

基于谱图还原的中阶梯光栅光谱仪有效波长提取算法

尹禄^{1,2}, 巴音贺希格^{1*}, 崔继承¹, 杨晋^{1,2}, 朱继伟¹, 姚雪峰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 中阶梯光栅光谱仪具有高色散、高分辨率、宽波段、全谱瞬态直读等诸多优点,是先进光谱仪器的代表之一。在中阶梯光栅光谱仪民用化、商品化的发展趋势之下,其二维谱图图像处理的地位越来越重要。目前,国内一般先利用质心提取算法计算光斑质心再结合谱图还原算法计算有效波长,但这种方法难以达到较为理想的要求。为了提升运算速度、波长提取精度以及成像误差补偿能力,提出了基于谱图还原的有效波长提取算法。利用谱图还原算法,将探测器拍摄的二维谱图转换为一维图,通过改进的直方图双峰法选取阈值对一维图降噪,实现了二维谱图中全部有效 (x, y) 点对应波长的一次性提取。先将二维谱图转换为一维图进行图像处理,使算法在提升运算速度的基础上提取精度也得到了改善,还可以对一定范围内的成像误差进行补偿。采用标准汞灯作为待测光源开展了中阶梯光栅光谱仪成像实验,并使用该算法进行数据处理。实验结果表明,不仅能够自动补偿光谱仪 $0.05 \mu\text{m}$ (两个像元)以内的成像偏差,而且能在精确提取有效波长的基础上大幅提升运算速度,波长误差小于 0.02 nm ,满足中阶梯光栅光谱仪图像处理的要求。

关键词 中阶梯光栅光谱仪; 谱图还原; 有效波长提取; 阈值去噪

中图分类号: TH744.1 **文献标识码:** A **DOI:** 10.3964/j.issn.1000-0593(2015)03-0850-06

引言

中阶梯光栅光谱仪以中阶梯光栅作为主色散元件,配合低色散元件在主色散的垂直方向交叉色散,具有高色散、高分辨率、宽波段全谱瞬态直读等特点,继天文观测后逐渐成为环境监测、军事防御、物质分析等领域关注的热点^[1,2]。20世纪70年代中阶梯光栅光谱仪率先在天文领域得到应用,此后国外相关研究日臻完善,目前实现了向民用化的过度,应用电感耦合等离子体原子发射光源(ICP-AES)及激光诱导击穿等离子体原子发射光源(LIBS)的中阶梯光栅光谱仪在光谱分析领域的应用日趋广泛^[3-5]。我国近年来也开展了相关研究^[6-8],长春光机所研制出了国内第一台样机^[9],目前正在向产品化方向发展,但是与国外仍有不小的差距。

由光源发出的光经中阶梯光栅与棱镜交叉色散后,在面阵CCD上形成二维光谱,本应与入射针孔等大的光斑由于像差、探测器随机噪声、像元饱和等因素影响形成不同形状的弥散斑,增加了有效波长提取的困难。目前一般采用先计

算弥散斑质心位置,再根据二维谱图模型找到与质心位置对应的波长的方法。但是这种质心提取算法^[10]软件较为复杂,二维图像的阈值选取方法相对繁琐,程序运行时间较长,且当质心不落在二维谱图模型上时无法获取波长信息,需要开发相应的算法作为近似补偿。鉴于此,提出了基于谱图还原的波长提取算法,并通过理论分析、实验验证讨论了其可行性与精度。通过光学设计与装调无法保证完全消除光谱仪的成像误差,本工作利用谱图还原算法先将二维谱图转换成一维图,再根据改进的直方图双峰法选取阈值去除噪声实现有效波长的提取,在允许微小成像误差的前提下,提升了算法的运算速度,同时也提高了波长提取的精度,为中阶梯光栅光谱仪图像处理算法的进一步优化提供了新思路。

1 中阶梯光栅光谱仪

1.1 中阶梯光栅

中阶梯光栅是一种特殊类型的粗光栅,其刻线密度很小,一般小于 $100 \text{ gr} \cdot \text{mm}^{-1}$,因而较之普通衍射光栅工作于

收稿日期: 2014-01-13, 修订日期: 2014-05-05

基金项目: 国家自然科学基金项目(61108032), 国家重大科学仪器设备开发专项项目(11YQ120023)和吉林省科技发展计划项目(20126012)资助

作者简介: 尹禄, 1989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: yinlu890622@163.com

