

АЛГОРИТМ КОРРЕКЦИИ ДИФРАКЦИИ ВТОРОГО ПОРЯДКА В СПЕКТРОМЕТРЕ С ВОГНУТОЙ ДИФРАКЦИОННОЙ РЕШЕТКОЙ

С. И. Бручковская*, Г. С. Литвинович, И. И. Бручковский, Л. В. Катковский

УДК 535.421;681.785.554

Институт прикладных физических проблем им. А. Н. Севченко
Белорусского государственного университета,
220108, Минск, ул. Курчатова, 7, Беларусь; e-mail: ms.bruchkovskaya@yandex.ru

(Поступила 27 марта 2019)

Спектрометры с дифракционной решеткой видимого и ближнего ИК диапазона обладают особенностью, которая состоит в наложении спектра второго порядка дифракции на первый. Это приводит к искажениям регистрируемого спектра в длинноволновой его части. Предложен метод коррекции дифракции второго порядка, основанный на представлении спектра в виде сумм функций Гаусса, параметры которых определяются экспериментально для отдельных длин волн с последующей численной интерполяцией. Также используется параметризация формы линий во втором порядке. Описаны детали необходимого эксперимента и осуществлена проверка работоспособности метода на примере спектрометра ССП-600Н.

Ключевые слова: перекрытие порядков дифракции, дифракция второго порядка, коррекция дифракции, спектральная коррекция, алгоритм коррекции, постобработка, спектрометр с дифракционной решеткой.

Spectrometers with a diffraction grating of the visible and near IR range have a feature that consists in superimposing a spectrum of the second diffraction order on the first. This leads to distortions of the recorded spectrum in its long-wave region. A second-order diffraction correction method is proposed, based on the representation of the spectrum as the sum of Gauss functions, the parameters of which are determined experimentally for individual wavelengths with subsequent numerical interpolation. Parameterization of the line shape in the second order is also used. The details of the required experiment are described and the method is tested on the example of the SSP-600N spectrometer.

Keywords: diffraction orders overlap, second-order diffraction, diffraction correction, spectral correction, method of correction, post processing method, grating spectrometer.

Введение. Широкий круг задач оперативного мониторинга земной поверхности решается с помощью малогабаритных спектрометров. В частности, с помощью спектрального анализа подстилающей поверхности можно проводить контроль за чрезвычайными ситуациями, состоянием лесных и сельских угодий, процессами в экологии и геологии [1]. Основные преимущества спектрометров с вогнутой дифракционной решеткой в качестве диспергирующего элемента — минимальное число элементов в оптической схеме, возможность регистрации широкого диапазона длин волн и компактный размер. Однако в режиме работы в широком диапазоне длин волн спектрометры с вогнутой дифракционной решеткой имеют существенный недостаток, который состоит в наложении спектров, формируемых в различных порядках дифракции. Это приводит к искажению регистрируемых спектров и сложностям в их дальнейшей интерпретации и обработке.

ALGORITHM OF SECOND-ORDER DIFFRACTION CORRECTION IN THE SPECTROMETER WITH A CONCAVE DIFFRACTION GRATING

S. I. Bruchkouskaya*, G. S. Litvinovich, I. I. Bruchkousky, L. V. Katkovsky (A. N. Sevchenko Institute for Applied Physical Problems, Belarusian State University, 7 Kurchatov Str., Minsk, 220108, Belarus; e-mail: ms.bruchkovskaya@yandex.ru)

Проблема наложения порядков частично может быть решена с помощью корректирующей пластинки, которая представляет собой интерференционный фильтр, устанавливаемый на детекторе непосредственно [2] либо с небольшим воздушным зазором и ослабляющий кратные дифракционные порядки. Интегрирование такой пластинки в спектрометр является нетривиальной задачей и не решает проблему полностью, при этом качество спектра ухудшается, так как фильтр создает дополнительные волнообразные искажения.

