

基于高斯过程回归的高分辨率光谱仪仪器轮廓建模*

李布威¹⁾²⁾³⁾ 唐靛^{1)2)†} 陆彦婷¹⁾²⁾ 叶慧琪¹⁾²⁾ 韩建¹⁾²⁾ 翟洋¹⁾²⁾
陈俊沅¹⁾²⁾³⁾ 肖东¹⁾²⁾³⁾⁴⁾

1) (中国科学院南京天文光学技术研究所, 南京 210042)

2) (中国科学院天文光学技术重点实验室(南京天文光学技术研究所), 南京 210042)

3) (中国科学院大学, 北京 100049)

4) (中国科学院大学南京学院, 南京 211135)

(2025年10月20日收到; 2025年11月24日收到修改稿)

类地系外行星的视向速度法探测要求新一代高分辨率天文光谱仪具备 10 cm/s 以上的仪器测量精度. 对高分辨率光谱仪的仪器轮廓进行准确建模和刻画, 有望显著地提高光谱仪波长定标精度, 突破测量精度瓶颈. 针对简单高斯模型无法准确表征实际光谱仪仪器轮廓的问题, 本文提出一种基于高斯过程回归的高分辨率天文光谱仪仪器轮廓精细建模方法, 结合实测激光频率梳定标数据, 对兴隆 2.16 m 望远镜高分辨率光纤光谱仪的仪器轮廓进行了建模分析, 并成功地将相关仪器轮廓模型应用于光谱仪的波长定标, 实现了波长定标精度和双通道一致性的提高.

关键词: 高分辨率光谱仪, 仪器轮廓, 波长定标, 高斯过程**DOI:** 10.7498/aps.75.20251426**CSTR:** 32037.14.aps.75.20251426

1 引言

高分辨率光谱仪是系外行星研究的重要工具^[1,2]. 在采用视向速度法探索系外行星时, 需要对行星周期性运动导致的寄主星光谱的红移、蓝移变化进行测量, 从而确定系外行星的质量、轨道周期等性质^[3-5]. 其中, 类地系外行星引起的视向速度变化非常微小, 在 10 cm/s (3.3×10^{-10}) 量级^[6,7]. 这对光谱仪的波长定标精度提出很高的要求. 仪器轮廓 (instrumental profile, IP) 表征了光谱仪对理想单色光的响应, 其形状受到光学部件、探测器和环境稳定性等多种因素的影响. IP 形状的精确建模对于亚米级精度视向速度定标十分重要. 不准确

的 IP 假设会导致计算谱线中心位置与真实谱线中心位置出现偏差, 影响波长定标的精度.

在早期研究中, IP 的建模面临两个主要问题. 第一, 使用的光源无法同时满足谱线本征宽度极窄、波长覆盖广且稳定性良好等特性^[8,9], 大多数光源在其可用波段范围内所能获取的数据并不足以对 IP 进行精确刻画. 第二, 通常使用 Gaussian, Moffat 或 Voigt 等参数模型来近似 IP 的形状^[10,11], 虽然结构简单、计算速度快, 但在建模 IP 时无法兼顾复杂形状、波段变化和局部细节等特性, 导致 IP 的细节被模糊忽略.

Valenti 等^[12] 利用傅里叶变换光谱仪 (分辨率约 400000) 获得了高信噪比的碘盒和太阳的超高分辨率光谱数据, 与参数化 IP 进行卷积, 然后将

* 国家重点研发计划 (批准号: 2023YFF0714803, 2023YFF0714800)、国家自然科学基金 (批准号: 12373094, 12293054) 和中国科学院青年创新促进会 (批准号: 2023068) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: ltang@niaot.ac.cn

其与待表征光谱仪测得的光谱进行比较, 优化求解出能够最佳重现观测光谱的仪器参数 IP. 该方法在利克天文台的汉密尔顿阶梯光栅光谱仪和凯克望远镜 HIRES 光谱仪上的应用都显示, 在交叉色散阶梯光栅光谱仪中, IP 形状与探测器位置相关. Chamarthi 等^[13]利用碘盒和 Zemax 仿真对印度 VBT 望远镜的一台阶梯光栅光谱仪的光学像差对其仪器轮廓形状的影响进行了分析. Bechter 等^[14]采用光学模型仿真分析的方法, 对 iLocater 光谱仪中光学像差可能导致的仪器轮廓相关视向速度误差进行了分析. MAROON-X 光谱仪连续两年的运行经验显示, 断电等因素导致的仪器运行中断会导致光谱仪仪器轮廓发生波长相关且无法复原的变化, 进而影响前后科学数据的可比较性^[15]. 激光频率梳 (laser frequency comb, LFC)^[16,17]等新型高精度定标光源的应用为 IP 模型的精细刻画提供了有力的工具. 赵斐等^[18]利用欧洲南方天文台 3.6 m 望远镜 HARPS 光谱仪的配套 LFC 对其仪器轮廓进行了测量, 发现谱线轮廓会随探测器位置和谱线强度产生变化; Milaković 和 Jethwa^[8]进一步借助 LFC 对 HARPS 的 IP 进行了精细刻画, 证实高分辨率光谱仪的 IP 形状并不适合用参数模型来表示. Schmidt 等^[19,20]利用 ESPRESSO 的天文光梳进行波长定标时, 仪器轮廓表征对波长定标精度有明显影响, 并表明参数模型表征 IP 的方法在真实情景下难以适应复杂的仪器条件所导致的 IP 的变化, 如 IP 形状存在非对称性或 IP 的两翼有细微的偏差、跨波段或跨级次 IP 形状的变化、探测器像素响应不均匀、环境/机械/光学系统导致的微小漂移等^[21-23].

为了解决上述问题, 本文提出一种基于高斯过

程回归 (Gaussian process regression, GPR)^[24,25]与分段建模策略的非参数 IP 模型, 利用 LFC 定标数据对 IP 进行建模, 实现了对高分辨率光谱仪全级次 IP 的精确刻画. 通过与经典高斯模型的对比, 该 GPR 模型展现了更优的模型拟合一致性. 将其应用于高分辨率光谱仪波长定标后, 波长求解精度以及不同光谱仪通道的波长定标一致性均得到了显著提高.

2 高分辨率光谱仪的仪器轮廓及其数学模型

2.1 高分辨率光谱仪的仪器轮廓

IP 建模的理想方法是输入一组本征宽度极窄、未混叠、均匀分布的谱线, 测量所产生的仪器响应. 天文激光频率梳具有数量丰富、频率间隔均匀、单个模式梳齿谱线的半高全宽 (FWHM) 远小于 IP 的特性, 是用于高分辨率光谱仪 IP 测量的理想定标源^[8,26]. LFC 的每根谱线 (也可称为梳齿、模式) 均可视为一个频域的脉冲函数, 如图 1(b) 所示. 若光谱仪在该波长处的 IP 形状如图 1(a) 所示, 则信号进入光谱仪系统, 卷积 IP 后, 在探测器上的像素化采样结果如图 1(c) 所示. 如图 1(d) 所示, 当 IP 形状存在明显不对称性时, 采用简单高斯拟合数据点得到的 IP 模型中心与真实 IP 中心将存在明显偏差.

