

反射式摄谱仪/单色计计算机 辅助设计的研究

赵晓东

(中国科学院长春光学精密机械研究所, 长春 130022)

摘要 本文在深入研究光学计算机辅助设计方法的基础上,应用 Michael P. Chrisp 波像差理论,编制了功能较齐全的摄谱仪/单色计计算机辅助设计软件。该软件具有计算像差,自动设计,象质评价,绘制图形等功能。光学元件面形可以是平面、球面、超环面、抛物面、椭球面。光学系统可以包含若干个反射面或全息光栅。和若干标准实例对比,表明该软件计算像差准确,自动设计良好,各项功能是可靠的,故可实际应用于这种光学系统的光学设计。

关键词: 计算机辅助设计;全息光栅;摄谱仪;波像差;单色计;象质评价;超环面

1 引 言

在本世纪初,摄谱仪/单色计主要以棱镜为分光元件。由于这种摄谱仪/单色计的分光方式为透射式,故短波段光谱吸收严重。二次大战后发展了光栅摄谱仪/单色计。由于分光元件为反射式光栅,故大大降低了短波段光谱吸收,提高了摄谱仪/单色计的光学性能。

为了使单一的光学元件同时具有分光功能和准直功能,我们可以将光栅制备在凹面坯上,早在 1882 年罗兰首先制成了凹面光栅,并应用于科学研究中。

最初的凹面光栅是机刻光栅。其像差理论早已成熟。但由于这种光栅有效大像差,特别是存在着严重的像散。为了获得好的象质谱面,通常将接收面选在罗兰元上。但这样作会带来如下缺点,对于单色计光学系统其扫描方式就会很复杂,而对于摄谱仪学光系统,其接收谱面就不可能是平面。

解决上述问题最有效办法是将凹光栅槽形复杂化,即在凹面坯形上用全息方式取代机刻方式制备衍射光栅。人们可以通过调整全息光栅的记录参数,光栅坯形参数,来改善凹面全息光栅的聚焦特性,以达到在给定的谱面上减少或消除某些象差。除此之外,全息光栅还有下列优点:杂散光低;无鬼线、信噪比好、分辨本领高。

计算机光学辅助设计方法,并在此基础上编制了相应的通用软件。该软件具有下列功能:计算各种象差,绘制图形,自动设计,计算仪器函数及分辨率。该软件适用于多个反射或衍射光学元件组成的光学系统,或单个光学元件组成之光学系统。光学元件之面形可以是平面,球面,超环面,抛物面及椭球面。由于用波差系数来计算各种象差,构造价值函数,故和用光线追迹方

法相比,计算速度大大提高。经过若干标准实例的验证,表明该软件计算像差准确,优化设计效果良好。

作者同时用该软件设计了若干个带有中缝的双光栅单色计。这种设计方式大大降低了杂散光,可作为真空紫外太阳辐射监视器。

本课题的目的是以 Michael P. chrisp 的全息光栅波像差理论为基础,编制一个摄谱仪/单色计光学设计通用软件。我所已有两届研究生分别用该理论编制了像差计算程序和设计了单片全息光栅平场摄谱仪。我所做的工作是以 Micheal P. chrisp 的理论为基础,编制一个功能较为齐全的摄谱仪/单色计计算机光学辅助设计软件。

为完成本课题,本作者首先研究了摄谱仪/单色计的计算。

2 文献综述

早在 1882 年,罗兰便研制出第一块凹面机刻光栅,并建立了这种光栅的像差理论。由于这种光栅存在着较大像差,特别是像散严重。人们为了获得消像差凹面光栅,做了长期不懈的努力,发现全息凹面光栅是最有效的办法。于是人们便不断深入地研究了全息光栅的成像理论。