В мировой практике проблема наложения вторых порядков, как правило, решается с помощью отрезающих фильтров, которые устанавливаются перед спектрометром [3]. Однако подобные решения увеличивают массогабаритные характеристики прибора и приводят к увеличению времени регистрации спектра, что в некоторых задачах дистанционного зондирования Земли (ДЗЗ) является критичным. Существует способ теоретического расчета спектров дифракции высших порядков [4], который не учитывает индивидуальных особенностей спектрометра. Следовательно, его результаты нуждаются в проверке для использования на практике. Часто применяются методы коррекции, в которых спектр дифракции второго порядка рассчитывается с учетом зависимости отношения интенсивностей второго порядка к первому. Для определения данной зависимости измеряются параметры узкополосных [2, 5] или широкополосных источников излучения [6, 7]. Отметим, что в таких случаях не учитываются уширение и форма линий во втором порядке.

В данной работе предлагается аналитический метод коррекции дифракции второго порядка, учитывающий как форму, так и интенсивность линий во втором порядке. Работоспособность метода продемонстрирована на примере спектрометра ССП-600Н.

Малогабаритный спектрометр ССП-600Н разработан в НИИ ПФП им. А. Н. Севченко БГУ для задач ДЗЗ, а также подспутниковых измерений коэффициента спектральной яркости подстилающей поверхности. Спектрометр построен по схеме с вогнутой голографической дифракционной решеткой, имеет рабочий диапазон 350—1050 нм и разрешение 4.2 нм. В качестве детектора используется неохлаждаемая ПЗС-линейка Toshiba TCD1304DG (3648 пикселей, разрядность 12 бит). Для определения темного сигнала в данной ПЗС-линейке реализована возможность регистрации сигнала темновых пикселей. Для ССП-600Н имеется проблема наложения спектра второго порядка из диапазона 350—525 нм на спектр первого порядка в области 700—1050 нм.

Алгоритм коррекции дифракции второго порядка. В основе предлагаемого алгоритма коррекции лежит предположение о том, что паразитный спектр второго порядка может быть восстановлен из коротковолновой области спектра первого порядка (неискаженный спектр) в диапазоне 350—525 нм и впоследствии скомпенсирован в длинноволновой области, где он накладывается на спектр первого порядка. Сложность решения такой задачи состоит в том, что восстановление спектра второго порядка по неискаженному спектру первого порядка для каждого прибора уникально, так как зависит от эффективности конкретной решетки, спектральной чувствительности детектора, ширины входной щели, параметров системы освещения входной щели, особенностей юстировки оптических элементов спектрометра. Кроме того, необходимо учитывать способ освещения входной щели спектрометра. Поскольку в задачах ДЗЗ, как правило, источник излучения диффузный, при проведении эксперимента необходимо использовать аналогичный источник.

Научная гипотеза данной работы заключается в том, что каждая монохроматическая линия, подаваемая на вход спектрометра, имеет свой однозначный образ в пространстве линий второго порядка. Тогда, регистрируя какую-либо квазимонохроматическую линию и ее образ во втором порядке, можно определить для данного спектрометра преобразующую функцию g , согласно которой происходит преобразование линии первого порядка h_i в ее образ \tilde{h}_i :

$$h_i \xrightarrow{g} \tilde{h}_i. \quad (1)$$

Пусть преобразующая функция g для данного спектрометра уже известна. Если представить неискаженную часть (в нашем случае диапазон 350—525 нм) спектра f_1 в виде суперпозиции функций Гаусса

$$f_1(\lambda) \approx \sum_{i=1}^N h_i(\lambda) = \sum_{i=1}^N A_1^i \exp\left[-\frac{4(\lambda - \lambda_1^i)^2 \ln 2}{(W_1^i)^2}\right] \quad (2)$$

(λ — длина волны; A_1^i , W_1^i , λ_1^i — амплитуда, ширина на полувысоте (полуширина), длина волны в максимуме функции h_i соответственно; N — число функций h_i), то по формуле (1) для каждой

функции h_i можно вычислить соответствующую ей функцию \tilde{h}_i во втором порядке и восстановить паразитный спектр по формуле:

$$\tilde{H}(\lambda) = \sum_{i=1}^N \tilde{h}_i. \quad (3)$$

Формула (3) несет в себе вполне определенный физический смысл: неискаженная часть спектра представляется в виде суперпозиции аппаратных функций данного конкретного спектрометра, соответствующих квазимонохроматическим линиям. Тогда скорректированный спектр f' в области наложения порядков:

$$f'(\lambda) = f_2(\lambda) - \tilde{H}(\lambda), \quad (4)$$

где f_2 — искаженная часть спектра; λ — длина волны в диапазоне 700—1050 нм.