2.2 仪器轮廓的数学模型

在光谱仪系统、环境因素稳定的情况下, 光谱仪每个波长位置处的 IP 形状是固定的, 即像素接收光子的比例 ψ 只与像素和谱线中心的距离以及

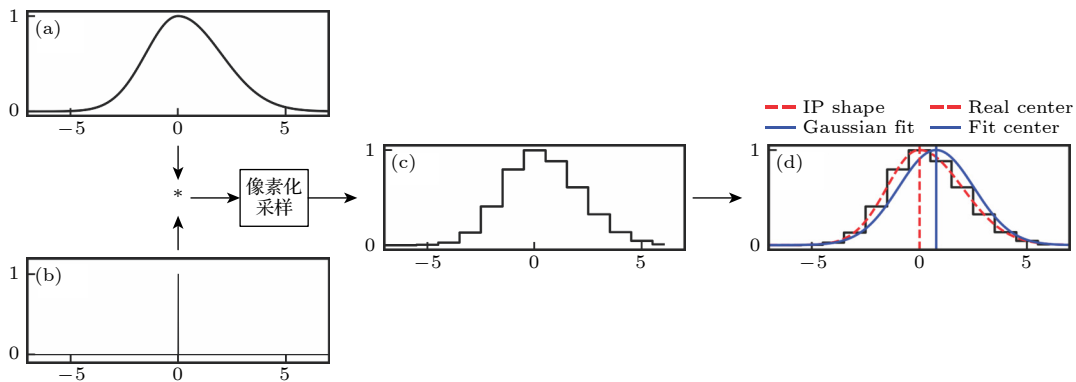


图 1 高分辨率光谱仪的仪器轮廓特性

Fig. 1. Instrumental profile of a high-resolution spectrograph.

谱线的强度有关, 即 $\psi \propto \Delta x$, 其中 $\Delta x = |x - x_*|$, x_* 为中心波长坐标. 因此, ψ 基于光子计数定义 IP 表达式为

$$\hat{\psi}(\Delta x) = (F_i - B_i)/f_*, \quad (1)$$

其中, 下标 i 表示在探测器主色散方向上 $x = i$ 位置处的像素 (在单个级次); $\hat{\psi}$ 上的符号表示观测到的值; f_* 为谱线的总通量; F_i 为距离中心 Δx 的像素光子通量; B_i 为背景通量, 通过这些参数估计距离中心 Δx 处的 IP 样本, 即 $\hat{\psi}(\Delta x)$.

在建模 IP 时, 不同数据点的权重是由 $\hat{\psi}(\Delta x)$ 的不确定性确定的. 考虑光子噪声和背景噪声共同作用下的观测方差, 可表示为

$$\sigma_{\hat{\psi}}^2 = \frac{1}{f_*^2} (\sigma_{F_i}^2 + \sigma_{B_i}^2). \quad (2)$$

(2) 式的物理含义是: 在保持信噪比不变的前提下, 考虑光子噪声和背景噪声的贡献, 再由总光通量 f_* 进行归一化. 该形式能最大程度上保留数据信息, 同时避免复杂的比值方差计算. 有研究表明, 取 $\sigma_{F_i}^2 = F_i$, $\sigma_{B_i}^2 = B_i$ 与真实误差差异不超过 5%, 满足高精度建模需求^[8]. 由于 CCD 存在读出噪声以及暗电流等影响, 向 $\sigma_{\hat{\psi}}^2$ 添加一个共有超参数 σ_0 来涵盖此影响.

$$\sigma_i^2 = \frac{1}{f_*^2} (F_i + B_i) + \sigma_0^2. \quad (3)$$

本研究在 IP 的建模中, 采用 (3) 式对 IP 采样点归一化强度及其不确定性进行描述.

3 基于高斯过程回归的仪器轮廓建模

3.1 数据预处理

首先, 对经过标准数据处理流程后的一维定标光谱进行分段处理, 并扣除背景. 之后, 为获得谱

线的初始结构参数, 对去背景的一维谱内的光梳谱线进行高斯拟合:

$$I(x_i; A, \mu, \tau, y_0) = A \exp\left[-\frac{(x_i - \mu)^2}{2\tau^2}\right] + y_0. \quad (4)$$

拟合后得到初始谱线参数集 θ 包括: 中心位置 μ 、振幅 A 、标准差 τ 和偏移 y_0 , 进而计算出由模型确定的谱线积分光通量:

$$f_i = \frac{A_i}{\tau_i \sqrt{2\pi}}, \quad (5)$$

式中, f_i 表示第 i 根谱线由高斯模型确定的初始谱线强度, A_i 和 τ_i 分别表示初始谱线振幅和标准差.

3.2 建模流程

基于对仪器轮廓特性的认识, 本研究选用带噪声项的 RBF 核函数, 以描述平滑且含残余噪声的 IP; 均值函数采用高斯函数, 以反映其近似高斯的形状. 在此基础上, 构建了一个两阶段的 GPR 建模流程, 具体如下.

第一阶段中, 将一维谱的每个级次进行分段处理 (每 256 像素一段), 得到段内完整的谱线列表. 对列表内每个谱线使用高斯函数进行初始拟合, 得到每个谱线的高斯参数. 使用初始高斯中心 μ_G 将谱线中心平移至 0 中心位置, 同时由高斯模型确定的谱线积分面积 f_G 对谱线强度归一化, 便得到训练样本 D_1 . 图 2 展示了以光梳为例的单个段落数据堆叠结果. 左图中虚线为高斯模型确定的谱线中心, 右图为堆叠得到的训练样本. D_1 和拟合的高斯模型 I_1 的残差作为 GPR 的输入, 训练得到的后验均值 $m(x; \phi)$ 与 I_1 之和, 即为初始 GPR 模型. 高斯过程还会输出后验方差 $\text{var}(x; \phi)$ (后验标准差使用 $\text{std}(x; \phi)$ 表示), 作为置信指标评估拟合效果. 有了初始 GPR 模型, 就可以更新 $\Delta x = 0$ 的定义. 这里

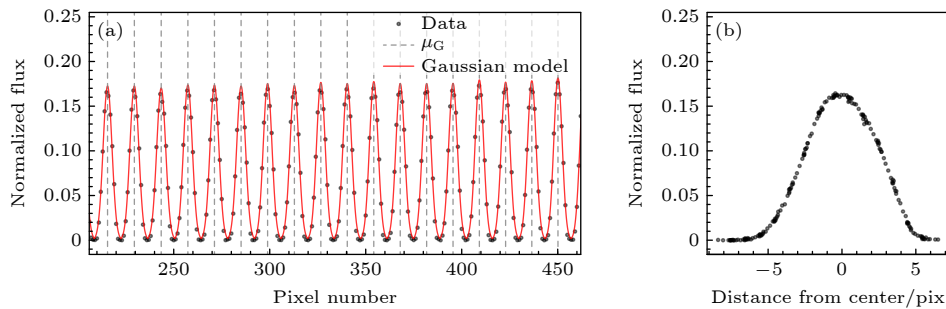


图 2 (a) 单个段落内的数据点 (以 LFC 为例); (b) 谱线去中心堆叠结果 D_{1P} ;

Fig. 2. (a) Data points within a single segment (using the LFC spectrum as an example); (b) stacked D_{1P} .

