

# 基于粒子群寻优的光谱仪波长误差修正方法\*

王智宏<sup>1,2,3</sup>, 陈琛<sup>3</sup>, 千承辉<sup>1,2,3</sup>, 刘杰<sup>1,2,3</sup>

(1. 吉林大学 地球信息探测仪器教育部重点实验室 长春 130021; 2. 吉林大学 地球探测技术及仪器国土资源部重点实验室 长春 130021; 3. 吉林大学仪器科学与电气工程学院 长春 130021)

**摘要:**为了提高便携式光栅扫描近红外光谱仪扫描波长的准确性,利用平面衍射光栅的色散公式,结合扫描机构中光栅、摆杆与丝杠之间的位置与传动关系,建立了光谱仪波长修正数学模型,提出了基于粒子群优化算法确定波长修正模型参数、基于波长修正模型的杆长比全谱对比寻优确定杆长和修正参数调节量、对光谱仪施以硬件结构调节软件补偿的波长修正方法,并利用标准光源的特征波长,对自制便携式近红外光谱仪进行了波长修正实验。实验结果表明,经波长修正后光谱仪的波长准确性优于 $\pm 1$  nm,满足光谱仪波长准确性的要求,验证了光谱仪波长误差分析的正确性与修正方法的有效性。

**关键词:** 便携式近红外光谱仪; 波长准确性; 误差修正; 波长修正模型; 粒子群优化算法

**中图分类号:** TH763      **文献标识码:** A      **国家标准学科分类代码:** 140.30

## Spectrometer wavelength error correction method based on particle swarm optimization

Wang Zhihong<sup>1,2,3</sup>, Chen Chen<sup>3</sup>, Qian Chenghui<sup>1,2,3</sup>, Liu Jie<sup>1,2,3</sup>

(1. Key Laboratory of Geo-exploration Instruments, Ministry of Education, Jilin University, Changchun 130021, China;  
2. Key Laboratory of Geo-exploration Technologies and Instruments, Ministry of Land and Resources, Jilin University, Changchun 130021, China; 3. College of Instrumentation & Electrical Engineering, Jilin University, Changchun 130021, China)

**Abstract:** In order to improve the accuracy of the scanning wavelength of the portable grating scanning near infrared spectrometer, on the basis of the dispersion formula of plane diffraction grating and the position & mechanical transmission relationship among the grating, swing rod and screw in the scanning mechanism, a mathematical model of spectrometer wavelength correction is built, and a wavelength correction method is proposed. The method includes three processes. First, the parameters of the wavelength correction model are determined based on particle swarm optimization algorithm. Second, the swing rod length and the correction value of the wavelength are determined based on the swing rod length ratio of the wavelength correction model and full spectrum comparison optimization. Third, the hardware structure adjustment and soft parameter compensation are conducted on the spectrometer. The characteristic wavelength of a standard light source was used to perform wavelength correction experiment on the self-developed portable near-infrared spectrometer. The experiment results indicate that after wavelength correction the wavelength accuracy of the spectrometer is better than  $\pm 1$  nm, which satisfies the spectrometer wavelength accuracy requirement, and the results verify the correctness of the spectrometer wavelength error analysis and the effectiveness of the wavelength correction method.

**Keywords:** portable near-infrared spectrometer; wavelength accuracy; error correction; wavelength correction model; particle swarm optimization algorithm

## 0 引言

光谱仪是一种用于物质光谱研究与分析的仪器,在农业、视频、化工、航空航天、生态环境等领域得到了大面积的推广应用<sup>[1-2]</sup>。光谱仪发展至今种类繁多,色散型光谱仪中基于光栅作为分光元件的光谱仪应用最广泛<sup>[3-4]</sup>,该类型的光谱仪由于波长与光栅转角并非简单的线性关系,而是正弦关系,因此光栅的旋转多采用凸轮机构、正弦机构或者余割杠杆机构实现波长的扫描<sup>[5]</sup>。光栅扫描型光谱仪的波长准确性取决于扫描机构的机械加工精度与安装的准确性。

当光栅扫描机构在装配过程中存在误差时,光谱仪扫描输出波长必然偏离设计值,产生波长误差,如何减小或补偿这种波长误差是一个值得研究的问题。针对此问题通常使用具有已知光谱峰值谱线的标准光源或标准样品结合拟合或差值算法,利用标准谱线建立波长和正弦传动机构的转角或探测器的像素的满足系统要求的近似对应关系。王明志等人<sup>[6]</sup>分析了光栅色散型成像光谱仪的光学结构和工作环境参数,建立了二次拟合函数,对光谱通道的中心波长进行了标定。为了使拟合公式更符合分光系统波长的实际分布,Cho J等人<sup>[7]</sup>基于图像传感器电荷耦合元件(charge-coupled device, CCD)的光栅光谱仪,采用了双三角项函数对波长和像素位置的标定,双三角项函数拟合的标准误差较多项式函数拟合的提高了0.005 nm。但无论是多项式还是三角函数作为拟合函数,波长标定精度在远离已知标准谱线的像素位置会有所下降。因此, Kim J等人<sup>[8]</sup>采用低相干干涉原理在已知图谱中产生干涉图样和窄带光源映射到抽样,再通过多点插值的方法进行波长校正,此法比常规方法精度高,但需要宽带光源和干涉仪等额外器件。余镇岗<sup>[9]</sup>提出了基于波导梳状滤波器对光谱仪了波长校正,解决了校准基线不足和特征峰分布不均的问题。这两种方法都有效地改善多项式拟合方法精度低的缺陷。为了提高多项式的波长标定精度,还需要参与拟合的标准波长尽可能地多,而且要大致均匀地覆盖全部波段,但一般标准光源谱线范围和谱线数量相对较少,而且易受光谱仪分辨率的限制,使所用的标准谱线更少,这样就限制了波长标定的精度。