В силу уникальности спектрального прибора для определения преобразующей функции g необходимы данные физического эксперимента, в ходе которого на вход прибора подается монохроматическая линия известной длины волны λ_j и регистрируются параметры ее образа во втором порядке (интенсивность, длина волны, полуширина). При этом известно, что максимальная интенсивность от образа монохроматической линии с длиной волны λ_j располагается на длине волны $2\lambda_j$.

Из данных эксперимента определяются соотношения k_j между интенсивностями j -й монохроматической линии во втором и первом порядках (I_2^j/I_1^j):

$$k_j = I_2^j/I_1^j, \quad (5)$$

(в нашем случае $j = 1, \dots, 5$). Также найдены полуширины j -й линии W_1^j в первом порядке и W_2^j для ее образа во втором.

Полученные наборы дискретных величин k_j, W_1^j, W_2^j аппроксимированы по методу наименьших квадратов (в нашем случае k_j и W_2^j — экспоненциальной функцией, W_1^j — степенной). В результате получены аналитические зависимости параметров спектральных линий от λ : $k(\lambda), W_1(\lambda)$ и $W_2(\lambda)$, необходимые для работы алгоритма коррекции.

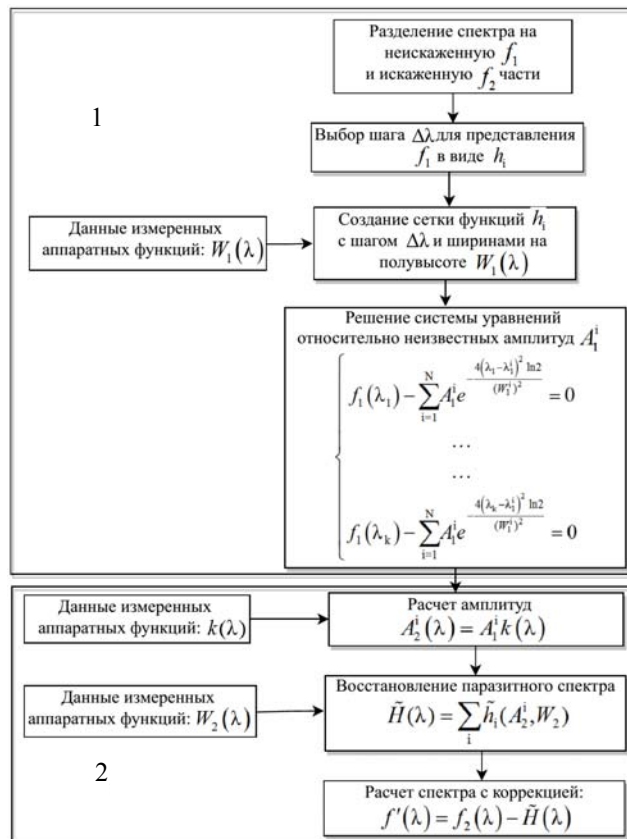


Рис. 1. Блок-схема алгоритма коррекции спектров второго порядка

На рис. 1 представлена блок-схема алгоритма коррекции, которую можно условно разделить на два этапа. На первом этапе происходит разделение исходного спектра на искаженную и неискаженную части. С использованием зависимости $W_1(\lambda)$ создается сетка функций h_i с единичными амплитудами и шагом $\Delta\lambda$ для представления неискаженной части спектра в виде их суммы по формуле (2).

