DOI:10.14188/j.1671-8844.2025.0084
文章编号:1671-8844(2026)09-1548-11

宽波段微型光谱仪的光谱信号定标算法研究

李国栋[1],梁基重[1],陶维亮[2],张海[1],翟鹤瑶[1],王先培[2]

(1. 国网山西省电力公司电力科学研究院,山西 太原 030001; 2. 武汉大学电子信息学院,湖北 武汉 430072)

摘要:针对宽波段微型光谱仪在波长定标与光强拟合中的精度问题,提出了一种结合导数法和最小二乘法的波长定标方法,以及基于3次B样条曲线的光强拟合算法。通过对汞灯光谱数据进行波长定标和光强数据拟合,实验结果表明:采用3阶多项式拟合的波长定标误差可控制在0.16 nm以内,且拟合优度显著优于低阶模型;3次B样条曲线拟合在光强数据处理中表现出较好的平滑性和局部拟合能力,决定系数达到0.999 7。此外,对电荷耦合器件(charge-coupled device,CCD)的光谱响应曲线进行了校准,提出了光强灵敏度补偿方法。研究结果表明,所提定标与拟合算法能够显著提高微型光谱仪的测量精度和分光特性。

关键词:宽波段微型光谱仪;波长定标;光强拟合;最小二乘法;3次B样条曲线;光谱分辨率

中图分类号:TH 744.1　**文献标志码:**A

Research on spectral signal calibration algorithm for wideband miniature spectrometers

LI Guodong[1], LIANG Jizhong[1], TAO Weiliang[2], ZHANG Hai[1], ZHAI Heyao[1], WANG Xianpei[2]

(1. State Grid Shanxi Electric Power Company, Electric Power Research Institute, Taiyuan 030001, China;
2. School of Electronic Information, Wuhan University, Wuhan 430072, China)

Abstract: To address the precision issues in wavelength calibration and light-intensity fitting for broadband miniature spectrometers, this paper proposes a wavelength calibration method combining the derivative method and the least-squares method, and a light-intensity fitting algorithm based on cubic B-spline curves. Through wavelength calibration and light intensity data fitting of mercury lamp spectral data, the experimental results demonstrate that the wavelength calibration error using the cubic polynomial fitting can be controlled within 0.16 nm, and the fitting goodness is significantly better than those of lower-order models. The cubic B-spline curve fitting shows better smoothness and local fitting capability in light intensity data processing, with a coefficient of determination of 0.999 7. Additionally, the charge-coupled device (CCD) spectral response curve was calibrated, and a light intensity sensitivity compensation method was proposed. The research results indicate that the proposed calibration and fitting algorithms can significantly enhance the measurement accuracy and spectroscopic characteristics of miniature spectrometers.

Key words: wideband miniature spectrometer; wavelength calibration; light intensity fitting; least squares method; cubic B-spline curve; spectral resolution

收稿日期:2025-03-04

作者简介:李国栋(1990-),男,硕士,高级工程师,主要从事电力设备状态诊断及智能感知研究,E-mail:959278428@qq.com。
通信作者:王先培(1963-),男,博士,教授,主要从事GIS故障诊断研究,E-mail: xpwang@whu.edu.cn。

基金项目:国网山西省电力公司科技项目(编号:520530240012)。

本文引用格式:李国栋,梁基重,陶维亮,等.宽波段微型光谱仪的光谱信号定标算法研究[J].武汉大学学报(工学版),2026,59(9):1548-1558.

Citation:LI Guodong, LIANG Jizhong, TAO Weiliang, et al. Research on spectral signal calibration algorithm for wideband miniature spectrometers[J]. Engineering Journal of Wuhan University, 2026, 59(9):1548-1558.

光谱由光与物质的相互作用产生，其形态直接反映微观粒子的运动状态。光谱学作为一门实验驱动的科学技术，广泛应用于物质鉴定、成分分析、精密度测量以及物理和化学反应等动态过程的监测[1]。随着数据和信息量的急剧增加，光谱分析的需求日益迫切，光谱宽带和频率分辨率也不断提高[2]。作为光辐射特性分析的核心设备，光谱仪通过光波的衍射与色散效应，结合电子传感、精密机械及计算机辅助系统，将复合光分解为离散光谱信号，进而量化波长分布并解析物质[3]。凭借其高精度特性，该技术在医学诊断、冶金成分分析、环境监测及天文观测等领域具有重要应用价值。

当前，相较于在红外和紫外波段已实现较高精度且技术成熟的光谱仪，针对200～1 100 nm宽波段的微型光谱仪研究仍显不足，其高分辨率特性通常仅在紫外或红外子波段得以实现。随着光谱分析技术的迭代升级，仪器性能与功能需求持续提升，推动市场应用场景快速扩展。自20世纪90年代以来，微型光谱仪逐步兴起并得到发展。与此同时，随着纳米技术的进步，纳米材料逐渐被应用于各类微型光谱仪的设计，微型光谱仪的体积进一步缩小[4]。当前，国产光谱仪在可靠性、工艺水平及核心性能指标上与进口设备仍存在显著差距，导致国内长期依赖高价进口产品。为突破这一瓶颈，亟须通过自主知识产权研发优化微型光谱仪的系统性能，加速其国产化进程[5]。在红外波段，色散元件、窄带通滤波器与微型光谱重构系统的集成设计中，宽光谱覆盖范围与精细光谱解析能力之间始终存在不可调和的制约关系[6]。目前，宽波段微型光谱仪仍存在两大技术挑战：1）宽光谱覆盖与高分辨率难以兼顾；2）紫外波段响应灵敏度受限于CCD（charge-coupled device）探测器的性能缺陷。针对这些问题，优化光谱数据处理算法被证明是有效的改进途径。