T. Namioka^[3]在总结前人工作的基础上首先创立一套比较完整的全息光栅像差理论。其方法是以光栅顶点作为光程函数所在坐标系的原点,将光栅的光程函数进行级数展开,最终得到像差的数学表达式。由于 T. Namioka^[3]在推导像差公式时,假设光阑中心设在光栅顶点处,故所得的幂级数展开式中的每一项均不包括光瞳坐标。他推导的像差公式只适于小视场单光栅系统。

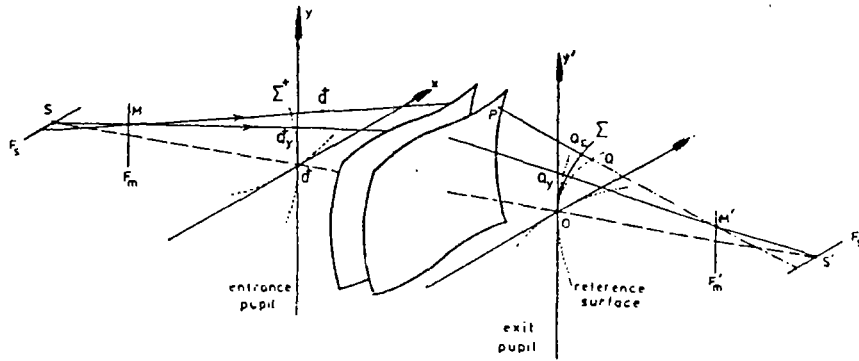
但对于由若干反射元件或光栅组成之复杂系统,光阑可能处于光学系统中的任何位置,光阑中心可能偏离光学元件的中心位置。因此 Namioka^[3]的理论不适合于复杂光学系统。另外 Namioka 在推导像差表达式时,以球面波作为参考波面,对于掠入射光谱仪,会带来较大的象差计算误差。

为解决上述问题,Micheal P. chrisp 提出了一种崭新的波像差理论^[1]。他首先假设参考波面是理想像散波面,采用光阑到系统中光学元件的距离来确定像差系数,直接对波像差系数进行级数展开。因此无论光阑位于系统中的任何位置,离轴光束通过系统时的像差公式仍正确。这个理论给出了每个光学元件的波差,整个系统的波差是在最终象面上对每个光学元件的波差迭加面得到,这种方式类似于透镜系统中所采用的 seidel 像差方法。从波差系数出发,而获得像面上横向像差的数学表达式,从而可得到点列图的分布。

在 chrisp 波差理论基础上,采用二次逼近法为优化方法,编制了摄谱仪/单色计的光学设计程序。

3 基本理论

P. chrisp 的波差理论^[1]如图 1 示,理想像散面 \sum^+ 经系统后产生有像差的波面 Σ ,象散参考面的法线通过焦线 $F'_m, F'_e, O^+, O^+, Q^+$ 点是物方光束与理想参考面的交点。所有的物方光束都通过物方焦线 F_m, F_e , 而象差则使象方光束偏离其理想焦线。



Ray paths through an astigmatic system.

图 1

通过光栅上一点 P 的光束波象差 W 是象波面与参考波面沿光束方向的距离,所以对光束 MQ^+PQ_e 有

$$W = \langle Q_e Q \rangle \\ = \langle Q^+ Q_e \rangle - \langle Q^+ Q \rangle$$

这里 $\langle \quad \rangle$ 代表光程距离。

$\langle Q^+ O \rangle = \langle Q^+ Q_e \rangle$, 这是因为它们有相同的波面距离

所以, $W = \langle O^+ O \rangle - \langle Q^+ Q \rangle$

(1)