* 通讯联系人 e-mail: bayin888@sina.com

较大的衍射角 (60°~70°) 和较大的衍射级次 (几十到几百), 因其特性介于小阶梯光栅和阶梯光栅之间而得名^[7]。根据光栅方程:

$$m\lambda = d(\sin i + \sin \beta) \quad (1)$$

式中 m 为衍射级次, d 为光栅常数, i 和 β 分别为光栅入射角和衍射角。在准李特洛条件下 $i = \beta$, 可以得出光栅的角色散表达式

$$\frac{d\beta}{d\lambda} = \frac{2 \tan \beta}{\lambda} \quad (2)$$

同时其理论分辨率表达式

$$R = \frac{2W \sin \beta}{\lambda} \quad (3)$$

式中 W 为光栅宽度。因为中阶梯光栅具有较大的衍射角, 由式(2)、式(3)可见其具有高角色散率和分辨率的特性。

1.2 中阶梯光栅光谱仪

由于中阶梯光栅工作在较高的衍射级次, 因而在主方向色散之后不同波长衍射级次重叠在一起, 增大了光谱识别与分析的难度, 需要垂直于主色散方向设置横向色散原件进行级次分离。

根据布拉格方程, 工作在李特洛条件下的光栅具有最高的衍射效率, 但是考虑到通过光栅后的光线需要经过棱镜, 中阶梯光栅应工作在准李特洛条件下, 即设置一定的偏置角。准直镜和聚焦镜采用离轴抛物镜可以消除球差, 采用对称的 C-T 结构可以减小彗差。

因此, 本实验所用中阶梯光栅光谱仪以中阶梯光栅配合棱镜交叉色散, 采用对称的 C-T 结构, 选择离轴抛物镜作为准直镜和聚焦镜, 其光学系统结构图如图 1 所示。

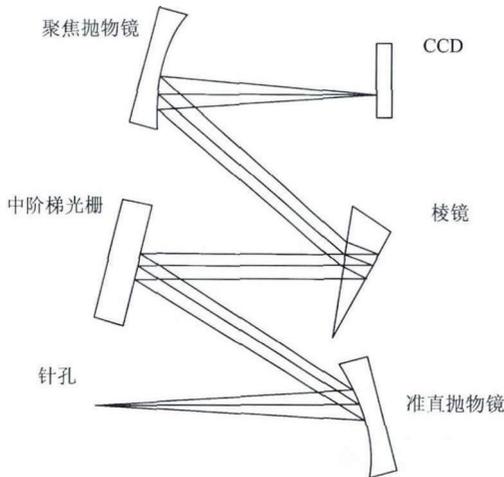


Fig. 1 Optic structure of echelle spectrograph

1.3 谱图还原算法

二维谱图上特定位置的像素点对应着相应的波长, 谱图还原算法就是建立二维谱图像元位置与波长的联系, 通过光斑位置推算光源所含波长的算法^[11]。

通过分析中阶梯光栅光谱仪的光学结构特点, 当针孔直径、系统焦距确定时, 二维谱图光斑位置的横、纵坐标分别

与棱镜、中阶梯光栅的性能参数有关, 在两个色散元件性能参数确定之后它们仅是波长的函数。根据式(1)所示的光栅方程, 并考虑准李特洛结构可以将光栅方程写为如下形式

$$m\lambda = d(\sin i + \sin \beta) \cos \omega \quad (4)$$

式中 ω 是中阶梯光栅的偏置角。将上式中的衍射角用主色散方向距中心的距离和焦距表示后, 可以得出波长与 y_i 、级次 m 的对应关系, 进而得到关于波长的第一个矩阵

$$M_\lambda = \begin{bmatrix} \lambda_{y_1 m_1} & \lambda_{y_1 m_2} & \cdots & \lambda_{y_1 m_q} \\ \lambda_{y_2 m_1} & \lambda_{y_2 m_2} & \cdots & \lambda_{y_2 m_q} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \lambda_{y_p m_1} & \lambda_{y_p m_2} & \cdots & \lambda_{y_p m_q} \end{bmatrix} \quad (5)$$

