

DOI: 10.19650/j.cnki.cjsi.J1904727

# 小型 CCD 光谱仪波长定标精度控制与影响分析\*

刘丽莹<sup>1</sup>, 李野<sup>1</sup>, 郑峰<sup>2</sup>, 张国玉<sup>1</sup>, 徐毅刚<sup>2</sup>

(1. 长春理工大学 长春 130022; 2. 江苏省无线电科学研究所有限公司 无锡 214127)

**摘要:**在光谱仪硬件性能基础上,波长定标是进一步引入误差的关键环节。若在定标方程系数固化过程中引入误差水平等同于像素采样误差,则在实际应用中波长测量误差就是在像素采样和波长定标方程计算环节上叠加引入2次误差,将造成测量误差的成倍扩大。以自主研发的小型光谱仪为基础,旨在通过数据分析研究波长定标环节中的影响因素,进而给出避免扩大误差的有效方法。所用的光谱仪在100 μm狭缝下半峰全宽(FHWM)约为5 nm,像素波长间隔约为0.45 nm,硬件系统的波长误差理论上为半像素波长间隔0.225 nm。重点分析了测量噪声和峰位判定算法对定标精度的影响,并提出采用多次测量均值降噪结合高斯拟合峰位判定法来提高定标精度。与传统的直接极值法相比(定标方程均采用5次多项式),定标方程拟合残差的2倍标准差约为0.1 nm,传统直接极值峰位判定法下,定标方程拟合残差的2倍标准差为0.37 nm。通过研究,波长定标过程中的3个误差控制关键环节分别是测量噪声控制、峰位判定算法及最小二乘平差。通过选择适当的算法参数值,将波长定标拟合残差的标准差控制在约1/10 pixel波长间隔水平,充分体现了高斯拟合峰位判定算法的多像素统计优势。

**关键词:**光谱仪;波长定标;噪声;不确定度;峰位判定

中图分类号: O433.4 TH741

文献标识码: A

国家标准学科分类代码: 140.3025

## Accuracy control and influence analysis of wavelength calibration for compact CCD spectrometer

Liu Liying<sup>1</sup>, Li Ye<sup>1</sup>, Zheng Feng<sup>2</sup>, Zhang Guoyu<sup>1</sup>, Xu Yigang<sup>2</sup>

(1. Changchun University of Science and Technology, Changchun 130022, China;

2. Jiangsu Radio Scientific Institute Co., Ltd, Wuxi 214127, China)

**Abstract:** On the base of hardware performance of spectrometer, wavelength calibration is the key process of further introducing errors. If the error level introduced in the solidification process of the calibration equation coefficients equals the pixel sampling error, then the wavelength measurement error in practical application includes two errors that comprises the pixel sampling error and the error introduced in the wavelength calibration equation calculation, which will enlarge and double the measurement error. Using the independently developed compact spectrometer, this paper aims to study the influence factors in wavelength calibration through data analysis, and then give an effective method to avoid error expanding. The FHWM of the adopted spectrometer is about 5 nm for a 100 μm slit, the wavelength interval of the pixels is about 0.45 nm, and the wavelength error of the hardware system is theoretically a half-pixel wavelength interval of 0.225 nm. The influence of the measurement noise and peak finding algorithm on calibration accuracy is analyzed emphatically, and the averaging noise reduction with multi-measurements combined with Gauss fitting peak finding method is proposed to improve calibration accuracy. Compared with traditional direct extremum method, the 2 times standard deviation of the fitting residual of calibration equation for the proposed method is about 0.1 nm, while the 2 times standard deviation of the fitting residual of calibration equation for traditional direct extremum method is 0.37 nm (two methods both use the 5th order polynomial as the calibration equation). Study reveals that the three key factors of error control in wavelength calibration are measurement noise control, peak finding algorithm and least squares adjustment. Through selecting appropriate algorithm parameters, the standard deviation of the fitting residual of wavelength calibration can be controlled at the level of about 1/10 pixel wavelength interval, which fully reflects the multi-pixel statistical advantage of Gauss fitting peak finding algorithm.

**Keywords:** spectrometer; wavelength calibration; noise; uncertainty; peak finding

收稿日期: 2019-02-11 Received Date: 2019-02-11

\* 基金项目: 2014年度国家公益性行业(气象)科研专项课题(GYHY201406037)项目资助

## 0 引言

波长测量精度是光谱仪的核心性能指标,波长测量的误差将会直接影响利用光谱数据进行的各种定性和定量分析的精度<sup>[1-3]</sup>。光谱仪波长测量误差来源于2个方面:仪器硬件特性和仪器的定标过程。仪器的硬件性能决定了测量精度的物理限制,定标则决定了与不确定度相关的测量及溯源偏差。波长定标方程是光谱仪实现波长测量的映射函数,同时确定定标方程过程中所涉及的算法参数也决定了波长的校准精度。因此,光谱仪的波长定标过程中的精度影响与控制非常值得进行深入研究。

