

生物医学工程设计 I 期末报告

低成本高光谱成像仪

第二小组
李海越 庄晨洁 俞文皓 何航舟

Low-cost Hyperspectral Imaging Device



生物医学工程系

北京大学

June 2022

目录

1 研究背景	2
1.1 光谱仪简介	2
1.2 光谱仪的应用	3
1.3 市场调研	5
1.4 同类产品调研与成本估计	5
2 总体解决方案	5
2.1 设计思路简介	5
2.2 器件原理	6
2.3 最终设计和理论计算	8
2.3.1 光路图	8
2.3.2 波长和角度对应关系	8
2.3.3 精度分析	9
3 任务开展情况	10
3.1 最终设计	10
3.1.1 选用器件	10
3.1.2 光路搭建	11
3.1.3 遮光	11
3.1.4 软件	12
3.1.5 算法	13
3.1.6 总结	16
3.2 效果展示	17
4 总结	19
4.1 创新	19
4.2 不足	19
4.3 未来展望	19
4.4 团队分工与对课程的感想和建议	19
4.4.1 团队分工	19
4.4.2 感想与建议	19
5 参考资料与文献	20

低成本高光谱成像仪

摘要

本小组针对高光谱成像仪价格昂贵的问题，提出基于扫描振镜和光电二极管的低成本便携式高光谱成像仪方案。通过振镜的旋转实现光谱在光电二极管上的扫描，减少线性 CCD 阵列作为感光器件造成的高昂成本。同时，成像仪保留了 0.5nm 的高分辨率和约 200nm 的波长扫描范围。我们完成了理论计算、实际模型搭建与测试、校准与数据降噪，并计划在未来进行进一步的小型化和优化。

1 研究背景

1.1 光谱仪简介

光谱仪是将成分复杂的光分解成光谱线的科学仪器。用于光谱测量的光谱仪种类繁多，但基本原理和结构大多类似，即通过色散元件将不同频率的光信号分散到空间上不同的位置，再使用光电探测器测量各个频率成分的强度。按照色散组件的分光原理，光谱仪可以分为棱镜光谱仪、光栅光谱仪和干涉光谱仪等。

图-1 所展示的就是光栅式光谱仪的内部结构。平行光通过面镜的两次反射后入射到闪耀光栅上。根据衍射与干涉的原理，不同波长的光以不同大小的角度从光栅平面出射。光束再经过一次面镜的反射汇聚后，入射到 CCD 相机上。作为一种光数转化元件，CCD 相机能够把光学影像转化为数字信号，由此即可得到光强度按照波长的分布关系。

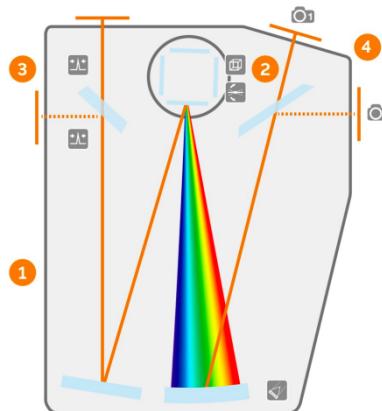


图 1：Andor Technology Kymema 328i 的内部结构示意图

1.2 光谱仪的应用

与其他分析仪器相比，光谱仪的分辨率更高、测量速度更快、采样方法灵活，可进行无损检验，并且能给我们带来一个全新维度的信息。因此，光谱测量作为一种重要的分析手段，被广泛应用于工业分选、医学成像、食品安全等多个领域，是科研和生产的“眼睛”。

近红外高光谱图像技术 (NIR-HIS) 是一种图像技术与光谱技术相结合的三维信息获取技术。在工业领域，它开始被广泛应用于塑料的快速无损检测。图-2 所示的就是一种快速、可靠的塑料识别分类模型，它能根据塑料瓶的化学组成和颜色对其进行分，对废混合塑料的回收再利用具有重要意义。其主要工作流程是使用近红外光谱反射率来识别瓶子的化学成分，CCD 相机结合偏最小二乘判别分析与树分类器来检测瓶子的颜色。结果表明，近红外光谱反射率的平均值和倾角波长可以作为特征对不同化学组成的塑料瓶进行分类，分类的准确率达到了 94.14%。

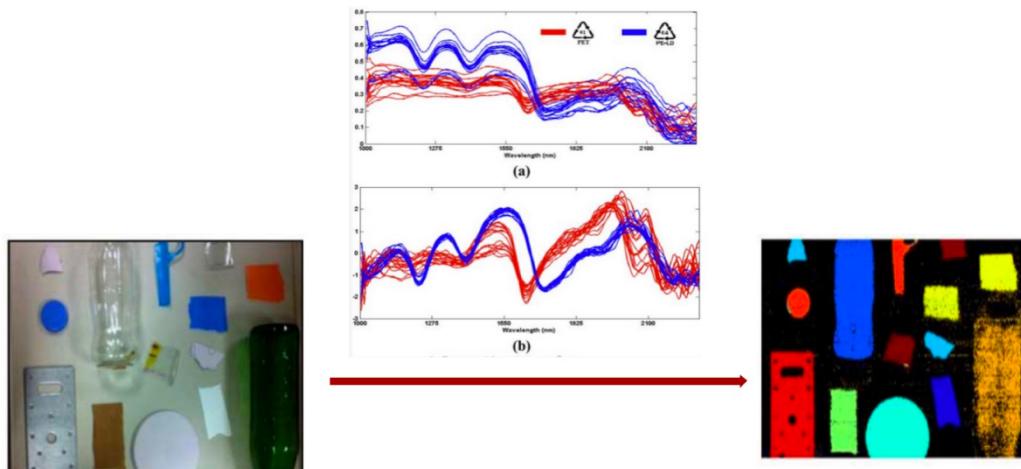


图 2: 垃圾分类的几组样本数据和处理过程

在农业领域。便携式的光谱仪可以被应用于农作物品质和成熟度，从而用于判断采摘时间。例如，肥城桃的生产过程中，中熟的桃子采摘下来后需要很长一段时间才能上市，而成熟的桃子通常采摘下来就立即食用。在此期间，桃子的质量属性会不断地快速变化。图-3 为现场采集照片和对光谱进行提取和处理的过程。中熟和成熟的肥城桃子的平均光谱反射率不同，结合化学计量学，即可对不同阶段的桃子进行判别。分类识别精度达到 91.7%。这一应用在科技农业中有着广泛的应用前景。

除此之外，参阅近十年来的文献可知，作为一种新型的、非接触式的光学诊断技术，高光谱成像通过光谱图像信息为临床医学提供了一种有效的辅助诊断手段。由于生物组织结构的不均一性，光在各个方向发生散射，而血红蛋白、黑色素和水等不同组分会吸收不同波长的光，因此，不同组织或器官的反射光谱能够反映自身的生物化学和组织学特性，这就为鉴别正常组织和癌变组织提供了强有力的依据。