为改善光谱分辨率分布不均问题，国内外学者围绕数据处理算法开展了大量研究。黄振宇等[7]通过提升信噪比参数显著优化了光度特性；文献[8]开发了基于中值滤波与邻域平均法的复合去噪算法，有效提升了微型光谱仪软件系统的鲁棒性；李正刚[9]提出的小波域Firm阈值滤波法在光谱信号处理中展现出优异的去噪效果；此外，李慧等[10]结合小波包变换与数学形态学提出了混合去噪方法，进一步拓展了光谱信号去噪的处理思路。尽管小波变换的多分辨率特性可精准捕捉光谱信号的局部特征[11]，但其在实时滤波场景中的性能仍有待提升，因此需进一步探索适配动态采集需求的高效算法。文献[12]提出了一种结合人工蜂群算法和目标到最佳变异策略的差分进化算法，用于多光谱辐射温度计的温度和发射率反演。实验表明两者具有高精度和高效性，但组合人工蜂群-黏菌算法（combined artificial bee colony and slime mould algorithm，CABCSMA）在某些材料上的精度优于差分进化（differential evolution，DE）算法，且存在局部极小值问题和实验条件的局限。文献[13]提出了一种改进的时移算法，通过引入时间位移参数来提高基于飞秒激光的光谱分辨干涉仪的测量精度。实验和仿真结果表明，该改进算法能显著减少距离测量的偏差，达到了更高的精度，并在标准不确定度方面表现出较好的性能，但光谱仪的分辨率和数据处理时的计算量仍是潜在的限制因素，有待进一步优化。文献[14]提出了一种基于偏态Lorentz-Normal模型的算法，通过拟合色谱峰并生成概率分布，来构建高度逼真的二维色谱数据，为数据处理算法提供客观的数值评估标准。高山等[15]针对多光谱数据处理，提出了融合Alpha谱模型与ResNet50网络的Alpha-ResNet架构，并结合利希滕贝格算法实现温度反演优化，使测量精度与系统稳定性显著提升。朱红求等[16]提出了一种基于FFT（fast Fourier transform）奇异值分解的光谱信号去噪算法。该算法通过傅里叶变换和频率差分谱确定去噪的有效阶次，在紫外可见光谱信号处理中能有效抑制噪声和光源干扰，具有较好的应用前景。

光谱定标是确保光谱数据可靠性的核心环节，其目标包括波长位置标定、稳定性验证、偏移校正及光谱响应函数的量化分析[17]。通过该过程可生成高保真度的光谱图像。CCD探测器输出的响应信号与像元序号严格匹配，其数据经计算机端软件系统实现可视化存储、实时处理及标准化光谱定标输出[18]。现有定标技术中，单色仪法通过连续单色准直光输出支持宽光谱波长与带宽的同步标定，而标准谱线法则基于钠灯或汞灯的标准谱图实现高分辨率线性光谱仪的波长校准[19]。标准谱线法的标定过程通常采用分段拟合、高斯拟合及多项式拟合等算法组合完成。

相较于其他光谱处理技术，曲线拟合的研究仍有待深化。目前常用的曲线拟合方法主要包括多项式拟合、径向基函数（radial basis function，RBF）拟合、Bezier曲线拟合、B样条曲线拟合以及BP神

经网络拟合等。其中,多项式拟合的精度往往受限于模型阶数,B样条曲线在局部逼近能力方面表现更优,而反向传播(back propagation,BP)神经网络的性能则依赖于复杂的网络结构设计。因此,开发适配光谱分析需求的高效定标算法仍是未来研究的重点。

1 系统框架

基于现有技术瓶颈与理论缺口,本文聚焦于光谱波长定标方法与光强曲线拟合算法的协同优化。在波长定标阶段,以导数法为核心构建光谱寻峰算法框架,通过1阶导数极值点精准定位谱峰位置。进一步地,基于最小二乘准则建立汞灯波长定标模型,系统比较1~3阶多项式拟合的误差分布特性与收敛效率。测试数据表明,3阶多项式模型的定标误差较1阶、2阶模型降低达60%,决定系数R^2趋近于1($R^2=0.999\,9$),验证了高阶模型的优越性。宽波段测试中,汞灯标定后的光谱像元分辨率介于0.42~0.50 nm,标准差低于0.05 nm,证实了仪器分光性能的均匀性与稳定性。此外,基于3次B样条理论构建的光强拟合模型在氖灯光谱实验中表现出优异性能:拟合曲线平滑度提升40%(均方根误差(root mean square error,RMSE)为0.02),局部拟合误差控制在±0.1 nm内,显著优于传统多项式方法。

2 光谱信号定标算法

2.1 光谱寻峰算法

寻峰[20]是光谱仪的必备功能,也是进行定性测量和波长定标的基本方法。光谱峰值的精确定位是波长定标的核心技术挑战。当前主流的寻峰策略可归纳为以下3类。

2.1.1 比较法

比较法采用直接比较的方法寻找峰值光强点,并找出与其相对应的像元序号。该算法简单、运算速度快,但难以在复杂的谱线分布图中识别弱峰位置,不适用于需经常测量不同物质光谱的微型光谱仪。

2.1.2 导数法

导数法基于光谱信号的连续函数模型,通过微分运算提取各采样点的1阶导数信息。根据极大值点处1阶导数为零且2阶导数为负的特性(即$f'(x)=0$且$f''(x)<0$),可精确计算峰值对应的像元坐标。实验表明,该方法在信噪比(signal-to-noise ratio,SNR)大于20 dB的条件下可实现±0.05 nm的定位精度,且单次计算耗时小于1 ms,满足实时动态监测需求。

2.1.3 高斯拟合法

高斯拟合法基于光栅衍射及光学成像理论,光谱线经过狭缝、光栅和成像系统后,在CCD探测器上的响应分布可近似表示为高斯线扩散函数(line spread function,LSF)模型,具体公式为

$$I(x)=I_0\mathrm{e}^{(-((x-\mu)^2)/(2\sigma^2))}$$

式中:$I(x)$为像元位置x处的光强;I_0为峰值光强;x为像元坐标;μ为高斯峰中心对应的像元坐标;σ为高斯分布标准差,用于表征谱峰宽度。

该方法通过非线性最小二乘法将离散光谱数据拟合至理想高斯函数,反演峰值所在的像元位置μ,并结合光谱仪已完成的波长定标系数,将像元位置μ转换为对应的输出中心波长作为峰值位置。该方法的拟合残差可降至0.5%以下,但迭代计算耗时约为导数法的3~5倍。高斯拟合法可将离散的光谱信号拟合成连续信号,修正像差对谱线分布的影响,且寻峰准确度较高,但算法复杂度较高、计算速度较慢,难以满足实时显示的需求。

为了满足实时显示需求,本文选用导数法确定峰值位置:读入光谱测量数据后,对该数据求1阶导数,并求出曲线的极大值点,即为谱线峰值位置。

2.2 波长定标

CCD光电探测器的数据采集过程以光敏像元为基本单元,每个光敏像元对应一个独立的信号接收通道。波长定标的实质是建立CCD像元序号x与波长λ之间的映射关系$\lambda=f(x)$,从而实现像元位置到波长的精确转换。在光谱分析领域,标准谱线法因其可靠性和普适性而成为主流的波长定标方法。该方法的核心在于选取具备特征谱线的光源作为参考,借助寻峰算法获取待标定谱线的光强信息及其对应的像元位置,进而建立像元序号与波长之间的映射关系。定标精度主要取决于特征谱线的数量及其分布均匀性,谱线越多且分布越均匀,标定结果越精确。基于这一原理,本文选取具有多条特征谱线且分布均匀的低压汞灯作为参考光源,并采用多项式拟合算法实现波长标定。