根据 Anderson 等^[27] 给出的中心估计方法, 引入样本偏移修正项, 将 X 再次修正至新的零中心位置:

$$\Delta x \rightarrow \Delta x + \frac{\hat{\psi}(0.5) - \hat{\psi}(-0.5)}{\frac{\partial \hat{\psi}}{\partial x}(-0.5) + \frac{\partial \hat{\psi}}{\partial x}(0.5)}. \quad (6)$$

重复这一过程, 使得两轮迭代的中心之差小于 1×10^{-3} 像素, 或达到最多 20 次迭代, 获得第一阶段的最佳 GPR 模型 IP_1 .

在第二阶段中, 使用第一阶段模型 IP_1 拟合到原始谱线上, 获得更为准确的中心估计量 μ_G 和由 GPR 模型确定的积分面积 f_G , 进而重新构建训练样本 \mathcal{D}_Π . 第二阶段不再对中心进行更新. 将 \mathcal{D}_Π 和拟合的高斯模型 I_Π 的残差再次作为 GPR 的输入, 得到的后验均值与 I_Π 之和, 即为每一段最佳的 GPR 模型 IP_Π . 最终模型被存入查找表中, 作为后续拟合与插值使用的模板. 单个阶段的流程如图 3 所示.

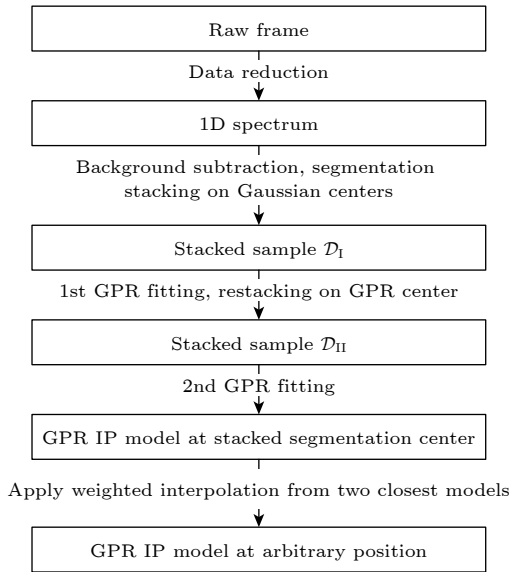


图 3 基于 GPR 的仪器轮廓建模流程

Fig. 3. Flowchart of the GPR-based IP modelling process.

3.3 建模精度评估

高斯过程能够通过核函数来构造点与点之间的相关性, 从而灵活刻画各段 IP 的细节形状, 但其建模精度仍需借助定量指标加以评估, 以确保在训练样本拟合良好的同时具备较强的泛化性能.

对于每一段的归一化观测数据 \hat{y} 及其拟合结果 y , 本研究使用简化卡方拟合优度 (χ_v^2) 来衡量整体拟合质量, 同时考虑了观测误差 σ_i 的影响:

$$\chi_v^2 = \frac{1}{N - k} \sum_{i=1}^N \left(\frac{\hat{y}_i - y_i}{\sigma_i} \right)^2, \quad (7)$$

式中, k 表示模型中的可调参数数量 (例如 θ, ϕ), N 表示模型数据点个数.

当 χ_v^2 值在 1 附近时, 认为模型很好地拟合了 IP 的特征. 当 χ_v^2 最接近 1 时, 认为模型最接近真实 IP, 并作为段内连续拟合时的候选模型保留. 当 $\chi_v^2 \gg 1$ 时, 则说明模型拟合不足或观测误差被低估; 当 $\chi_v^2 \ll 1$ 时, 则可能存在过拟合或误差被高估的情况.

而对于拟合到原始谱线上时, 使用均方误差 (RMSE) 来评价模型对于单根谱线的拟合质量:

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\hat{y}_i - y_i)^2}. \quad (8)$$

RMSE 表示模型与观测数据的偏离程度, 其反映了模型在像素尺度上的平均预测误差, 其单位与通量单位一致. RMSE 越小, 表示模型的谱线拟合精度越高.

3.4 任意位置仪器轮廓生成

天文高分辨率光纤光谱仪的 IP 在 CCD 不同位置上的形状不同, 主要是由光谱仪的光学像差导致的, 因此可认为是连续缓慢平滑变化的^[9]. 基于此本文使用相邻段插值的方法来构建任意位置的仪器轮廓.

对相邻段之间的 IP 模型采用线性权重进行拼接:

$$\begin{aligned} & \hat{\psi}(\Delta x)|_{x \in (X_i, X_{i+1})} \\ &= \frac{d_2}{D} \cdot \hat{\psi}_i(\Delta x) + \frac{d_1}{D} \cdot \hat{\psi}_{i+1}(\Delta x), \end{aligned} \quad (9)$$

式中, X_i 表示第 i 段的中心像素位置, 任意选取一条谱线, 中心满足 $x \in (X_i, X_{i+1})$. 将查找表中的模板 IP 模型拟合到对应段的中心位置的谱线上, 得到该段的中心模型 $\hat{\psi}_i(\Delta x)$. 其中 $D = |X_{i+1} - X_i|$ 表示段中心模型间中心距离, $d_1 = |x - X_i|$, $d_2 = |x - X_{i+1}|$ 分别为谱线中心和左右段中心模型的距离 (若谱线中心位置 $x < X_1$ 或 $x > X_{16}$, 则按最临近边缘模板 IP 进行拟合, 不再应用权重).

最终 IP 模型可以依靠左右临近两个段落的 IP 根据 (9) 式的关系进行重构.

4 216HRS 光谱仪的仪器轮廓刻画与应用

4.1 2.16 m 望远镜高分辨率光纤光谱仪

中国科学院国家天文台兴隆观测站的 2.16 m 望远镜高分辨率光纤光谱仪 (high resolution spectrograph of a 2.16-m Telescope, HRS)^[28] 是一台光纤输入高分辨率中阶梯光栅交叉色散光谱仪, 具备两个光纤输入通道 (科学+同步定标), 利用阶梯光栅进行主色散, 同时为了将主色散方向上交叠在一起的不同衍射级次分开, 利用交叉色散元件使衍射级次在垂直主色散方向分开, 最终成像在面阵 CCD 探测器上. HRS 的光谱分辨能力 $R \approx 50000$, 配备了一台模式间隔为 25 GHz 的天文激光频率梳^[29].

4.2 基于 GPR 方法的仪器轮廓建模

本研究使用的数据为 HRS 光谱仪连续拍摄的一组双通道天文激光频率梳二维光谱, 单幅曝光时间 10 s, 平均信噪比 ≥ 200 . 经过标准数据处理后, 得到多级次一维光谱. 为排除梳齿和级次交叠带来的误差, 选取 100—110 级次作为 IP 建模数据样本, 进行背景估计与扣除, 得到无背景一维光谱, 在其基础上进行仪器轮廓建模.