总体而言，光谱仪的应用领域较为广泛，同时各行业之间具有一定的差异性。便携式光谱仪行业投资分析指出，随着光谱仪技术的提升，下游应用将进一步普及。在新材料、新能源汽车、锂电池、智能硬件等领域也有着更多的机会。例如，中国的新能源汽车增长高于全球水平，大量充电桩将被安装在公路上，而这些设备的电池、新材料都需要用到光谱检测；同时，充电桩生产过程的质量监控也需要用到光学检测技术。因此，随着行业整体技术水平的提高，我国光谱仪下游需求的将持续扩张。

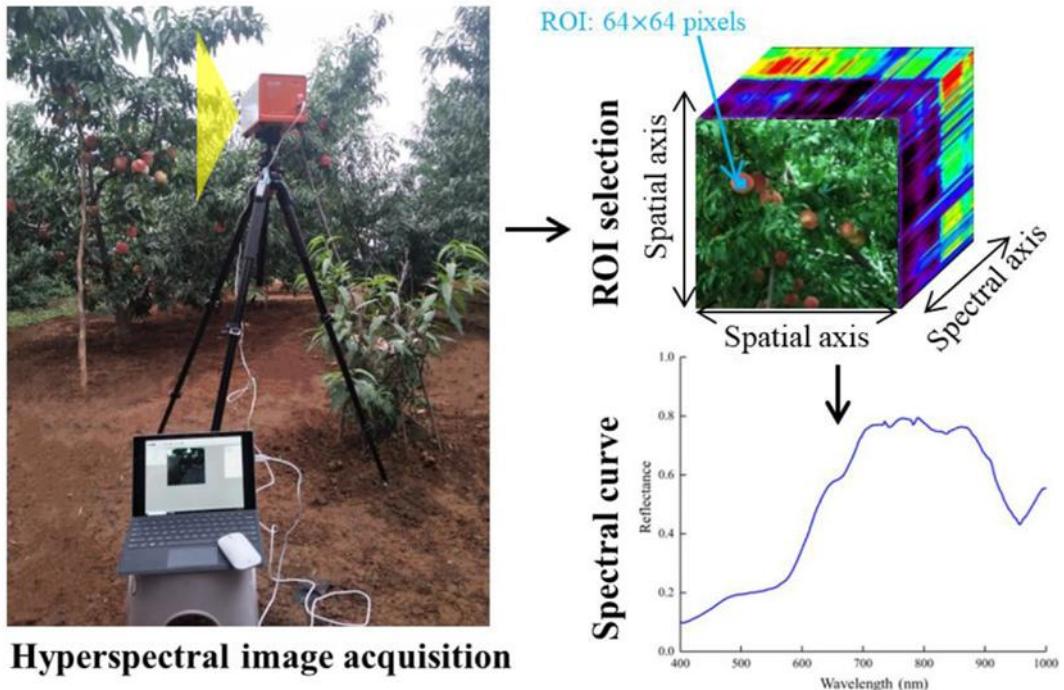


图 3: 果园现场高光谱图像采集和光谱处理

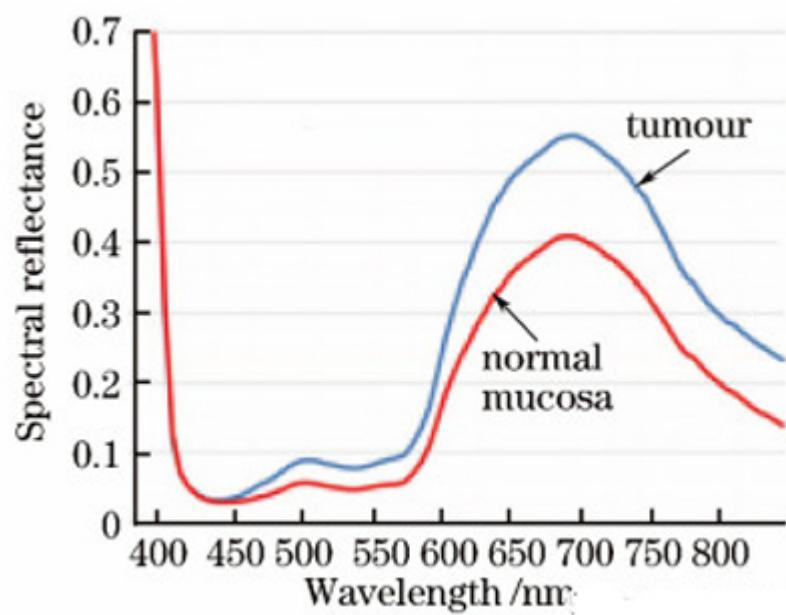


图 4: 正常粘膜组织和肿瘤组织的光谱反射曲线

1.3 市场调研

科学仪器创新与制造是促进科技进步的基石产业，也是催生科技创新的重要要素。近年来，随着科学技术的发展，各大行业对科学分析仪器的应用需求不断增加。而光谱仪不仅可以用于生产过程的检验检测，也用于产品和环境的检测与监督。因此，在当今科技创新大背景之下，光谱仪市场增长空间较大，行业发展势头也随之向好。

根据新思界产业研究中心发布的《2021 - 2026 年中国光谱仪市场调查及行业分析报告》显示，随着下游应用需求增加，光谱仪市场发展迅速。在全球市场范围内，光谱仪市场规模从 2016 年的 76.3 亿美元发展到 2020 年的 90.2 亿美元，年均复合增长率约为 4.3%。预计在未来一段时间内，光谱仪市场仍有着较大增长潜力。

与一些发达国家相比而言，光谱仪在中国的市场规模相对偏小，且对进口设备依赖程度较大。2020 年 1-4 月，中国光谱仪行业产品进口额为 2.09 亿美元，出口额仅 0.34 亿美元，贸易逆差为 1.75 亿美元。从总额占比来看，2020 年全年，中国光谱仪市场份额达到 9.8 亿美元，仅占据全球市场规模的 10.8%。然而，2015 年至 2020 年我国市场规模的年复合增长率率为 6.8%，增速远高于北美和印度等地区。因此，在我国光谱仪的整体市场仍具有很大的上升潜力。

随着技术水平的不断提升，光谱仪自应用到各个行业后，一直处于快速的发展和变更之中。具体而言，其于产品质量、重量及检测精确度方面存在较大发展空间。就目前来看，我国市面上已出现了便捷的手持式光谱仪产品，市场竞争较为激烈。在未来，随着市场应用需求的增加以及使用要求的提升，便携式、手持式和个性化光谱仪市场潜力巨大；加之 5G 商用进程的加快以及物联网技术的渗透，光谱仪市场有望向微型化、智能化方向进一步开拓，甚至是与智能手机相结合，全方位渗透进入群众的日常生活中。

1.4 同类产品调研与成本估计

我们对市场上现有的一些较为成熟、市场份额较大的公司产品进行了调研。这些产品售价区间约在几万到几十万不等，更精密的科研级光谱仪可达几百万。其价格差的主要原因在于分光波段不同、分辨精度不同以及用途不同，但总体而言光谱仪的价格均十分高昂。因此，大多数科研用光谱仪难以延伸到我国广大农村和欠发达地区。