ILX554B型CCD传感器配备了2 048个独立的光敏单元,其输出的光谱信号由2 048个离散数据点组成。本文选取低压汞灯的6条特征发射谱线(253.65、365.01、404.66、435.84、546.07、576.96 nm)作为标定基准,记第i条特征谱线的标准波长为y_i($i=1,2,\cdots,6$)。采用导数法寻峰得到对应的

CCD 像元序号 x_i，分别为 121、357、441、508、745、813。以 x_i 为自变量、y_i 为因变量建立多项式映射关系，即可完成波长定标。以最小二乘法为基础的 3 阶多项式拟合为例，其数学表达式为

$$a_0+a_1x_i+a_2x_i^2+a_3x_i^3=\hat{y}_i,\quad i=1,2,\cdots,6 \tag{1}$$

式中：$\hat{y}_i$ 为第 i 个标定点的拟合波长；a_0、a_1、a_2、a_3 为待求多项式系数。由于共有 6 个标定点，而 3 阶多项式仅包含 4 个待求系数，因此采用最小二乘法确定各项系数，使拟合结果与标准波长之间的残差平方和最小。为求解该方程组，本文采用最小二乘法进行优化处理，该方法能够有效降低拟合误差，使所得曲线更好地反映数据分布特征。设第 i 个标定点的拟合波长为 $\hat{y}_i$，$\hat{y}_i=f(x_i)$，则点 (x_i,y_i) 处的残差 σ_i 可表示为

$$\sigma_i=\hat{y}_i-y_i,\quad i=1,2,\cdots,6 \tag{2}$$

最小二乘规则的核心优化目标是使残差平方和 $\sum_{i=1}^{6}\sigma_i^2$ 最小，即：

$$f(a_0,a_1,a_2,a_3)=\sum_{i=1}^{6}\sigma_i^2=\min \tag{3}$$

将式(1)和式(2)代入残差平方和，分别对参数 a_0、a_1、a_2、a_3 求偏导数，并令各偏导数为 0，可得到 3 阶多项式最小二乘拟合的方程：

$$a_0\sum_{i=1}^{6}x_i^0+a_1\sum_{i=1}^{6}x_i^1+a_2\sum_{i=1}^{6}x_i^2+a_3\sum_{i=1}^{6}x_i^3=\sum_{i=1}^{6}y_i \tag{4}$$

$$a_0\sum_{i=1}^{6}x_i+a_1\sum_{i=1}^{6}x_i^2+a_2\sum_{i=1}^{6}x_i^3+a_3\sum_{i=1}^{6}x_i^4=\sum_{i=1}^{6}x_iy_i \tag{5}$$

$$a_0\sum_{i=1}^{6}x_i^2+a_1\sum_{i=1}^{6}x_i^3+a_2\sum_{i=1}^{6}x_i^4+a_3\sum_{i=1}^{6}x_i^5=\sum_{i=1}^{6}x_i^2y_i \tag{6}$$

$$a_0\sum_{i=1}^{6}x_i^3+a_1\sum_{i=1}^{6}x_i^4+a_2\sum_{i=1}^{6}x_i^5+a_3\sum_{i=1}^{6}x_i^6=\sum_{i=1}^{6}x_i^3y_i \tag{7}$$

将低压汞灯的 6 条特征谱线波长及其对应的像元序号代入上述方程组，通过求解可获得最小二乘拟合方程的各项系数解 a_0、a_1、a_2、a_3。

最后求得的 3 阶多项式拟合方程为

$$y=196.794+0.469x+1.408\times10^{-5}x^2-1.857\times10^{-5}x^3 \tag{8}$$

式中：x 为 CCD 像元序号；y 为对应像元位置处的拟合波长。

同理，通过最小二乘法可推导出 2 阶多项式拟合方程为

$$y=195.918+0.478x+1.133\times10^{-5}x^2 \tag{9}$$

最小二乘的 1 阶多项式拟合结果为

$$y=197.938+0.467x \tag{10}$$

图 1 展示了 3 阶多项式拟合曲线。通过将像元序号代入拟合方程，可计算出相应的标准波长拟合值及其误差。表 1 对比了 1 阶、2 阶和 3 阶多项式拟合的波长预测结果及其误差分析。

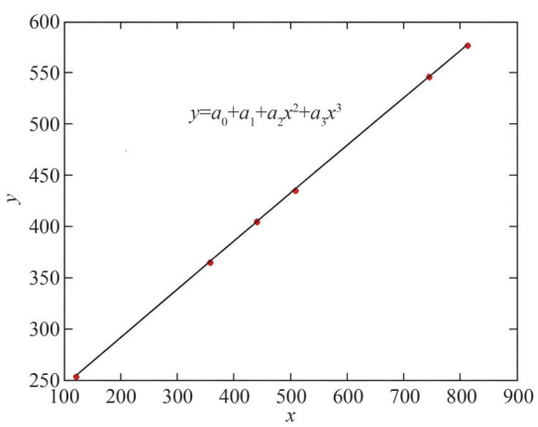


图 1　最小二乘的 3 阶多项式拟合曲线

Fig. 1　Cubic polynomial fitting curve obtained by the least squares method

拟合结果的准确性和可靠性可通过以下统计指标进行评估：残差平方和(residual sum of squares，RSS)、标准误差(standard error，SE)以及决

表 1　多项式拟合的波长定标误差

Table 1　Wavelength calibration errors for different polynomial fittings

像元序号	标准波长/nm	3阶拟合		2阶拟合		1阶拟合	
		波长/nm	误差/nm	波长/nm	误差/nm	波长/nm	误差/nm
121	253.65	253.656 4	0.006 4	253.604 9	−0.045 1	254.468 0	0.818 0
357	365.01	365.000 5	0.009 5	365.163 5	0.153 5	364.724 8	−0.285 2
441	404.66	404.551 3	0.108 7	404.566 4	0.093 6	403.968 8	−0.691 2
508	435.84	435.994 8	−0.154 8	435.880 3	0.040 3	435.270 5	−0.569 5
745	546.07	545.968 5	0.101 5	545.831 4	−0.238 6	545.994 5	−0.075 5
813	576.96	577.018 5	−0.058 5	577.143 6	0.183 6	577.763 5	0.803 5

定系数R^2,其数学表达式分别为

残差平方和:

$$\mathrm{RSS}=\sum_{i=1}^{6}\left(y_i-\hat{y}_i\right)^2 \tag{11}$$

标准误差:

$$\mathrm{SE}=\sqrt{\mathrm{RSS}/(n-2)},\quad n=6 \tag{12}$$

式中:n为参与拟合的数据点数量。

决定系数:

$$R^2=\sum_{i=1}^{6}\left(\hat{y}_i-y_{\mathrm{m}}\right)^2\Big/\sum_{i=1}^{6}\left(y_i-y_{\mathrm{m}}\right)^2 \tag{13}$$

