第32卷，第10期
2012年10月

光 谱 学 与 光 谱 分 析
Spectroscopy and Spectral Analysis

Vol. 32, No. 10, pp2870-2874
October, 2012

宽波段单色仪多级谱高精度波长定标

张子辉[1,2]，王淑荣[1*]，黄　煜[1]，李　博[1]，于向阳[1,2]，林冠宇[1]

1. 中国科学院长春光学精密机械与物理研究所应用光学国家重点实验室，吉林 长春　130033
2. 中国科学院研究生院，北京　100049

摘　要　通常利用单色仪输出的单色光对空间遥感光谱仪进行波长定标。提出以空间遥感光谱仪的置信度为标准，来评价宽波段单色仪高精度波长定标精度的方法。通过对仪器精度的分析，分别求出单色仪的波长的重复性误差和偏差。应用高压汞灯的本征谱和光栅衍射多级谱作为定标谱线，避免更换灯源带来的误差。通过粗细定标相结合的方法，缩短扫描时间，并且运用高斯拟合对波峰进行精确定位，缩小误差。最后利用高次拟合得到的关系式，测出单色仪波长精度，计算出空间遥感光谱仪定标的置信度。以1.5 M单色仪为例，单色仪在200～840 nm波段内波长精度±0.016 nm，则空间遥感光谱仪的波长精度达到±0.050 nm的置信度为99.82%。

关键词　光谱学；波长定标；寻峰；多级谱；高斯拟合
中图分类号：TP722.3　　**文献标识码**：A　　**DOI**：10.3964/j.issn.1000-0593(2012)10-2870-05

引　言

近年来，大气的探测和研究等技术迅速发展，对空间遥感光谱仪器的需求越来越大。而国内外大多应用高精度单色仪对空间遥感光谱仪行波长定标。标准光源通过单色仪分光，将需要的单色光输出给遥感光谱仪[1]，方法如图1所示。通过对国内外空间遥感光谱仪器波长精度的对比总结，其波长精度通常达到±0.05 nm。要求单色仪具有更高的波长精度，所以实现单色仪对宽波段单色仪的高精度定标具有重要意义。

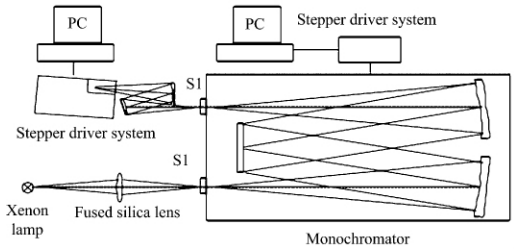

Fig. 1　Illustration of wavelength calibration for Spectroradiometer

1　评价方法

单色仪本身存在误差，不可能得到空间遥感光谱仪波长误差的真值。为了确认单色仪的波长精度，引入正态分布致信区间方法[2]，如式(1)所示

$$p[\,|\lambda_{\text{standard}}-\lambda_{\text{survey}}|\leqslant\Delta\lambda]=\int_{\lambda_{\text{survey}}-\Delta\lambda}^{\lambda_{\text{survey}}+\Delta\lambda}\frac{1}{\sqrt{2\pi}\Delta\lambda/k}\exp\left[\frac{(x-\lambda_{\text{survey}})^2}{2(\Delta\lambda/k)^2}\right]\mathrm{d}x \tag{1}$$

$$k=\text{空间遥感光谱仪波长精度}/\text{单色仪波长精度} \tag{2}$$

其中$\lambda_{\text{standard}}$为准确波长，$\lambda_{\text{survey}}$为实测波长。

由式(1)可知要使探测仪的置信度达到99%以上，k值应不小于2.58。所以单色仪的波长精度应小于$\Delta\lambda/2.58=\pm0.019$ nm。这对单色仪波长定标实验提出来较高的要求。

