

基于光谱采样率的反卷积算法分析

刘卫静^{1,2} 李斌成¹ 韩艳玲¹ 曲哲超¹

(¹ 中国科学院光电技术研究所, 四川 成都 610209; ² 中国科学院研究生院, 北京 100049)

摘要 反卷积方法是提高光谱仪分辨率的重要手段。采用空域迭代反卷积和频域维纳滤波对多纵模激光器光谱进行数据仿真,并在不同光谱仪采样率条件下,比较了迭代反卷积和维纳滤波结果。仿真结果表明,迭代反卷积和维纳滤波可以有效消除光谱仪仪器响应函数引起的光谱展宽,提高光谱仪分辨率。在光谱仪采样率低的情况下,迭代反卷积的分辨率增强效果优于维纳滤波。随着采样率的增加,维纳滤波的误差小于迭代反卷积。实验分别测量了单纵模和多纵模 632.8 nm He-Ne 激光器光谱,并对测量结果进行反卷积处理。结果表明,低分辨率光谱仪测量的激光器光谱经反卷积处理后与高分辨率光谱仪直接测量结果一致。

关键词 光谱学;采样率;反卷积;分辨率

中图分类号 O433 文献标识码 A doi: 10.3788/LOP49.043001

Analysis of Deconvolution Algorithm Based on Spectral Sampling Rate

Liu Weijing^{1,2} Li Bincheng¹ Han Yanling¹ Qu Zhechao¹

(¹ Institute of Optics and Electronics, Chinese Academy of Sciences, Chengdu, Sichuan 610209, China)
(² Graduate University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)

Abstract Deconvolution technique is currently available for application in spectral analysis to enhance the resolution of spectra, especially the spectra with multi-longitude modes. Iterative deconvolution and Wiener filtering techniques are discussed. The root-mean-square errors of iterative deconvolution and Wiener filtering with different spectral sampling rates are compared via computer simulation. The results indicate that the resolution of the observed spectrum is improved by using iterative deconvolution and Wiener filtering. The iterative deconvolution works better than Wiener filter at low spectral sampling rate. Experimentally, the spectra of two He-Ne lasers centered at 632.8 nm with single mode and multi-mode are deconvolved. The number of longitude modes, longitude spaces and spectral bandwidths of the He-Ne lasers are obtained by using iterative deconvolution. The deconvolved spectra of He-Ne lasers measured with a low-resolution spectrometer are in agreement with the spectra measured directly with a high-resolution spectrometer.

Key words spectroscopy; sampling rate; deconvolution; resolution

OCIS codes 300.6320; 300.6360; 100.1830

1 引言

光谱数据的高分辨测量对物理、化学等多个学科领域都有十分重要的应用^[1~6],在激光光刻、光纤通信和光学遥感等应用中也离不开激光线宽、模式等参数的分析。光谱仪器的衍射、孔径宽度和系统像差等因素限制了其分辨率的提高,应用数学反卷积算法可以进行修正^[7,8]。常规的反卷积方法有空域和频域反卷积,主要有逆滤波、维纳滤波、Van Cittert 迭代以及傅里叶反卷积等方法^[9~13]。钱霖等^[14~16]应用傅里叶反卷积和迭代反卷积方法分别对红外光谱、半导体激光器光谱和准分子激光器光谱数据进行处理,提高了光谱分辨率;另外, Buslov 等^[17,18]根据光谱仪狭缝宽度和重叠光谱间隔不同对傅里叶反卷积方法进行数据仿真,并将该方法应用在红外光谱测量中。本文对光谱采样率与反卷积算法之间的关系进行分析,当激光器光谱为多纵模时,光谱采样率不同,迭代反卷积和维纳滤波处理结果存在差异,本文对该差异进行数值仿真,并进行了实验验证。