虽然国际上已经有光谱波长定标相关的技术标准,但仅限于基本方法流程,并没有细致到精度控制的程度。随着各种小型 CCD 光谱仪技术的发展<sup>[4-6]</sup>,使得光谱测量技术在各个领域中的应用日益增多,光谱仪波长定标误差问题的重要性也就越来越凸显,相关内容的研究论文也日益增多。从现有文献来看,波长定标中的关键问题包括模型选择(模型形式选择和模型参数选择)、算法选择(定标算法及算法参数的选择)、定标点的选择(标样权重问题)、以及测量误差的影响与控制(测量过程的影响控制)<sup>[7-9]</sup>。一篇文献通常难以对每个环节都进行细致论述,并且波长定标过程中各因素的影响程度也与光谱仪硬件系统参数有一定程度的依赖性。因此,不同论文中所研究的侧重点也有不同。光谱仪波长定标方程的模型形式主要分2类:1)基于光学原理方程的参数估计模型<sup>[10-11]</sup>;2)基于函数逼近理论的幂级多项式拟合模型<sup>[12]</sup>,后者在实际应用中更为普遍。定标方程的求解方法主要是最小二乘平差法,根据拟合残差的分析结果优化求解模型的系数<sup>[13-14]</sup>。

本文以自主研制的小型 CCD 光谱仪为硬件基础,从实验参数控制及数据处理分析入手,在现有波长定标原理与方法基础上,进一步深入研究光谱仪波长定标环节中的精度影响与控制方法,对硬件参数特性(光谱分辨率、像素波长采样间隔和测量噪声)及峰位判定算法与波长定标精度之间的关系进行详细的分析与探讨。通过研究,可认为噪声影响控制、峰位判定精度提高和定标系数拟合求解是3个关键环节。本文所给出的定标流程方法及实验处理分析结果,对于小型 CCD 光谱仪的定标具有一定的实际应用参考价值。

## 1 光谱仪波长定标原理方法及流程

仪器定标的目的是建立所使用标准具的量值及相应的不确定度与待定标仪器的测量值及不确定度之间的对应关系,是仪器科学中不容忽视的重要步骤,具有以下作

用,确定测量仪器或测量系统的输入输出关系,赋予测量仪器或测量系统分度值;确定测量仪器或测量系统的静态测量特性指标;消除系统误差(测量的偏差),改善测量仪器或测量系统的准确度。消除系统误差具有非常关键的作用,是定标作用中最为突出并有显著意义的一项特性,因此定标也经常被称为校准。

光栅光谱仪的测量方式是采用阵列探测器采集由光栅分光后的一系列单色狭缝的像,所以直接获得的原始数据实际上是由像素灰度值与像素位置序列构成的二元数据结构。那么波长的测量,实际上就是通过原始数据与光栅分光后在探测器像面上形成的波长排布与探测器像素位置之间的关系来定义。也就是建立像素位置与分光的波长之间的一一对应的映射函数关系,可认为光谱仪像面上分光的波长 $\lambda$ 是像素位置 $i$ 的函数。

$$\lambda = f(i, \theta) \quad (1)$$

式(1)即为光谱仪的波长定标方程。波长定标的过程就是求解函数 $f$ 的过程,函数 $f$ 的求解实际上就是确定函数 $f$ 的数学形式以及其中参数 $\theta$ 值。波长定标方程的求解通常有2种方法:1)基于机理模型的参数估计法;2)基于统计学习的函数逼近法。映射方程实际上可以用色散方程及光路的结构参数进行准确描述,但是入射出射几何参数在装配过程中的偏差大于探测器像素尺寸,所以光路几何参数的精确确定也同样需要利用波长标准具的测试,并进行参数拟合计算实现。由于基于机理模型的参数估计法形式复杂,并且没有显著的精度优势,所以在实际中通常采用第2种方法。由于任意函数曲线均可通过幂级数多项式形式来近似逼近,所以可设模型形式为:

$$\lambda_i = \sum_{j=0}^n a_j i^j, \quad i = 1, 2, \dots, N; j = 0, 1, \dots, n \quad (2)$$

式中: $i$ 表示线阵探测器像素对应的序号; $N$ 是探测器总像素数; $n$ 表示幂级数多项式的幂次。这是模型建模方法中最常用的幂级数多项式形式, $n$ 值的选择即为该模型的参数选择。当 $n = 1$ 时,方程为线性方程;当 $n > 1$ 时,方程为非线性方程。

定标方程系数和级次的确定主要利用最小二乘平差,通过对方程参数与数据之间的拟合残差分析,最终判定定标方程的最优解。

对于仪器的计量,首先需要实现仪器定标测试原理及过程的参数化和流程化,从而逐渐形成标准化的测试规范或操作规程<sup>[15]</sup>。图1所示为波长定标的流程,主要包括光源预热、预测试、数据测量、数据预处理、峰位判定、拟合求解、精度判定及存储与管理几个环节,右边通过辅助框注明该环节的意义,虚线框表示该环节对定标精度有显著影响。其中前2个虚线环节是通过硬件操作保证测量数据质量的环节,后面3个虚线框是数据处理