精度包括精密度和准确度，而单色仪的精密度δ_a即是单色仪的波长重复性误差，单色仪的准确度δ_b是波长偏差。单色仪波长精度δ的计算方法如式(3)所示

$$\delta=\sqrt{\delta_a^2+\delta_b^2} \tag{3}$$

通过多次扫描，单色仪的重复性误差为

$$\delta_a=\sqrt{\sum_1^n(x_i-\bar{x})^2/(n-1)} \tag{4}$$

收稿日期：2012-04-26，**修订日期**：2012-07-15
基金项目：国家自然科学基金项目(41074126)和吉林省青年科研基金项目(20090118)资助
作者简介：张子辉，1987年生，中国科学院长春光学精密机械与物理研究所硕士研究生　e-mail：zhangzihui123@126.com
*通讯联系人　e-mail：srwang@ciomp.ac.cn

© 1994-2013 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net

考虑到光源稳定性和试验环境变化的原因，应尽量缩短试验时间，所以采用一次最大误差法，则波长误差为

$$\delta_b = \delta_{i\max}/k_n \tag{5}$$

式中，$\delta_{i\max}$为单次测量最大波长误差。当扫描次数为 1 时，查表得到 $1/k_n=1.25$。

对于宽波段单色仪高精度波长定标，首先应选择正确的光源。而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，要求较多数目的谱线；谱线带宽较窄、且位置精确高；谱线强度既不使仪器响应饱和又能满足一定的信噪比[3]；定标谱线应全面而且均匀的覆盖单色仪的光谱范围[4]。高压汞灯为目前应用最为广泛的定标光源之一，其主要谱线集中于 200～600 nm。而对于宽波段单色仪，一般覆盖近紫外到近红外波段。该类单色仪一般需要多个灯源相结合进行波长定标。但是在更换灯源对定标光路有影响，为了减少误差，运用高压汞灯发射出本证谱线和光栅衍射出的多级谱(如表 1 所示)对宽波段单色仪进行波长定标。

Table 1　The wavelengths of mercury lamp at different diffraction orders

Wavelength/nm	Order	Effective wavelength/nm
253.650 6	2	507.301 2
	3	760.951 8
	4	1 014.602
296.728 3	2	593.456 6
	3	890.184 9
	4	1 186.913 2
313.1551	2	626.310 2
	3	939.465 3
404.657 2	2	809.314 4
407.783 8	2	815.567 6
435.833 7	2	871.667 4
546.075 3	2	1 092.150 6
576.959 8	2	1 153.919 6

当入射和出射狭缝宽度相等时，单色仪出射狭缝出射辐通量由式(6)和式(7)计算。

$$\Phi_{\max} = Ea_2h_2 \tag{6}$$

$$E = \tau(\lambda)L(\lambda)\Omega' \tag{7}$$

所以 $\Phi_{\max} = \tau(\lambda)L(\lambda)\Omega' a_2h_2$

其中 a_2 和 h_2 分别为出射狭缝宽度和高度，$\tau(\lambda)$为单色仪反射镜的反射率，这里可以认为近似等于 1，$L(\lambda)$为光源的辐亮度，Ω'为立体角。为了满足接收设备的信噪比，应调节单色仪的出射和入射狭缝宽度。入射和出射狭缝对光谱带宽的影响分别如式(8)和式(9)所示

$$\delta_1\lambda = \frac{a_1\gamma}{f(\mathrm{d}\theta/\mathrm{d}\lambda)} \tag{8}$$

$$\delta_2\lambda = \frac{a_2}{f'(\mathrm{d}\theta/\mathrm{d}\lambda)} \tag{9}$$

$$\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}\lambda} = \frac{m}{d\cos\theta} \approx \frac{m}{d} \tag{10}$$

单色仪的光谱带宽为 $\delta\lambda=\delta_1\lambda+\delta_2\lambda$。通过光栅常数和横向放大率可以求出单色仪的光谱带宽。由公式(8)可以看出，单色仪的角分辨率与光栅的衍射级次成正比。所以二级谱和三级谱的光谱带宽分别为一级谱光谱带宽的 1/2 和 1/3。所以运用多级谱定标能够提高定标精度。