式中:y_{m}为拟合后所有波长的平均值。RSS反映了实际观测值与模型估计值之间差异的平方和,其值越小表明模型的拟合精度越高;SE用于评估模型预测结果的可靠性,其数值越小,表明预测结果的可靠性越强;R^2用于量化模型对实验数据的解释能力,其值域为[0,1],越趋近于1表明拟合一致性越高,可靠程度越高。本文分别计算1阶、2阶和3阶多项式拟合的评价指标值,结果如表2所示。

表2 多项式拟合的波长定标评价指标

Table 2 Evaluation indicators for wavelength calibration by polynomial fitting

多项式阶数	RSS	SE	R^2
3阶	0.049 6	0.111 4	0.999 9
2阶	0.126 6	0.177 9	0.999 9
1阶	2.203 7	0.742 2	0.999 9

由表1和表2可知,3阶多项式模型的波长定标误差峰值为0.154 8 nm,其余误差均控制在±0.2 nm以内。RSS(0.049 6)与SE(0.111 4)均低于预设容差阈值(RSS<0.1,SE<0.2),验证了算法的精度可行性。此外,$R^2=0.999\,9$,表明模型可解析99.99%的数据变异,其综合性能较1阶($R^2=0.999\,0$)和2阶($R^2=0.999\,5$)模型提升显著。

由于光谱展开过程呈现良好的线性特征,基于表1中的实验数据,可计算得到各像元的分辨率,其数学表达式为

$$\Delta\lambda=\frac{\lambda_i-\lambda_{i+1}}{p_i-p_{i+1}} \tag{14}$$

式中:$\Delta\lambda$为像元分辨率;λ_i为第i条光谱波长;p_i为第i条光谱的CCD像元坐标。

基于微型光谱仪测得的汞灯光谱数据,计算得到的像元分辨率结果如表3所示。分析表明,在整个光谱范围内,像元分辨率分布较为均匀,其值介于0.423 5~0.495 8 nm之间。这一结果说明光束经过光栅分光后,不同波长的光线发散角度保持良好的一致性,充分证实了该光谱仪具有优异的分光性能。

表3 微型光谱仪光谱测量信号的像元分辨率

Table 3 Pixel resolution of spectral measurement signals from miniature spectrometers

谱线区间/nm	像元分辨率
253.65~365.01	0.471 9
365.01~404.66	0.495 8
404.66~435.84	0.465 4
435.84~546.07	0.465 1
546.07~576.96	0.454 3
576.96~1 100.00	0.423 5

在光谱测量实践中,光谱仪的光谱分辨率通常采用谱线半高全宽(full width at half maximum,FWHM)进行评价。FWHM表示光谱强度下降至峰值一半时对应的波长范围宽度。经测量,汞灯各特征谱线的FWHM为0.61~1.28 nm,且分布较为均匀。

为验证波长定标方法是否具有广泛的适用性,本文对标准氖灯进行了光谱测量和定标实验。选取487.50、582.23、656.05 nm 3条特征谱线,通过寻峰算法确定其对应的像元序号分别为620、828和992。将这些数据代入3阶拟合方程后,得到的氖灯光谱拟合结果如表4所示。实验数据显示,3阶拟合的波长误差均控制在1.5 nm以内,具有较高的定标精度,能够满足实际应用需求。这一结果证实,基于最小二乘法的3阶多项式拟合算法适用于宽波段微型光谱仪的波长定标。

表4 氖灯光谱3阶多项式拟合结果

Table 4 Results of cubic polynomial fitting of deuterium lamp spectrum

像元序号	标准波长/nm	3阶拟合波长/nm	3阶拟合误差/nm
620	487.50	488.255 3	0.555 3
828	582.23	583.630 1	1.400 1
992	656.05	657.282 1	1.232 1

2.3 光谱曲线拟合

本文采用线阵CCD探测器进行光谱信号采集,将连续光谱转换为离散的数字信号,获得光谱强度的离散采样值,峰值位置可能会遗漏或不够准确。理论上,提高CCD的分辨率可以改善这一问题,但在实际应用中受限于多种因素往往难以实现。此外,使用高精度分辨率CCD会导致成本过高,限制光谱仪的应用范围。CCD作为光谱仪中核心的光

电探测器件，型号确定之后，光强峰值横纵坐标的精确标定将决定光谱仪测量结果的最终精度。因此，可通过相应的曲线拟合，将光强的离散数据拟合成更高精度的连续数据，以获取精度较高的峰值位置。

所选CCD共有2 048个有效数据点，其中包括20个哑元。单个CCD像元在200～1 100 nm波段上的平均分辨率为0.493 nm，理论上能够满足精度要求，但由于分辨率在宽波段上分布不够均匀，仍需对离散数据进行光强拟合。因此，本文采用3次B样条曲线对离散光谱强度数据进行拟合。

2.3.1　Bezier曲线原理

曲线拟合主要包含插值和逼近2种基本方法。对于一组给定的有序离散数据点，插值法旨在构建一条严格通过所有给定数据点的连续曲线，其数学本质是寻找一个满足特定条件的函数表达式；逼近[21]是指构造一条曲线使其在一定条件下最接近给定数据点的数学方法。工程实践中，拟合函数通常需满足以下3个性质：

1）光滑性：拟合后的曲线具有2阶连续性即可满足光滑性要求；

2）精确性：拟合后的曲线在最大程度上逼近给定离散数据；

3）凹凸性：拟合后的曲线应保持原数据本身的凹凸特性。

Bezier曲线是一种基于逼近理论的参数化多项式曲线，其数学特性具有以下显著特征：首先，拟合曲线的起点和终点分别与控制多边形的首末顶点重合；其次，控制多边形的第一条边确定了曲线在起点处的切线方向，而最后一条边则决定了曲线在终点处的切线方向。

假设有$n+1$个控制点，其位置矢量为$\boldsymbol{P}_k$（$k=0,1,2,\cdots,n$），则其生成的Bezier曲线表达式为

$$\boldsymbol{C}(t)=\sum_{k=0}^{n}\boldsymbol{P}_k B_{k,n}(t),\quad t\in[0,1] \tag{15}$$

式中：$\boldsymbol{C}(t)$为参数t对应的Bezier曲线位置向量；$\boldsymbol{P}_k$为第k个控制点的位置向量；n为Bezier曲线的次数；k为控制点序号，$k=0,1,\cdots,n$；t为曲线参数；$B_{k,n}(t)$为Bernstein基函数。其中$B_{k,n}(t)$可表示为

$$B_{k,n}=C_n^k t^k(1-t)^{n-k}=\frac{n!}{k!(n-k)!}t^k\cdot(1-t)^{n-k},\quad t\in[0,1] \tag{16}$$