4.2.1 局部建模结果

光谱仪探测器不同位置处的仪器轮廓存在一定差异. 常用于描述仪器轮廓的参数模型不止高斯

模型, 还包括超高斯、Moffat 和 Voigt 等更复杂的模型. 为了验证 GPR 方法相对于部分参数模型方法拟合的优势和有效性, 对段 IP 的分别使用不同模型进行拟合验证.

图 4 展示了 100 级次第 4 段使用不同模型拟合结果. 从各子图的上半部分可以看到, 蓝色点表示模型的训练样本, 红色实线表示模型拟合的 IP 结果, 不同模型的拟合优度标注在图的上方; 各子图的下半部分表示拟合结果与原始数据点的残差分布. 很明显, GPR 模型的拟合结果相较其他参数模型更加贴近真实数据, 拟合误差得到了有效校正.

考虑到其他参数模型更为复杂的参数结构, 后续选取高斯模型作为基准模型与 GPR 模型进行对比实验.

4.2.2 段模型评估

为进一步评估不同级次、不同区域下的建模效果, 本文对每个级次的所有区域段 (共 10 级次 16 段) 计算了 χ^2_v , 并以热图形式展示在二维段号-级次坐标中, 如图 5 所示.

为便于比较两种模型对于段 IP 的拟合性能, 其 χ^2_v 的统计量汇总于表 1 中. 从表 1 中可观察到, 由高斯模型拟合结果计算的 χ^2_v , 平均值为 95.82, 在绝大部分区域都远大于 1, 说明模型拟合不足, 无法很好地捕捉 IP 的形状的细节. 而右图 GPR 模型的 χ^2_v 的平均值为 0.97, 符合 χ^2_v 评价指标的要求: 绝大部分都在 1 附近. 说明 GPR 模型对于段落 IP 的拟合质量很好.

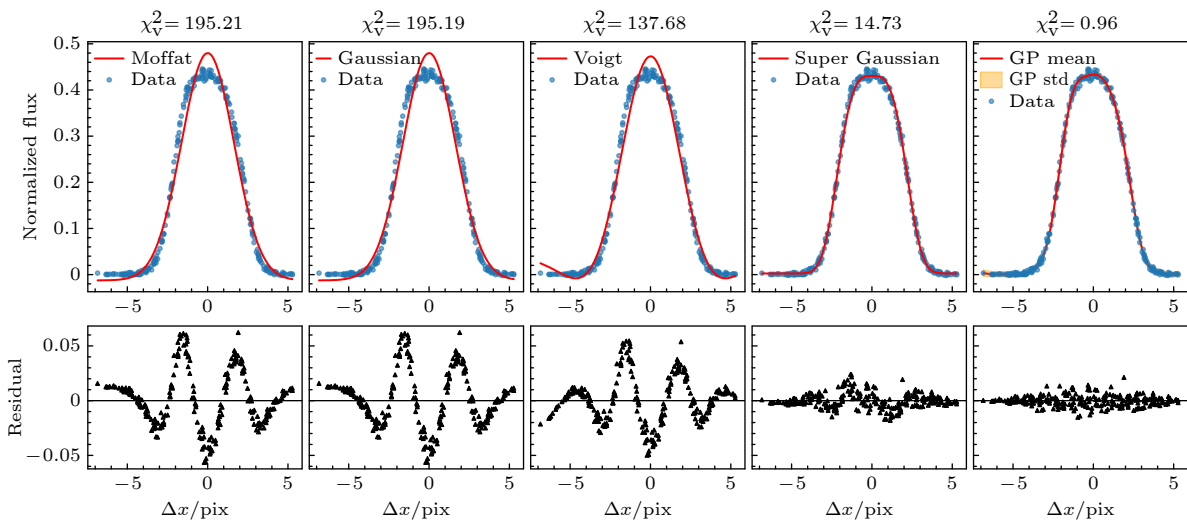


图 4 100 级次第 4 段不同模型的拟合结果

Fig. 4. Fitting results of different models for Order 100, Segment 4.

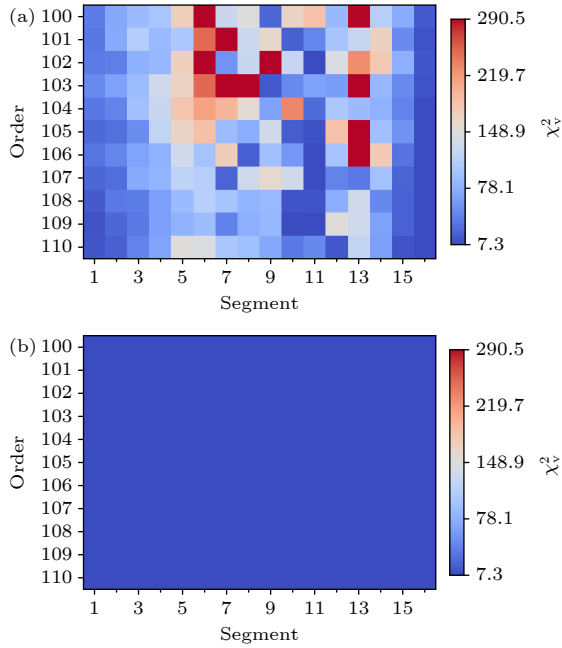


图5 不同模型拟合段IP的 χ_v^2 值热图 (a) 高斯模型; (b) GPR模型
Fig. 5. Heatmaps of the reduced χ_v^2 values for different models fitted to stacked segment IPs: (a) Gaussian model; (b) GPR model.

表1 两种模型拟合段IP的 χ_v^2 统计量
Table 1. χ_v^2 statistics of the segment IP fitted by the two models.

模型类型	平均值	标准差	5%—95%分位
高斯模型	95.82	82.58	7.34, 290.50
GPR模型	0.97	0.92	0.95, 0.99

4.2.3 原始谱线拟合

为了进一步验证具有新中心定义的GPR模型在实际应用中的精度与鲁棒性, 本文将第二阶段训练得到的IP模型, 按3.4节的IP连续变化关系, 面向单根光梳谱线进行IP重构, 并与原始数据进行比较: 选定一根谱线, 以其中心位置为基准, 选取与其左右相邻的两段GPR模型(保存在一个查找表内)进行插值, 构建该谱线位置的混合模型. 将该模型作为模板, 对该谱线进行拟合.

考虑到模型拟合过程中可能存在边缘数据点导致的中心拟合精度下降的问题, 本文引入加权拟合策略. 图6展示了单根谱线的不同模型拟合结果和拟合残差, 图中红色三角为GPR模型拟合残差, 其一个标准差范围 $\pm\sigma_G$ 用灰色区域表示; 蓝色方块为高斯模型拟合残差, 其一个标准差边界 $\pm\sigma_g$ 用黑实线表示.