应曲线以及光纤吸收曲线等光学效率曲线的传递后,实际测试得到的谱峰相对强度与标准谱峰强度数值之间存在显著偏差,但这种峰强的偏差并不会显著影响峰位信息判定。根据锐利判据,当2个临峰间距小于光谱测量仪器的分辨率时,光谱仪由于无法分辨,在测量数据中会体现为单峰。测试自主研制的小型光谱仪的分辨率约为5 nm(100  $\mu\text{m}$  狭缝时),其中有7处分辨率显著无法分开的双峰,不能参与定标(365.015与365.483 6、435.833与434.749 4、576.959 8与579.066 3、750.386 9与751.465 2、800.615 7与801.478 6、810.369 3与811.531 1、840.821与842.464 8 nm)。

### 3 定标精度的影响与控制

从图1来看,数据(降噪)预处理、峰位判定和(定标方程系数)拟合求解3个环节是数据处理过程中对定标精度能够有效控制的3个环节。

#### 3.1 随机噪声的影响

对于峰值检测来讲,噪声水平是一个重要的影响因素,原因是在峰值最近的左右2个像素之间的信号水平差异很小,随机噪声的幅值就能够显著影响极值的判别。由于标准波长光源的各个谱峰之间峰值强度相差较大,某些弱峰的强度仅仅相当于强峰的1/10甚至更低。所以对于弱峰检测来讲,需要一定的噪声抑制处理。

噪声水平以及噪声对谱线峰值检测的影响如下。10次光谱数据减去平均光谱后的残差盒形图如图4所示,可给出每个像素10次测量的统计中位数、最大值、最小值及上下四分位数。

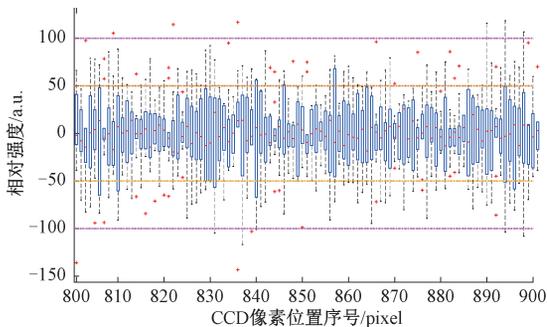


图4 局部像素多次测量数据的噪声幅值分布

Fig.4 Partial pixel noise amplitude distribution of multiple measurement data

残差总体统计标准差不到50,可以认为在95%以上的置信水平,噪声值都在 $\pm 100$ 以内。这样的噪声水平,即使对信号值为10 000左右的峰值来讲,也会存在 $\pm 1\%$ 的波动。测量多次进行平均是典型的噪声抑制方法,所

以在波长定标流程中,平均谱处理也是关键的一个环节。要求重复采集 $N$ 次( $N \geq 10$ ),再对 $N$ 次数据进行平均计算。

2个峰位处数据的放大显示效果如图5所示,可以看出噪声在谱线的峰值处对峰位判断存在影响,当峰值最近处的2个像素的数值非常接近时,噪声会影响峰位判别,致使产生峰位判别误差。可以看出,不同像素处多次测量的离散程度并不一致,在峰位处的像素更容易产生相对较大的波动。在10次测量平均的情况下,平均值基本上接近期望值,已经具有显著的随机噪声抑制效果,并且随着测量次数的增加,平均谱的噪声抑制效果会更好。

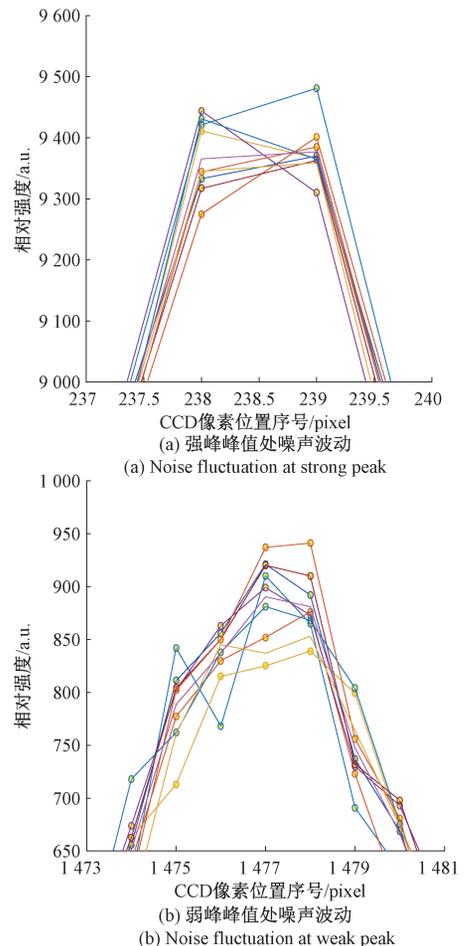


图5 2个不同峰值强度下的峰位噪声波动细节

Fig.5 Noise fluctuation details for 2 different peak intensities

#### 3.2 阵列探测器的像素采样间隔及峰值检测算法对峰位判定的影响

对于光源发射的线状光谱,物理模型上经常用高斯或洛伦兹线型来近似描述,下面分析其被线阵CCD像素采样的效果,光辐射功率分布轮廓用高斯函数近似描

述为:

$$y = ae^{-\frac{|x|}{\sigma}} + b \quad (3)$$

功率分布被离散的像素阵列采样之后,像素间隔决定了连续分布轮廓中峰位峰强信息的采样精度,仿真效果如图 6 所示。

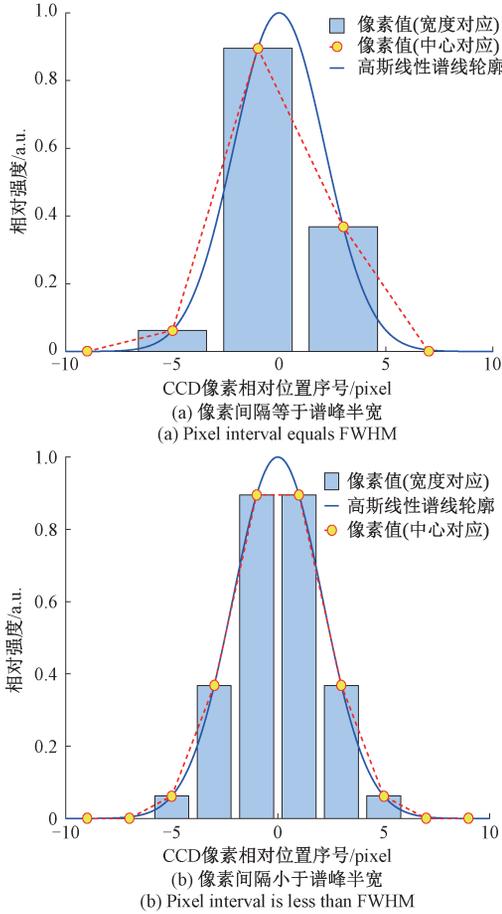


图 6 不同像素间距对连续光谱进行采样效果仿真  
Fig.6 Simulation of continuous spectrum sampling with different pixel intervals

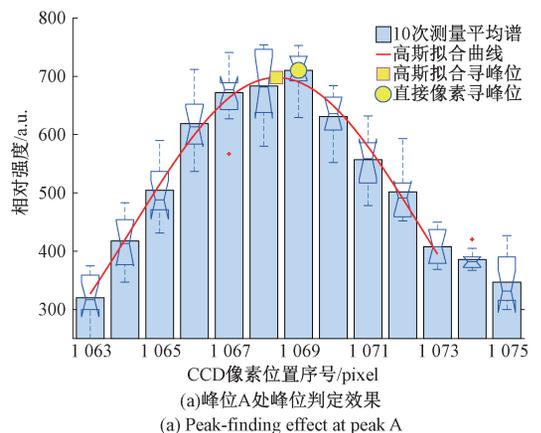
图 6 分别是仿真不同像素间隔对同一个高斯轮廓分布谱线在阵列探测器像素上的采样效果。可以看出,只有在谱线功率分布轮廓内的像素数目超过一定数目时,才能够比较真实地用采样数据还原谱峰轮廓。

峰位检测是波长定标流程中影响定标精度的一个关键环节。谱峰分析是各种分析测量中的常见问题,目前已发展出了很多常用的峰位检测算法,如极值判别法、导数判别法(一阶导数检峰和二阶导数检峰)、对称零面积判别法、谱峰函数拟合判别法等。由于一般的谱线数据都存在高频噪声和低频的基线漂移,所以峰位检测应该是滤除低频基线漂移和高频噪声影响后对中频信息进行极值或形心判别。

实际上,现在没有一种公认的适用于各种情况的峰位判定算法,人眼睛的直接观察是一种非常好的峰位判定方式。这是因为人眼同时可以对全部谱峰数据进行信息处理和识别,本质上是一种全局的分析模式。目前与人眼识别原理比较接近的谱峰检测方法有对称零面积函数卷积变换法和谱峰函数拟合法。这 2 种数据处理方法虽然处理过程不同,但效果上类似。对称零面积函数卷积变换法中需要选取各种形式的窗函数与信号进行卷积,而窗函数需要满足对称零面积的特征要求,而卷积运算的意义类似于加权积分,所以会对峰值位置处敏感性增强。谱峰函数拟合法则需要选择谱峰拟合函数,寻找与谱峰的峰形相似的函数进行拟合,使得最小二乘拟合残差最小时函数的拟合峰值即为所求的峰位判定值。