再根据光斑坐标与波长的函数关系, 可以分别得出关于横、纵坐标的第二、第三个矩阵

$$M_x = \begin{bmatrix} X_{y_1 m_1} & X_{y_1 m_2} & \cdots & X_{y_1 m_q} \\ X_{y_2 m_1} & X_{y_2 m_2} & \cdots & X_{y_2 m_q} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ X_{y_p m_1} & X_{y_p m_2} & \cdots & X_{y_p m_q} \end{bmatrix} \quad (6)$$

$$M_y = \begin{bmatrix} Y_{y_1 m_1} & Y_{y_1 m_2} & \cdots & Y_{y_1 m_q} \\ Y_{y_2 m_1} & Y_{y_2 m_2} & \cdots & Y_{y_2 m_q} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ Y_{y_p m_1} & Y_{y_p m_2} & \cdots & Y_{y_p m_q} \end{bmatrix} \quad (7)$$

通过以上三个矩阵可以建立出波长与纵横坐标关系的矩阵

$$M = \begin{bmatrix} \lambda_{x_1 y_1} & \lambda_{x_1 y_2} & \cdots & \lambda_{x_1 y_q} \\ \lambda_{x_2 y_1} & \lambda_{x_2 y_2} & \cdots & \lambda_{x_2 y_q} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \lambda_{x_p y_1} & \lambda_{x_p y_2} & \cdots & \lambda_{x_p y_q} \end{bmatrix} \quad (8)$$

在理想情况且光源为连续光谱时, 在面阵探测器上形成的光谱图如图 2 所示。

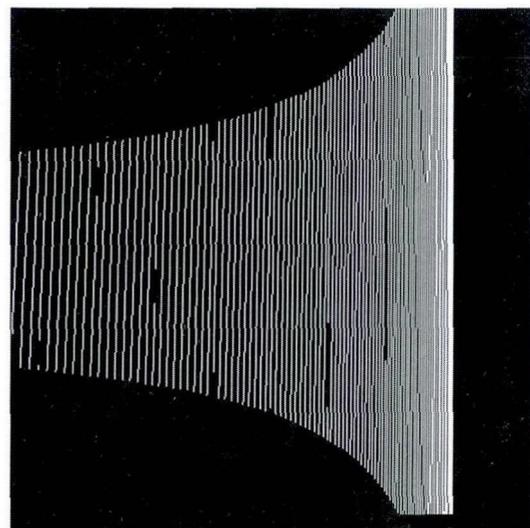


Fig. 2 The image of two-dimension spectra

2 基于谱图还原的中阶梯光栅光谱仪有效波长提取算法

2.1 一维谱图的建立

根据谱图还原算法建立如式(8)所示的矩阵 M ，它是一个行列数与面阵探测器横纵像元数相同的阵列，矩阵中每一个元素的位置都对应着探测器像面上的一个像元，位置上的元素是落在该像元上的光斑所对应的波长值，值得注意的是由图 2 可以看出矩阵中有很多像元没有波长与之对应，故以下仅称矩阵中有波长对应的像元位置为二维谱图模型。

读取探测器拍摄到的图像，输出成光强矩阵，矩阵中的元素为每一个像元上接收到的光强值。通过像元合并，使光强矩阵与矩阵 M 具有相同的行列数，即光强值与波长一一对应起来；同时探测器像元尺寸与入射针孔尺寸相当。理想情况下探测器像面上光斑恰好充满一个像元，但是由于像差、探测器随机噪声、探测器饱和和像元溢出等因素影响，光斑往往弥散为一个 3×3 、 5×5 甚至 7×7 像元的大光斑，且其中心并非与理论值完全重合。文献[10]提出的质心提取算法，先根据光强矩阵计算出弥散斑的质心，再依据质心坐标在二维谱图模型中寻找对应的波长，当光斑质心无法恰巧落在二维谱图模型上时，需要相应算法寻找二维谱图模型上最靠近质心的像元，这就增加了波长标定的难度。

为了解决这个问题，提出了先利用二维谱图模型与光强矩阵作用得到一维谱图，再提取有效波长的思路。先由二维谱图模型找出所有波长及其对应的像素位置，再根据光强矩阵得到每个波长的光强值，制成横坐标为波长、纵坐标为光强的一维谱图。提取出的光强绝大部分是背景噪声，少部分是弥散斑覆盖像元对应的光强，这些光强一般远大于背景噪声的光强，只要设置合适的阈值就能将它们与背景噪声区别开。当质心没有落在二维谱图模型上时，只要成像偏差小于两个像素，它的弥散斑仍能覆盖二维谱图模型从而被提取出来。由图 3 示意图可以看出，每一个有效波长将会提取出多个光强。根据中阶梯光栅光谱仪交叉色散以及全谱瞬态直读的特性，二维谱图模型上的像元能够代表仪器光谱范围内所有波长，且波长在二维谱图模型上纵向连续，纵向相邻的两