Wang Q. P. 等人<sup>[10]</sup>和 Fu Q 等人<sup>[11]</sup>分析了定包含角光栅单色仪误差产生的原因,提出了误差模型参数拟合方法; Du X. W. 等人<sup>[12]</sup>和 Liu K 等人<sup>[13]</sup>等对固定光栅光谱仪进行了参数拟合波长校正方法研究,实验对比验证了参数拟合方法比多项式拟合方法的校正精度高。但参数拟合方法是基于光谱仪的光学和结构参数推导出的方程,拟合过程是对方程里参数逐一进行误差最小迭代。

需要注意的是,如果方程里参数初值选取不合适,或者光谱仪安装过程中参数误差较大时,可能无法得到合理的参数拟合结果。

王智宏等人<sup>[14]</sup>基于建立的光栅正弦扫描型单色仪的机械位置误差方程,提出一种利用标准光源的特征波长及对应的光谱仪扫描波长进行方程变参数联立求解、寻优确定最佳调节量和补偿量,通过硬件调节、软件修正实施校正的方法。但这种方法在方程联立参数求解时,由于光谱仪波长扫描精度的局限性,存在无解的情况,从而导致该波长校正方法无法实施。

粒子群算法最早是在1995年由 Kennedy J 等人<sup>[15]</sup>率先提出的一种基于种群全局搜索算法演变而来,该算法具有收敛快、精度高、易实现的优点,对非线性、多峰值以及不可微分等问题都可提供有效解<sup>[16]</sup>,在科学与工程领域如电网智能控制<sup>[17]</sup>、无人机航迹规划<sup>[18]</sup>以及城轨列车节能驾驶<sup>[19]</sup>等方面均有应用。

本文针对实验室自主研制的光栅扫描型漫反射近红外光谱仪(型号 PISA-S)<sup>[20]</sup>,依据光栅分光色散公式,结合扫描机构中光栅、摆杆与丝杠之间的机械传动关系,建立光谱仪扫描机构机械位置误差的波长修正模型,提出采用粒子群算法确定修正模型参数、最值寻优确定调整参数和补偿参数,通过仪器软硬件联合调整补偿校正提高光谱仪的波长精度。

## 1 光谱仪波长误差分析

### 1.1 光栅分光原理

实验室自主研制近红外光谱仪采用的是艾伯特-法斯特光路分光系统<sup>[20]</sup>,根据光栅衍射理论<sup>[21]</sup>,光栅的衍射方程为:

$$d[\sin\varphi - \sin(\varphi')] = b\lambda \quad (1)$$

式中: $d$ 是光栅常数(光栅刻线的间距), $\varphi$ 是相对于光栅法线的入射角, $\varphi'$ 是相对于光栅法线的衍射角。 $b$ 是衍射光谱的级数,取1; $\lambda$ 为衍射光线的波长值。

设 $\alpha = (\varphi - \varphi')/2$ , $\Omega = (\varphi + \varphi')/2$ ,式(1)化简为:

$$\lambda = 2d\cos\alpha\sin\Omega \quad (2)$$

设 $a = 2d\cos\alpha$ 为光栅角度参数,代入式(2)得:

$$\lambda = a\sin\Omega \quad (3)$$

### 1.2 光栅扫描机构

光栅光谱仪的扫描传动机构(见图1)采用精密丝杠螺母、杆子摆杆的正弦机构,实现分光系统中光栅的连续扫描,为系统提供与丝杠转角及螺母位移 $S$ 呈线性变化的波长 $\lambda_0$ <sup>[22]</sup>。

$$\lambda_0 = a\sin\Omega = a_0S/L_0 \quad (4)$$

式中: $a_0$ 为光栅角度参数的设计值, $L_0$ 为摆杆的长度的

设计值。此时要求光谱仪在光零位置(即  $\varphi = \varphi'$ )时摆杆中心线垂直于丝杠轴线,即光零误差角  $\beta = 0$ 、光零初始位移  $S_0 = 0$ 、螺母导向面垂直丝杠轴线,即  $\theta = 0$ 。