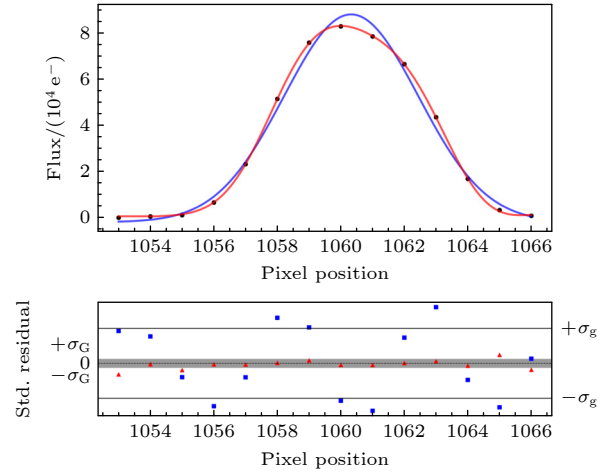


图6 不同模型拟合到单根谱线的结果
Fig. 6. Model fitting results for a single spectral line.

对该幅曝光中通道A的所有梳齿进行IP模型拟合, 统计其 χ_v^2 的分布, 结果如图7所示. 每个梳齿为一个色条, 其位置由级次和拟合中心像素位置决定. 相比左图使用高斯模型的 χ_v^2 分布, GPR模型在全级次上的变化幅度更小, 谱线拟合的 χ_v^2 整体更接近1, 证明了GPR模型的单根谱线拟合精度同样更高. 对该幅曝光中通道B的一维光谱数据重复以上建模-拟合过程, 结果如图8所示. 可以发现, 不同通道的GPR模型拟合结果差异显著小于简单高斯模型, 说明基于GPR的仪器轮廓建模可以有效地消除双通道光谱仪由光学像差等因素引入的误差, 提高双通道数据一致性.

为评价不同模型在不同通道的拟合质量, 对 χ_v^2 的平均值、标准差和5%—95%分位区间进行了统计, 其结果见表2.

表2 两种模型拟合谱线的 χ_v^2 统计量
Table 2. χ_v^2 statistics of the spectral-line fitting using the two models.

模型类型	通道	平均值	标准差	5%—95%分位
Gaussian χ_v^2	通道A	349.44	360.95	6.73, 1095.35
	通道B	379.19	377.37	9.14, 1122.68
GPR χ_v^2	通道A	5.01	7.61	0.50, 17.28
	通道B	5.57	8.95	0.42, 19.43

4.3 利用仪器轮廓模型提高波长定标精度

在波长定标过程中, 引入本研究建立的模型, 有望进一步提升分辨率光谱仪波长定标精度.

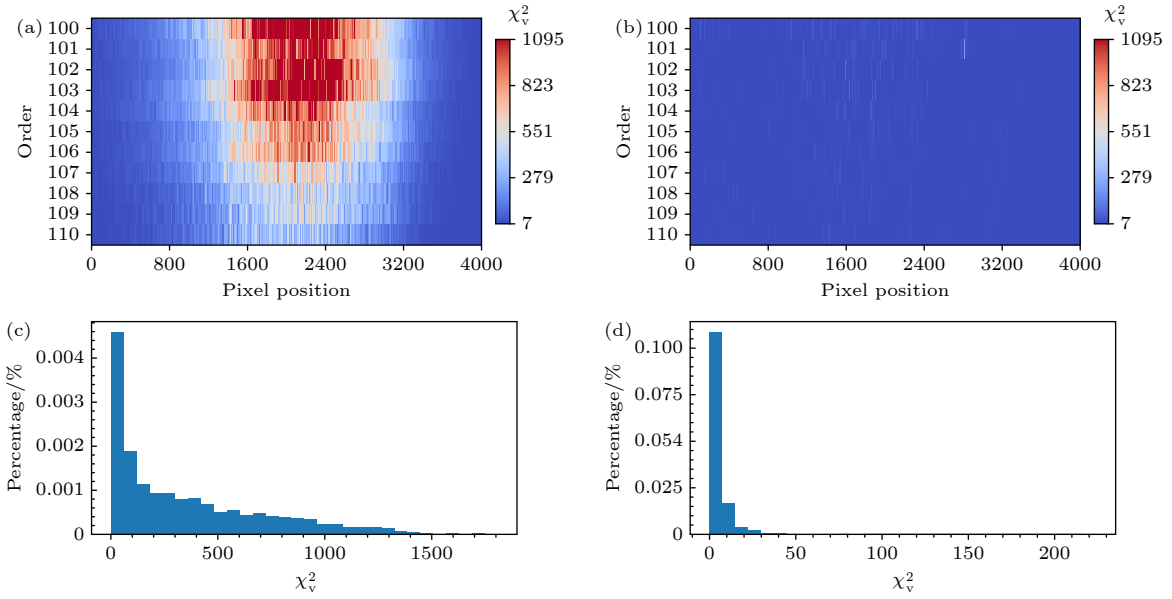


图 7 通道 A 不同模型拟合单根谱线的 χ^2_{ν} 值热图及分布统计 (a) 高斯模型; (b) GPR 模型; (c) 高斯模型 χ^2_{ν} 的概率密度分布; (d) GPR 模型 χ^2_{ν} 的概率密度分布

Fig. 7. Heatmaps and probability density distributions of the reduced chi-squared values of different models of channel A: (a) Reduced chi-squared of comb lines fitted with the Gaussian model; (b) reduced chi-squared of comb lines fitted with the GPR model; (c) probability density distribution of reduced chi-squared for the Gaussian model; (d) probability density distribution of reduced chi-squared for the GPR model.

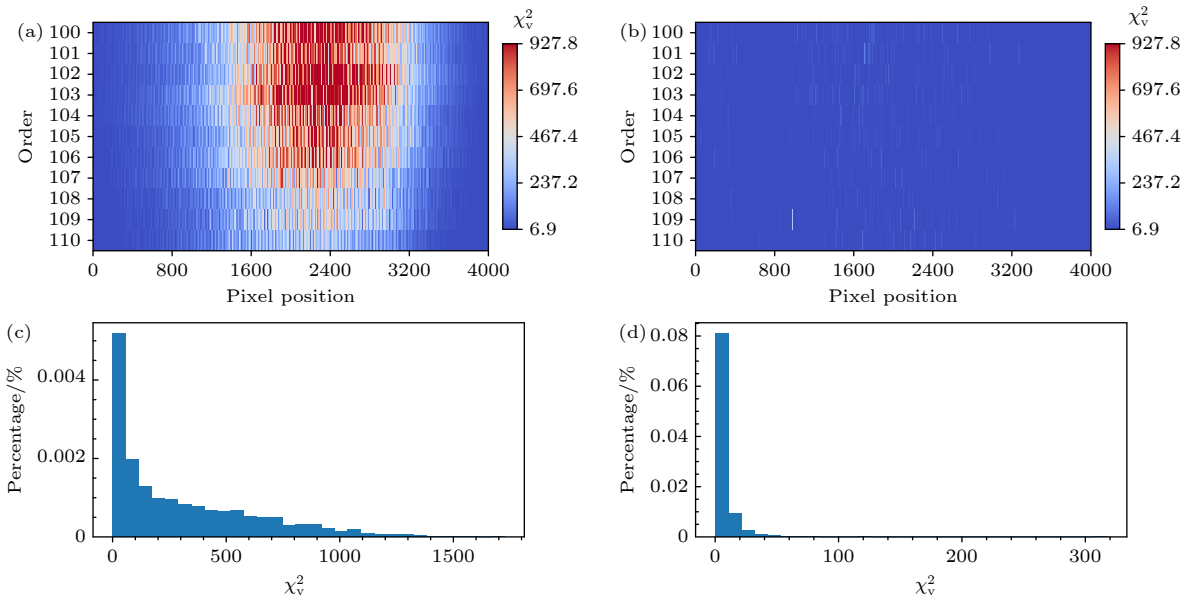


图 8 通道 B 不同模型拟合单根谱线的 χ^2_{ν} 值热图 (a), (b) 及概率密度分布统计 (c), (d) (a), (c) 高斯模型; (b), (d) GPR 模型
Fig. 8. Heatmaps (a), (b) and probability density distributions (c), (d) of the reduced chi-squared values χ^2_{ν} of different models of channel B: (a), (c) Gaussian model; (b), (d) GPR model.