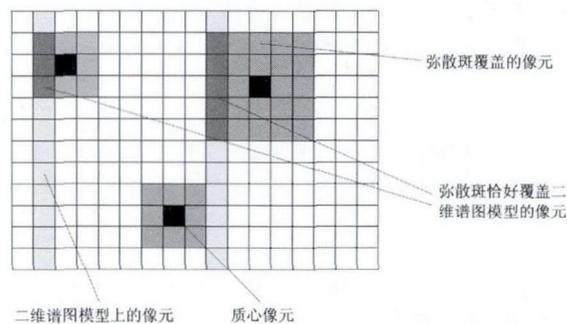


Fig. 3 Schematic diagram of image plane

个像元所代表的波长相差约 0.02 nm 。由于每一个弥散斑覆盖可能覆盖模型上一到五个像元，因此将会提取出浮动范围小于 0.1 nm 的一组波长。由于一般实际波长更接近光强最大的像元对应的波长，因此找出每组波长中对应光强最大的即为有效波长，波长提取误差将小于 0.02 nm 。由于光谱仪器的设计和装调无法保证完全消除光谱仪成像误差，基于此方法的波长提取算法考虑了有效波长光斑质心不落在二维谱图模型上的情况，对于成像误差小于两个像素的情况可以自动校正误差，提取最接近光斑质心的波长。

利用该方法只分析二维谱图模型上的光强分布，可以有效规避绝大多数的噪声光斑，能够精确捕捉有效光斑并允许较小的成像误差存在，与直接处理二维谱图的算法相比节约了大量时间、提升了算法运行速度。

2.2 阈值降噪

有效波长对应的弥散斑光强中心最大，向四周逐渐衰减，直至与背景噪声相当。若质心像元距离二维谱图模型最近像元两个像素、弥散斑的大小为 3×3 像元时，有效光斑所覆盖二维谱图模型上像元对应的有效光强可能与背景噪声光强相差不大，因此选取合适的阈值对波长的准确提取非常关键。考虑到不同波段的背景光强可能不同，采用分波段选取阈值的方法，避免有效波长对应光强值小于背景噪声光强值的情况。

关于灰度图像阈值选取方法有很多，比如最大类间方差法、最大熵法、直方图双峰法等^[12,13]。考虑计算精度与运算速度，依据直方图双峰法提出了改进的阈值选取方法。直方

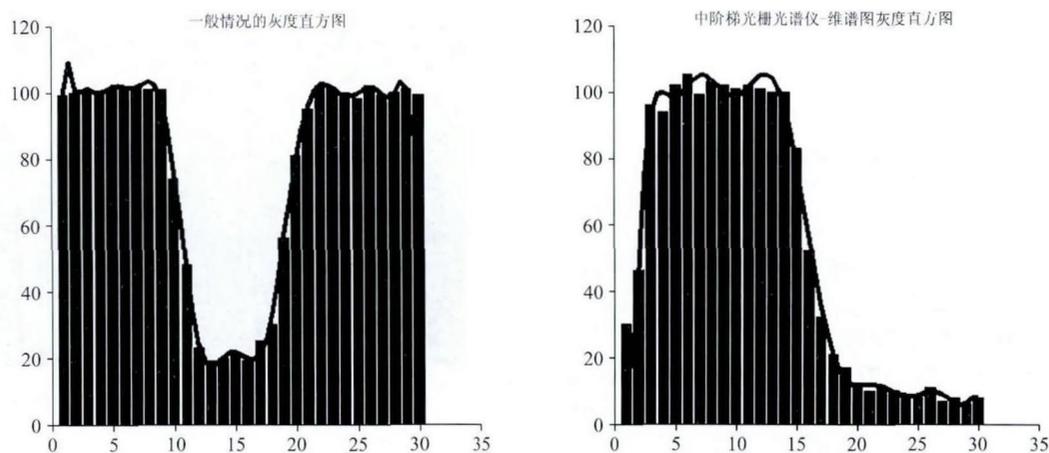


Fig. 4 The contrast image of gray histogram

图双峰法是将灰度值等间隔分为多个区间，计算出落在每一区间中的像元数，画出灰度分部直方图，双峰之间的低谷处对应的灰度值即为阈值。谱图还原后的一维图的阈值选取情况与之类似，但背景噪声所占区间的像元数很多，有效光强区间的像元数较少且分散，如图 4 所示。