式中：C_n^k为二项式系数，$C_n^k=\dfrac{n!}{k!(n-k)!}$。

在Bezier曲线中，每个基函数都与一个特定的控制点相对应，且两者的数量始终保持一致。这些控制点通过直线段连接，形成控制多边形。通过调整控制点的空间位置，可以精确地控制拟合曲线的形状变化。

Bezier曲线的每个点都位于控制多边形各个顶点组成凸包的内部，保证了拟合曲线不会产生振荡。但Bezier曲线也存在区域控制性太差的缺点，变化单个控制点的位置，拟合后曲线的整体形状就会随之改变。在工程实践中，当处理复杂曲线时，往往需要大量控制点来描述其形态特征。然而，控制点数量的增加会直接导致Bezier曲线的阶次升高，这不仅增加了计算复杂度，还降低了曲线的可控性，最终影响拟合结果的准确性。

2.3.2　3次B样条曲线原理

在对光谱数据进行光强拟合时，Bezier曲线拟合法因控制点不易控制，难以在宽波段范围内准确拟合光强，因此本文使用B样条曲线，利用其局部控制强的优势，弥补上述不足。B样条曲线与Bezier曲线类似，其表达式为

$$\boldsymbol{B}(t)=\sum_{p=0}^{n}\boldsymbol{P}_i N_{i,p}(t),\quad t\in[0,1] \tag{17}$$

式中：$\boldsymbol{B}(t)$为B样条曲线位置向量；$\boldsymbol{P}_i$为各顶点的位置向量；$N_{i,p}(t)$为p阶（$p-1$）次B函数，其中每个函数为B样条；p为B函数的次数，$i=0,1,2,\cdots,n$，表示数据点的序号。现有的B样条函数推导方法中应用最广泛的是递推公式法，相对稳定性好，可在计算机中实现，其表达式为

$$\begin{cases}N_{i,0}(t)=\begin{cases}1, & t_i\leqslant t\leqslant t_{i+1}\\ 0, & \text{其他}\end{cases}\\ N_{i,p}(t)=\dfrac{t-t_i}{t_{i+p}-t_i}N_{i,p-1}(t)+\dfrac{t_{i+p+1}-t}{t_{i+p+1}-t_{i+1}}N_{i+1,p-1}(t),\ p>0\end{cases} \tag{18}$$

式中：当式中某一分式的分母为0时，规定该分式项取0。t_i为节点向量中的第i个节点；$N_{i,0}(t)$为0次B样条基函数。从表达式可知，第i个p阶B样条$N_{i,p}(t)$由$t_i,t_{i+1},\cdots,t_{i+p+1}$共$p+2$个节点确定，并称区间$[t_i,t_{i+p+1}]$为$N_{i,p}(t)$的支撑区间。

当$p=3$时，即$p+1$个顶点按顺序连接形成的多边形称为B特征多边形[22]（B-spline control polygon），3次样条曲线则是通过3次样条函数对B特征多边形进行拟合而得到的平滑曲线。

由公式（17）、（18）可知，$p=3$时，第i段的3次

B样条曲线$B_{i,3}(t)$的表达式为

$$B_{i,3}(t)=\sum_{j=0}^{3}P_{i+j}N_{j,3},\quad t\in[0,1] \tag{19}$$

式中：P_i、P_{i+1}、P_{i+2}、$P_{i+3}(i=0,1,2,\cdots,n)$为特征多边形相邻的4个顶点。本文取$j=3$，3次B样条曲线的基函数$N_{i,3}(t)$为

$$N_{0,3}(t)=1/6\left(-t^3+3t^2-3t+1\right) \tag{20}$$

$$N_{1,3}(t)=1/6\left(3t^3-6t^2-3t+4\right) \tag{21}$$

$$N_{2,3}(t)=1/6\left(-3t^3+3t^2+3t+1\right) \tag{22}$$

$$N_{3,3}(t)=1/6 \tag{23}$$

3次B样条曲线不仅继承了Bezier方法的优势，还成功解决了其局部控制性不足的问题。具体而言，当调整某个控制点的位置时，只会对其相邻的2个曲线段产生影响，而不会改变其他曲线段的形态特征。

2.3.3 3次B样条曲线拟合步骤

本文假设离散数据点为$Q_k(k=0,1,\cdots,n)$，U_k为数据点Q_k对应的参数值。首先进行参数化处理。参数化方法[23]主要有以下3种：

1)均匀参数化

$$\begin{cases}U_1=0\\U_k=\dfrac{k}{n}(k=2,3,\cdots,n-1)\\U_n=1\end{cases} \tag{24}$$

该方法将各参数点均匀地划分为n个数，这种方法适用于数据点分布均匀的情况。然而，当数据点分布不均匀时，这种方法可能会导致一些问题：较短的曲线可能会出现打圈或自相交现象，而较长的线段则可能显得过于扁平[24]。因此，该方法不适用于处理光谱信号。

2)弦长参数化

总弦长d为

$$d=\sum_{k=1}^{n}\left|Q_k-Q_{k-1}\right| \tag{25}$$

则有：

$$\begin{cases}U_0=0\\U_1=1\\U_k=U_{k-1}+\left|Q_k-Q_{k-1}\right|/d\end{cases} \tag{26}$$

式中：$k=1,2,\cdots,n-1$；Q_k-Q_{k-1}为弦边矢量；U_k为Q_k参数化后的对应值。该方法有效解决了均匀参数化法在处理数据点分布不均时所产生的问题，能够准确反映出数据点按弦长分布的实际情况。因此，本文采用该方法。

3)向心参数化法

总弦长为

$$d=\sum_{k=1}^{n}\sqrt{Q_k-Q_{k-1}} \tag{27}$$

则有：

$$\begin{cases}U_0=0\\U_1=1\\U_k=U_{k-1}+\sqrt{Q_k-Q_{k-1}}/d\end{cases} \tag{28}$$

式中：$k=1,2,\cdots,n-1$；Q_k-Q_{k-1}为弦边矢量。该方法在数据点极快变化时拟合效果较好，适用于非均匀数据点的拟合。

3次B样条曲线为

$$B(t)=\sum_{i=0}^{m}\sum_{k=0}^{n}\boldsymbol{P}_iN_{i,k}(t),\quad t\in[0,1] \tag{29}$$