Далее решается система линейных уравнений

$$\begin{cases} f_1(\lambda_1) - \sum_{i=1}^N A_1^i \exp\left[-\frac{4(\lambda_1 - \lambda_1^i)^2 \ln 2}{(W_1^i)^2}\right] = 0, \\ \dots \\ f_1(\lambda_k) - \sum_{i=1}^N A_1^i \exp\left[-\frac{4(\lambda_k - \lambda_1^i)^2 \ln 2}{(W_1^i)^2}\right] = 0 \end{cases} \quad (6)$$

относительно неизвестных амплитуд A_1^i функций h_i ($i, k = 1 \dots N$). В системе (6) каждое уравнение представляет собой разность спектра $f_1(\lambda_k)$ и суммы всех функций h_i (с амплитудами A_1^i) на длине волны λ_k . Таким образом, сумма функций h_i рассчитывается в каждом уравнении лишь для одной точки λ_k . Видно, что число уравнений системы N равно числу неизвестных.

На втором этапе алгоритма с помощью найденных значений A_1^i и зависимости $k(\lambda)$ рассчитываются амплитуды A_2^i во втором порядке:

$$A_1^i(\lambda) = A_1^i k(\lambda). \quad (7)$$

Для полного описания функций \tilde{h}_i , кроме амплитуд A_2^i , требуются полуширины, которые можно получить из зависимости $W_2(\lambda)$. Таким образом, каждая из функций $\tilde{h}_i(A_2^i, W_2)$ определяется явно в отличие от преобразующей функции g . Далее по формуле (4) можно восстановить паразитный спектр второго порядка.

Эксперимент. Для экспериментального определения k_j , W_1^j и W_2^j использован специально сконструированный протяженный источник монохроматического излучения [8] на основе ртутной лампы и лазерных диодов с $\lambda = 406.0, 445.9$ и 515.6 нм. Излучение от них поочередно вводилось в интегрирующую сферу, а выходящее обратно многократно рассеянное излучение регистрировалось с помощью спектрометра ССП-600Н. В процессе эксперимента регистрировались линии с известными длинами волн λ_j и их образы, определялись полуширины W_1^j и W_2^j , а также отношения интенсивностей k_j . Таким образом зарегистрировано шесть монохроматических линий и их образов.

Поскольку во втором порядке линии имеют явно асимметричную форму, для их аппроксимации использована асимметричная функция Гаусса:

$$\begin{cases} y = y_0 + H \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\lambda - \lambda_c}{w_1}\right)^2\right], & \lambda < \lambda_c, \\ y = y_0 + H \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\lambda - \lambda_c}{w_2}\right)^2\right], & \lambda \geq \lambda_c, \end{cases} \quad (8)$$

где y_0 — константа; H — амплитуда; w_1 и w_2 — ширина на полувысоте слева и справа от центральной длины волны λ_c , так что полуширина образа линии во втором порядке

$$W_2^j = w_1^j + w_2^j.$$

Для определения вида функций $k(\lambda)$, $W_1(\lambda)$, $w_1(\lambda)$, $w_2(\lambda)$ в диапазоне 700—1050 нм аппроксимированы параметры монохроматических линий на $\lambda = 406.0, 435.8, 445.9$ и 515.6 нм и их образов. Аппроксимация дискретных значений k_j , W_1^j , w_1^j , w_2^j проведена методом наименьших квадратов.

Отметим, что ранее была предпринята попытка реализации эксперимента [8] с помощью монохроматического излучателя МДР-23 и оптического волокна, в ходе которой выяснилось, что огромное значение имеет способ освещения входной щели спектрометра. Следует использовать такой способ освещения, при котором получается взаимно-однозначное соответствие линии и ее образа, а именно, освещение однородным протяженным источником монохроматического излучения [3].

Результаты и их обсуждение. Проверка работоспособности предложенного метода коррекции осуществлялась на примере различных типов реальных спектров: сплошного, линейчатого и комбинированного. На этапе определения погрешности метода выяснилось, что собственный шум детектора прибора ССП-600Н по амплитуде сопоставим с ошибками метода, что не позволяет провести корректные оценки погрешности метода.