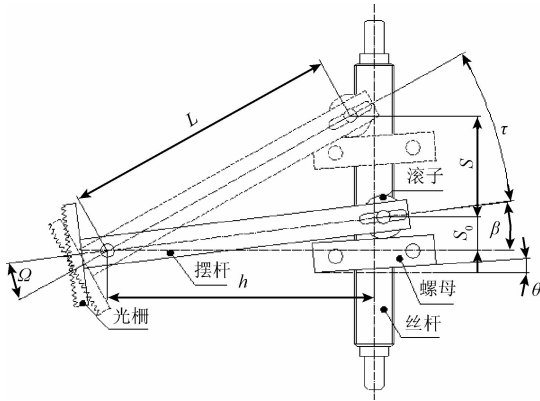


图1 实际扫描机构

Fig.1 Schematic diagram of the actual scanning mechanism

若实际光谱仪参数偏离设计值,光栅的入射光线与出射光线之间的夹角为  $2\alpha$ ,实际摆杆长度为  $L$ ,光零误差角  $\beta$ 、螺母倾斜角  $\theta$ 、光零初始位移  $S_0$  均不为0,扫描机构如图1所示,其中摆杆旋转角  $\tau$  等于光栅转角  $\Omega$ 。由图1可知:

$$\sin\beta = \frac{S_0 - (h - L\cos\beta)\tan\theta}{L} \quad (5)$$

$$\sin(\beta + \tau) = \frac{S + S_0 - [h - L\cos(\beta + \tau)]\tan\theta}{L} \quad (6)$$

式(5)与(6)做差,并整理得:

$$\frac{\sin(\beta + \tau - \theta) - \sin(\beta - \theta)}{\cos\theta} = \frac{S}{L} = \frac{S}{L_0} \cdot \frac{L_0}{L} \quad (7)$$

由式(3)得  $\sin\tau = \sin\Omega = \lambda/a$ ,由式(4)得  $S/L_0 = \lambda_0/a_0$ ,分别代入式(7),整理得:

$$\lambda_0 = \left( \frac{\lambda}{a} \cos\gamma + \sqrt{1 - \frac{\lambda^2}{a^2} \sin\gamma - \sin\gamma} \right) kL \quad (8)$$

式中: $\gamma = \beta - \theta$ ,  $\lambda$  为实际的光谱仪输出波长,  $k$  为结构误差参数。

$$k = \frac{a_0}{L_0 \cos\theta} \quad (9)$$

## 2 光谱仪波长修正方法

### 2.1 波长修正数学模型的建立

根据式(8),由于光谱仪中光零误差角  $\beta$  和螺母倾斜角  $\theta$  的存在,导致理论波长  $\lambda_0$  (设计值或读数) 偏离实际波长  $\lambda$  (真值)。光谱仪输出波长  $\lambda_0$  由  $a$ 、 $\gamma$ 、 $k$ 、 $L$ 、 $\lambda$  等5个参数决定。在光谱仪的机械机构中,实际的摆杆

长度、光零位置、螺母倾斜角以及光路夹角相对于理论数据都存在误差。在实际误差修正中,反光镜和光栅的安装位置、丝杠位置都不易调整,而摆杆长度  $L$  是一个易于实现调整的参数,因此考虑摆杆长度  $L$  作为光谱仪调整的参数减小波长误差。设调整后杆长与原杆长之比为  $n$  (杆长比),并增加波长误差修正量  $c$ 。则式(8)可表示为:

$$\lambda_0 = \left( \frac{\lambda}{a} \cos\gamma + \sqrt{1 - \frac{\lambda^2}{a^2} \sin\gamma - \frac{\sin\gamma}{n}} \right) nkL - c \quad (10)$$

式(10)为光谱仪的波长修正模型。式中  $a$ 、 $\lambda$ 、 $c$  的单位为  $\text{nm}$ ,  $L$  的单位为  $\text{mm}$ ,根据式(9),  $k$  的单位为  $\text{nm/mm}$ 。

### 2.2 波长修正模型参数的确定

波长修正方程式(10)中有6个参数,其中  $n$  为调节参数,仪器未调节时  $n = 1$ ;其他的  $a$ 、 $\gamma$ 、 $k$ 、 $L$ 、 $c$  等5个参数,可根据仪器的各参数实际值或设计值获得,但必定会引入误差。而利用标准光源的特征波长及对应的光谱仪扫描波长进行方程变参数联立求解<sup>[10]</sup>也是一个可行的方法,由于光谱仪波长扫描精度的局限性,存在无解的情况,因此提出采用粒子群算法寻优求解。

#### 2.2.1 粒子群算法原理

粒子群优化算法是在区域内搜索寻优求解<sup>[23]</sup>。在一个  $F$  维空间中进行最优值的搜索,种群有  $M$  个粒子组成,其中第  $i$  个粒子的位置用一个  $F$  维向量  $X(i, :) = (x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{iF})$  表示,此时的寻优速度为  $V(i, :) = (v_{i1}, v_{i2}, \dots, v_{iF})$ ,该粒子的个体最优位置为  $P(i) = (p_{i1}, p_{i2}, \dots, p_{iF})$ ,整个种群的全局最优位置为  $Pg = (p_{g1}, p_{g2}, \dots, p_{gF})$ ,利用公式(11)、(12)分别更新下一个位置的寻优速度及寻优位置。

$$v(t+1) = wv(t) + c_1 r_1 (p(t) - x(t)) + c_2 r_2 (p_{gd}(t) - x(t)) \quad (11)$$

$$x(t+1) = x(t) + v(t+1) \quad (12)$$

式中: $t$  为当前的迭代次数,  $x(t)$ 、 $x(t+1)$  分别为当前位置及下一个位置,  $v(t)$ 、 $v(t+1)$  分别为当前速度及下一个速度,  $w$  为惯性因子,  $c_1$ 、 $c_2$  为学习因子,  $r_1$ 、 $r_2$  为分布在  $[0, 1]$  之间的随机数。