f_{100}	$-\sin\alpha$	1	f_{102}	$\sin\alpha(1 - \frac{L^2 \cos\alpha}{r_m \rho})$	$\frac{1}{2}$
f_{200}	T	$\frac{1}{2}$	f_{202}	$V + \frac{L^2}{\rho} (\frac{S}{R} - \frac{V \cos\alpha}{r_m})$	$\frac{1}{4}$
f_{020}	\hat{S}	$\frac{1}{2}$	f_{022}	$\frac{\cos\alpha}{\rho} - \frac{3}{r_s} + \frac{4L \cos\alpha}{r_s \rho} + \frac{\hat{S} L^2}{\rho} (\frac{3}{\rho} + \frac{\cos\alpha}{r_s} - \frac{2L^2 \cos^2 \alpha}{r_s \rho^2})$	$\frac{1}{4}$
f_{300}	$\frac{T \sin\alpha}{r_m}$	$\frac{1}{2}$	f_{011}	$-1 + \frac{L \cos\alpha}{\rho}$	1
f_{120}	$\frac{\hat{S} \sin\alpha}{r_m}$	$\frac{1}{2}$	f_{013}	$1 - \frac{L \cos\alpha}{\rho} - \frac{2L^2 \cos\alpha}{r_s \rho} - \frac{L^3}{\rho^2} (\hat{S} - \frac{\cos^2 \alpha}{r_s})$	$\frac{1}{2}$
f_{220}	$\frac{2\hat{S} \sin^2 \alpha}{r_m^2} - \frac{T\hat{S}}{r_m} + \frac{S}{R\rho}$	$\frac{1}{4}$	f_{111}	$\sin\alpha (\frac{-1}{r_s} + \frac{L \cos\alpha}{r_m \rho})$	1
f_{400}	$\frac{4T \sin^2 \alpha}{r_m^2} - \frac{T^2}{r_m} + \frac{S}{R^2}$	$\frac{1}{8}$	f_{031}	$\frac{\hat{S}}{r_s} - \frac{\hat{S} L}{\rho} (\frac{1}{\rho} + \frac{\cos\alpha}{r_s})$	$\frac{1}{2}$
f_{040}	$\hat{S} (\frac{1}{\rho^2} - \frac{\hat{S}}{r_s})$	$\frac{1}{8}$	f_{211}	$\frac{-V}{r_s} - \frac{L}{\rho} (\frac{S}{R} - \frac{V \cos\alpha}{r_m})$	$\frac{1}{2}$

$$\begin{aligned}
 T(\alpha, r_m) &= \frac{\cos^2 \alpha}{r_m} - \frac{\cos \alpha}{R} & S(\alpha, r_m) &= \frac{1}{r_m} - \frac{\cos \alpha}{R} \\
 V(\alpha, r_m) &= \frac{\cos \alpha}{R} - \frac{1}{r_m} + \frac{3\sin^2 \alpha}{r_m} & \hat{S}(\alpha, r_s) &= \frac{1}{r_s} - \frac{\cos \alpha}{\rho} \\
 \hat{S}(\alpha, r_m, r_s) &= \frac{r_m}{r_s^2} - \frac{\cos \alpha}{\rho}
 \end{aligned}$$

下面给出 W 的具体表达式(4级展开):

$$\begin{aligned}
 W &= w_{100}x_n \\
 &+ 1/2w_{200}x_n^2 + 1/2w_{020}y_n^2 + w_{011}y_nu_n \\
 &+ 1/2w_{300}x_n^3 + 1/2w_{120}x_ny_n^2 + w_{111}x_ny_nu_n + 1/2w_{102}x_nu_n^2 \\
 &+ 1/8w_{400}x_n^4 + 1/8w_{040}y_n^4 + 1/4w_{220}x_n^2y_n^2 + 1/2w_{031}y_n^3u_n \\
 &+ 1/2w_{211}x_n^2y_nu_n + 1/4w_{202}x_n^2u_n^2 + 1/4w_{022}y_n^2u_n^2 \\
 &+ 1/2w_{013}y_nu_n^3
 \end{aligned}$$

最后我们给出点列图的计算表达式:

$$\begin{aligned}
 \delta X &= -(r' - x_n x \sin \beta) / r' \cos \beta \\
 &[r' / Z - x_n \sin \beta] dW / dx_n - y_n \sin \beta dW / dy_n \\
 \delta Y &= -(r' - x_n X \sin \beta) / Y \cdot (dW / dy_n)
 \end{aligned}$$