为了满足低成本的需求，以实现新一代超光谱医学检测技术在广大农村和偏远山区的推广。我们进一步调研了光谱仪内部各个零件的大致成本（如图-5 所示）。以前文所述的光栅式光谱仪为例，其内部结构的主要成本元件为光栅、面镜、CCD 相机。现在市场上大多科研级的闪耀光栅价格在几百到上千元之间；反射面镜的报价也在一千元以下；真正昂贵的部分是 CCD 相机。如图-5(c) 所示，这是与图 1 光谱仪同一家 Andor 公司出产的科研级别的 CCD 相机 iKon-M 912。它有着非常优越的性能与参数配置，有效像素数可达 2048×2048 ，但其报价也因此达到了十万至五十万。综上来看，CCD 相机是光栅式光谱仪成本的主要来源。因此，若是想要降低成本，对其内部结构及配置进行改进、尽可能规避 CCD 相机的使用、从基础架构上进行优化，成为了设计的首要准则。

2 总体解决方案

2.1 设计思路简介

我们在光谱仪设计时首先制定了 0.5nm 的精度目标和 200nm 的波长覆盖范围。在此标准下尽可能通过改变光路、更换光学器件来实现降低成本、减小体积的目标。

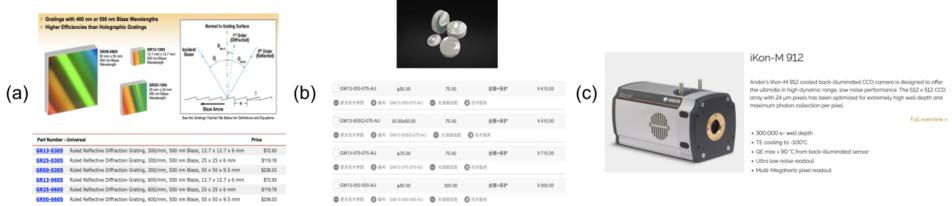


图 5: 光栅内部原件市场价格调研 (a) 闪耀光栅 (b) 反射面镜 (c)CCD 相机

我们保持市面上光谱仪的结构：点光源入射-经过凹透镜汇聚成平行光-通过分光仪器-光被感光器件收集。其中分光仪器和感光器件是光谱仪成本高昂的主要原因。常见的分光仪器为棱镜和光栅，其中棱镜的对光线分离的分辨率难以达到我们的要求，因此在分光仪器上选用光栅。且为了减小设备体积，选用反射光栅。

在感光器件方面，市面上的光谱仪多使用线状 CCD 阵列。光线经过分光后不同波长的光以不同角度出射，线状阵列中每一个像素点接受某一波段的光。经过从而一次性测量出所有待测波段的光谱强度。但 CCD 价格高昂，为了降低成本，我们计划采用一个光电二极管（PD）接受光线，同时旋转经分光后的光线，使不同波长的光线依次扫描过 PD，记录其光谱强度。在此方法下，只要建立旋转角度和波长之间的一一对应关系，且记录各个旋转角度下接收到的光谱强度，就可以还原出光源的光谱。这一方法虽牺牲了时间分辨率，但极大地降低了成本，我们将其确定为实现“低成本”的核心。

要旋转经分光后的光线，最直接的方法是通过舵机旋转光栅。使光栅上光的入射点和转轴位于同一位置，旋转光栅，入射光线方向与 PD 位置不变，由于不同波长的光衍射角不同，在此过程中 PD 便会依次接收到不同波长的衍射光线。同时舵机可以保证高精度与稳定的转速。但市面上的光栅体积较大，通过舵机快速带动旋转有一定危险性，且光栅和舵机的连接件不易制得，因此我们采取了另一种旋转光线的方式：扫描振镜。

通过在光源和光栅之间放置扫描振镜，辅以凸透镜构造对称的光路，可以改变光线的入射角。保证光在光栅上的入射点不变，扫描振镜旋转的过程中，入射光线方向不断改变，PD 位置不变，同样可以使 PD 依次接收到不同波长的衍射光线。

2.2 器件原理

闪耀光栅 光栅是一种具有周期结构，从而能够等宽、等间隔地分割入射波面地光学元件。反射式的闪耀光栅的多个平行小平面与光栅平面具有一个角度，即闪耀角 θ_b （如图-7）。入射光入射时，单个小平面因为宽度极小，因而会产生衍射，使对应方向出现衍射极大峰值。同时，多个小平面之间发生干涉，且干涉的零级峰值与衍射峰值有一定角度；当不同波段光的干涉一级亮条纹恰巧位于衍射峰的范围内时，可以观察到不同波长的光被分离（如图-8）。

扫描振镜 扫描振镜是高速振镜扫描系统的一个结构部件，可以通过输入模拟电压信号控制镜面旋转，具有快速、准确等特征。其内部结构类似于指针式电流计，由定子、转子、检测传感器三部分组成。扫描振镜上的镜面质量较小，同时内部设有精密的负反馈位置传感校正机制，可以实现光路的精确控制。在本次光谱仪项目的设计中，常用于激光打标的扫描振镜是非常优良的镜面旋转控制机构，运转速度及精度都能达到很高的标准。