2　实验方法

宽波段单色仪进行高精度定标，整个过程进行一次需要较长时间。为了节省时间采用粗细定标相结合的方法进行波长定标。并且在编辑程序中，采用采集一次，扫描一次，再以零点为基准计算出下一次行进距离的扫描方法，从理论上消除了理论误差。

2.1　粗定标

首先以较宽的扫描间隔对单色仪的整个波长范围进行扫描，得到在整个波长范围内的谱线情况。在波长精度小于±0.1 nm，可以认为定标曲线是线性的。利用四点法初步确定各个谱线的位置。找出每个谱线位置对应的扫描范围。选择出 3 条较为分散的谱线作为验证谱线，其他的作为定标谱线。

2.2　细定标

缩短扫描间隔，分别在 2.1 节中得到定标谱线范围进行细扫描，得到各个谱线的波形。但是波长是连续的，而采集的数据时离散的。为了将谱峰定位的精度进一步提高，可以采用数值方法进行步数细分。通过对汞灯的多次扫描，高压汞灯谱峰的峰形符合高斯函数，用高斯函数对谱峰进行拟合[3,5]。

$$G_i(x) = A_i\exp[-(x-B_i)^2/C_i^2] \tag{11}$$

如式(11)所示，在峰值中找出若干个点，利用最小二乘法计算出 A_i，B_i 和 C_i 的值。$x=B_i$ 处既是谱线的峰值。通过寻峰方法，可以使谱线的峰值位置的误差减小到 1 步以内。

利用上述方法寻找到每个定标谱线的精确位置。应用最小二乘法对其进行多项式拟合。通过对波长偏差的对比，选择出最优的拟合方法。然后代入到控制程序中，扫描验证谱线位置，确定准确度。

3　实验验证

以 1.5 M 单色仪为例，对其进行高精度波长定标。该单色仪是一个光谱范围 200～840 nm 的扫描式光谱仪器。其中 100 mm×100 mm 光栅频率为 1 200 g·mm^{-1}，表面镀 Al+MgF_2 膜[6]。定标实验所用仪器包括高压汞灯光源、前聚光镜、光电倍增管探测器、光电倍增管高压电源、皮安表、波长扫描控制器及计算机(如图 2)。光源发出的光经过单色仪出射的单色光由光电倍增管接收，转化为电信号，传给 Keithley6485 皮安表，在计算机操作程序控制下通过 IEEE-488 接口进行数据采集[7]。同时，通过步进电机驱动 1.5 M 单色仪波长扫描步进电机，转动单色仪正弦机构[8]的精密丝杠，进而转动光栅，完成光谱扫描，绘出光谱图。经过理论计算，该单色仪每扫过 1 nm 的波长，电机要走 13 333 步(电机细分 8 000)。通过计算，当出射和入射狭缝宽度都为 0.05

© 1994-2013 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net

mm 时，单色仪的光谱最大带宽为 0.042 nm。从表 1 中选出 14 条在 1.5 M 单色仪波长范围内的进行定标。其中 296.7，579.0 和 313.1 nm 的二级谱 3 条谱线作为验证谱线，其余的作为定标谱线。并且通过式 6 计算，14 条谱线都满足能量要求。通过多次扫描，根据式(4)计算，1.5 M 单色仪的波峰的重复性误差为 0.005 nm。设置扫描间隔为 0.1 nm，对单色仪的整个波长范围进行扫描，得到结果如图 3 所示。