Результаты дополнительных исследований [9] показали, что среднеквадратичное отклонение (СКО) шума спектрометра ССП-600Н может быть уменьшено с помощью усреднения нескольких спектров, причем имеет место нелинейная зависимость от числа регистрируемых спектров. Поэтому с целью уменьшения влияния шумовой составляющей на оценки погрешности самого метода анализируемые ниже спектры усреднялись для $N = 1000$ спектров на одной экспозиции.

На рис. 2, а приведен пример реализации алгоритма коррекции для спектра неба, зарегистрированного ССП-600Н. Спектр неба представляет собой комбинированный тип спектра, который сочетает в себе медленно меняющуюся часть и быстро меняющуюся — резкие линии поглощения (фраунгоферовы линии). Точность разложения спектра на функции h_i может быть описана с помощью функции $\varepsilon(\lambda)$ (рис. 2, б):

$$\varepsilon(\lambda) = \left[\left(f_1(\lambda) - \sum_{i=1}^N h_i \right) / I_m \right] \cdot 100\%,$$

где $I_m = 2500$ (верхний предел линейности детектора ССП-600Н в отсчетах АЦП). Функция $\varepsilon(\lambda)$ представляет собой остаток от разложения спектра f_1 на сумму функций h_i , нормированный на максимальную интенсивность для данного прибора. В качестве нормирующей величины в расчете $\varepsilon(\lambda)$ используется $I_m = 2500$, так как внутри диапазона измерений анализируемых спектров находятся нулевые значения (или близкие к ним).

Из рис. 2, б видно, что основная часть значений $\varepsilon(\lambda)$ не превышает 0.5 % в диапазоне 350—520 нм. В диапазоне 520—550 нм увеличение амплитуды $\varepsilon(\lambda)$ объясняется краевыми эффектами, связанными с тем, что в разложении спектра не используются функции h_i с $\lambda_{\max} > 550$ нм, так как второй порядок дифракции от этих длин волн выходит за пределы рабочего диапазона спектрометра.

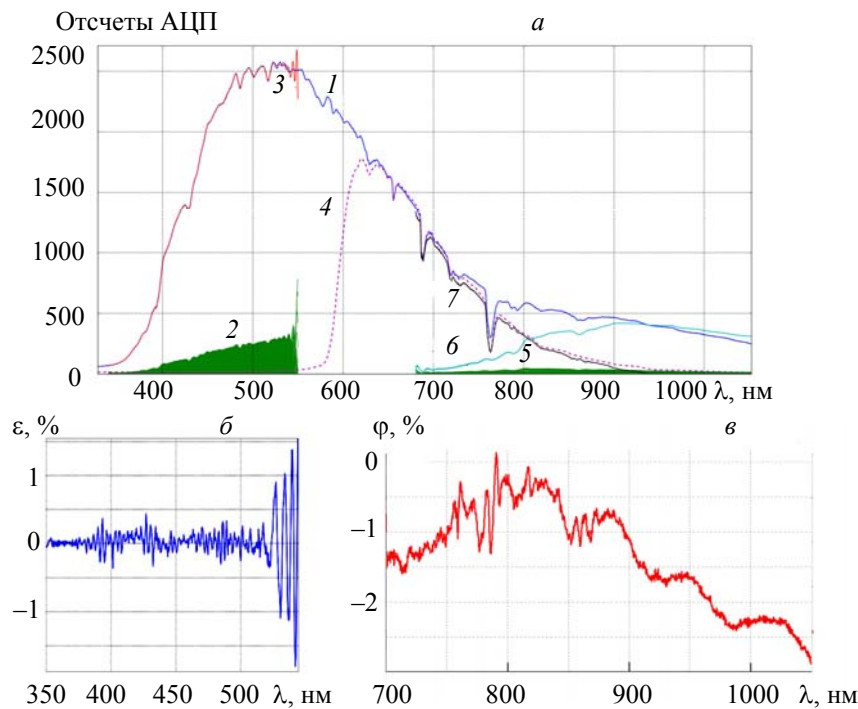


Рис. 2. Коррекция дифракции второго порядка для спектра неба (а): 1 — исходный спектр f_1 , 2 — функции h_i , 3 — суперпозиция функций h_i (совпадает со спектром 1), 4 — спектр неба через фильтр КС-10, 5 — функции \tilde{h}_i , 6 — восстановленный спектр второго порядка \tilde{H} , 7 — спектр с коррекцией f' ; погрешность разложения ε (б); погрешность восстановления φ (в)