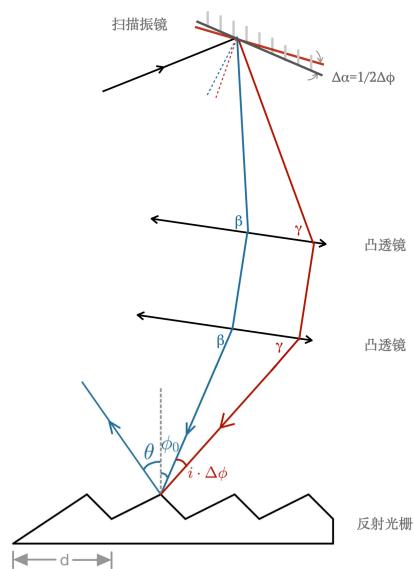


图 6: 扫描振镜光路

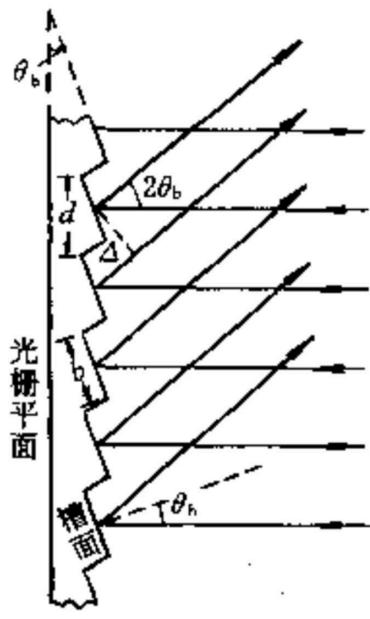


图 7: 闪耀光栅与闪耀角

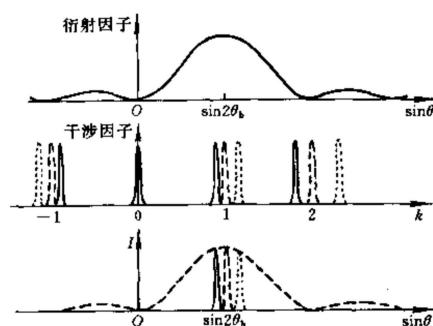


图 8: 光栅衍射与干涉

2.3 最终设计和理论计算

2.3.1 光路图

图-9、10 所示即为最终光路的设计图与实物图。

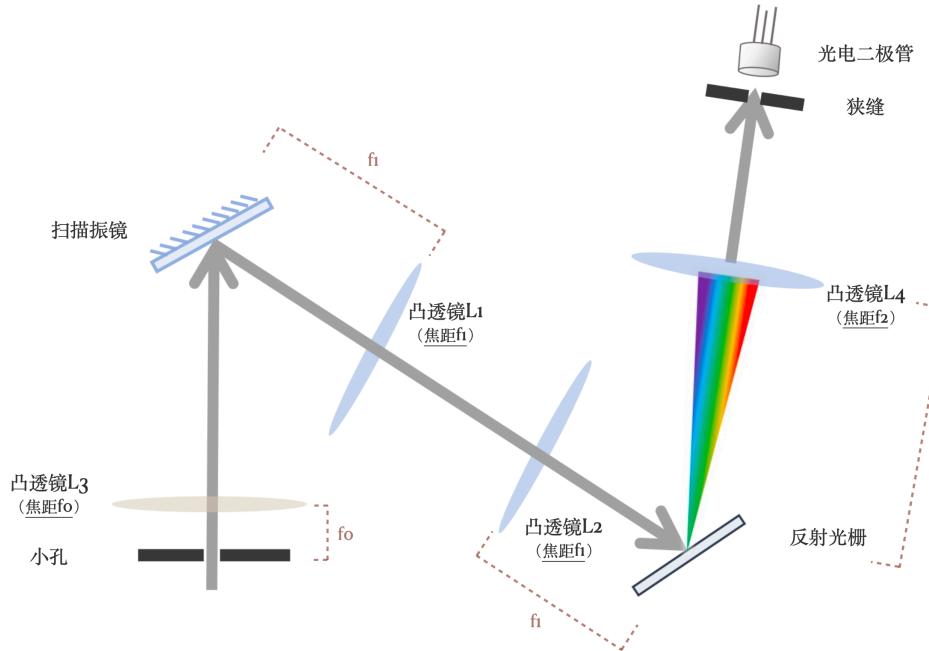


图 9: 光路说明图

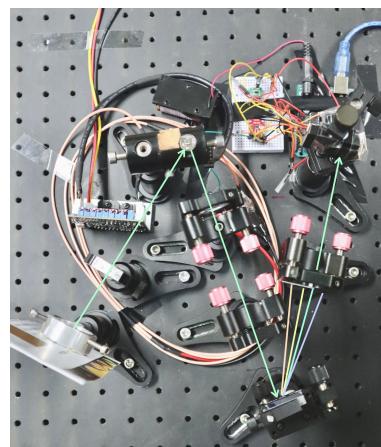


图 10: 实际光路图

2.3.2 波长和角度对应关系

参考图-6，根据反射光栅原理，在一级干涉条纹处，入射角 ϕ 、出射角 θ 、光栅常数 d 和波长 λ 需满足如下关系：

$$d(\sin\theta - \sin\phi) = k\lambda$$

考虑目标测量波长 400nm-600nm，及市面上光栅线密度，取 $k = 1$ 。

在扫描振镜的控制程序中，将扫描振镜旋转角度分为 4096 份，用 $i=1, 2, 3\dots 4096$ 标记，在程序中通过改变 i 值大小实现振镜的旋转。通过实验测得 i 值每改变 1，面镜单位旋转角 $\Delta\alpha = \frac{6.25^\circ}{4096}$ 。对应入射光线单位旋转角 $\Delta\phi = 2\Delta\alpha = \frac{12.5^\circ}{4096}$

记振镜位于初始角度时光线入射角为 ϕ_0 ，则在振镜旋转过程中入射角 $\phi = \phi_0 \pm i\Delta\phi$ (在实际光路中测的 \pm 取 $+$)。

由此获得波长和振镜旋转角度的一一对应关系：

$$d[\sin\theta - \sin(\phi_0 + i\Delta\phi)] = \lambda$$

2.3.3 精度分析

波长精度校核 将波长与振镜旋转角度对应关系式微分得

$$d\cos(\theta_0 + 2\Delta\phi i) \times 2\Delta\phi di = d\lambda$$

选定 1200 线光栅，取初始入射角 $\phi_0 = 0^\circ$

当 $di = 1$ 时， $d\lambda = 0.04nm$

满足 0.5nm 的精度要求，且保留取平均值降噪的空间。

光斑直径最小值 由瑞利判据：

$$\frac{\Delta\lambda}{d} \geq \frac{\lambda}{Nd}$$

代入 $\lambda = 600nm$, $\Delta\lambda = 0.5nm$ ，得 $N \geq 1200$

即光斑至少覆盖 1200 条光栅线，对应光斑直径至少 1mm。

光电二极管的直径最大值 由瑞利判据：

$$f \times \frac{2\Delta\lambda}{d} \geq d_{PD}$$

代入 $f = 100mm$, $\Delta\lambda = 0.5nm$ ，得 $d_{PD} \leq 0.12mm$

由于市面上 PD 的直径多为 1mm 左右，我们计划在 PD 前放置狭缝以控制 PD 接收到的光斑大小。

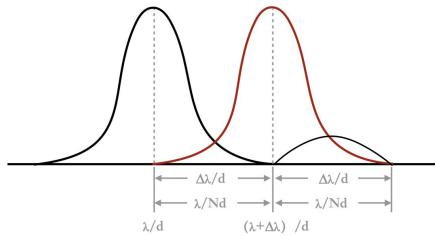


图 11: 光斑直径最小值

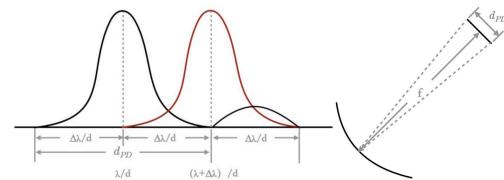


图 12: PD 直径最大值

3 任务开展情况

3.1 最终设计

在上述理论分析的基础之上，我们开展了器件选取、光路搭建等一系列工作。图-9、10 所示的就是最终光路与器件示意图。此外，我们还在硬件的基础上进一步进行了软件上的算法优化。以下部分将逐一介绍我们的各项工作与最终方案。