高斯拟合峰位判定是在直接极值峰位判定的基础上,前后各取  $N_{eff}=5$  pixel,共 11 pixel 数据进行高斯函数拟合,数据的分析和处理在 MATLAB 平台上进行。直接峰位判别算法采用 MATLAB 中的 findpeaks 命令,高斯拟合算法选用了 nlinfit 进行高斯拟合。理想情况下,高斯拟合的峰位判定与直接极值峰位判定之间的偏差应该在半像素间隔以内。这种高斯拟合的峰位判定结果能够更有效地反映出原始光谱轮廓与探测器采样后的数据之间的对应关系。以拟合后高斯函数的峰位作为峰位判定结果,可以得到高于像素分辨率的子像素分辨率,峰位判定精度至少提高一个数量级。

对直接极值峰位判定和高斯函数拟合峰位判定 2 种方法进行比较,图 7 所示为 2 处偏差较大峰位处的判定的放大细节效果。从图 7 可以看出,2 种峰位判定结果偏差大于半像素间距。偏差超过半像素间隔的原因主要是由于峰值处像素点的随机噪声较大,即使是采用了 10 次测量平均值计算,峰值轮廓上依然在峰位处产生了强度偏差,该偏差水平足以影响峰值判别时与相邻的像素强度值之间的高低比较,致使极值判别峰值与轮廓质心峰值出现显著偏差。



(a) 峰位 A 处峰位判定效果  
(a) Peak-finding effect at peak A

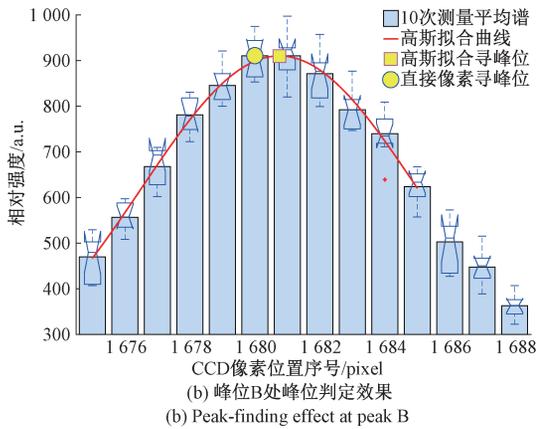


图7 两处偏差较大峰位处的判定的放大细节效果

Fig.7 The magnified details of peak-finding effect at the two peaks with significant deviation

像素平均波长采样间隔可以由式(4)计算得出

$$\delta\lambda = \frac{\lambda_{\text{pend}} - \lambda_{p1}}{n_{\text{pend}} - n_{p1}} \approx 0.45 \text{ nm} \quad (4)$$

表1所示为Hg-Arg灯24个尖峰处对应的标准波长值,以及直接峰位判定像素位置和对应的高斯拟合峰位判定峰值位置。

综上所述,多次采样平均算法和高斯拟合峰位判定算法是抑制波长定标数据中随机噪声影响的有效方法,是确保波长定标精度的重要手段。在噪声影响得到抑制的情况下,采用直接极值判别的峰位判定方法产生的峰位判定偏差不会超过半像素间隔。当噪声影响较大时,峰位处的随机噪声影响将会使峰位判定偏差超过半像素间隔,但是一般不会超过一个像素间隔,此时增加多次采样平均算法中的采样数能进一步改善。高斯拟合峰位判定算法实际是一种几何形心判定法,采用峰值附近若干个像素数据的轮廓进行峰位拟合,该算法具有多像素的统计优势,即使在噪声影响较大时,拟合得到的峰位依然十分接近真实的峰位。

### 3.3 定标方程拟合平差及波长定标精度的确定

根据光栅色散方程以及元件之间的几何关系可以基本确定,标准波长与线阵CCD像素位置之间的关系存在一定程度的非线性特征,在低精度水平要求下可近似为线性关系。在光谱仪的实际应用中,还是要求尽可能保证波长定标的精度,因为波长的测量误差将直接影响后续数据二次分析测量的准确性。所以波长定标方程通常采用高次多项式拟合形式,并采用最小二乘平差法确定模型级次和方程系数。

方程拟合求解采用MATLAB中的polyfit命令即可实现。最小二乘平差法的要求是定标数据点的个数大于多项式的幂级项数,但是项数过多时会产生过拟合问题,

表1 Hg-Arg灯标准波长与直接峰位判定和高斯拟合峰位判定对应表

Table 1 Data table of standard wavelength and peak-finding result of Hg-Arg lamp with direct extremum value peak-finder and Gauss fitting peak-finder