收稿日期: 2011-10-06; 收到修改稿日期: 2011-11-15; 网络出版日期: 2012-03-02

作者简介: 刘卫静(1987—),女,博士研究生,主要从事准分子激光器输出参数检测技术方面的研究。

E-mail: l_wj8709@sina.com

导师简介: 李斌成(1966—),男,研究员,博士生导师,主要从事光热技术和光学薄膜制备及检测技术等方面的研究。

E-mail: bcli@ioe.ac.cn

2 基本原理

光谱仪实测光谱数据 $y(\lambda)$ 可表示为光谱仪仪器响应函数 $h(\lambda)$ 与激光器真实光谱 $x(\lambda)$ 的卷积

$$y(\lambda) = x(\lambda) * h(\lambda), \quad (1)$$

式中 $*$ 表示卷积。已知光谱仪实测光谱和仪器响应函数, 可以通过反卷积方法求得激光器真实光谱。在常规反卷积中, 应用最广的反卷积算法有迭代反卷积和维纳滤波^[10]。

迭代法的主要内容是通过迭代过程找 $x(\lambda)$ 的近似, 其过程表示为

$$\begin{cases} x^{(1)}(\lambda) = y(\lambda) \\ x^{(2)}(\lambda) = x^{(1)}(\lambda) + r(x^{(1)}(\lambda))[y(\lambda) - h(\lambda) * x^{(1)}(\lambda)] \\ \vdots \\ x'(\lambda) = x^{(k+1)}(\lambda) = x^{(k)}(\lambda) + r[x^{(k)}(\lambda)][y(\lambda) - h(\lambda) * x^{(k)}(\lambda)] \end{cases}, \quad (2)$$

式中 $x'(\lambda)$ 为反卷积结果, k 为迭代次数。噪声会形成不真实峰, 并随迭代过程而增长, 为了改善这种情况, 引进松弛函数来抑制反卷积过程中不真实峰的形成, 表示为

$$r[x^{(k)}(\lambda)] = r_0[1 - 2|x^{(k)}(\lambda) - 0.5|], \quad (3)$$

式中 r_0 为 $r[x^{(k)}(\lambda)]$ 的最大值。

维纳滤波的设计思路是通过找一个非因果滤波器 $g(\lambda)$, 它用 $y(\lambda)$ 作输入, 使其输出为

$$x'(\lambda) = y(\lambda) * g(\lambda). \quad (4)$$

滤波器 $g(\lambda)$ 的设计需要满足均方误差最小。利用线性均方估计中的正交原理, 均方误差达到最小的充要条件是误差信号与任一进入估计的输入信号正交。根据相关函数、傅里叶变换的定义及性质可知, 为了满足上述条件, 设计的维纳滤波器可以表达为

$$X'(\omega) = \frac{H^*(\omega)Y(\omega)}{|H(\omega)|^2 + 1/R_{SN}}, \quad (5)$$

式中 $Y(\omega)$ 、 $H(\omega)$ 分别为 $y(\lambda)$ 和 $h(\lambda)$ 的离散空间傅里叶变换, R_{SN} 为实测光谱信号的信噪比(SNR)。对 $X'(\omega)$ 进行傅里叶逆变换就可以得到激光器真实光谱的近似解。

两种反卷积算法都可以有效提高光谱分辨率, 但在不同条件下两种反卷积算法的结果会存在差异。下面根据光谱仪分辨率和实测光谱采样率的不同对这两种反卷积算法进行数值仿真。

3 数据仿真

激光器光谱的多种展宽因素(自然展宽、碰撞展宽、多普勒展宽和仪器展宽等)的组合使合成的激光器光谱及展宽函数趋向高斯型。假设激光器真实光谱为高斯型, 包括三个纵模, 纵模宽度 $\tau = 0.200$ pm[光谱的半峰全宽(FWHM)等于 $\tau \sqrt{\ln 4}$], 纵模间隔 $\Delta\lambda = 0.585$ pm, 光谱如图 1(a)所示。光谱仪仪器响应函数也为高斯型, 谱宽 FWHM 为 1.000 pm, 由此模拟的实测光谱如图 1(b)所示(加入零均值高斯白噪声)。