根据实际情况，参考直方图双峰法分区间统计灰度值个数的思想，设置光强值的步进，依次统计所考察的区间内包含像元个数，与像元总个数比较直至满足判别标准，如图 5 流程图所示。

阈值选取时选择的步进过小会增加算法运算时间，选择

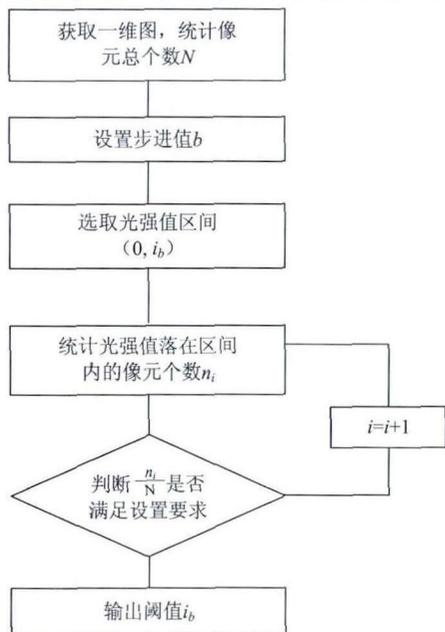


Fig. 5 The flow chart of threshold setting

过大会影响阈值的选择精度，可以根据实际情况灵活取舍。实验证明，步进选取光强平均值的十分之一，可以满足阈值选取要求。判别标准为光强小于阈值的像元数占二维谱图模型上总像元数的百分比是否大于所设定的值，它也可以根据不同需要灵活调整。

这种可控的分波段阈值选取算法适用于中阶梯光栅光谱仪光谱范围内的一维谱图降噪，且操作灵活可变量能够满足不同去噪比例的要求。

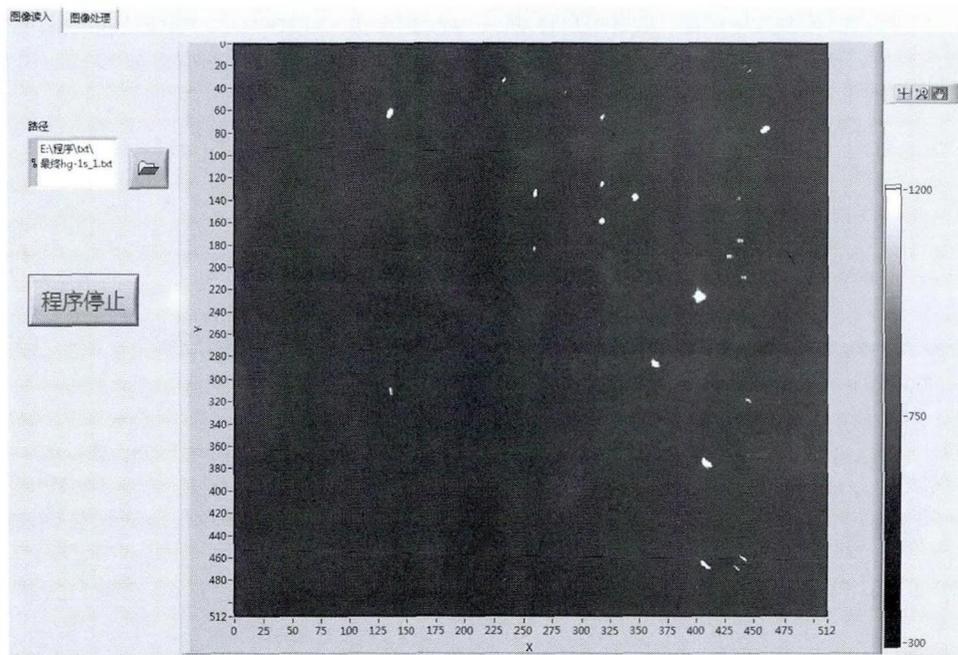
3 实验结果

利用基于谱图还原的中阶梯光栅光谱仪有效波长提取算法对本课题组自主研发的中阶梯光栅光谱仪样机的光谱图像进行处理，样机参数指标如表 1 所示。

Table 1 The parameter of echelle spectrograph

性能指标	具体参数
系统分辨率/nm	25 000@200
光谱范围/nm	200~900
系统焦距/mm	321
中阶梯光栅刻线数/(gr · mm ⁻¹)	54.49
棱镜顶角/(°)	26
探测器像元数	512×512(像元合并后)
针孔直径/μm	26