在此, 使用不同模型拟合天文光梳谱线并构建波长解多项式函数, 来评估模型在谱线中心位置波长的拟合精度.

4.3.1 波长解的建立

为了探求波长关于探测器表面位置的函数关

系 (波长解), 根据阶梯光栅色散原理, 波长解可表示为 $\lambda = \frac{f(x, o)}{o}$. 式中, λ 为真空波长; x 为探测器表面的横向像素位置; o 为衍射级次的级数. 每个级次基于五阶 Legendre 多项式构建像素-波长映射函数 (波长解函数):

$$\lambda(x) = \sum_{k=0}^n c_k P_k(x), \quad (10)$$

其中 $\lambda(x)$ 表示主色散像素位置 x 对应的真空波长; $P_k(x)$ 为 Legendre 多项式的基函数; c_k 为对应的拟合系数; 整数 k 为多项式的阶次, 范围为 $k = 0, 1, \dots, n$, 而 $n = 5$ 表示波长解所采用的最高阶数.

激光频率梳作为一种锁定至外部频率基准的高精度定标源, 其各梳齿的绝对频率 (绝对波长 λ_i) 已知. 依据 (10) 式, 对该级次内各谱线的绝对波长与模型中心像素位置进行拟合, 从而建立两者之间的映射关系. 拟合得到的多项式系数即确定了该级次的波长解函数. 对于任意一根梳齿, 只需将模型给出的中心像素位置代入该波长解函数, 即可求得在该模型下梳齿的拟合波长. 根据拟合函数 $\lambda(x)$, 计算单个级次上所有梳齿的拟合波长和系统确定的绝对波长之间的残差的均方根误差 (RMSE), 作为波长解精度的评价指标.

4.3.2 奇偶梳齿验证

为了定量地评估 IP 模型对光梳中心像素位置的拟合能力及其在波长解中的表现差异. 将每个级次的梳齿根据编号分为奇偶两组, 解奇组波长解函数, 求解偶组梳齿的拟合波长和绝对波长的差异.

步骤如下: 设第 i 根光梳梳齿的中心像素为 μ_i , 绝对波长为 λ_i . 对级次内的奇数编号梳齿 $\{\mu_i | i \in 2n - 1\}$ 进行模型拟合 (使用 GPR 或高斯 IP 模型); 基于拟合中心构建波长解 $\lambda(x)$; 使用该波长解计算偶数编号梳齿 $\{\mu_j | j \in 2n\}$ 的波长; 最后计算每个梳齿的拟合波长和绝对波长 λ_i 的残差 $\Delta\lambda_i$.

图 9(a) 展示了全级次奇数梳齿定标下偶数梳

齿的拟合波长和其绝对波长的差 $\Delta\lambda_i$ 相对于绝对波长的分布情况. 由 GPR 模型构建的波长解, 其拟合波长和绝对波长差异更小. 图 9(b) 绘制了 $\Delta\lambda_i$ 和梳齿数量的直方图, 很明显在 $\Delta\lambda_i = 0$ 附近, GPR 模型拟合的谱线数量更多更集中. 高斯模型的 RMSE 相比 GPR 模型高约 35.6%.

4.3.3 临近光梳曝光的波长解验证

为了检验所构建的 GPR 模型在不同曝光间的迁移稳定性与波长定标中的实际应用能力, 本文利用两幅相邻光梳曝光的同一通道数据进行了如下验证实验: 在曝光 1 中训练 GPR 模型, 应用于曝光 2 上, 并在使用曝光 2 重新构建波长解, 最终以曝光 2 的绝对波长为参考, 评估模型在短时间内 (低仪器漂移情况下) 的泛化能力. 具体步骤如下: 保存曝光 A 上每个级次的段 GPR 模型查找表. 在曝光 B 上, 使用该表构建曝光 B 梳齿的 GPR 模型; 并以此构建波长解函数; 最后计算每个梳齿的 $\Delta\lambda_i$.

图 10(a) 展示了全级次所有梳齿的 $\Delta\lambda_i$ 相对于绝对波长的分布情况. 由图 10 可以看到, 在短时间内、光谱仪仪器漂移不大的情况下, 利用单幅光梳曝光建立的 GPR 模型能够在一定范围内适应微弱的仪器漂移, 在相邻曝光数据上依旧展现很好的拟合效果: 其拟合残差整体更趋近于零, 离散程度明显减小, 残差覆盖宽度较高斯模型显著收窄. 这表明 GPR 模型在拟合谱线中心位置与波长关系时具有更高的精度与一致性. 图 10(b) 残差直方图进一步说明了这一点: GPR 的分布更窄、峰值更高, 表明其拟合误差更小. 从 RMSE 来看, GPR 的 RMSE 为 0.00057 Å, 低于高斯模型的 0.00099 Å, 降低了约 42.5%.

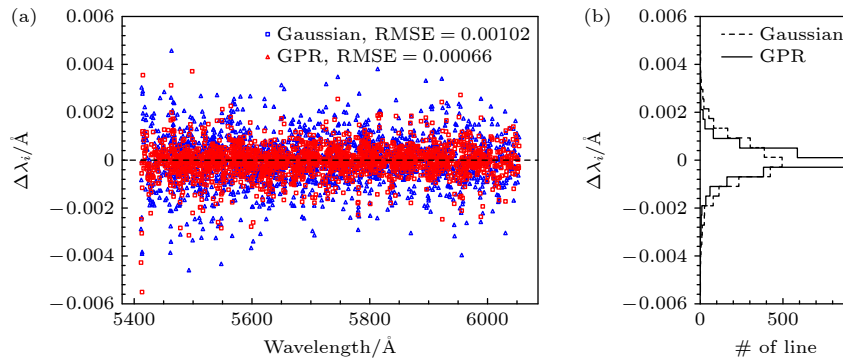


图 9 不同 IP 模型下利用奇数组梳齿波长解求得的偶数组梳齿波长残差 $\Delta\lambda_i$ 分布

Fig. 9. Wavelength residual $\Delta\lambda_i$ distributions of even-numbered comb lines calculated with the wavelength solution derived from odd-numbered comb lines utilizing different IP models.