3.1.1 选用器件

根据设计完成的光路以及该光路所需要的精度要求，我们完成了器件的选型。在表-1 中介绍了我们的器件选型情况。表格中的器件编号与图-9 中相同。

表 1: 器件选型表

	器件名称	选用品牌/型号	器件参数	功能
光学部件	闪耀光栅	LBTEK BG25-1200-500	线密度: 1200L/mm 闪耀角: 17.5° 闪耀波长: 550nm	实现不同波段光的分离
	透镜 L_1 、 L_2 *	LBTEK	焦距: 50mm	实现光路中光线折射， 保障光栅入射光线 在角度改变的同时， 光斑位置不发生移动
	面镜 L_3 *	LBTEK CM05-F100-AG	焦距: 100mm 直径: 12.7mm	将点光源的入射光线 反射为平行光
	面镜 L_4 *	LBTEK CM05-F100-AG	焦距: 100mm 直径: 12.7mm	将光栅的出射光线 聚焦于狭缝位置
感光器件	感光二极管	波粒光子 PDV-100G1T5AR		将光强信息转化为电信号
	狭缝 *	LBTEK S1-30W	缝宽: $30\mu\text{m}$	使照射到感光二极管上 的光波段较窄， 保障分辨率
旋转机构	扫描振镜		控制电压: 5V; 输入电压: $\pm 24\text{V}$	通过面镜旋转 实现扫描测量光谱
控制部件	DAC 模块	MCP4725	精度: 12-bit	与单片机 IIC 通讯， 接受数字信号；输出 模拟电压控制扫描振镜
	Arduino 开发板	UNO R3		控制光谱仪扫描、 读取数据并通过串口 将数据传输给电脑
电源	直流电源 $\times 2$		最大输出电压: 32V	提供振镜所需的 $\pm 24\text{V}$ 电压
	DC-DC 转换芯片	TPS60400		提供感光二极管所需 -5V 电压
	干电池		输出电压: 9V	给开发板提供稳定电压， 消除市电高频噪声影响
固定部件	光学支架若干			固定器件
	光学面包板			固定光学支架

(注: 加 * 号表示该器件由于疫情影响在实际实现过程中发生改动或使用其他类似部件替代)

遗憾的是，由于疫情的影响，我们所需要的的部分器件不能及时送达，因此最后我们在实际实现的过程中不得不根据现实条件做出调整。例如，面镜 $L3$ 、 $L4$ 在实际光路搭建过程中被更改为透镜，这一改动使得我们最终的光谱仪在纵向长度上稍有加长，同时使用了更多的透镜可能产生更多光的散射损耗。

3.1.2 光路搭建

利用光学面包板与光学支架进行固定，我们搭建了如图-10 所示光路。通过共轴调节与光路调节，保障各个器件的中心位与主光轴重合，同时各透镜的相对位置满足其焦距与光路的要求，使透镜 $L1$ 到扫描振镜之间的光为平行光、透镜 $L4$ 的出射光汇聚到狭缝上，以实现较好的分光及检测效果。

同时，为了减小整个仪器的体积，同时保证光栅的反光效率较高，光路之间的夹角较小，器件摆放较为紧凑。

主要光路调节完毕后，将在卡纸上扎出的小孔固定在光轴与透镜 $L1$ 的焦平面的焦点处，完成整个光路。此时，利用照明设备向小孔内部照射时，小孔可近似视作位置固定的点光源，使内部实际光路与设计光路一致。

3.1.3 遮光

由于感光二极管增益较大，因此光谱仪在实际使用过程中必须有合理的方式将感光部分同环境光与其他可能的杂乱光线隔绝。为了达到比较好的遮光效果，同时使制作方案简便、成本较低，我们利用已有的纸箱制作遮光部件。

经过实际试验，我们选用的光栅会在三个不同方向产生光强较大的反射光线，而我们只需要利用其中确定的闪耀角对应的衍射峰。其余的光线经过不同位置的光学部件，又可能发生更多的折射与漫反射。同时，我们选用的扫描振镜，也不能将全部光线反射，其透射光会在其他位置形成光斑，也会对感光元件探测光强产生影响。因此，在仪器内部对光路进行遮蔽，不让不符合光路的杂光造成影响也是十分必要的。

最终我们实现了内外两层的遮光部件（见图-13，图-14）。

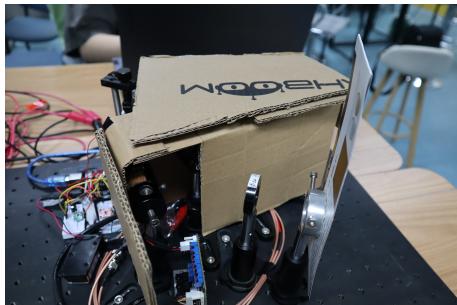


图 13: 内层遮光



图 14: 外层遮光

3.1.4 软件

此部分包括下位机与上位机程序的介绍也所实现的功能，其具体实现已经开源，更多实现细节请参见<https://github.com/riverback/2022Spring-PBL2-Spectrograph>。

下位机 负责振镜的控制、PD 数据的读取以及与上位机之间数据和指令的通讯

我们使用了一块 Arduino UNO R3 开发板作为下位机的控制模块。通过 IIC 与 DAC 通信，Arduino 可以发出信号控制振镜转动到确定角度；同时，Arduino 可以读取感光二极管处获得的电压信号，并使用内置的 ADC 将其转换为数字信号，获得一组“振镜角度-光强读数”数据对。在扫描过程中，单片机控制振镜逐步增大（或减小）转动角度，同时不断读取光强数值，并将数据通过串口发送到上位机；在发送 4096 个扫描信号后，即振镜转动 6.25° 后，完成一次扫描，即可获得单个点光源的光谱数据。

Arduino 与电脑 USB 的串口连接是全双工的，因此在发送信号的同时，下位机也可以接收上位机的指令，执行不同的动作。下位机程序共有三种功能：单次扫描，连续扫描，校准。单次扫描时，振镜仅从最小角度运动到最大角度扫描一次后复位；循环扫描时，振镜连续不断地做从小角度运动到大角度后反向转动的运动，实现不停顿连续往复扫描，使得平均每次扫描速度加快。而在校准模式时，振镜固定在一个预先设定好的位置不动，方便调整光路，观察振镜位置。实现多功能扫描的下位机程序主循环的伪代码表示如下：

```
loop(){
    instruction=get_instruction();
    switch(instruction){
        case SCANONCE:
            scan();
            instruction = STOP; break;
        case SCAN:
            scan(); break;
        case SETUP:
            set_up(); break;
    }
}
```

上位机 提供图形化界面，负责扫描、校准与暂停指令的发送，同时完成数据的实时显示与处理后绘制光谱。

我们使用 Python 的 PyQt5 进行了图形化界面的设计，最终的程序图形界面见图-15。上方的黑色部分为光谱数据的实时显示区，可以提供为经过强度补偿和降噪的原始数据的实时显示，对掌握光谱仪运行情况以及调节光路提供帮助。

程序内部，我们通过 PyQt5 的 QThread 类实现了上位机程序的多线程功能，满足了上位机同时进行发送指令、读取数据、处理数据以及实时显示的多线程要求。通过“循环扫描”功能，我们可以在实时显示区观察到实时的光谱数据；通过校准功能，可以方便地读取当前入射光对应的光强峰值位置，便于进行波长校准；单词扫描功能则会在扫描完入射光后，通过波长校准、光强补偿以及降噪算法处理后，按照波长对应颜色生成最终的光谱图。