实验采用标准汞灯光源对有效波长提取算法进行验证，标准汞灯光源具有一系列分立的特征谱线，且覆盖 200~600 nm 波段，满足验证本算法的波段要求。实验前对样机进行精确装调，尽可能降低光谱仪成像偏差以验证波长提取算法在成像偏差小于两个像元时的准确性。



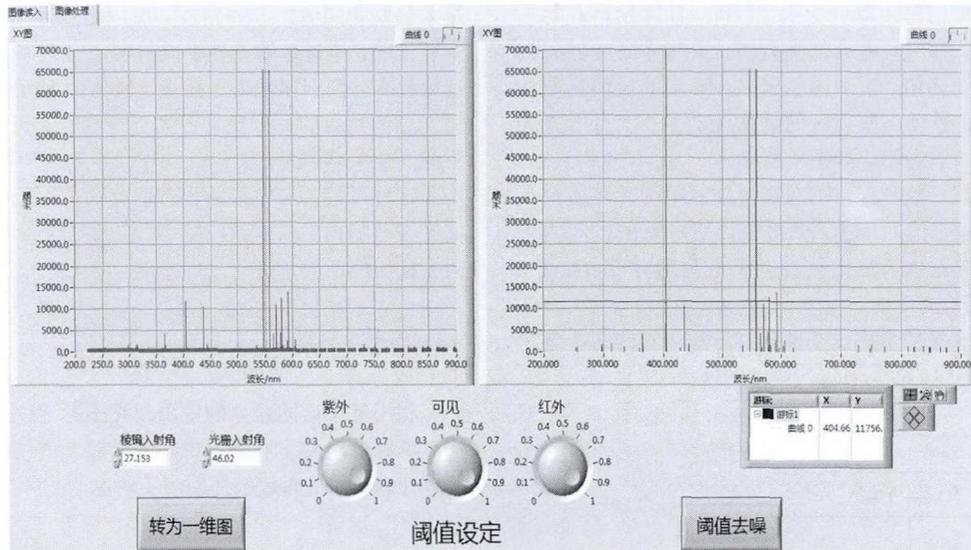


Fig. 6 Display interface of software

Table 2 The experimental results

汞灯特征谱线 /nm	提取波长 /nm	最大光强对应波长 /nm	提取有效波长所占区间 /nm	波长提取误差 /nm
253.65	253.61~253.69	253.65	0.08	0
296.72	296.69~296.72	296.70	0.03	0.02
365.48	365.46~365.48	365.47	0.02	0.01
404.66	404.61~404.69	404.66	0.08	0
546.07	546.05~546.11	546.08	0.06	0.01
576.96	576.96~576.99	576.97	0.03	0.01
579.07	579.06~579.15	579.09	0.07	0.02

利用基于 Labview 编写的图像处理软件, 导入探测器拍摄的汞灯光强图, 将二维谱图转换为一维图, 根据用户转动旋钮选取不同波段的阈值, 最终读取降噪后的有效波长, 与标准汞灯的特征谱线相对照, 对该算法进行验证, 如图 6 所示。

References

- [1] Oleg Korabiev, Franck Montmessin, Alexander Trokhimovsky. *Optics*, 2013, 52(5): 1054.
- [2] Michael P Wood, James E Lawler. *Optics*, 2012, 51(35): 8407.
- [3] Daniel Profrock, Andreas Prange. *Spectroscopy*, 2012, 66(8): 843.
- [4] Amina Ismael, Bruno Bousquet, Karine Michel-Le Pierres. *Spectroscopy*, 2011, 65(5): 4673.
- [5] Yonghoon Lee, Se-Woung Oh, Song-Hee Han. *Spectroscopy*, 2012, 66(12): 1385.
- [6] CHEN Shao-jie, QI Xiang-dong, Bayanheshig, et al(陈少杰, 齐向东, 巴音贺希格, 等). *Chinese Journal of Luminescence(发光学报)*, 2013, 34(5): 672.
- [7] LIU Hai-tao, HUANG Yuan-shen, LI Bai-cheng, et al(刘海涛, 黄元申, 李柏承, 等). *Optical Instruments(光学仪器)*, 2013, 35(03): 46.
- [8] PAN Ming-zhong, LIU Yu-juan, CHEN Shao-jie, et al(潘明忠, 刘玉娟, 陈少杰, 等). *Opt. Precision Eng.(光学精密工程)*, 2012, 20(8): 1725.
- [9] TANG Yu-guo, SONG Nan, Bayanheshig, et al(唐玉国, 宋楠, 巴音贺希格, 等). *Opt. Precision Eng.(光学精密工程)*, 2010, 18(9): 1989.
- [10] HE Miao, TANG Yu-guo, CHEN Shao-jie, et al(何淼, 唐玉国, 陈少杰, 等). *Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析)*