序号	标准波长/nm	像素定位	高斯定位
1	313.16	120	120.26
2	334.15	168	168.07
3*	365.06	239	238.47
4	404.66	327	327.13
5*	435.72	397	396.59
6	546.07	642	642.05
7*	578.01	713	713.12
8	696.54	976	975.67
9	706.72	998	998.46
10	727.29	1 043	1 043.78
11	738.40	1 069	1 068.33
12*	750.82	1 096	1 095.57
13	763.51	1 124	1 124.15
14	772.38	1 143	1 143.58
15	794.82	1 194	1 193.48
16*	801.08	1 207	1 207.05
17*	811.09	1 230	1 229.95
18	826.45	1 263	1 263.71
19*	841.81	1 298	1 297.83
20	852.14	1 320	1 320.67
21	912.30	1 454	1 454.54
22	922.45	1 477	1 477.02
23	965.79	1 573	1 573.57
24	1013.98	1 680	1 680.76

注: \* 表示不参与波长定标的7个点。

所以从低到高逐渐比较残差水平和残差分布特性从而确定级次。当残差水平低于需求精度,并且残差分布近似钟形对称分布,则可以认为不必再增加多项式的项数了。通过上述逐步比较过程,最终确定了采用5次多项式。当多项式级次超过5次再次增加时,残差水平的降低不再显著。

比较一下采用直接极值峰位判定数据的波长定标与采用高斯拟合峰位判定数据的波长定标结果。由于在表1中的24个定标点中,存在着临峰间距超过光谱分辨率的点,去掉这7个点后(表中序数带星号的均是双峰组合),共计17个定标点。

图8所示为分别采用直接极值峰位判定与高斯拟合

峰位判定数据定标方程及残差分布效果,二者的 5 次多项式拟合方程系数分别如式(5)和(6)所示。

$$\lambda_{dc17} = -5.0434 \times 10^{-16} n_p^5 + 5.0789 \times 10^{-12} n_p^4 - 1.7815 \times 10^{-8} n_p^3 + 2.7188 \times 10^{-5} n_p^2 + 0.43283 n_p + 260.8 \quad (5)$$

$$\lambda_{gf17} = -1.1907 \times 10^{-15} n_p^5 + 8.2728 \times 10^{-12} n_p^4 - 2.3224 \times 10^{-8} n_p^3 + 3.0911 \times 10^{-5} n_p^2 + 0.43199 n_p + 260.78 \quad (6)$$

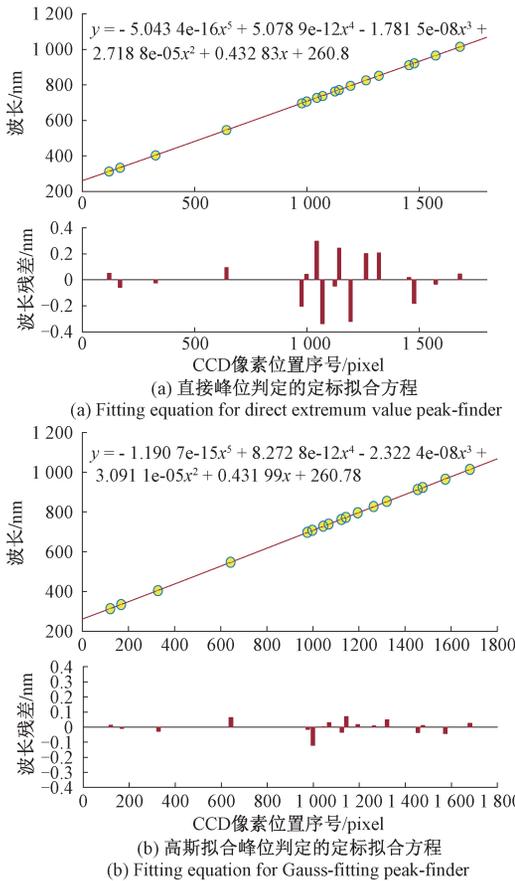


图 8 极值与高斯拟合峰位判定数据拟合方程及残差分布  
Fig.8 Fitting equations and residual distributions for direct extremum value peak-finder and Gauss-fitting peak-finder

图 9 所示为上述 2 个定标模型的残差分布及残差统计直方图的对比,直方图能够提供更为直观的残差分布效果。从残差图中可以直观看到,直接极值峰位判定数据的波长定标的残差基本上分布在 $\pm 0.4$  nm 范围内,而高斯拟合峰位判定数据的波长定标的残差大约分布在 $\pm 0.1$  nm 范围内。

通过定标方程拟合求解后的残差分布可以看出,高斯拟合方法判定出的峰位与标准波长之间的多项式拟合得到的定标方程残差非常小。用残差的标准差进行比较,直接极值比较峰位数据与标准波长之间的定标拟合时的残差标准差为  $STD_{dm} = 0.184$  nm,高斯拟合峰位数据