其中

$$\begin{aligned}
 T(\alpha, r_m) &= \cos^2 \alpha / r_m - \cos \alpha / R \\
 S(\alpha, r_m) &= 1 / r_m - \cos \alpha / R \\
 S(\alpha, r_m, r_s) &= r_m / r_s^2 - \cos \alpha / \rho \\
 V(\alpha, r_m) &= \cos \alpha / R - 1 / r_m + 3 \sin^2 \alpha / r_m \\
 S(\alpha, r_s) &= 1 / r_s - \cos \alpha / \rho
 \end{aligned}$$

4 最优化设计的数学原理

4.1 数学原理^{[6],[7],[8]}

本人使用二次逼近法作为优化设计的数学方法。现将该数学理论详述如下:

二次逼近法^[8]—sequential Quadratic programming, 亦称序列二次规化法。其基本思想是, 将非线性规化问题(2)转化为一系列二次规化子问题; 以这些子问题的解构成多次迭代步的搜索方向 $d^{(k)}$; 沿方向 $d^{(k)}$ 进行的精确一维搜索, 得到步长 a_k

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + a_k d^{(k)}$$

序列 $x^{(k+1)}$ 最终逼近优化问题的解 x^* 。

$$\text{极小化目标函数 } f[x] = 0 \quad x \in E^n$$

$$\text{满足于等式约束条件 } h_j[x] = 0 \quad j = 1, 2, \dots, m. \quad (2)$$

4.2 程序的计算方法

依据以上数学原理, 可按下列步骤在计算机上实现计算:

(1) 计算目标函数和约束条件在 $x^{(k)}$ 处的函数值和一阶导数值, 判断是否收敛。

a) 在 $x^{(k)}$ 处计算 $f[x^{(k)}], f[x^{(k)}], h[x^{(k)}], A^{(k)}$

b) 如果 $\|\lambda^{(k)} A - f[x^{(k)}]\| \leq 10^{-5}$

或 $\|f[x^{(k)}] - f[x^{(k-1)}]\| \leq 10^{-5}$

且 $\|h\| \leq 10^{-5}$

且 $\lambda_j \leq 0, j=1$

那么算法收敛,得到最优解,迭代停止。

否则进一步迭代。

(2)确定搜索方向 d

a)更新惩罚因子 $r^{(k)}$

$$r^{(k)} = 2\beta[h[x^{(k)}]^T h[x^{(k)}]/(\lambda^{(k)T}\lambda^{(k)})]^{1/2}$$

b)更新 Hesse 矩阵的逆矩阵的估算值 $B^{(k)}$

c)更新 Lagrange 乘子估算值

$$\lambda^{(k)} = (r^{(k)}/2 \cdot I + A^{(k)}B^{(k)}A^{(k)T})^{-1}(h[x^{(k)}] - A^{(k)}B^{(k)}f[x^{(k)}])$$

d)计算与迭代搜索方向 d

$$d = -B^{(k)}(A^{(k)T}\lambda^{(k)} + f[x^{(k)}])$$

(3)确定沿方向 d 的搜索步长 a_k ,使

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + a_k d^{(k)}$$

5 仪器函数及分辨率

光谱仪的分子能力由它的仪器函数 $A(y)$,或者由它的通过函数 $\eta(y)$ (跟 $A(y)$ 差一乘常数)的曲线半宽度所决定。

当入缝无限窄时,且光学系统无像差时, $\eta(y)$ 和像的照度分布相同,

$$\eta(y) = [\sin^2 \pi y/b_0]/\pi y/b_0^2 = e_0(y) \quad (3)$$

如果入缝是不相干照明,在有限宽度时函数 $\eta(y)$ 通过两次对公式的平滑化积分而到。即首先沿入缝的几何像宽 b_1 积分,然后沿出缝宽 b_2 积分:

$$\eta(y_2) = (1/b_1') \int_{y_2 = b_2/2}^{y_2 + b_2/2} \xi(y) b_2 y \quad (4)$$

其中

$$\xi(y_1) = (1/b_0') \int_{y_1 - b_1'/2}^{y_1 + b_1'/2} e(y) b_1 y \quad (5)$$

由于出缝所在的平面通常垂直于出射光束的轴,因此标准狭缝的像的几何宽度

$$b_0' = \lambda f_2/a'$$

6 程序的结构、功能

程序采用 FORTRAN-77 语言和 BASIC 语言混合方式实现,因此具有一些初步的图形功能(例如绘制点到图,镜头图等)。程序使用菜单方式管理,因此使用方便。程序之结构是模块化结构。程序的主要功能如下:

(1)对系统优化设计。

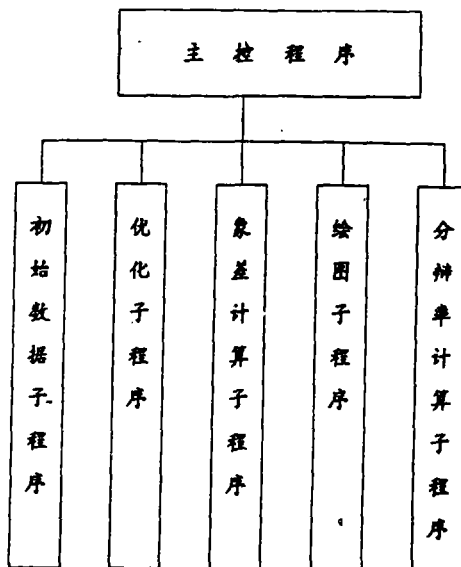
(2)计算系统的波差或横向像差。

(3) 计算系统的分辨率。

(4) 计算系统各光学元件的子午, 弧矢象距, 系统的谱线弯曲半径。

(5) 绘制点列图, 整个缝象之图形, 镜头图, 仪器函数之图形。

全部程序共计约六千条自然语句。程序的流程图如下:



7 设计实例及验证

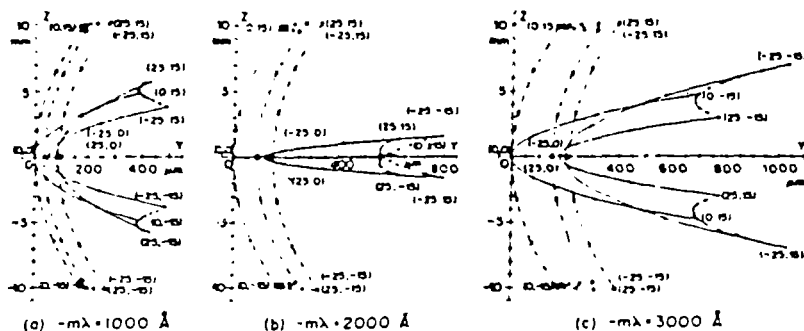
7.1 用标准实例对程序可靠性之验证

首先, 以 T. Namioka^[4] 设计的 $1000 \text{ \AA} \sim 3000 \text{ \AA}$ 单片全息凹面光栅单色计为标准例子对程序像差计算可靠性进行验证。