Для проверки работоспособности алгоритма восстановленный спектр $f'(\lambda)$ протяженного объекта сравнивался со спектром того же объекта, зарегистрированным через фильтр КС-10, который отсекает коротковолновую часть до 650 нм. Таким образом, в случае использования фильтра КС-10 происходит физическое удаление длин волн, способных создать второй порядок дифракции. Тогда функцию $\varphi(\lambda)$, описывающую точность алгоритма коррекции, можно рассчитать следующим образом:

$$\varphi(\lambda) = \left[(f'(\lambda) - f_{\text{КС}}(\lambda)) / I_m \right] \cdot 100\%,$$

где $f_{\text{КС}}$ — спектр неба, зарегистрированный через фильтр КС-10. Функция $\varphi(\lambda)$ представляет собой разницу (нормированную на максимальную интенсивность I_m) между восстановленным спектром и спектром, зарегистрированным с помощью фильтра КС-10. Вид функции $\varphi(\lambda)$ для восстановленного спектра неба представлен на рис. 2, в. Видно, что $\varphi(\lambda)$ практически во всем диапазоне коррекции принимает отрицательные значения. Другими словами, алгоритм коррекции переоценивает вклад спектра дифракции второго порядка на $\sim 1.5\%$, вследствие чего восстановленный спектр имеет меньшую интенсивность, чем спектр, зарегистрированный через фильтр КС-10.

Повышенная погрешность в диапазонах 700—750 и 900—1050 нм может быть обусловлена относительно слабой чувствительностью детектора (2—10%), низким отношением сигнал/шум ($SNR = 14$ —50), низкой эффективностью дифракционной решетки (20% для 350 нм и 15% для 1000 нм). Дополнительную погрешность может вносить недостаточная точность аппроксимации ввиду малого количества экспериментальных точек.

Исследовано также влияние шага сетки $\Delta\lambda$ функций h_i на результаты коррекции. Выявлено, что при линейном уменьшении шага $\Delta\lambda$ СКО функции $\varphi(\lambda)$ уменьшается экспоненциально, в то время как машинное время расчета возрастает экспоненциально. Исходя из этого, целесообразно выбирать шаг $\Delta\lambda$ минимальным и равным шагу дискретизации спектра ($\Delta\lambda = 0.25$ нм).

Процедура коррекции проведена также для спектров фотометрической сферы (сплошной тип спектра) и ртутной лампы (линейчатый). На рис. 3 представлены функции $\varphi(\lambda)$, рассчитанные для трех описанных выше протяженных источников. Как видно, погрешность $\varphi(\lambda)$ практически во всем диапазоне коррекции принимает отрицательные значения для спектров неба и фотометрической сферы, что также свидетельствует о переоценке вклада дифракции второго порядка при работе алгоритма коррекции. В диапазонах 700—800 и 875—1050 нм наблюдается увеличение погрешности $\varphi(\lambda)$. Вышеуказанные особенности, возможно, связаны с неточной аппроксимацией коэффициентов $k(\lambda)$, $w_1(\lambda)$, $w_2(\lambda)$, в частности, с недостаточным количеством экспериментальных точек в диапазонах 350—400 и 440—525 нм.

На рис. 2, а на $\lambda = 680$ нм наблюдается неплывный переход от исходного спектра к скорректированному, что объясняется ненулевым уровнем сигнала при $\lambda = 340$ нм. Данная особенность связана с наличием рассеянного излучения внутри спектрального прибора и также вносит вклад в погрешность $\varphi(\lambda)$.