与标准波长之间的定标拟合时的残差标准差为  $STD_{gf} = 0.0457$  nm,大约是相邻 2 个像素之间波长间隔的 1/10。

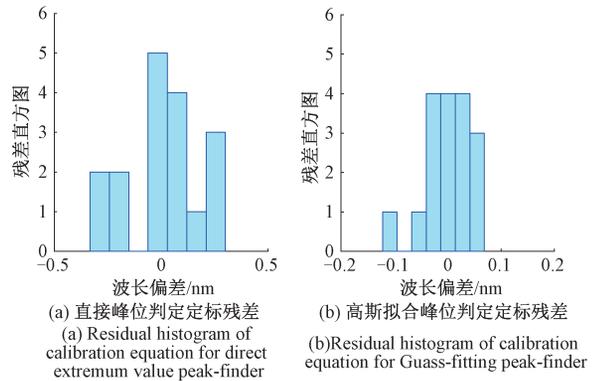


图 9 两个定标模型的残差分布统计直方图的对比  
Fig.9 Comparison of residual distribution histograms between 2 calibration models

可以看出,  $STD_{dm}$  大约是  $STD_{gf}$  的 4 倍。用定标方程拟合残差的标准差作为波长定标的不确定度的表征形式,高斯拟合方法判定的峰位的波长定标不确定度,可认为在 68% 置信水平下,  $U_{gfk1} = STD_{gf} \approx 0.05$  nm (包含因子  $k=1$ ,保留 2 位有效数字);在 95% 置信水平下,  $U_{gfk2} = 2 \times U_{gfk1} \approx 0.1$  nm (包含因子  $k=2$ )。

## 4 结 论

实验用的光谱仪波长像素间隔  $\delta\lambda \approx 0.45$  nm,不进行像素插值的情况下,波长的测量误差一般可用半像素间隔 ( $\delta\lambda/2$ ) 表示。波长定标精度只需要小于  $\delta\lambda/2 = 0.225$  nm 即可。根据本文分析结果,高斯拟合峰位判断方法下的波长定标精度用  $U_{gfk2}$  表征时约为 0.1 nm,已经显著小于半像素间隔误差,该方法下得到的 5 次多项式拟合方程可以作为波长定标方程。而用直接像素极值比较峰位判定方法下的波长定标不确定度约为 0.37 nm,大于半像素间隔误差,在波长精度要求不高时也可以采用,只是波长定标环节已经扩大了测量误差。通过本文的波长定标过程的实验及数据分析,可以得到以下结论:

1) 光谱分辨率 FWHM 决定了定标点之间的邻峰最小间隔,小于光谱分辨率的临峰间隔无法被分开,即小于波长分辨率的邻峰定标点不能参与波长定标;像素采样间隔不能小于 FWHM,要准确识别谱峰,FWHM 至少应该是像素采样间隔 2 倍以上。

2) 高斯拟合的峰位判定是一种基于多像素轮廓统计拟合的峰位判定算法,是一种能够实现超像素分辨水平的峰位判定方法,这种能力主要是来自于该算法的多像素统计优势。当直接极值判定峰位与高斯拟合判定峰位显著超过半个像素,可以认为是由于噪声的影响,导致直

接判定峰位没有选择更接近对称中心的那个像素,而选择了偏离对称中心的相邻像素。

3) 最小二乘平差拟合是求解波长定标方程的常用方法,多项式的幂次选择会影响波长定标精度。对精度要求高时,适当地提高多项式的幂次是十分必要的,因为像素位置与波长之间具有一定程度的非线性关系,这是由衍射方程与平场校正等光学系统参数决定的。

4) 指出降噪处理、峰位判定算法、以及最小二乘拟合平差是控制波长定标精度的3个关键环节,多次测量平均算法中的测量次数 $N_m$ ,高斯拟合峰位判定算法中的像素 $N_n$ ,以及多项式拟合幂次 $N_p$ ,这3个参数可以认为是组合算法中的3个关键参数,通过选择适当的参数值( $N_m=10, N_n=2 \times 5 + 1 = 11, N_p=5$ ),可以有效地将波长定标拟合残差标准差低至大约 $1/10$  pixel 波长间隔。这充分显示了波长定标误差与硬件系统的量化采样误差之间的关系。波长定标作为计量环节,只有其精度显著高于硬件系统的量化采样精度时,在不确定度合成过程中,才能够有效确保光谱仪系统的最终标称的精度指标主要是由硬件系统的量化采样精度决定。若在定标方程系数固化过程中引入误差水平等同于量化采样误差,在实际应用中波长测量误差就是在量化采样和波长定标方程计算环节上叠加引入2次误差,将造成测量误差成倍扩大。