$R=500\text{mm}$, $r_c=184.554\text{mm}$, $r_d=376.611\text{mm}$,

$\gamma=-68.8318^\circ$, $\delta=-41.1297^\circ$, $r=409.659\text{mm}$,

$r'=410.870\text{mm}$, $\alpha-\beta=69^\circ 44'$

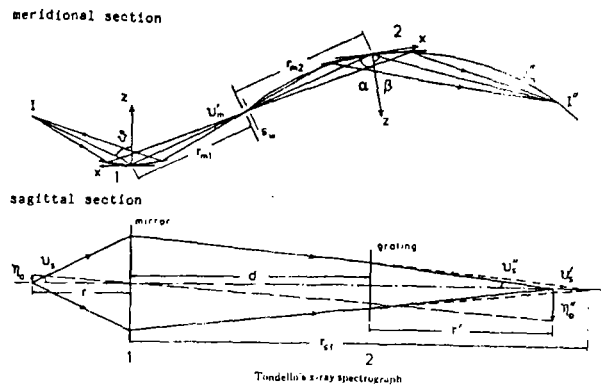
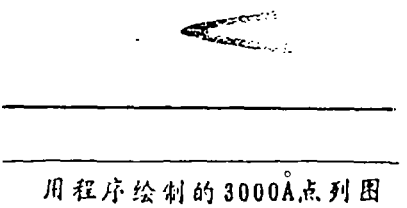
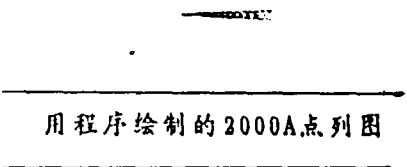
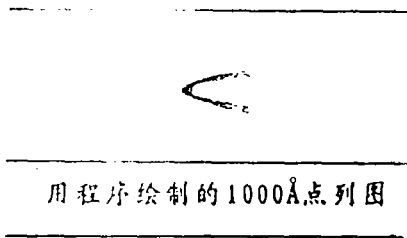


T. Namioka 用光线追迹得到的点列图(实线部分)

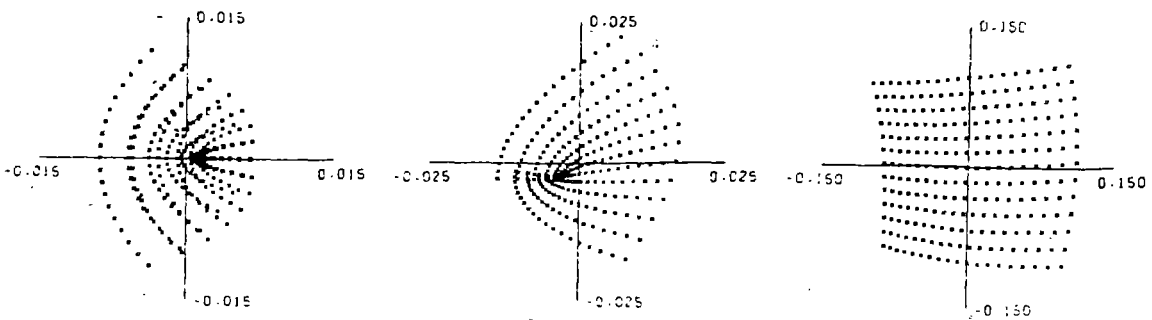
由上述点列图对照, 可看出, 程序计算点列图的形状与尺寸与 namioka 用光线追迹得到的点列图, 完全一致。

下面再以 P. chrisp^[2] 设计的 X-摄谱仪为标准例子对程序的象差计算的可靠性进行验证。由上述点列图对比, 可以看出用程序绘制的点列图与 P. chrisp 用光线追迹绘制的点列图, 在形状和尺寸上完全符合因此程序的象差计算是准确可靠的。

由于程序的象差计算正确, 因此就可对程序的优化设计的性能作出判定。首先用 P. chrisp 设计的凹面全息光栅单色计作示范^[2]。



P. chrisp 设计的 X-摄谱仪光路图



Spot diagrams from Tondello's system for different object point heights.

Wavelength $\lambda = 44 \text{ \AA}$, and the image plane is perpendicular to the base ray. All axes are in millimeters.