#### 2.2.2 粒子群算法模型参数求解

该粒子群算法应用波长修正模型参数的求解,具体操作步骤如下。

1) 初始化参数:设定种群规模,学习因子,惯性因子,迭代停止阈值。

2) 定义寻优区间:根据光谱仪波长修正方程中  $a$ 、 $k$ 、 $L$ 、 $\gamma$ 、 $m$  5个模型参数的理论值,在其理论值的  $\pm 10\%$  作为粒子群寻优算法的寻优区间  $F$ 。

3) 确定起始位置与起始速度:在寻优区间内随机的定义一个5维空间,设定寻优的种群规模  $z$ ,在寻优区间

内根据寻优规模随机确定每个粒子的起始位置  $x(t)$  与起始速度  $v(t)$ 。

4) 确定最佳起始位置:将每个粒子的起始位置代入目标公式得各粒子的适应度值  $f(t)$ , 选取  $f(t)$  中最小值对应的位置作为此时种群的全局最优值  $P_g(t)$ 。

5) 获取新的位置:利用式(11)与(12)获取每个粒子的下一个寻优位置  $x(t+1)$ , 此外为了防止粒子所处的位置超出  $F$  维空间, 对每个寻优位置  $x(t+1)$  都会添加一个判断, 若  $x(t+1) \notin F$  维空间, 取  $x(t+1) = x(t)$ 。

6) 判断寻优过程中的最佳位置:将每个粒子的新位置  $x(t+1)$  带入目标公式获得该位置的适应度值  $f(t+1)$ , 对比该粒子上一个位置  $x(t)$  对应的  $f(t)$  判断此粒子的个体最优位置作为  $P(t+1)$ 。然后对比所有粒子的此时的最优位置对应的  $f(t+1)$ , 选择更优的位置更新的全局最佳位置  $P_g(t+1)$ 。

7) 输出符合条件的位置参数:  $t = t + 1$ , 重复步骤 5 与步骤 6, 直至达到设置的迭代停止阈值范围, 输出此时的全局最佳位置  $P_g(t+1)$  的 5 维元素值为修正方程参数的求解值。

### 2.3 误差修正

模型各参数确定后, 根据光谱仪的波长范围利用式(10)可求得的光谱仪每个输出波长的误差  $\Delta\lambda = |\lambda - \lambda_0|$ , 若其中有大于仪器波长精度指标时, 需要调整参数  $c$  和  $n$  进行误差修正。根据杆长的调节范围, 选取一定范围的  $n$  值, 通过计算不同  $n$  值时光谱仪的波长范围内  $\Delta\lambda$  的最大偏差  $\Delta\lambda_{\max}$  以及平均值  $\Delta\lambda_{\text{mean}}$ 。选取  $\Delta\lambda_{\max}$  最小时的  $n$  值作为最优杆长比  $n_{\text{op}}$ , 则摆杆长度调节值为:

$$\Delta_L = (n_{\text{op}} - 1)L \quad (13)$$

此时波长误差值的均值  $\Delta\lambda_{\text{mean}}$ , 通过调整  $c$  值消除。则新的波长修正模型方程中的参数  $n$  和  $c$  分别为:

$$n_{(\text{新})} = n_{\text{op}} \quad c_{(\text{新})} = c_{(\text{旧})} - \Delta\lambda_{\text{mean}} \quad (14)$$

代入式(10)检验光谱仪的波长误差是否满足精度要求。

## 3 实 验

### 3.1 实验器材

1) 实验仪器:实验室自主研发的便携式近红外光谱仪器(采用平面光栅扫描, 波长范围 1 200 ~ 2 800 nm 可选, 波长重复性:  $\pm 1 \text{ nm}@1 300 \sim 2 600 \text{ nm}$ , 扫描间隔 1 ~ 8 nm 可选; 积分球取样; PbS 传感器及自制信号转换放大和光谱信号采集控制电路), 红光激光模组(功率为 5 mW, 波长为 649.25 nm, 可提供标准波长  $\lambda_1 = 1 298.5 \text{ nm}$ ,  $\lambda_2 = 1 947.8 \text{ nm}$ ,  $\lambda_3 = 2 597 \text{ nm}$ ), 绿光激光模组(功率为

10 mW, 波长为 532 nm, 可提供标准波长  $\lambda_1 = 1 596 \text{ nm}$ ,  $\lambda_2 = 2 128 \text{ nm}$ ,  $\lambda_3 = 2 660 \text{ nm}$ )。

2) 应用软件:实验室基于 MATLAB 平台自主研发的信号采集软件 PISA\_DEBUG。

3) 实验平台:将激光模块代替光谱仪的光源, 对准光谱仪的入射狭缝, 并在二者之间放置一个色散元件, 使激光散射后充满入射狭缝并尽量充满准直反射镜。在光谱仪与 PC 机通过 USB 数据线连接获得光谱数据。