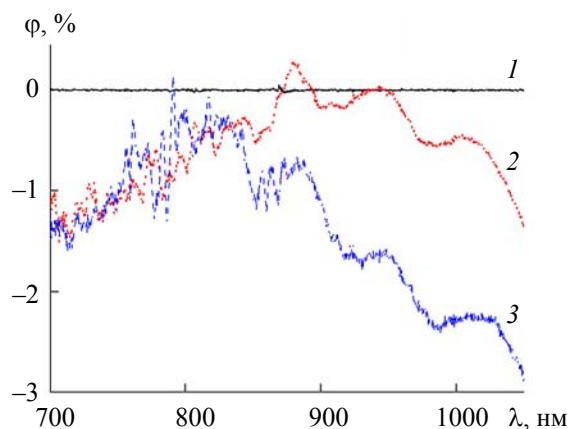


Рис. 3. Нормированная погрешность восстановления $\varphi(\lambda)$ для спектров ртутной лампы (1), фотометрической сферы (2) и неба (3)

Ошибка $\varphi(\lambda)$ восстановления спектра для протяженного источника линейчатого спектра (ртутная лампа) при использовании предлагаемого метода не превосходит собственных шумов детектора спектрометра и не превышает 0.1 %. Это связано с тем, что линейчатый спектр наиболее естественно представляется в виде функций Гаусса. Кроме того, линии излучения ртути использованы в качестве узловых точек для расчета аппроксимирующих функций для работы алгоритма, что сводит ошибку аппроксимации к минимуму.

Заключение. На примере малогабаритного спектрометра ССП-600Н показано, что эффект наложения паразитного спектра дифракции второго порядка может быть вычислен аналитически после регистрации спектра. Предложенный метод математической коррекции спектров отличается тем, что в основе работы алгоритма лежит представление спектра в виде сумм функций Гаусса, параметры которых определяются экспериментально для отдельных длин волн с последующей численной интерполяцией, а также используется параметризация формы линий во втором порядке. Параметры алгоритма должны быть привязаны к оптическим характеристикам конкретного спектрального прибора, поэтому для практической реализации предлагаемого алгоритма предварительно должен быть проведен эксперимент, который имеет целью установить вид зависимости g между исходной монохроматической линией и ее образом в пространстве вторых порядков, что необходимо для выполнения параметризации форм линий. Для определения параметров функции g из экспериментальных данных получены аппроксимации отношений интенсивностей $k(\lambda)$ и ширин на полувысоте для первого и второго порядков $W_1(\lambda)$ и $W_2(\lambda)$.

Анализ ошибок восстановления спектров осуществлялся в сравнении со спектрами, полученными с использованием оптического фильтра КС-10. Для сплошного и комбинированного спектров ошибка восстановления ≤ 3 %, для линейчатого спектра 0.1 %, что является хорошим результатом для большинства задач дистанционного зондирования.

- [1] **Б. И. Беляев, Л. В. Катковский.** Оптическое дистанционное зондирование, Минск, БГУ (2006) 395—417
- [2] **Y. Kim, I. An.** Anal. Chem., **70**, N 7 (1998) 1346—1351
- [3] **W. Neumann.** Fundamentals of Dispersive Optical Spectroscopy Systems, Bellingham Washington USA, SPIE Press (2014) 63—66, 222
- [4] **Л. Л. Досколович, Е. А. Безус, Д. А. Быков.** Компьютерная оптика, **38**, № 4 (2014) 777—781
- [5] **V. Stanishev.** Astron. Nachr., **328**, N 9 (2007) 948—952
- [6] **Z. Xu, M. H. Brill.** Color Res. Appl., **42** (2017) 189—192
- [7] **W. Lee, H. Lee, J. W. Hahn.** Infrared Phys. Technol., **67** (2014) 327—332
- [8] **С. И. Бручковская, Г. С. Литвинович, И. И. Бручковский, В. В. Станчик.** Тез. докл. XV всерос. открытой конф. “Современные проблемы дистанционного зондирования Земли из космоса”, 13—17 ноября 2017 г., Москва, ИКИ РАН (2017) 126
- [9] **Г. С. Литвинович, И. И. Бручковский, С. И. Бручковская.** Тез. докл. XV всерос. открытой конф. “Современные проблемы дистанционного зондирования Земли из космоса”, 13—17 ноября 2017 г., Москва, изд-во ИКИ РАН (2017) 139