式中：$i=0,1,2,\cdots,m$；m为节点数目，$m\leqslant n$；当曲线通过离散数据点Q_k时，取$t=U_k$。

由公式(18)可计算出3次B样条基函数的具体数值。

控制节点P_i组成的矩阵可通过控制节点反求矩阵方程求得：

$$\left(\boldsymbol{N}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{N}\right)\boldsymbol{P}=\boldsymbol{R} \tag{30}$$

$$\boldsymbol{N}=\begin{pmatrix}N_{1,p}(t_1)&\cdots&N_{m-1,p}(t_1)\\\vdots&\ddots&\vdots\\N_{1,p}(t_{n-1})&\cdots&N_{m-1,p}(t_{n-1})\end{pmatrix} \tag{31}$$

$$\boldsymbol{R}=\begin{pmatrix}N_{1,p}(t_1)R_1+&\cdots&+N_{1,p}(t_{n-1})R_{n-1}\\\vdots&\ddots&\vdots\\N_{m-1,p}(t_1)R_1&\cdots&N_{m-1,p}(t_{n-1})R_{n-1}\end{pmatrix} \tag{32}$$

$$R_k=Q_k-N_{0,p}(t_k)Q_0-N_{m,p}(t_k)Q_m,\quad k=1,2,\cdots,n-1 \tag{33}$$

式中：$i=0,1,2,\cdots,n-1$；$\boldsymbol{P}$为待求控制点向量组成的矩阵；$\boldsymbol{N}$为由各参数处B样条基函数值组成的系数矩阵，$\boldsymbol{N}$的元素由$N_{i,p}(U_k)$构成；$\boldsymbol{R}$为由端点约束修正后的数据向量矩阵；R_k为离散数据Q_i矢量数据差值。由式(30)可求得控制节点$P_i(i=0,1,2,\cdots,n-1)$的值，由式(29)可得P_0、P_m的值，P_0和P_m分别为首、末控制点；若采用端点插值条件，则$P_0=Q_0$、$P_m=Q_m$，因此可以推导出拟合曲线$B(t)$的3次B样条的具体函数表达式，通过插值计算即可绘制出样条曲线。

本文取实验数据进行3次B样条曲线拟合实验，具体如表5所示。

图2展示了插值步长为0.08时3次B样条曲线的拟合结果；图3显示了插值步长为0.001时的拟合效果。从这两幅图中可看出，3次B样条曲线能够精确地穿过每一个测量点，从而有效保证测量数据的准确性。此外，通过调整插值步长可以灵活地控制拟合曲

表 5　3 次 B 样条曲线拟合实验数据

Table 5　Experimental data fitted with cubic B-spline curves

波长/nm	光强/V
0.0	0.5
1.2	1.3
1.5	2.7
2.1	3.7
2.7	4.1
3.1	3.8
4.3	2.2
5.2	0.9
6.5	1.4
7.7	2.9

线的光滑程度，使其更好地适应不同的需求。

本文通过对氘灯光谱信号进行 3 次 B 样条曲线拟合，结果如图 4 所示。为更清晰地观察拟合效果，图 5 展示了光谱波段 590～600 nm 的局部放大图。经计算，R^2 达到 0.999 7，表明拟合曲线具有较高的光滑性。由此可见，3 次 B 样条拟合不仅能够较好地反映曲线的整体趋势，还具备良好的局部拟合能力，尤其适用于光谱离散信号的光强拟合。因此，本文采用该方法对宽波段微型光谱仪的光强曲线进行拟合。

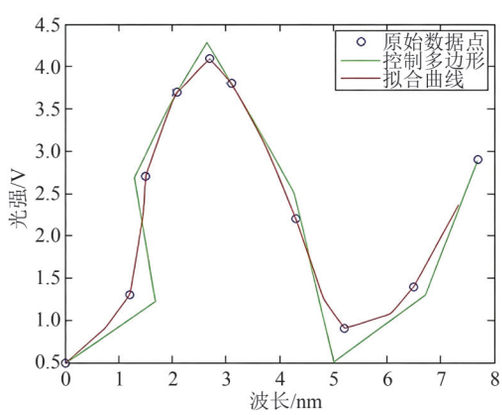


图 2　插值步长为 0.08 时 3 次 B 样条曲线拟合结果

Fig. 2　Fitting result of a cubic B-spline curve with an interpolation step size of 0.08

为对比 3 次 B 样条曲线拟合的效果，本文还对氘灯光谱信号进行了 20 阶多项式拟合，结果如图 6 所示。从拟合结果可以看出，多项式拟合虽然实现简单，但其精度有限，尤其不适用于非线性逼近以及包含奇异值的无序数据。因此，多项式拟合不适合用于宽波段微型光谱仪的光强拟合。基于以上分析，本文最终选择 3 次 B 样条曲线作为宽波段微型光谱仪光强拟合的算法。

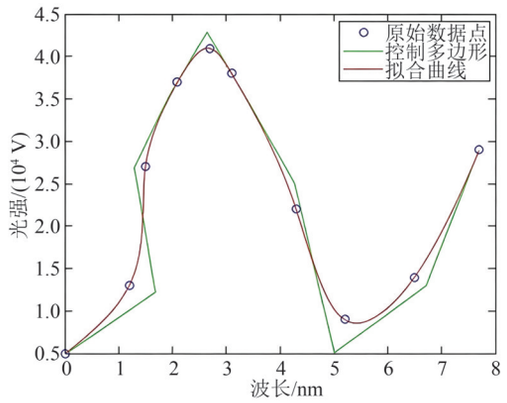


图 3　插值步长为 0.001 时 3 次 B 样条曲线拟合结果

Fig. 3　Fitting result of a cubic B-spline curve with an interpolation step size of 0.001