### 3.2 实验方法

1) 标准光谱测量:利用实验平台分别测量红光和绿光激光模块的光谱数据, 采样间隔 1 nm, 扫描范围 1 300 ~ 2 800 nm。重复 10 次实验测量光谱获得每个激光模块的 10 个光谱数据。

2) 数据处理:分别提取两种激光模组特征谱线(标准波长)  $\lambda_i$  对应的每次光谱数据的峰值对应的波长值  $\lambda_{0j}$ 。其中  $i = 1 \sim 6$ ,  $j = 1 \sim 10$ 。对于每个标准波长  $\lambda_i$  对应的光谱仪输出的扫描波长值  $\lambda_{0j}$  取  $\lambda_{0j}$  出现次数最多的值。

3) 模型参数粒子群优化求解:根据实验光谱仪设计参数, 计算得:  $a = 2d\cos\alpha_0 = 6 264.6 \text{ nm}$ ,  $k = a_0/L_0\cos\theta = 133.3 \text{ nm/mm}$ , 取  $a = 6 100 \sim 6 400 \text{ nm}$ ,  $\gamma = -10^\circ \sim 10^\circ$ ,  $k = 119 \sim 150 \text{ nm/mm}$ ,  $L = 43 \sim 51 \text{ mm}$ ,  $c = -25 \sim 25 \text{ nm}$ 。则寻优区间  $F = [6 100, 6 400; -10, 10; 119, 150; 43, 51; -25, 25]$ , 区间长度分别为  $\Delta a = 300 \text{ nm}$ ,  $\Delta\gamma = 20^\circ$ ,  $\Delta k = 31 \text{ nm/mm}$ ,  $\Delta L = 8 \text{ mm}$ ,  $\Delta c = 50 \text{ nm}$ 。

设目标公式为:

$$f = \frac{1}{6} \sum_{i=1}^6 \left| \left( \frac{\lambda_i}{a} \cos\gamma + \sqrt{1 - \frac{\lambda_i^2}{a^2} \sin^2\gamma} - \frac{\sin\gamma}{n} \right) kL - c - \lambda_{0i} \right| \quad (15)$$

式中:  $\lambda_{0i}$  为 2 个激光模块测量光谱获得的峰值波长值,  $\lambda_i$  为 2 个激光模块实际光谱数据波长值(即激光模块提供的标准波长)。设置种群规模  $z = 800$ , 通过 MATLAB 中自带的函数 rand 随机生成 (0, 1) 区间内的数据, 按每个参数的寻优期间, 随机设置 800 个初始粒子位置  $x(1)$ , 初始粒子速度  $V_1(i) = (\Delta a, \Delta k, \Delta L, \Delta\gamma, \Delta c)/1 000$ , 惯性因子  $w = 0.8$ , 学习因子  $c_1 = 0.2$ ,  $c_2 = 0.8$ 。MATLAB 编程按粒子群寻优算法获得 5 个波长修正参数  $a$ 、 $\gamma$ 、 $k$ 、 $L$ 、 $m$  的值。

4) 最优法确定  $n_{\text{op}}$ :根据摆杆长度可调的最大值  $L_{\max}$  和最小值  $L_{\min}$ , 取调节杆长比  $n = [L_{\max}/L, L_{\min}/L]$ , 通过 MATLAB 计算式(10)在不同  $n$  值时, 光谱仪在  $\lambda = 1 200 \sim 2 800 \text{ nm}$  范围内波长误差  $\Delta\lambda$ 。计算得  $\Delta\lambda$  的均值  $\Delta\lambda_{\text{mean}}(n)$  和最大偏差  $\Delta\lambda_{\max}(n)$ , 选取最大偏差  $\Delta\lambda_{\max}(n)$  为最小时的  $n$  作为最优杆长比  $n_{\text{op}}$ , 取此杆长比下的  $\Delta\lambda_{\text{mean}}(n_{\text{op}})$  作为波长误差修正值  $c$  的调节量按式(14)计

算获得新的误差修正值  $c_{(新)}$ 。

5) 修正补偿测试: 依据  $n_{op}$  通过式(13) 计算摆杆长度调整量  $\Delta L$ , 按此调节量调节光谱仪的扫描机构的摆杆长度, 按  $c_{(新)}$  调节光谱仪的扫描初始波长补偿量, 重复步骤 1) 与步骤 2) 获得误差校正后的扫描波长。

### 3.3 实验结果与分析

#### 3.3.1 激光光谱测量数据处理与参数求解

重复 10 次实验测量 2 个激光模块光谱, 得每个模块的 3 个光谱数据如图 2 所示。取峰值得每个标准波长  $\lambda_i$  对应的扫描波长  $\lambda_{0ij}$ , 取  $\lambda_{0ij}$  ( $j=1 \sim 10$ ) 中相同波长值出现次数最多的结果为  $\lambda_{0i}$ , 并计算波长误差  $\Delta\lambda_i$ , 如表 1 所示。可见光谱仪当前波长误差为 55.5 ~ 88 nm, 最大偏差为 32.5 nm, 均值为 74.78 nm, 超出光谱仪波长精度  $\pm 1$  nm 的要求, 需要进行波长误差校正。