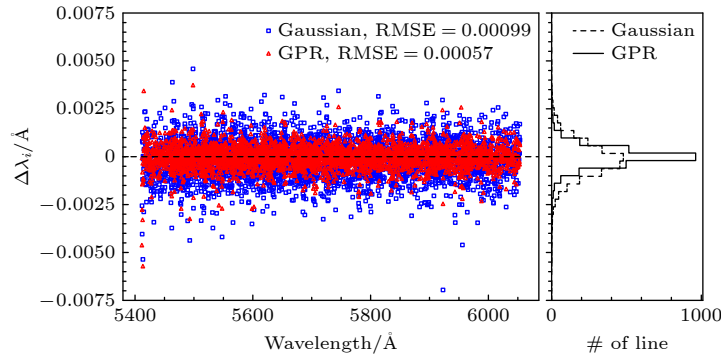


图 10 不同 IP 模型在临近曝光数据上的波长定标精度比较

Fig. 10. Wavelength calibration precision of different IP models on adjacent exposure data.

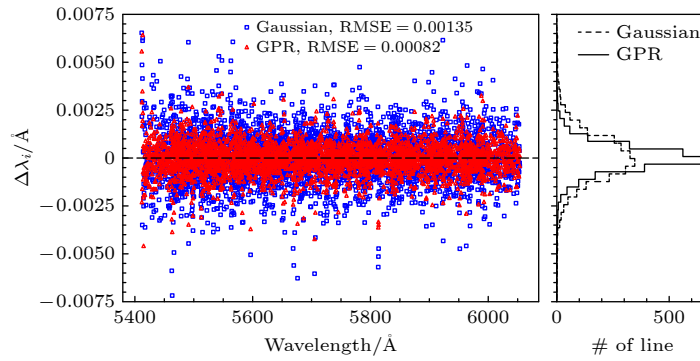


图 11 采用不同 IP 模型的光谱仪双通道波长解差异统计直方图

Fig. 11. Histogram of wavelength solution differences between the two spectrograph channels using different IP models.

4.3.4 双通道波长解验证

高精度视向速度观测通常需要采用双通道同步定标: 在科学通道观测目标光的同时, 同步定标通道记录同步定标光源的光谱, 从而实现对观测过程中仪器漂移的有效追踪和扣除. 这要求两个光谱通道具有高度一致性. 除了需要在硬件上提高仪器自身的稳定性外, 也要求在数据处理中尽可能提高两个通道的波长解一致性. 本文为了验证 GPR 模型在提高双通道同步定标精度方面的作用, 分别在 A, B 两通道上独立构建 GPR 模型, 并各自完成梳齿中心拟合与波长解构建. 随后, 根据波长解, 计算每根谱线在两个通道上计算得到的谱线波长与绝对谱线波长的差异情况, 该差值的统计分布即反映了双通道间的拟合一致性.

图 11 为采用不同 IP 模型的光谱仪双通道波长解差异情况的统计直方图. 其中, 实线表示 GPR 模型求解的双通道波长解差异情况, 虚线表示简单高斯模型求解的双通道波长解差异情况. 高斯模型在不同通道下, 对同一谱线的波长误差要明显比 GPR 模型的分布更宽. 即在相同条件下, 两通道之间使用 GPR 模型求得的波长解一致性更好. 类似

临近曝光验证, 计算了相同模型不同通道的梳齿间波长残差的 RMSE, 高斯模型 RMSE 为 0.00135, 而 GPR 则为 0.00082. 和临近曝光验证和奇偶梳齿验证相同, GPR 模型展现了相比高斯模型更精确的波长解.

5 结论

本文提出了一种基于高斯过程回归进行高分辨率光谱仪仪器轮廓建模的方法. 该方法引入中心迭代修正与段间连续拼接策略, 有效地提升了模型对 IP 的复杂细节和非对称结构的刻画能力, 显著地改善了谱线中心拟合的准确性. 所构建的多段 IP 模型在不同光谱级次与探测器区域下的简化卡方拟合优度和 RMSE 均表现出良好的稳定性与一致性, 验证了该方法在高分辨率光谱仪仪器轮廓建模中的适用性与鲁棒性. 此外经实验数据验证, 在单幅光梳曝光的单通道波长定标中, GPR 模型构建的波长解相较简单高斯模型的光梳梳齿拟合残差 RMSE 降低约 35.6%; 在短时间、低仪器漂移情况下, 所构建的 GPR 模型具有较好的泛化能力,

能够在跨曝光数据的相同通道波长定标中得到应用, 所得梳齿拟合残差 RMSE 相较于简单高斯模型下降约 42.5%; 在同幅曝光的双通道同步定标中, 利用 GPR 模型求得的通道间波长解差异相较于简单高斯模型显著地降低, RMSE 下降约 37.1%. 研究结果表明, 该建模方法能够很好地提高高分辨率天文光谱仪器轮廓刻画精度, 提高跨短时间、跨通道的波长解精度和一致性, 减小仪器测量误差。

参考文献

- [1] Queloz D, Mayor M, Udry S, et al. 2001 *J. Messenger* **105** 1
- [2] Pepe F, Cristiani S, Rebolo R, et al. 2013 *J. Messenger* **153** 6
- [3] Mayor M, Queloz D 1995 *Nature* **378** 355
- [4] Mignon L, Delfosse X, Bonfils X, et al. 2024 *Astron. Astrophys.* **689** A32
- [5] Passegger V M, Suárez Mascareño A, Allart R, et al. 2024 *Astron. Astrophys.* **684** A22
- [6] Mayor M, Lovis C, Santos N C 2014 *Nature* **513** 328
- [7] Pepe F, Ehrenreich D, Meyer M R 2014 *Nature* **513** 358
- [8] Milaković D, Jethwa P 2024 *Astron. Astrophys.* **684** A38
- [9] Hao Z B, Ye H Q, Tang L, Hao J, Han J, Zhai Y, Xiao D 2022 *Acta Opt. Sin.* **42** 0112002 (in Chinese) [郝志博, 叶慧琪, 唐靓, 郝俊, 韩建, 翟洋, 肖东 2022 *光学学报* **42** 0112002]
- [10] Hirano T, Kuzuhara M, Kotani T, et al. 2020 *Publ. Astron. Soc. Jpn.* **72** 93
- [11] Schmidt T M, Bouchy F 2024 *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **530** 1252
- [12] Valenti J A, Butler R P, Marcy G W 1995 *Publ. Astron. Soc. Pac.* **107** 966
- [13] Chamarthi S, Banyal R K, Sriram S 2019 *J. Astron. Telesc. Instrum. Syst.* **5** 038003
- [14] Bechter E B, Bechter A J, Crepp J R, Crass J 2021 *J. Astron. Telesc. Instrum. Syst.* **7** 035008
- [15] Seifahrt A, Bean J L, Kasper D, et al. 2022 *Proc. SPIE* **12184** 121841G
- [16] Udem T, Holzwarth R, Hänsch T W 2002 *Nature* **416** 233
- [17] Murphy M T, Udem T, Holzwarth R, et al. 2007 *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **380** 839
- [18] Zhao F, Curto G L, Pasquini L, et al. 2021 *Astron. Astrophys.* **645** A23
- [19] Schmidt T M, Molaro P, Murphy M T, et al. 2021 *Astron. Astrophys.* **646** A144
- [20] Schmidt T M 2024 *Proc. SPIE* **13100** 131004P
- [21] Robertson J G 2013 *Publ. Astron. Soc. Aust.* **30** e048
- [22] Hao Z B, Ye H Q, Han J, et al. 2020 arXiv: 2005.07864 [astro-ph. IM]
- [23] Cai Y, Xu Z, Ji K 2020 *Sol. Phys.* **295** 31
- [24] Meech A, Aigrain S, Brogi M, Birkby J L 2022 *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **512** 2604
- [25] Aigrain S, Foreman-Mackey D 2023 *Annu. Rev. Astron. Astrophys.* **61** 329
- [26] Steinmetz T, Wilken T, Araujo-Hauck C, Holzwarth R, Hänsch T W, Udem T 2009 *Appl. Phys. B* **96** 251
- [27] Anderson J, King I R 2000 *Publ. Astron. Soc. Pac.* **112** 1360
- [28] Fan Z, Wang H J, Jiang X J, et al. 2016 *Publ. Astron. Soc. Pac.* **128** 115005
- [29] Hao Z B, Ye H Q, Han J, Wu Y J, Zhai Y, Xiao D 2018 *Publ. Astron. Soc. Pac.* **130** 125001