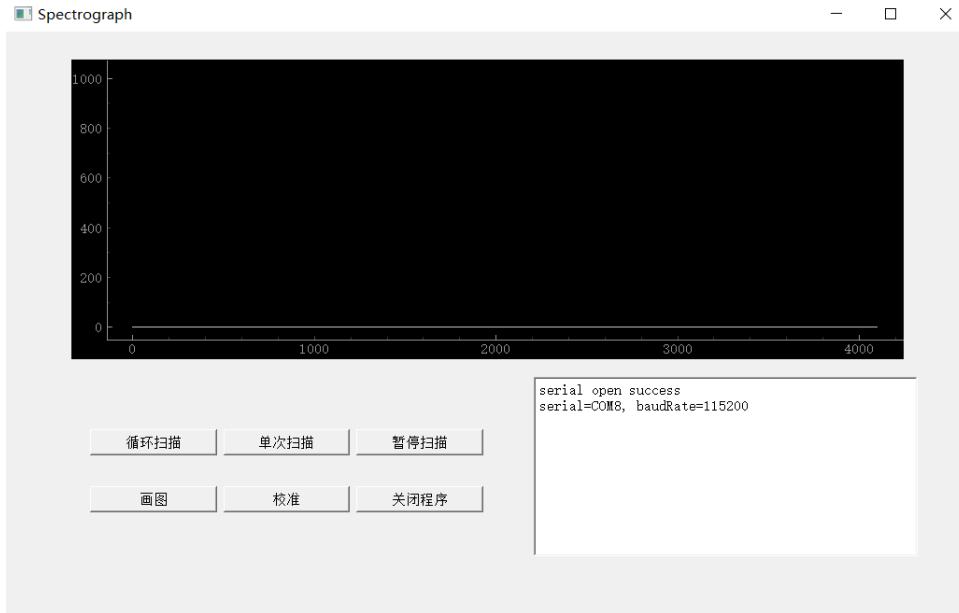


图 15: 上位机图形化界面

3.1.5 算法

波长校准 我们计算波长的公式如下:

$$d \times [\sin(\theta) - \sin(\phi)]$$

$$\phi = \phi_0 + \Delta\phi \times i, \quad \Delta\phi = \frac{12.5^\circ}{4096}$$

角度的示意可见图-16:

其中 θ 为固定的出射角, $\Delta\phi$ 为我们的振镜每次旋转改变的角度, 为已知值, 可通过输入的指定电压确定当前振镜已经旋转的角度, ϕ_0 为初始时刻输入控制电压为 0 时的入射角度。

由于我们无法在搭建的光路中对初始的入射角和出射角进行精确测量, 所以我们需要通过激光校准的方式进行参数的确定和光路的校准, 经过理论计算, 我们推导出可以通过两束波长不同但已知的激光进行校准, 计算公式如下:

$$\lambda_1 = d \times [\sin(\theta) - \sin(\phi_0 + i_1 \times \Delta\phi)]$$

$$\lambda_2 = d \times [\sin(\theta) - \sin(\phi_0 + i_2 \times \Delta\phi)]$$

$$\frac{\lambda_1 - \lambda_2}{d} = \sin(\phi_1) - \sin(\phi_2) = 2 \cos\left(\frac{i_1 + i_2}{2} \times \Delta\phi\right) \sin\left(\frac{i_1 - i_2}{2} \times \Delta\phi\right)$$

$$\phi_0 = \arccos\left(\frac{\lambda_2 - \lambda_1}{2d \sin\left(\frac{i_1 - i_2}{2}\right)}\right) - \frac{i_1 + i_2}{2} \times \Delta\phi$$

通过以上推导, 我们证明了可以通过两束波长不同但已知的激光对参数进行确定, 并进行光路的校准。

实际中具体操作如下:

通过软件设计的校准功能, 可以轻松通过一次扫描读出光谱峰值处对应的 i 值, 获得第一组 (i_1, λ_1) 更换激光重新校准可以获得另外一组 (i_2, λ_2) , 获得两组数据后, 便可以通过上述推算出的公式进行未知参数的计算。确定了未知参数后, 就相当于获得了波长函数与 i 的关系。

另外一种未使用的更加简便的校准方式为：根据同样操作获得的两组数据，直接进行线性插值，即：

$$\lambda(i) = \lambda_1 + \frac{\lambda_2 - \lambda_1}{i_2 - i_1} \times (i - i_1)$$

由于我们的测量的波长处于可见光波段，而且测量范围为 200nm 左右，属于拉曼光谱，由于光栅公式中的三角函数均为光滑函数，这种线性插值的方式仍然满足我们对精度的要求，同时在有更好激光校准的工业实际应用场景下，这种方法已经被广泛应用。

但是考虑到我们使用的激光较为粗糙，波峰过宽，我们在最终设计中仍是使用了前一种方法进行校准。使用绿光和蓝光校准的效果如图-17，图中的光谱数据为校准后使用绿色激光入射得到的光谱数据，可以从横轴范围看出校准的效果较好，同时也可以看出我们所使用的激光不够理想，光谱较宽。

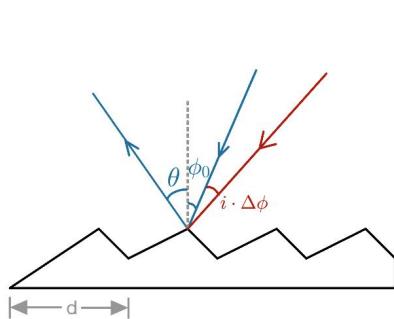


图 16: 角度示意

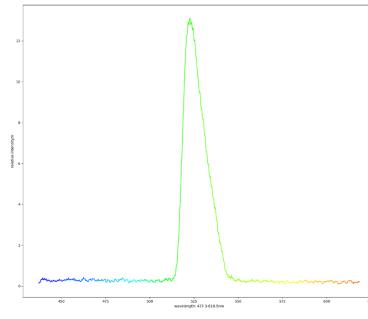


图 17: 绿色激光校准

不同波长光的光强补偿 由于入射光的波长不同，受到光栅绝对效率、光电二极管（PD）响应效率以及衍射效率的不同，我们需要对初步测得的光谱数据根据波长进行光强的校准。具体原理与计算公式分述如下：

1. 光栅绝对效率补偿：

光栅某一级的衍射效率定义为衍射到该级次衍射峰的光强度与入射光强度之比，为了测试光栅的绝对衍射效率，需要精确测试入射光栅上的单色光强度和各个衍射峰的强度。光学实验需要在真空的条件下进行，无法方便的进行各种实验操作。

我们采用了所购买的光栅以及 LBTEK 公司提供的绝对效率曲线与散点数据进行了光栅绝对效率的补偿。所用光栅的绝对效率-波长曲线见图-18。

2. PD 响应效率补偿：

我们所使用的光电二极管对于不同波长的偏振光，其响应效率也是不同的，同样我们根据厂家提供的响应曲线进行采点，进行光强的补偿。PD 响应曲线见图-19。

3. 衍射效率补偿：

根据我们的光路设计，测量范围内所有波长的光会共同落在一级衍射峰中。根据衍射因子对光强的影响公式，我们可以得出不同波长的光对应的衍射效率。

计算公式如下：

$$I = I_0 \frac{\sin^2(\alpha)}{\alpha^2} \frac{\sin^2(N\beta)}{\sin^2(\beta)}$$

其中 $\frac{\sin^2(\alpha)}{\alpha^2}$ 为衍射因子， $\frac{\sin^2(N\beta)}{\sin^2(\beta)}$ 为干涉因子，其中 α 和 β 是与入射角和光栅常数有关的角，其中 α 由以下公式给出：

$$\alpha = \pi a \frac{\sin(\theta)}{\lambda}$$

由于所以各波长的入射光的干涉极大峰均位于同一个衍射峰内，因此在进行强度补偿时不需要考虑。

根据衍射强度公式可绘制出响应的波长与强度曲线见图-20.