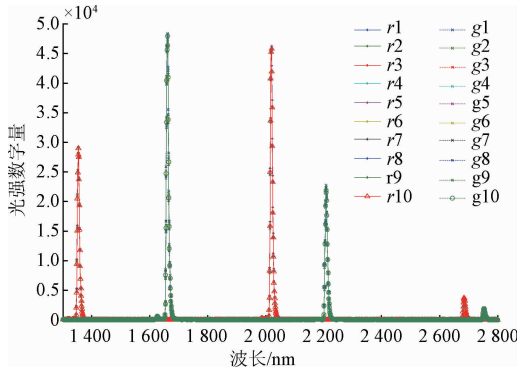


图 2 两个激光模块的 10 次光谱扫描数据

Fig. 2 Ten spectrum scanning data of two laser modules

表 1 激光特征光谱的采集数据

Table 1 The acquired data of laser characteristic spectrum before correction (nm)

序号	1	2	3	4	5	6
$\lambda$	1 298.5	1 947.8	2 597	1 596	2 128	2 660
$\lambda_0$	1 354	2 020	2 685	1 661	2 209	2 753
$\Delta\lambda = \lambda_0 - \lambda$	55.5	72.2	88	65	81	87

模型参数粒子群寻优结果为  $a = 6\ 328.65$  nm,  $\gamma = 2.5^\circ$ ,  $k = 134.876$  nm/mm,  $L = 48.97$  mm,  $c = -6.3$  nm。

#### 3.3.2 确定最优调整量

光谱仪摆杆可调节长度在 43 ~ 51 mm, 根据参数粒子群寻优获得的杆长  $L$  值 48.97 mm, 确定杆长比  $n$  的调节范围为  $[0.878\ 1, 1.041\ 5]$ 。以间隔 0.000 1, 通过 MATLAB 计算式(10) 在波长 1 200 ~ 2 800 nm 范围内不同  $n$  值时, 扫描波长误差的均值  $\Delta\lambda_{mean}(n)$  和最大偏差  $\Delta\lambda_{max}(n)$ , 如图 4 所示。波长误差最大偏差  $\Delta\lambda_{max}(n)$  对应的  $n = n_{op} = 0.973\ 2$ , 此时波长误差均值  $\Delta\lambda_{mean}(n_{op}) =$

12.65 nm, 则  $c_{(新)} = c + \Delta\lambda_{mean} = -6.3 + 12.65 = 6.35$  nm。需要调节的杆长为  $\Delta L = (n_{op} - 1)L = (0.973\ 2 - 1) \times 48.97 \approx -1.31$  mm。

当  $n = 1$  时,  $\Delta\lambda_{max}(1) = 45.42$  nm,  $\Delta\lambda_{mean}(1) = 75.13$  nm, 与实际偏差  $(74.78 \pm 16.25$  nm) 相符, 表明光谱仪扫描系统中机械安装误差分析建立的波长修正模型的正确性。

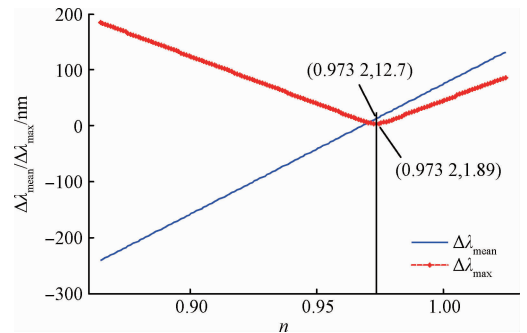


图 3 不同  $n$  值下的波长误差均值和最大偏差值

Fig. 3 The average and maximum deviation of the wavelength error under different rod length  $n$

#### 3.3.3 误差修正后的结果

将 3.3.1 节和 3.3.2 节获得的波长修正模型参数值代入式(10) 的调整后的波长修正方程式:

$$\lambda_0 = 1.014\ 6\lambda +$$

$$279.596\ 2 \times \sqrt{1 - 2.50 \times 10^{-8} \lambda^2} - 280.909\ 2 \quad (16)$$

将波长  $\lambda = 1\ 300 \sim 2\ 600$  nm 代入式(16), 计算波长误差  $\Delta\lambda$  (见图 5) 最大值为 0.93 nm, 最小值为 -0.96 nm。可见在光谱仪波长范围内, 波长误差满足仪器波长准确性好于  $\pm 1$  nm 的要求。

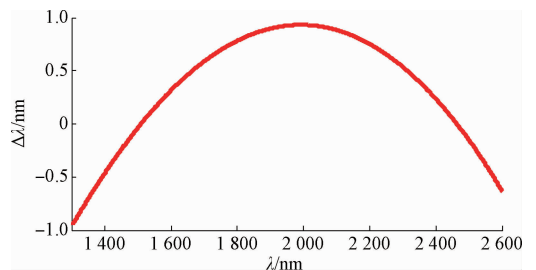


图 4 误差修正后全谱波长误差值

Fig. 4 The full spectrum wavelength error after error correction

将红光激光模块的特征波长代入式(16), 得对应的光谱仪输出波长的计算值  $\lambda'_0$ , 并计算波长误差  $\Delta\lambda'$ , 分别列于表 2 中第 3 和 4 行。修正后光谱仪在 3 个特征波长处的误差计算值  $\Delta\lambda'$  分别为 -0.97, 0.92, -0.61 nm。