为了验证软件的自动设计性能,我们取第一组数据之初始结构,最终的最优结果是

$$r_d = 484.177 \text{ mm}$$

$$r_c = 339.711 \text{ mm}$$

$$\delta = -41.722^\circ$$

$$Y = -70.098^\circ$$

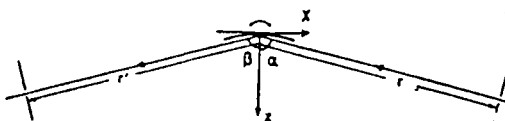
该结果与 OPT 结果或是 Takashi 的优化结果一致,故说明自动设计性能良好。

用程序绘制的物高为 0 时的点列图

用程序绘制的物高为 0.2 时的点列图

用程序绘制的物点高为 2.0 时的点列图

		Initial Gratings	Final Gratings	
			OPT	Takashi
First	r_d	500.0 mm	479.419 mm	479.316 mm
	r_c	500.0 mm	330.630 mm	332.225 mm
	δ	-28.648°	-41.677°	-41.844°
	Y	-45.837°	-69.997°	-70.576°
Second	r_d	200.0 mm	479.419 mm	480.152 mm
	r_c	400.0 mm	330.630 mm	326.846 mm
	δ	-28.648°	-41.677°	-40.873°
	Y	-45.837°	-69.997°	-68.253°



Concave Grating $R = 500. \text{ mm}$ $f = 600. \text{ mm}^{-1}$

Conjugates $r = 409.607 \text{ mm}$ $\alpha - \beta = 69.733^\circ$
 $r' = 410.959 \text{ mm}$ $m = -1$

Aperture Ray $X = 25. \text{ mm}$ $Y = 15. \text{ mm}$

8 结 论

本文以 P. chrisp 波差理论为基础,研究了光学计算机辅助设计的方法,并编制了摄谱仪/单色计通用光学计算机辅助设计软件。

该软件有较强的实用性和通用性,具有光学计算机辅助设计的基本功能,即绘图,计算象差,自动设计,象质评价。

经过标准实例的验证,表明该软件计算象差准确可靠,自动设计效果良好,故可实际用于复杂反射式光栅光谱仪的光学设计。

参考文献

- [1]M. P. Chrisp, Appl. Opt, 1983, 22, 1508
- [2]M. P. Chrisp, Appl. Opt, 1983, 22, (1519)
- [3]H. Noda, T. Namioka, and M. Seya, J. Opt. Soc. Am. , 1974, 64, 1031
- [4]H. Noda, T. Namioka, and M. Seya, J. Opt. Soc. Am. , 1974, 64, 1037
- [5]H. Noda, T. Namioka, and M. Seya, J. Opt. Soc. Am. , 1974, 64, 1043
- [6]袁旭沧编,《光学自动设计与光学传递函数》. 1986
- [7]沈守范等编,《通用优化方法 SOP 程序》. 1986
- [8]余俊,周济主编,《优化方法程序库 OPB. 1——原理及使用说明》. 1989
- [9]王之江,《光学设计原理》. 1963
- [10]H. G. Beutler, J. Opt. Soc. Am. , 1985, 35, 311
- [11]A. Jakahashi and T. Katayama, J. Opt. Soc. Am. , 1974, 64, 1043

On Computer-Aided Design of Reflective Spectrograph/monochromator

Zhao Xiaodong

(Changchun Institute of Optics and Fine Mechanics Chinese Academy of Sciences ,Changchun 130022)

Abstract

On the basement of thoroughly researching of optical computer-aided design, applying the wavelength aberration theory which was established by Micheal P. Chrisp, this article has fabricated completefunction software which can be used in designing monochromator, spectrograph.

This software has functions of calculating aberrations, auto-designing, calculating resolving capability, drawing. The shape can be plane, sphere, ellipsoid, toroidal, paraboloid. The optical system can include some mirrors and holographic gratings.

Compared with a few standard examples, such software have proved itself to be accurate in calculating aberrations, the effect of auto-design is good, and all of its functions are reliable. So this software can be used in real designing.

Key words: Computer-aided design, Toroidal, Holographic grating, Monochromator, Spectrograph