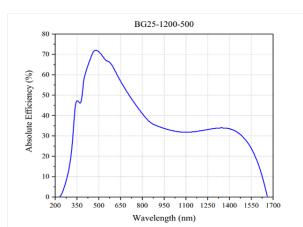


图 18: 光栅绝对效率

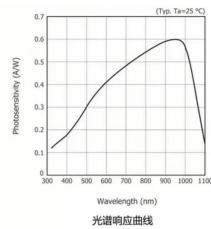


图 19: PD 响应曲线

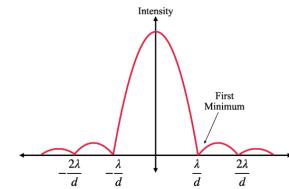


图 20: 衍射强度补偿

光谱数据降噪 经过了能量补偿和波长校准后，我们已经可以初步得到所测样品或者光源的光谱数据，但是光谱数据中存在着较多的噪声，影响了光谱数据的精度并且不利于光谱的分析。

噪声来源主要有两方面：第一种噪声的来源是由于我们所使用的光电二极管（PD）增益过高，导致的随机噪声，见图-21；第二个问题是由于所使用的电源连接的是市电，因此存在一些高频噪声。

针对上述两种来源，我们分别使用了递推平均滤波方法和 Savitzky-Golay 滤波方法进行了处理，取得了较好的效果。详细介绍如下：

递推平均滤波：由于随机噪声基本具有高频振荡、幅度不稳定但均值为零的特性，因此可以通过取窗口平均的方式来消除这一均值为 0 的噪声。

数学表达可以表示如下：

$$\bar{y}_i = \frac{1}{N+1} \sum_{j=i-N/2}^{i+N/2} y_j y_j$$

我们使用了一维卷积的方式实现了递推平均滤波，考虑到精度的要求，设置窗口大小为 11，并且不改变原始数据长度，从效果来看较好的抑制了由于 PD 过高增益带来的随机噪声。递推平均滤波处理后的效果如图-21，图-22 所示。

Savitzky-Golay 滤波方法：Savitzky-Golay 滤波方法又称信号的最小二乘平滑，是一种在时域内基于局域多项式最小二乘法拟合的滤波方法，这种方法的最大特点在于可以在滤除高频噪声的同时保证数据的形状不发生改变，因此十分适合我们去除市电造成的高频噪声的应用场景。

数学原理描述如下：设一个窗口内的一组数据为 $x[i]$, $i = -m, \dots, 0, \dots, m$, i 的取值为 $2m+1$ 个连续的整数值，现构造一个 n 阶多项式 ($n \leq 2m+1$) 来拟合这组数据：

$$f(i) = \sum_{k=0}^n b_{n0} + b_{n1}i + b_{n2}i^2 + \dots + b_{nn}i^n$$

拟合数据点与原数据点的残差平方和为：

$$E = \sum_{i=-m}^m (f(i) - x[i])^2 = \sum_{i=-m}^m (\sum_{k=0}^n b_{nk} i^k - x[i])^2$$

使用最小二乘法，要使拟合效果最好，则残差平方和应最小，即 E 对该多项式的系数 b_{nk} 求偏导应为 0：

$$\frac{\partial E}{\partial b_{nk}} = 2 \sum_{i=-m}^m (\sum_{k=0}^n b_{nk} i^k - x[i]) i^r = 0$$

解得：

$$\sum_{i=-m}^m x[i] i^r = \sum_{k=0}^n b_{nk} \sum_{i=-m}^m i^{k+r}$$

当需要拟合的单边点数 m ，多项式的阶数 n ，以及待拟合的数据 $x[i]$ 已知后，即可求出该多项式。你和出来的多项式用来求取该窗口内的中心点估计值，而对于后面的点，不断移动窗口重复操作即可。

实际应用中，可以使用离散卷积快速得到该窗口内的中心点平均值。Savitzky-Golay 平滑公式为：

$$x_{k,smooth} = \bar{x}_k = \frac{1}{H} \sum_{i=-w}^{+w} x_{k+i} h_i$$

其中， $\frac{h_i}{H}$ 为平滑系数，由最小二乘法拟合多项式求得。

经过了 S-G 滤波处理的效果对比见图-22，图-23，可以发现 S-G 滤波在滤除了高频噪声的同时，仍保留了原始光谱数据的形状不变，较好的实现了高频噪声降噪。

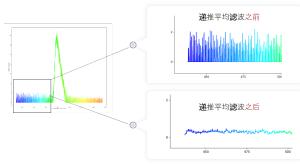


图 21: 抑制随机噪声

图 22: 只有递推平均降噪

图 23: 递推平均 + S-G 滤波

3.1.6 总结

总结本小组的工作成果如下：

1. 我们实现了 430nm-600nm 左右范围内的光谱数据测量，且测量精度可达 0.5nm。
2. 我们实现了透射式光谱仪，可以使用普通光源作为输入，实时地输出光谱曲线，并经过降噪等算法处理后绘制光谱图。
3. 我们实现了循环扫描与单词扫描的功能，既可满足高精度光谱数据的测量与光谱绘制，也可以通过循环扫描满足快速的光谱数据采集。
4. 我们实现了便捷而且鲁棒的校准功能，通过两束测量范围内、波长不同且已知的激光，便可以完成波长校准。

同时我们根据所使用的器件进行了成本估计（主要包含核心光电器件），其中由于疫情影响，部分器件在实际实现过程中选用了其他类似部件替代（成本更低或者相近），综合考虑所用器件的价格以及人工费，以及对比市场上常见光谱仪产品，我们认为实现了本小组课题目标中的低成本要求。具体成本见表-2。

表 2: 核心器件成本

器件名称	价格
扫描振镜	850 元
LBTEK 凸透镜 50mm ×2	1264 元
LBTEK 凸透镜 100mm ×2	
光电二极管	779 元
LBTEK 反射光栅	730 元
LBTEK 狹缝	338 元
总计	3961 元

3.2 效果展示

在上述设计的基础之上，我们进行了一些实际应用场景的测试。图-26 至图-32 所展示的即我们所做的部分测试结果。

由于手机手电筒是由 R、G、B 三色 LED 光混合而成，我们能很明显地在图-26 看到绿光波峰与蓝光波峰，但是由于红色的波长在我们的量程之外，故在这一光谱图上表现得不甚显著。