按 3.3.2 节寻优结果, 调整光谱仪杆长和修正波长补偿值后, 再次进行标准光谱测量, 重复 10 次测量红光

激光模块光谱如图 5 所示,读取红光激光模块的特征波长对应的光谱仪输出波长  $\lambda_0$ ,并计算波长误差  $\Delta\lambda$ ,列于表 2 中第 5 和 6 行。修正后光谱仪在 3 个特征波长处的误差实际值  $\Delta\lambda$  分别为  $-0.85$ 、 $0.85$ 、 $0.65$  nm。 $\lambda'$ 和  $\Delta\lambda$  的差异是由于杆长调节量的实际与计算值之间的误差造成的。

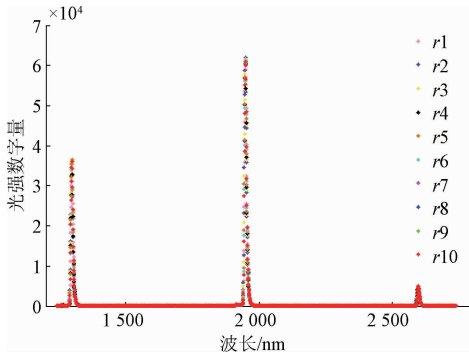


图 5 十次红激光模块光谱扫描数据

Fig. 5 Ten spectrum scanning data of the red laser module

表 2 误差修正后的光谱数据

Table 2 Laser spectrum data after error correction

	(nm)		
序号	1	2	3
$\lambda$	1 298.5	1 947.8	2 597
$\lambda'_0$	1 297.53	1 948.72	2 596.39
$\Delta\lambda' = \lambda'_0 - \lambda$	-0.97	0.92	-0.61
$\lambda_0$	1 297.65	1 948.65	2 597.65
$\Delta\lambda = \lambda_0 - \lambda$	-0.85	0.85	0.65

上述结果可见,修正补偿后光谱仪波长准确性优于  $\pm 1$  nm,满足精度要求,验证了光谱仪扫描系统中机械安装误差的分析的正确性和波长修正方法的有效性。

## 4 结 论

本文针对光栅扫描型光谱仪,通过对其正弦扫描系统机械安装误差的分析,建立了波长修正的数学模型,设计了波长修正模型参数的粒子群寻优求解算法、基于误差修正模型杆长比全谱对比寻优调节杆长和补偿参数的波长修正方法。利用标准光源特征波长,对实验室自制光谱仪的扫描波长进行了修正实验。实验结果表明,经波长修正后光谱仪的波长准确性优于  $\pm 1$  nm,满足光谱仪波长精度的要求,验证了光谱仪扫描系统误差分析的正确性和修正方法的有效性。

## 参考文献

[ 1 ] 岳红轩,潘建根,沈海平,等. 快速光谱分析系统及其性能评估[J]. 照明工程学报,2007,18(4):25-28.  
YUE H X, PAN J G, SHEN H P, et al. High accuracy array spectrometer and the valuation of accuracy for color measurement [ J ]. China Illuminating Engineering Journal, 2007, 18(4):25-28.

[ 2 ] 李昌厚. 现代光谱仪器及其应用的最新进展[J]. 光谱仪器与分析,2011(增刊1):178-185.  
LI CH H. The latest development of modern spectroscopy instruments and their applications [ J ]. Spectral Instruments & Analysis, 2011(Suppl. 1):178-185.

[ 3 ] 齐晓,韩建国,李曼莉. 近红外光谱分析仪器的的发展概况[J]. 光谱学与光谱分析,2007,27(10):2022-2026.  
QI X, HAN J G, LI M L. Survey of the development of near-infrared spectroscopy instruments [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2007,27(10):2022-2026.

[ 4 ] PUEGNER T, KNOBBE J, LAKNER H. Basic angles in microelectromechanical system scanning grating spectrometers [ J ]. Applied Optics, 2011, 50(24):4894-4902.

[ 5 ] 李全臣,蒋月娟. 光谱仪器原理[M]. 北京:北京理工大学出版社,1999.  
LI Q CH, JIANG Y J. Principle of spectrometer[M]. Beijing: Beijing Institute of Technology Press,1999.

[ 6 ] 王明志,晏磊,杨彬,等. 光栅色散型成像光谱仪室内外光谱定标中心波长偏移研究[J]. 光谱学与光谱分析,2013,33(8):2280-2285.  
WANG M ZH, YAN L, YANG B, et al. Central wavelength shift analysis between laboratory and field spectral calibrations of grating based imaging spectrometer [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2013, 33(8):2280-2285.

[ 7 ] CHO J, GEMPERLINE P J, WALKER D. Wavelength calibration method for a CCD detector and multichannel fiber-optic probes [ J ]. Applied Spectroscopy, 1995, 9(12):1841-1845.

[ 8 ] KIM J, HAN J, JEONG J. Accurate wavelength calibration method for spectrometer using low coherence interferometry [ J ]. Journal of Lightwave Technology, 2015, 33(16):3413-3418.