Instrument profile modelling of high-resolution spectrograph based on Gaussian process regression*

LI Buwei¹⁾²⁾³⁾ TANG Liang^{1)2)†} LU Yanting¹⁾²⁾ YE Huiqi¹⁾²⁾ HAN Jian¹⁾²⁾
ZHAI Yang¹⁾²⁾ CHEN Junyuan¹⁾²⁾³⁾ XIAO Dong¹⁾²⁾³⁾⁴⁾

1) (*Nanjing Institute of Astronomical Optics & Technology, Chinese Academy of Sciences, Nanjing 210042, China*)

2) (*CAS Key Laboratory of Astronomical Optics & Technology, Nanjing Institute of Astronomical Optics & Technology, Chinese Academy of Sciences, Nanjing 210042, China*)

3) (*University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China*)

4) (*University of Chinese Academy of Sciences, Nanjing 211135, China*)

(Received 20 October 2025; revised manuscript received 24 November 2025)

Abstract

High-resolution spectrographs are central to modern exoplanet research, particularly effective for detecting Earth-like planets with radial velocity (RV) signals of only a few tens of centimeters per second. To achieve this level of accuracy, high-precision wavelength calibration is required. A key factor in this process is the modeling

* Project supported by the National Key R&D Program of China (Grant Nos. 2023YFF0714803, 2023YFF0714800), the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 12373094, 12293054), and the Youth Innovation Promotion Association of Chinese Academy of Sciences (Grant No. 2023068).

† Corresponding author. E-mail: ltang@niaot.ac.cn

of the instrumental profile (IP), which describes the response of the spectrograph to incident light. The true IP of a high-resolution instrument is often complex. It may display asymmetric or extended wings and undergo change on the detector because of optical aberrations, variations in fiber illumination, and environmental effects. These features lead to systematic errors in the measured line centers when traditional parametric models such as Gaussian functions are used, and they limit the achievable RV precision.

In this work, a non-parametric IP modeling method is adopted based on Gaussian process regression (GPR). The IP is treated as a smooth function with a flexible covariance structure, without being constrained by a predefined analytic form. GPR learns both the global structure and small-scale features of the line shape directly from the data. Since the IP varies slowly across the detector, the method divides each spectral order into several consecutive spatial segments. Each segment is fitted independently, and can capture local variations. The model includes measurement uncertainties and provides a probabilistic description of the IP. Adjacent segments are connected through smooth interpolation to ensure a continuous IP throughout the entire order. Model performance is evaluated using reduced chi-squared and root mean square error (RMSE), enabling quantitative assessment and comparison with traditional approaches.

The method is tested using laser frequency comb (LFC) exposure from the fiber-fed high resolution spectrograph (HRS) on a 2.16 m telescope at Xinglong Observatory. The LFC generates a dense and highly stable set of emission lines, which is well suitable for validating IP reconstruction. Three experiments show clear and consistent improvements. Using odd-numbered lines to predict even-numbered ones within a single exposure reduces the RMSE by 35.6% compared with a Gaussian model, showing better determination of line centers. Applying an IP model trained on one exposure to a later exposure reduces the RMSE by 42.5%, demonstrating improved stability when the model is transferred between exposures. A comparison between two channels under the same exposure conditions shows a 37.1% improvement in calibration consistency, indicating reduced channel-to-channel systematics.

The results from this study show that GPR provides a more accurate description of the instrumental profile and its spatial variation than traditional parametric models. The improved reconstruction of the IP leads to more accurate line center measurements and a more stable and precise wavelength solution. This capability is important for advancing the RV precision of high-resolution spectrographs toward the centimeter-per-second level. The GPR provides a promising method for modeling instrumental profiles and supports the precision required for detecting Earth-like exoplanets.

Keywords: high-resolution spectrograph, instrumental profile, wavelength calibration, Gaussian process

DOI: [10.7498/aps.75.20251426](https://doi.org/10.7498/aps.75.20251426)

CSTR: [32037.14.aps.75.20251426](https://cstr.cn/32037.14.aps.75.20251426)

基于高斯过程回归的高分辨率光谱仪仪器轮廓建模

李布威 唐靓 陆彦婷 叶慧琪 韩建 翟洋 陈俊沅 肖东

Instrument profile modelling of high-resolution spectrograph based on Gaussian process regression

LI Buwei TANG Liang LU Yanting YE Huiqi HAN Jian ZHAI Yang CHEN Junyuan XIAO Dong

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 75, 040404 (2026) DOI: 10.7498/aps.75.20251426

CSTR: 32037.14.aps.75.20251426

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.75.20251426>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

远心同-离轴混合数字全息高分辨率重建方法

Telecentric in-line-and-off-axis hybrid digital holographic high-resolution reconstruction method

物理学报. 2021, 70(15): 154202 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210190>

利用地基高分辨率傅里叶变换红外光谱技术探测大气氟氯烃气体 CCl_2F_2 的时空变化特征

Detection of atmosphere CCl_2F_2 spatio-temporal variations by ground-based high resolution Fourier transform infrared spectroscopy

物理学报. 2021, 70(20): 200201 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210640>

高分辨率宽范围连续变推力离子推力器设计及其天地一体化验证

Design of high-resolution wide-range continuously variable thrust ion thruster and its space-earth integrated verification

物理学报. 2025, 74(20): 205205 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250841>

高分辨率磁共振二维扩散成像技术综述

Review of high-resolution 2-dimensional diffusion magnetic resonance imaging techniques

物理学报. 2025, 74(11): 118703 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250235>

双腔光力系统中基于连续域束缚态的超高分辨率质量传感

Ultrahigh-resolution mass sensing based on bound states in continuum domain in double-cavity optomechanical system

物理学报. 2025, 74(13): 134201 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250063>

亚角秒空间分辨的太阳极紫外宽波段成像光谱仪光学设计

Optical design of sub-angular second spatially resolved solar extreme ultraviolet broadband imaging spectrometer

物理学报. 2024, 73(3): 039501 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231481>