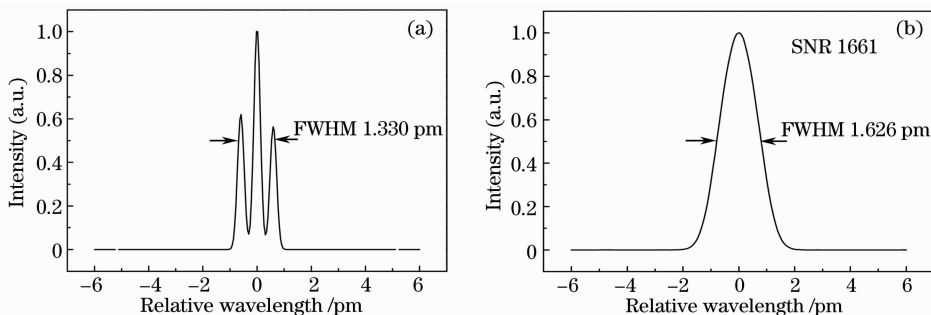


图 1 (a) 模拟的激光器真实光谱; (b) 模拟的实测光谱

Fig. 1 (a) Simulated real spectrum of the laser; (b) simulated observed spectrum

根据奈奎斯特采样定理, 为了不丢失光谱信号信息, 光谱采样率 f_s 必须大于或等于两倍信号谱的最高频率 f_h ^[19], 即

$$f_s \geq 2f_h. \quad (6)$$

采样频率不满足奈奎斯特抽样定理时,会出现频谱混叠。对图 1 模拟光谱进行采样率分析,通过频谱分析得到,模拟激光器真实光谱的最低采样率为 $1.000 \times 10^{11} \text{ cm}^{-1}$,模拟实测光谱的最低采样率为 $1.448 \times 10^{10} \text{ cm}^{-1}$ 。

激光器光谱的多个纵模能否被分辨采用的标准是瑞利判据。当激光器光谱中强度最低的纵模与其相邻纵模的合强度值(I_p)低于最小纵模强度值(I_m)的 0.810 倍时,定义为两个纵模被分开。

图 2 分别给出了在不同采样率情况下,通过迭代反卷积和维纳滤波方法得到的激光器真实光谱的近似解与假设的激光器真实光谱之间的均方根(RMS)误差和反卷积后 I_p/I_m 随采样率变化的情况。

由图 2(a)可知,低采样率时迭代反卷积误差小,分辨率增强效果优于维纳滤波,随着采样率的增加,迭代过程使激光器峰值变大,而维纳滤波的结果更接近激光器的真实光谱,误差小于迭代反卷积。同样由图 2(b)可以看出,迭代反卷积结果中 I_p/I_m 值小于 0.810,迭代反卷积结果能分辨出激光器的多个纵模;而维纳滤波结果中 I_p/I_m 值随着采样率的增加而下降,对曲线进行多项式拟合得到,采样率 $f_s \geq 4.691 \times 10^{11} \text{ cm}^{-1}$ 时, $I_p/I_m \leq 0.810$,只有在采样率高时反卷积结果才能分辨出激光器的多个纵模。

对于多纵模激光器光谱,光谱仪分辨率不同,反卷积方法提高光谱分辨率的程度不同。图 3(a)、(b)分别为 $f_s = 2.00 \times 10^{11} \text{ cm}^{-1}$ 时光谱仪仪器响应函数宽度 $\omega = 0.600 \text{ pm}$ 和 $\omega = 1.200 \text{ pm}$ 的反卷积结果。当光谱仪分辨率较高时,通过反卷积方法可以分辨出激光器的多个纵模,而当光谱仪分辨率降低时,反卷积方法提高光谱分辨率的程度受到限制。图 3(c)给出了不同仪器响应函数宽度情况下得到的反卷积结果的均方根误差。由于迭代过程会使激光器峰值变大,迭代反卷积的误差大于维纳滤波。