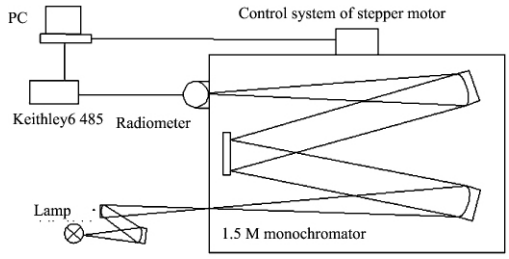

Fig. 2 Optical path of wavelength calibration

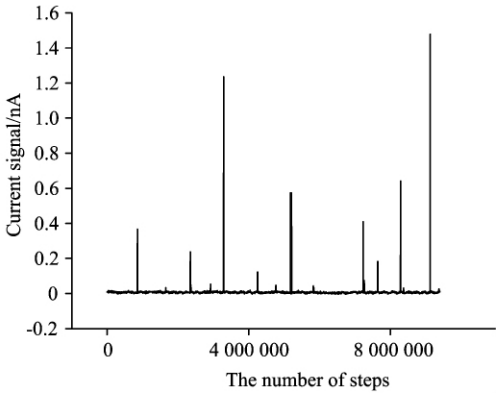

Fig. 3 Spectra of mercury with scanning interval of 0.1 nm

确定出 11 条定标谱线的大概范围，如表 2 所示。

Table 2 The number of steps of stepper motor at different wavelengths

Order	Wavelength/nm	The steps range of motor
First	253.650 6	845 900～871 900
First	313.155 1	1 640 300～1 666 300
First	404.657 2	2 863 500～2 889 500
First	435.833 7	3 278 700～3 304 700
2nd of 253 nm	507.301 2	4 233 200～4 259 200
First	546.075 3	4 751 800～4 777 800
First	576.959 8	5 164 600～5 190 600
2nd of 296 nm	593.456 6	5 385 900～5 411 900
First	690.746 1	6 687 900～6 713 900
3th of 253 nm	760.951 8	7 629 000～7 655 000
2nd of 404 nm	809.314 4	8 278 000～8 304 000

按照表 2 中列出来的步数范围，在该范围内以每次 13 步(即 0.001 nm)的间隔进行扫描。得到 11 个波长谱线的具体情况。以 404.7 nm 为例，其扫描数据如图 4 中蓝点所示。图 4 中红色曲线为 404.7 nm 波长的扫描峰形的高斯拟合曲线，利用 1.1 节中提到寻峰的方法，和容易的找到 404.7 nm 波峰对应的步数是 2 874 188。