[ 9 ] 余镇岗. 便携式拉曼光谱仪的设计及定标方法研究[D]. 上海:上海交通大学,2015.  
YU ZH G. Design of portable raman spectrometer and research on the calibration method [ D ]. Shanghai: Shanghai Jiao Tong University, 2015.

[ 10 ] WANG Q P, ZHANG Y W. A simple method for wavelength calibration of monochromators with a sine



- drive [J]. Review of Scientific Instruments, 1995, 66(2): 2284-2286.
- [11] FU Q, RAH S Y, LU S K, et al. Characteristics of the relation between wavelength and displacement in monochromators with a sine drive[J]. Nuclear Inst and Method in Physics Research A, 2007, 580(3): 1522-1525.
- [12] DU X W, LI C Y, WANG Q P. Accurate wavelength calibration method for flat-field grating spectrometers[J]. Applied Spectroscopy, 2011, 65(9): 1083-1086.
- [13] LIU K, YU F H. Accurate wavelength calibration method using system parameters for grating spectrometers [J]. Optical Engineering, 2013, 52(1): 3603.
- [14] 王智宏, 刘杰, 陈琛, 等. 单色仪扫描波长机械位置误差的校正方法: CN106500839A [P]. 2017.  
WANG ZH H, LIU J, CHEN CH, et al. A method for correcting mechanical position errors of scanning wavelengths in monochromator: CN106500839A [P]. 2017.
- [15] KENNEDY J, EBERHART R. Particle swarm optimization [C]. IEEE International Conference on Neural Networks, 1995: 1942-1948.
- [16] EBERHART R, KENNEDY J. A new optimizer using particle swarm theory [C]. IEEE International Symposium on MICRO Machine and Human Science, 1995: 39-43.
- [17] 刘先正, 温家良, 潘艳, 等. 采用改进粒子群算法的直流电网最优潮流控制[J]. 电网技术, 2017, 41(3): 715-720.  
LIU X ZH, WEN J L, PAN Y, et al. OPF control of DC-grid using improved PSO algorithm [J]. Power System Technology, 2017, 41(3): 715-720.
- [18] 方群, 徐青. 基于改进粒子群算法的无人机三维航迹规划[J]. 西北工业大学学报, 2017, 5(1): 66-73.  
FANG Q, XU Q. 3D Route planning for uav based on improved PSO algorithm [J]. Journal of Northwestern Polytechnical University, 2017, 35(1): 66-73.
- [19] 黄友能, 宫少丰, 曹源, 等. 基于粒子群算法的城轨列车节能驾驶优化模型[J]. 交通运输工程学报, 2016, 16(2): 118-124.  
HUANG Y N, GONG SH F, CAO Y, et al. Optimization model of energy-efficient driving for train in urban rail transit based on particle swarm algorithm [J]. Journal of Traffic and Transportation Engineering, 2016, 16(2): 118-124.
- [20] 王智宏, 林君, 武子玉, 等. 便携式矿物近红外光谱仪的研制[J]. 仪器仪表学报, 2005, 26(11): 1135-1138.  
WANG ZH H, LIN J, WU Z Y, et al. Development of the portable mineral NIR spectrometer [J]. Chinese Journal of Scientific Instrument, 2005, 26(11): 1135-1138.
- [21] KINGSLAKE R, THOMPSON B J. Applied optics and optical engineering [M]. Manhattan: Academic Press, 1969.
- [22] 高明辉, 林洁琼, 廉凤慧, 等. 基于 AOTF 的便携式近红外光谱测量仪的研制[J]. 长春工业大学学报, 2008, 29(3): 314-318.  
GAO M H, LIN J Q, LIAN F H, et al. Portable NIR spectrometer based on AOTF [J]. Journal of Changchun University, 2008, 29(3): 314-318.
- [23] 曾嘉俊, 刘志刚, 黄元亮, 等. 基于子区域的粒子群优化算法研究[J]. 计算机工程, 2011, 37(14): 205-207.  
ZENG J J, LIU ZH G, HUANG Y L, et al. Research of particle swarm optimization algorithm based on sub-region [J]. Computer Engineering, 2011, 37(14): 205-207.

### 作者简介



**Wang Zhihong** received her B. Sc. degree from Tianjin University in 1990, received her M. Sc. and Ph. D. degrees both from Jilin University in 1999 and 2005, respectively. Now she is a professor and doctoral supervisor at Jilin University. Her main research interest includes the near infrared spectrum technology and application.



**Liu Jie** (Corresponding author) received her B. Sc. degree from Jilin University of Technology in 1991 and M. Sc. degree from the Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics, CAS in 1994. Now she is a professor at Jilin University. Her main research is engaged in photoelectric sensor instrument.

**王智宏**, 1990年于天津大学获得学士学位, 分别在1999年和2005年于吉林大学获得硕士学位和博士学位, 现为吉林大学教授、博士生导师, 主要研究方向为近红外光谱及应用技术的研究。

Email: zhwang@jlu.edu.cn

**刘杰** (通讯作者), 1991年于吉林工业大学获得学士学位, 1994年于长春光机所获得硕士学位, 现为吉林大学教授, 主要研究方向为光电传感器。

Email: L\_jie@jlu.edu.cn