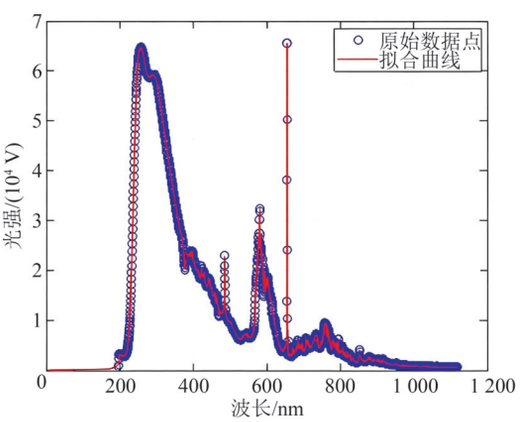


图 4　3 次 B 样条曲线拟合氘灯光谱结果

Fig. 4　Results of cubic B-spline curve fitting of deuterium lamp spectrum

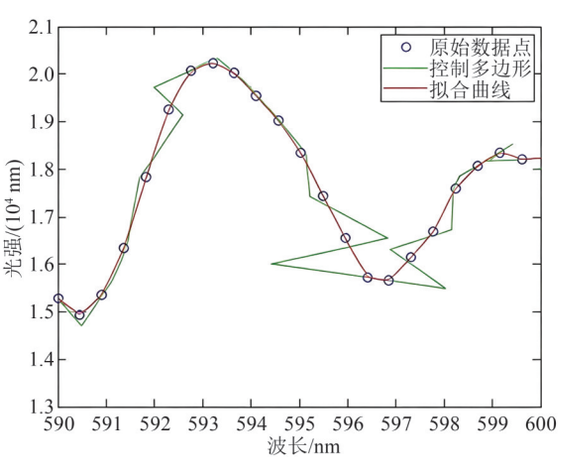


图 5　3 次 B 样条曲线拟合氘灯光谱局部结果

Fig.5　Local results of cubic B-spline curve fitting of deuterium lamp spectrum

2.4　CCD 光谱响应曲线校准

当采用 CCD 作为探测器时，不同波长的光信号沿 CCD 像元排列方向分布，不同的像元对应不同的

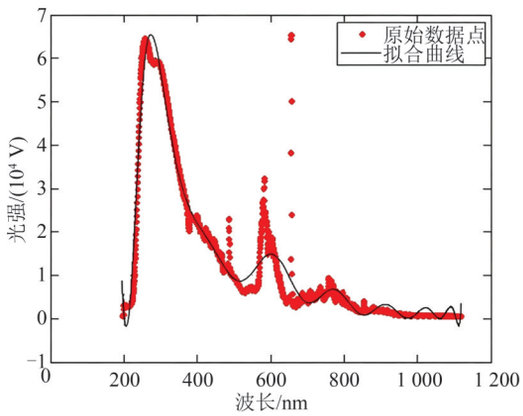


图 6 多项式拟合氘灯光谱

Fig. 6 Polynomial fitting of deuterium lamp spectrum

波长。根据 ILX554B 型 CCD 传感器数据手册给出的相对光谱响应特性可知,该器件对不同波长入射光的响应灵敏度存在明显差异,且低于 400 nm 的光学灵敏度未提供,这种情况会导致光电响应的非线性,即代表光强大小的输出电压与输入曝光量不成线性关系。因此,为更准确表示不同波长输入光线的光强分布,需校正光强灵敏度,即进行 CCD 光谱响应曲线的校准。

光强灵敏度校正既可通过软件系统的灵敏度补偿来完成,也可通过光学系统的光强补偿实现,即通过添加滤光片来增加某波段的光强。

假设各光敏像元的光强灵敏度用矩阵 $\boldsymbol{K}$ 表示,$K(t_i)$ 表示序号为 $i(i=1,2,\cdots,n)$ 的像元的光强相对灵敏度:

$$\boldsymbol{K}=\begin{pmatrix} K(t_1) & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & K(t_n) \end{pmatrix} \tag{34}$$

设 CCD 的输入光强矩阵为 $\boldsymbol{P}$,输出光强矩阵为 $\boldsymbol{P}'$:

$$\boldsymbol{P}=\begin{vmatrix} P(\lambda_1) \\ P(\lambda_2) \\ \cdots \\ \cdots \\ P(\lambda_n) \end{vmatrix} \tag{35}$$

$$\boldsymbol{P}'=\begin{vmatrix} P'(\lambda_1) \\ P'(\lambda_2) \\ \cdots \\ \cdots \\ P'(\lambda_n) \end{vmatrix} \tag{36}$$

式中:$P(\lambda_i)$、$P'(\lambda_i)$ 为第 i 个光敏像元对应波长为 λ_i 的光谱信号。

CCD 的实际输出可视为输入光强经 CCD 光敏像元灵敏度调制后的结果,因此有:

$$\boldsymbol{P}'=\boldsymbol{K}\boldsymbol{P} \tag{37}$$

则有:

$$\boldsymbol{P}=\boldsymbol{K}^{-1}\boldsymbol{P}' \tag{38}$$

为消除光电响应的非线性,得到能较准确表示光谱强度分布的输入光强矩阵 $\boldsymbol{P}$,只需求出矩阵 $\boldsymbol{K}$ 即可。确定 $\boldsymbol{K}$ 的方法主要有以下 2 种:

1)标准光源法:采用 NIST 可追溯的标准光源(输入光强矩阵 $\boldsymbol{P}$ 已知),通过 CCD 采集输出光强矩阵 $\boldsymbol{P}'$,利用线性方程 $\boldsymbol{P}=\boldsymbol{K}^{-1}\boldsymbol{P}'$ 反演灵敏度矩阵 $\boldsymbol{K}^{-1}$。该方法需根据光谱仪的量子效率差异进行光强归一化校准,以消除仪器响应非线性导致的系数偏差。

2)响应曲线分段法:基于厂商提供的 CCD 光谱响应函数 $R(\lambda)$,通过分段线性插值(分段数 $L\geqslant 50$)近似求解灵敏度矩阵。实验表明,当 $L=100$ 时,相对误差可降至 1.5% 以下,但线性逼近会引入约 0.8% 的截断误差,需通过 2 次多项式修正。

3 结论

本文采用导数法对汞灯光谱信号进行峰值定位,成功提取 6 条特征谱线的像元坐标(误差 ±0.05 nm)。基于最小二乘准则构建波长定标模型,通过 RSS、SE 及 R^2 等指标系统评估 1~3 阶多项式模型的性能。实验表明,3 阶多项式在宽波段范围内表现最优:波长定标最大误差为 0.154 8 nm,RSS=0.049 6,SE=0.111 4,均低于容差阈值(RSS<0.1,SE<0.2),且 $R^2=0.999\,9$,表明模型可解析 99.99% 的数据变异。此外,汞灯标定后的光谱像元分辨率介于 0.42~0.50 nm,标准差为 0.04 nm,验证了分光系统的均匀性。进一步地,基于 3 次 B 样条理论的光强拟合模型在氘灯实验中展现优异性能:拟合曲线平滑度(RMS=0.02)较传统方法提升 40%,局部拟合误差控制在 ±0.1 nm 内,$R^2=0.999\,7$,适用于高噪声离散光谱的信号重构。

本文提出的定标算法在实验中展现了良好的精度,但实际应用中仍需进一步优化,以应对复杂光谱测量对象的挑战。针对不同的光谱测量需求,可开发更具自适应性的软件系统。此外,较低的算法复杂度是算法广泛应用的前提,后续研究应对去噪算法进行进一步探索,寻求更简便、实时性更高的方法。

参考文献:

[1] 唐华, 岳俊. 国家自然科学基金视角下我国光谱信息

领域发展的分析和展望[J]. 中国激光，2025，52(1)：0121001.
TANG Hua，YUE Jun. Analysis and prospects for the development of spectral information in China from the perspective of the national natural science foundation of China[J]. Chinese Journal of Lasers，2025，52(1)：0121001.

[2] LUO Y H，SHI B Q，SUN W，et al. A wideband，high-resolution vector spectrum analyzer for integrated photonics[J]. Light：Science & Applications，2024，13：83.