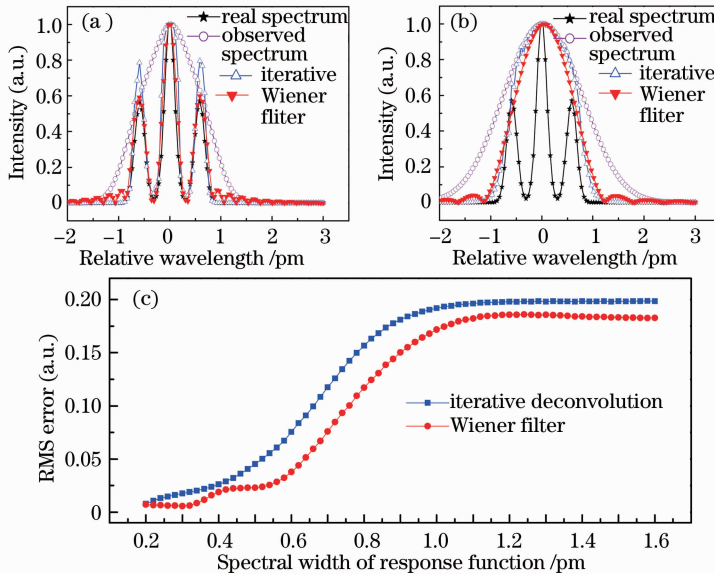


图 3 不同仪器响应函数宽度时反卷积结果。(a) 0.600 pm; (b) 1.200 pm; (c) 均方根误差

Fig. 3 Deconvolved spectra with different spectral widths of the response function.

(a) 0.600 pm; (b) 1.200 pm; (c) RMS error

图 4(a)给出光谱采样率 $f_s = 4.00 \times 10^{11} \text{ cm}^{-1}$ 时, I_p/I_m 随光谱仪仪器响应函数宽度变化的情况。对仿真数据进行直线拟合,计算得到 $I_p/I_m = 0.810$ 时仪器响应函数宽度 (FWHM) 分别为 0.992 pm 和 1.099 pm,当光谱仪仪器响应函数宽度分别大于该值时,通过维纳滤波和迭代反卷积算法不能分辨出激光

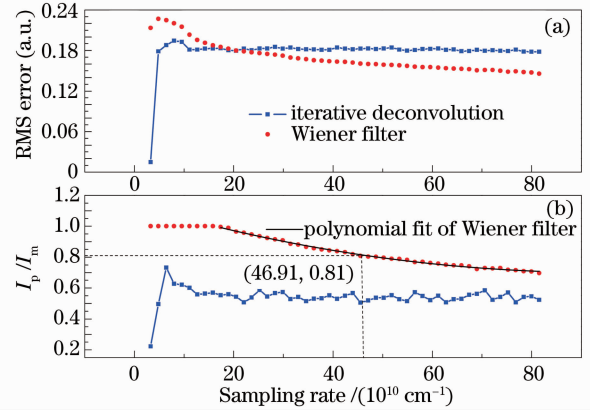


图 2 (a) 不同采样率时反卷积结果的均方根误差;

(b) I_p/I_m 随采样率变化值

Fig. 2 (a) RMS error of deconvolved spectra with different sampling rates; (b) the I_p/I_m versus sampling rates

器的多个纵模。同样,对低采样率时反卷积算法提高光谱仪分辨率的程度进行了分析。图 4(b)为光谱采样率 $f_s = 1.00 \times 10^{11} \text{ cm}^{-1}$ 时 I_p/I_m 随光谱仪仪器响应函数宽度变化的情况。当仪器响应函数宽度 (FWHM) 分别大于 0.903 pm 和 1.071 pm 时,通过维纳滤波和迭代反卷积算法不能分辨出激光器的多个纵模。

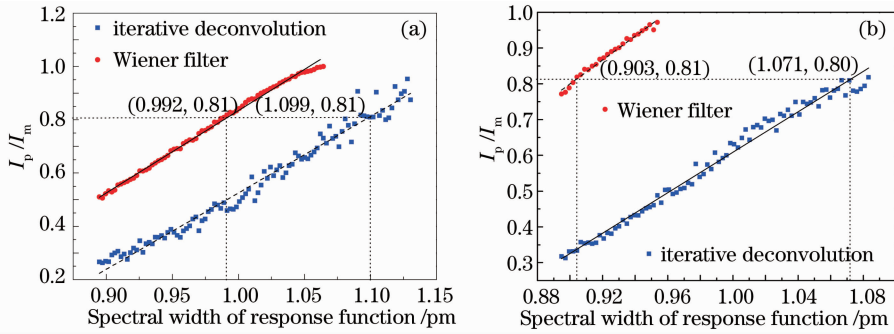


图 4 不同采样率时 I_p/I_m 随仪器响应函数宽度变化情况。(a) $4.00 \times 10^{11} \text{ cm}^{-1}$; (b) $1.00 \times 10^{11} \text{ cm}^{-1}$

Fig. 4 I_p/I_m versus the FWHM of the response function with different sampling rates.

