chinese)
- [14] XU L, DAVENPORT M A, TURNER M A, *et al.*. Compressive echelle spectroscopy [J]. *SPIE*, 2011, 8165(81650E):1-13.
- [15] 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, 18(5):442-447.
WU X H, ZHU Y T, WANG L. Optical design of high resolution echelle spectrograph [J]. *Opt. Precision Eng.*, 2003, 18(5):442-447. (in Chinese)
- [16] 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: 长春光学精密机械与物理研究所, 2013.
CHEN SH J. *Method for Wide Spectral Coverage Echelle Spectrograph Design and Calibration* [D]. Changchun: Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics, 2013. (in Chinese)
- [17] 何森, 唐玉国, 陈少杰. 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 SH J. Position acquiring of signal spots in the echelle spectrograph[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2012, 32(3): 849-853. (in Chinese)
- [18] 尹禄, 巴音贺希格, 崔继承. 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 CH. An effective wavelength detection method based on echelle spectra reduction[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2015, 35(3):850-855. (in Chinese)

作者简介:



崔继承(1976—),男,吉林长春人,博士,副研究员,主要从事光学设计、光谱仪器设计开发及光谱理论的研究。E-mail:jicheng_cui@163.com



张锐(1990—),女,甘肃兰州人,博士研究生,2013年于兰州大学获得学士学位,主要从事光谱仪器研发及光谱信息处理技术的研究。E-mail:zhangrui_grating@163.com