其余测试结果也都很好地体现了物体的颜色性质与一些相关属性。例如，图-29 中深绿色叶子与图-30 浅绿色叶子的光谱形状非常相近，但是图-29 的峰值显著小于图-30。这与深绿色叶子更为不透光的性质有关。

当然，由于我们的测试光源是手机手电筒，并且采用透射照射的形式，故除去物体本身的特征颜色外，光谱中仍残留部分白光的光强波长分布。

总体而言，以上光谱图像确证了我们所设计光谱仪的合理性与准确性。这些事实也给该设备进一步的应用奠定了实践基础。

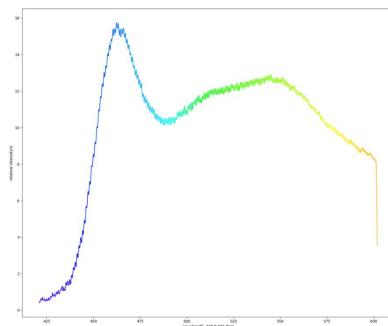


图 24: 手电筒白光

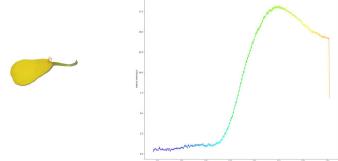


图 25: 黄色花瓣

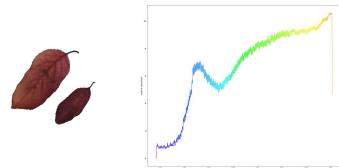


图 26: 红色叶子

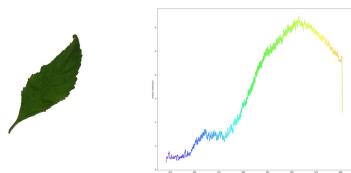


图 27: 深绿色叶子

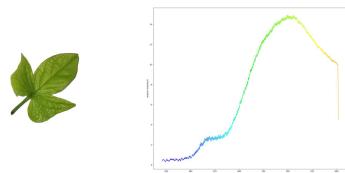


图 28: 浅绿色叶子

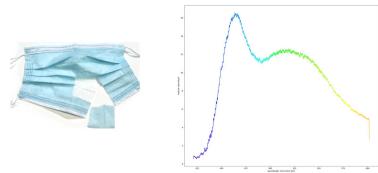


图 29: 蓝色口罩碎片

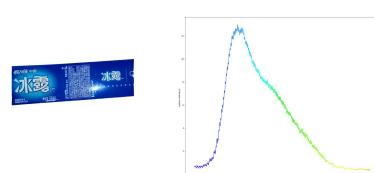


图 30: 冰露矿泉水塑料包装纸

4 总结

4.1 创新

1. 本小组的设计通过使用旋转装置，避免了 CCD 的使用，极大地降低了成本。
2. 同时通过高精度振镜、高灵敏度 PD 的使用，获得了较高的理论分辨率 ($< 0.5\text{nm}$)。
3. 在疫情影响的大背景下，以及经过了对有限经费的综合考量，我们小组合理利用了现有的器材，并通过合理设计与创造利用了常见的耗材（例如纸板箱）完成了原型机的设计与搭建，并成功验证了方案的可能性。

4.2 不足

1. 由于目前所有光学器件仍通过光学支架固定，同时受限于先有透镜的焦距，我们未能实现光谱仪原型机的小型化。
2. 同样由于光学支架和先有透镜焦距的限制，我们在光栅处的入射角无法设计得很小，从而光栅的衍射效率未能达到最佳。
3. 我们的小孔是通过在卡纸上戳孔制作的，十分粗糙。
4. 我们所使用的校准激光，精度不够且光谱较宽，不够理想，从而降低了校准的精度。
5. 我们所使用的测试光源为手机手电筒的白光，属于由 RGB 三种颜色的光叠加制作的白光，因此在进行测试时，会残留一部分白光的光强，对光谱的绘制产生影响。

4.3 未来展望

针对上述总结的不足之处，我们希望通过通过使用焦距更小的透镜并用机械设计替代光学支架的方式实现光谱仪设备的小型化，也可以通过使用透射式光栅或者合理设计透镜焦距的方式来提高光栅的衍射效率；同时可以使用更加精细的光学小孔，和更加理想的激光（光谱接近 δ 函数）来进行校准。而最后一点不足，则需要根据具体的使用场景，例如如果是连接在扫描仪器后使用，则最好设计可调节大小的小孔，如果是仍作为透射式光谱仪，则需要更好的测试光源。

4.4 团队分工与对课程的感想和建议

4.4.1 团队分工

前期的理论计算、器件选型以及光路设计，中后期的光路搭建与调试，以及最终的外壳制作均由小组成员共同合作完成。俞文皓同学负责了控制振镜旋转以及抓取并传输数据的 Arduino 下位机程序的编写；何航舟同学负责了图形化界面以及数据处理的上位机程序编写；庄晨洁和李海越同学共同负责了工作内容的整理、PPT 制作以及汇报展示工作，同时也负责了选型后器件的购买以及后期借用各种器件的联络工作。

4.4.2 感想与建议

在本次课程中，我们小组共同合作完成了低成本高光谱成像仪的搭建和设计。这个过程很好地锻炼了我们思考与解决问题的能力，并且在实践过程中，我们的理论知识水平与动手操作的水平也

得到了很大的提升。非常感谢熊汗青老师、李长辉老师对我们课题的指导。总体而言，这是一次非常充实而又有收获的课题实践，希望它可以成为我们日后通往更广阔的生物医学工程世界之路上，一段生动具体、意义非凡的经历。

在课程设置方面，我们在前半学期学习到了 Arduino 的入门知识，也掌握了较为系统的 SOLIDWORKS 的 3D 打印操作方式。助教学长学姐也非常细心负责，帮助我们答疑解惑。这两个软件的学习为后续的广泛运用打下了良好的基础。但是，我们认为 Arduino 的教学相对缺乏系统性，也没有充分利用好教学课时。教学比较零散。希望在日后的培养方案中可以安排更为专业、扎实、全面的单片机知识讲解，夯实基础，可以让同学们对其有更好的运用能力。

5 参考资料与文献

1. https://en.wikipedia.org/wiki/Optical_spectrometer
2. <https://www.dualix.com.cn/Application/index/id/126.html>
3. <https://www.dualix.com.cn/Detail/index/id/124/aid/1258.html>
4. Calin, Mihaela Antonina, et al. "Hyperspectral imaging in the medical field: Present and future." *Applied Spectroscopy Reviews* 49.6 (2014): 435-447.
5. <https://www.dualix.com.cn/Detail/index/id/216/aid/1171.html>
6. Iftak Hussain and Audrey K. Bowden, "Smartphone-based optical spectroscopic platforms for biomedical applications: a review." *Biomedical Optics Express* Vol. 12, Issue 4, pp. 1974-1998 (2021)