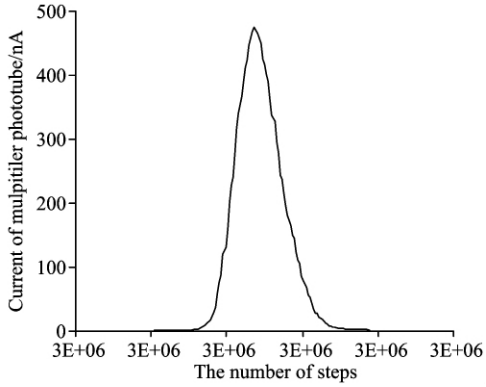

Fig. 4 Gaussian fit of 404.7 nm wavelength

利用相同的方法得到定标 11 个波长所对应的步数。进行线性拟合，得到结果如图 5 所示。

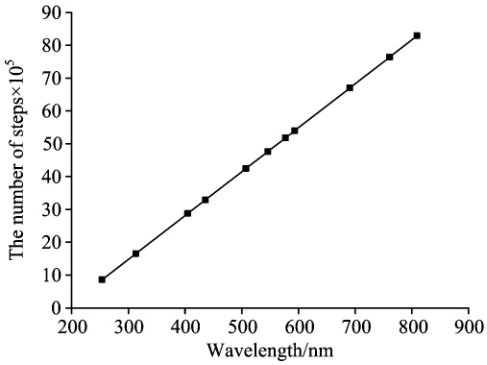

Fig. 5 Linear fit

将线性拟合公式带入 LabVIEW 程序进行检验，计算出各个波长对应的误差。

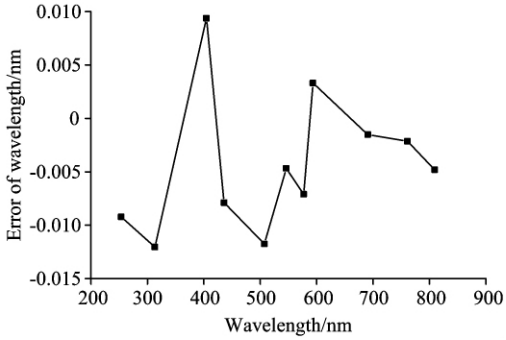

Fig. 6 Error of linear fit

由图 6 可以看出，线性拟合无法满足要求。为了减小误差，采用高次多项式拟合[9,10]。分别对表 2 中的各个点进行 2，3，4 和 5 次拟合，将拟合公式带入程序中，进行检验。通过对检验的比较，当采用 3 次多项式拟合时误差最小。得到的误差如表 3 所示。

根据式(5)得到，三次拟合得到的波长最大负误差为 −0.015 nm，波长最大正误差为 0.012 nm。通过调整零点位

© 1994-2013 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

置，可以平衡正负误差。

Table 3　Error by cubic polynomial fitting

Standard value	Survey value	Wavelength error
253.650 6	253.641	−0.009 6
313.155 1	313.143	−0.012 1
404.657 2	404.667	0.009 8
435.833 7	435.826	−0.007 7
507.301 2	507.290	−0.011 2
546.075 3	546.071	−0.004 3
576.959 8	576.953	−0.006 8
593.456 6	593.460	0.003 4
690.746 1	690.745	−0.001 1
760.951 8	760.950	−0.001 8
809.314 4	809.310	−0.004 4

4　实验结果验证

将细定标中得到的三次拟合得到的，扫描 296.728 3，579.066 3 和 313.155 1 nm 的二级谱三条谱线，得到峰值位置分别为 296.740，579.059 和 626.316 nm，三个验证波长的误差分别为 0.011 7，−0.007 3 和 0.005 9 nm。由式(5)可知，结果验证的波长最大负误差为−0.009 nm，最大正误差为 0.015 nm。

所以，1.5 M 单色仪波长最大负误差为−0.015 nm，最大正误差为 0.015 nm。而单色仪的波长重复性误差为±0.005 nm，根据式(3)得到 1.5 M 单色仪的波长精度为

$$\delta = \sqrt{(0.005\ \text{nm})^2 + (0.015\ \text{nm})^2} = 0.016\ \text{nm}$$

当 $\Delta\lambda = \pm 0.050$ nm 时，两个波长最大误差对应的 k 值分别为−3.12 和 3.12。而由式(1)可得

$$p[|\lambda_{\text{standard}} - \lambda_{\text{survey}}| \leqslant \Delta\lambda] = \frac{2}{\sqrt{2\pi}}\int_{-k}^{k}\exp\left(-\frac{t^2}{2}\right)\mathrm{d}t = \phi(k) - \phi(-k) \qquad (12)$$

通过查表[11]可以得到 $\phi(3.12) = 0.999\ 1$，$\phi(-3.12) = 0.000\ 9$。所以，当 1.5 M 单色仪的波长精度为±0.016 nm 范围内时，根据式(12)的，空间遥感光谱仪的波长精度在±0.050 nm 范围内的置信度为 0.998 2，满足要求。从而说明三次多项式拟合得到的公式较为准确，达到定标要求。

5　结　论

针对宽波段单色仪的特点，确定了粗细定标相结合的波长定标方案。采用汞灯本证谱和光栅衍射的多级谱作为定标谱线。采用高斯拟合方法计算出峰值，提高了定标精度。利用已知谱线与电机步数 3 次多项式拟合的波长定标曲线，得到 1.5 M 单色仪的波长精度为±0.016 nm。使得空间遥感光谱仪的波长精度达到±0.050 nm 的置信度为 99.82%。验证了该方法的可行性，并实现了对宽波段单色仪的高精度波长定标。

References

[1] LIN Guan-yu(林冠宇). Chinese Journal of Scientific Instrument(仪器仪表学报), 2010, 31(12): 2668.