程序运行时间约 10 s, 较之质心提取算法几分钟的运行时间有了较大改善, 且汞灯全部特征谱线均被提取出来, 提取误差小于 0.02 nm, 结果对照如表 2 所示。

4 结论

国内中阶梯光栅光谱仪正向产品化的方向发展, 因此高效率高精度的有效波长提取算法具有非常重要的意义。提出了基于谱图还原的有效波长提取算法, 编制波长提取软件, 以标准汞灯为测试光源进行实验验证。分析对比实验结果得出: (1) 直接对一维图进行处理, 比处理二维谱图的质心提取算法速度提高了十几倍。(2) 当光谱仪的成像偏差在 0.05 μm (两个像元) 以内时不影响波长提取结果。(3) 具有较高的波长提取精度, 提取误差小于 0.02 nm, 满足中阶梯光栅光谱仪的波长提取要求。

析), 2012, 32(3): 849.

- [11] TANG Yu-guo, CHEN Shao-jié, Bayanheshig, et al(唐玉国, 陈少杰, 巴音贺希格, 等). Opt. Precision Eng. (光学精密工程), 2010, 18(10): 2130.
- [12] WU Yi-quan, WU Jia-ming, ZHAN Bi-chao, et al(吴一全, 吴加明, 占必超, 等). Acta Armamentarii(兵工学报), 2011, 32(4): 469.
- [13] WU Yi-quan, MENG Tian-liang, WANG Kai(吴一全, 孟天亮, 王 凯). Opt. Precision Eng. (光学精密工程), 2014, 22(1): 235.

An Effective Wavelength Detection Method Based on Echelle Spectra Reduction

YIN Lu^{1, 2}, Bayanheshig^{1*}, CUI Ji-cheng¹, YANG Jin^{1, 2}, ZHU Ji-wei¹, YAO Xue-feng¹

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

Abstract Echelle spectrometer with high dispersion, high resolution, wide spectral coverage, full spectrum transient direct-reading and many other advantages, is one of the representative of the advanced spectrometer. In the commercialization trend of echelle spectrometer, the method of two-dimension spectra image processing is becoming more and more important. Currently, centroid extraction algorithm often be used first to detect the centroid position of effective facula and then combined with echelle spectrum reduction method to detect the effective wavelength, but this method is more difficult to achieve the desired requirements. To improve the speed, accuracy and the ability of imaging error correction during detecting the effective wavelength, an effective wavelength detection method based on spectra reduction is coming up. At the beginning, the two-dimension spectra will be converted to a one-dimension image using echelle spectra reduction method instead of finding centroid of effective facula. And then by setting appropriate threshold the one-dimension image is easy to be dealing with than the two-dimension spectra image and all of the pixel points stand for effective wavelength can be detected at one time. Based on this new idea, the speed and accuracy of image processing have been improved, at the same time a range of imaging errors can be compensated. Using the echelle spectrograph make a test applying this algorithm for data processing to check whether this method is fit for the spectra image processing or not. Choosing a standard mercury lamp as a light source during the test because the standard mercury lamp have a number of known characteristic lines which can be used to examine the accuracy of wavelength detection. According to experimental result, this method not only increase operation speed but improve accuracy of wavelength detection, also the imaging error lower than 0.05 mm (two pixel) can be corrected, and the wavelength accuracy would up to 0.02 nm which can satisfy the requirements of echelle spectrograph for image processing.

Keywords Echelle spectrograph; Spectra reduction; Effective wavelength detection; Threshold de-noising

(Received Jan. 13, 2014; accepted May 5, 2014)

* Corresponding author