## 参考文献

- [1] 张琳,周金池. 近红外光谱仪主要性能指标及研究进展[J]. 分析仪器, 2010(5):1-5.  
ZHANG L, ZHOU J CH. Main performance indexes and research progress of near-infrared spectrometer [J]. Analytical Instrumentation, 2010(5):1-5.
- [2] HUENI A, DAMM A, KNEUBUEHLER M, et al. Field and airborne spectroscopy cross validation—some considerations [J]. IEEE Journal of Selected Topics in Applied Earth Observations & Remote Sensing, 2017, 10(3):1117-1135.
- [3] REDONDAS A, NEVAS S, BERJÓNA, et al. Wavelength calibration of Brewer spectrophotometer using a tunable pulsed laser and implications to the Brewer ozone retrieval [J]. Atmospheric Measurement Techniques, 2018, 11(6):3759-3768.
- [4] 高明,许黄蓉. 低成本光谱仪的研制[J]. 光学仪器, 2017, 39(2):77-80.  
GAO M, XU H R. Development of low-cost spectrometer[J]. Optical Instruments, 2017, 39(2):77-80.
- [5] 谢炜,裘燕青. 一种微型光纤光谱仪的研制及其性能

测试[J]. 中国计量学院学报, 2012, 23(2):115-119.  
XIE W, QIU Y Q. Development and performance testing of portable fiber spectrometer [J]. Journal of China University of Metrology, 2012, 23(2):115-119.

- [6] 李学青,王双保,王林月. 基于STM32和CPLD的小型化近紫外CCD光谱仪[J]. 仪表技术与传感器, 2016(2):18-20.  
LI X Q, WANG SH B, WANG L Y. Design on Small-size Near Ultraviolet CCD Spectrometer Based on STM32 and CPLD [J]. Instrument Technique and Sensor, 2016(2):18-20.
- [7] LI ZH G, LIN CH, LI CH L, et al. Prelaunch spectral calibration of a carbon dioxide spectrometer [J]. Measurement Science and Technology, 2017, 28(6):1-9.
- [8] SUN Y C, HUANG C, XIA G, et al. Accurate wavelength calibration method for compact CCD spectrometer [J]. Journal of the Optical Society of America A-Optics, Image Science & Vision, 2017, 34(4):498-505.
- [9] LAURA M, ALASDAIR M A, ANDREAS H, et al. Optimized spectrometers characterization procedure for near ground support of ESA FLEX observations: Part 1 spectral calibration and characterisation [J]. Remote Sensing, 2018, 10(289):1-19.
- [10] LIU K, YU F H. Accurate wavelength calibration method using system parameters for grating spectrometers [J]. Optical Engineering, 2013, 52(1):3603-1-3603-6.
- [11] 刘恩超,郑小兵,李新,等. 绝对光谱辐照度仪的波长定标[J]. 光学精密工程, 2013, 21(3):608-615.  
LIU EN CH, ZHENG X B, LI X, et al. Wavelength calibration of absolute irradiance spectra-radiometer [J]. Optics and Precision Engineering, 2013, 21(3):608-615.
- [12] 董冰,郑峰,石晓光,等. 基于多项式拟合残差法的光纤光谱仪的波长定标方法研究[J]. 长春理工大学学报(自然科学版), 2017, 40(1):14-18.  
DONG B, ZHENG F, SHI X G, et al. Wavelength calibration of the fiber optic spectrometer based on the polynomial fitting residual error method [J]. Journal of Changchun University of Science and Technology (Natural Science Edition), 2017, 40(1):14-18.
- [13] 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.  
JU J W, NIE J H, ZHANG ZH H, et al. Research on wavelength calibration of linear-CCD UV spectrometer [J]. Infrared, 2017, 38(6):24-29.
- [14] MA Y, XIA G, HUANG CH, et al. A simple and

accurate wavelength calibration method for CCD-spectrometer[J]. *Infrared & Laser Engineering*, 2018, 47(S1): S117002-1; S117002-7.

- [15] GAIGALAS A K, WANG L, HE H J, et al. Procedures for wavelength calibration and spectral response correction of CCD array spectrometers[J]. *Journal of Research of the National Institute of Standards & Technology*, 2009, 114(4): 215-228.
- [16] CRAIG J S, MARC L S, JOSEPH R. Wavelengths of spectral lines in mercury pencil lamps [J]. *Applied Optics*, 1996, 35(1): 74-77.

## 作者简介



刘丽莹, 2004 年于吉林大学获得学士学位, 2007 年于长春理工大学获得硕士学位, 现为长春理工大学理学院博士研究生, 主要研究方向为光谱学与成像技术。  
E-mail: liying\_ivy@126.com

**Liu Liying** received her B. Sc. degree from Jilin University in 2004, M. Sc. degree from Changchun University of Science and Technology in 2007. Now she is a Ph. D. candidate in Changchun University of Science and Technology. Her main research interests include spectroscopy and imaging technology.



**李野**(通信作者), 分别在 1992 年、2003 年和 2011 年于长春理工大学获得学士学位、硕士学位和博士学位, 现为长春理工大学研究员, 主要研究方向为光电成像器件与系统。

E-mail: liyecust@163.com

**Li Ye** (Corresponding author) received his B. Sc., M. Sc. and Ph. D. degrees all from Changchun University of Science and Technology in 1992, 2003 and 2011, respectively. Now he is a research fellow in Changchun University of Science and Technology. His main research interests include photoelectric imaging devices and systems.