[2] MA Hong, WANG Jin-bo(马　宏, 王金波). Theory on Error and Precission of Instrument(误差理论与仪器精度). Beijing: Arms Industry of Publishment(北京: 兵器工业出版社), 2007. 45.

[3] LI Xin, ZHANG Guo-wei, XUN Li-na, et al(李　新, 张国伟, 寻丽娜, 等). Acta Optica Sinca(光学学报), 2008, 28(5): 902.

[4] JIN Li-hong, CHENG Xiao-bo, LI Ming-zhong, et al(靳丽红, 陈小波, 李明忠, 等). Journal of Sichun University(Natural Science Edition(四川大学学报·自然科学版), 1998, 35(4): 546.

[5] CUI De-qi, LIAO Ning-fang, CAO Wei-liang, et al(崔德琪, 廖宁放, 曹玮亮, 等). Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析), 2011, 31(7): 1762.

[6] WANG Jia-peng, WANG Shu-rong, XU Ling-di, et al(王加朋, 王淑荣, 徐领娣, 等). Opto-Electronic Engineering(光电工程), 2008, 35(6): 42.

[7] YANG Jia-jian, LU Xiao-feng, FENG Xiao-dong, et al(杨家键, 卢小丰, 冯晓东, 等). Electronic Measurement Technology(电子测量技术), 2010, 33(4): 78.

[8] LI Quan-chen, JIANG Yue-juan(李全臣, 蒋月娟). Principle of Spectrograph(光谱仪器原理). Beijing: Beijing Institute of Technology Press(北京: 北京理工大学出版社), 1999. 209.

[9] DONG Ning-ning, LI Min, LIU Zhen, et al(董宁宁, 李　敏, 刘　震, 等). Optics and Precision Engineering(光学精密工程), 2008, 16(9): 1661.

[10] SHEN Hang-cheng, PAN Jian-gen, FENG Hua-jun, et al(沈杭城, 潘建根, 冯华君, 等). Optical Instruments(光学仪器), 2006, 28(5): 51.

[11] LI Zhong-fan, GAO Wen-sen(李忠范, 高文森). Methematical Statistics and Stochastic Process(数理统计与随机过程). Changchun: Jilin University Publishing House(长春: 吉林大学出版社), 2000. 536.

© 1994-2013 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net

High-Precision Wavelength Calibration of Wide-Band Monochromator

ZHANG Zi-hui[1,2], WANG Shu-rong[1*], HUANG Yu[1], LI Bo[1], YU Xiang-yang[1,2], LIN Guan-yu[1]

1. State Key Laboratory of Applied Optics, Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics, Chinese Academy of Sciences, Changchun 130033, China
2. Graduate University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China

Abstract Usually the monochromator is used to output monochromatic light to calibrate the space remote sensing spectrometer. In the present paper, the confidence of space remote sensing spectrometer is used as a standard to evaluate the precision of wide-band monochromator wavelength calibration. Through analysis of the accuracy of the instrument, the monochromator wavelength repeatability error and deviations was obtained respectively. And the intrinsic spectrum of the high pressure mercury lamp and the grating diffraction was used as calibration lines to avoid the error caused by replacing the light source. Through the special method of wavelength calibration to shorten the scan time, the Gaussian fitting was used to look for peaks of wavelength to reduce error. Finally, the relationship derived from polynomial fitting to measure the exact wavelengths' accuracy of the monochromator and calculate the calibration confidence of the space remote sensing spectrometer. Using this method, we can make wavelength accuracy of the 1.5 M monochromator with wavelength band from 200 to 840 nm to reach to ±0.016 nm, then the confidence of the space remote sensing spectrometer can reach to 99.82%.

Keywords Spectroscopy; Wavelength calibration; Peak search; Multi-level spectrum; Gaussian fit

(Received Apr. 26, 2012; accepted Jul. 15, 2012)

* Corresponding author

© 1994-2013 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net