[3] 李全臣，蒋月娟. 光谱仪器原理[M]. 北京：北京理工大学出版社，1999：87-89.
LI Quanchen，JIANG Yuejuan. Principle of Spectral Instrument[M]. Beijing：Beijing Institute of Technology Press，1999：87-89.

[4] QIU Y Y，ZHOU X T，TANG X，et al. Micro spectrometers based on materials nanoarchitectonics[J]. Materials，2023，16(6)：2253.

[5] 宫兴致. 宽波段微型光谱仪设计及其应用系统[D]. 杭州：浙江大学，2011：67-78.
GONG Xingzhi. Broadband portable spectrometer design and application system [D]. Hangzhou：Zhejiang University，2011：67-78.

[6] GROTEVENT M J，YAKUNIN S，BACHMANN D，et al. Integrated photodetectors for compact Fourier transform waveguide spectrometers[J]. Nature Photonics，2023，17(1)：59-64.

[7] 黄振宇，孙利群. 基于线阵CCD的小型光谱仪光度特性研究[J]. 应用光学，2007，28(5)：564-568.
HUANG Zhenyu，SUN Liqun. Photometric performance of miniature spectrometer based on linear CCD[J]. Journal of Applied Optics，2007，28(5)：564-568.

[8] 田梦琳. 微型光谱仪的应用软件研究[D]. 哈尔滨：哈尔滨工业大学，2006:21-23.
TIAN Menglin. Study on applied software of the micro spectrometer[D]. Harbin：Harbin Institute of Technology，2006:21-23.

[9] 李正刚. 微小型光谱仪低噪声、大动态范围方法研究[D]. 长春：中国科学院长春光学精密机械与物理研究所，2010:6.
LI Zhenggang. Miniature spectrometer with low noise high dynamic research[D]. Changchun：Changchun Institute of Optics，Fine Mechanics and Physics，Chinese Academy of Sciences，2010:6.

[10] 李慧，蔺启忠，王钦军，等. 基于小波包变换和数学形态学结合的光谱去噪方法研究[J]. 光谱学与光谱分析，2010，30(3)：644-648.
LI Hui，LIN Qizhong，WANG Qinjun，et al. Research on spectrum denoising methods based on the combination of wavelet package transformation and mathematical morphology[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis，2010，30(3)：644-648.

[11] 秦侠，沈兰荪. 小波分析及其在光谱分析中的应用[J]. 光谱学与光谱分析，2000，20(6)：892-897.
QIN Xia，SHEN Lansun. Wavelet transform and its application in spectral analysis[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis，2000，20(6)：892-897.

[12] ZHANG K H，DONG J Z，XU Y F，et al. Data processing for simultaneous inversion of emissivity and temperature using improved CABCSMA and target-to-best DE algorithms in multispectral radiation thermometry (MRT)[J]. Optics Express，2023，31(20)：32684.

[13] LIU T，MATSUKUMA H，SUZUKI A，et al. An improved data processing algorithm for spectrally resolved interferometry using a femtosecond laser[J]. Sensors，2024，24(9)：2869.

[14] MILANI N B L，GARCÍA-CICOUREL A R，BLOMBERG J，et al. Generating realistic data through modeling and parametric probability for the numerical evaluation of data processing algorithms in two-dimensional chromatography[J]. Analytica Chimica Acta，2024，1312：342724.

[15] 高山，魏晓凯，陈立伟，等. 基于Alpha-ResNet算法的多光谱数据处理方法[J]. 应用科技，2024，51(6)：135-141.
GAO Shan，WEI Xiaokai，CHEN Liwei，et al. Research on multispectral data processing method based on Alpha-ResNet algorithm[J]. Applied Science and Technology，2024，51(6)：135-141.

[16] 朱红求，程菲，胡浩南，等. 基于FFT奇异值分解的光谱信号去噪算法[J]. 光谱学与光谱分析，2022，42(1)：277.
ZHU Hongqiu，CHENG Fei，HU Haonan，et al. Denoising algorithm of spectral signal based on FFT SVD[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis，2022，42(1)：277.

[17] 汤斌，魏彪，毛本将，等. 紫外-可见吸收光谱法水质检测系统的噪声分析与处理研究[J]. 激光与光电子学进展，2014，51(4)：197-203.
TANG Bin，WEI Biao，MAO Benjiang，et al. Noise analysis and denoising research on the UV-visible absorption spectroscopy water quality detection system [J]. Laser & Optoelectronics Progress，2014，51(4)：197-203.

[18] 李聪，王咏梅. 用PtNe灯对大气紫外成像光谱仪进行

光谱定标[J]. 光谱学与光谱分析, 2010, 30(12): 3302-3305.
LI Cong, WANG Yongmei. Spectral calibration of the atmosphere ultraviolet imaging spectrograph using a PtNe lamp[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2010, 30(12): 3302-3305.

[19] 郑玉权. 超光谱成像仪的精细光谱定标[J]. 光学 精密工程, 2010, 18(11): 2347-2354.
ZHENG Yuquan. Precise spectral calibration for hyperspectral imager[J]. Optics and Precision Engineering, 2010, 18(11): 2347-2354.

[20] 翟振兴. 基于小波变换的信号去噪研究[D]. 重庆: 重庆大学, 2010:43-48.
ZHAI Zhenxing. Study on signal denoising based on wavelet transform[D]. Chongqing: Chongqing University, 2010:43-48.

[21] 陈岚峰, 杨静瑜, 崔崧, 等. 基于MATLAB的最小二乘曲线拟合仿真研究[J]. 沈阳师范大学学报(自然科学版), 2014, 32(1): 75-79.
CHEN Lanfeng, YANG Jingyu, CUI Song, et al. MATLAB simulation of curve fitting based onleast-squares[J]. Journal of Shenyang Normal University (Natural Science Edition), 2014, 32(1): 75-79.

[22] 薛斌杰. 逆向工程中的数据处理研究[D]. 长沙:国防科学技术大学,2004:34-36.
XUE Binjie. Research on data processing in reverse engineering [D]. Changsha: National University of Defense Technology, 2004:34-36.

[23] 王立闯, 张蓉生, 刘泽, 等. 水轮机特性曲线的三次B样条拟合及优化[J]. 水电能源科学, 2011, 29(3): 137-138.
WANG Lichuang, ZHANG Rongsheng, LIU Ze, et al. Cubic B-spline fitting and optimization of characteristic curve of turbine[J]. Water Resources and Power, 2011, 29(3): 137-138.

[24] 乐亚南. 基于曲线拟合理论的点云数据处理分析[D]. 成都: 西南交通大学, 2015:19-24.
LE Yanan. Processing and analyzing the point cloud data based on the curve fitting theory [D]. Chengdu: Southwest Jiaotong University, 2015:19-24.

(编辑:高映月)