(a) $4.00 \times 10^{11} \text{ cm}^{-1}$; (b) $1.00 \times 10^{11} \text{ cm}^{-1}$

同样,对激光器真实光谱为 Voigt 型分布的情况进行分析,仿真结果显示:迭代反卷积和维纳滤波也适用于 Voigt 型分布的光谱。

4 实 验

分别用两台不同分辨率的光谱仪对 Melles Griot 公司的单纵模和多纵模 632.8 nm He-Ne 激光器光谱进行测量,激光器型号分别为 05-LTP-903 和 25-LHP-151-230。系统光路如图 5 所示。两台光谱仪的分辨率 (FWHM) 分别为 0.171 pm (ELIAS III) 和 1.038 pm (Wavemeter),由同一路触发信号控制,实现同步采集。对 Wavemeter 光谱仪测量的激光器光谱进行反卷积处理,消除光谱仪器引起的光谱展宽,与 ELIAS III 光谱仪测量结果比较,从而反映出反卷积方法提高光谱分辨率的程度。

反卷积方法采用迭代反卷积和维纳滤波,仪器响应函数由光谱仪器制造商提供(由极窄脉宽光源测量得到)。测量结果和反卷积结果如图 6 所示。图 6(a)为单纵模激光器的实测光谱图和两种反卷积结果,光谱仪测量光谱谱宽 (FWHM) 为 1.075 pm,两种反卷积结果相同,反卷积后光谱谱宽 (FWHM) 为 0.405 pm,与测量光谱相比,谱宽减小了 62.3%;图 6(b)为多纵模激光器的实测光谱图和两种反卷积结果,实测光谱谱宽

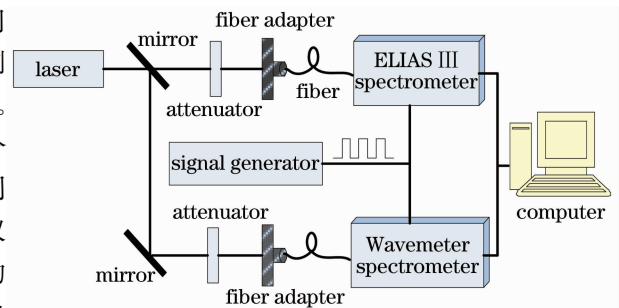


图 5 激光光谱测量系统光路图

Fig. 5 Schematic diagram of the measurement system of laser spectra

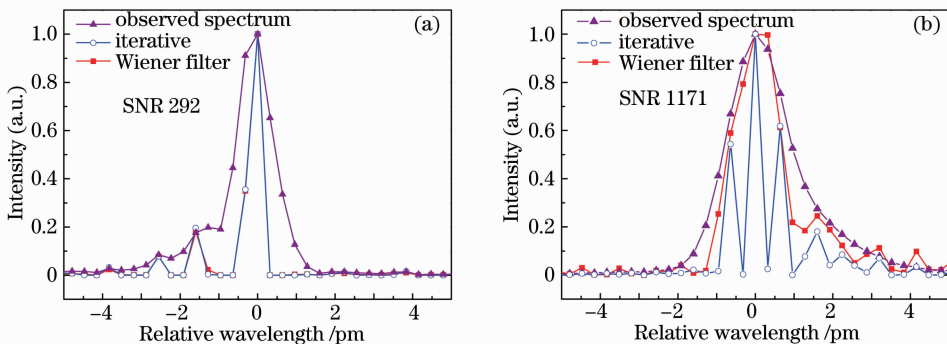


图 6 用 Wavemeter 光谱仪测量的两台激光器光谱及其反卷积结果。(a) 单纵模激光器;(b) 多纵模激光器

Fig. 6 Observed and deconvolved spectra of the He-Ne lasers using Wavemeter spectrometer.

(a) single-longitudinal-mode laser; (b) multi-longitudinal-mode laser

(FWHM)为 1.863 pm, 迭代反卷积光谱显示, 该激光器为三纵模激光器, 纵模间隔为 0.639 pm, 谱宽 (FWHM)为 1.367 pm, 谱宽减小了 26.6%, 维纳滤波后光谱谱宽 (FWHM)为 1.349 pm, 谱宽减小了 27.6%。由于 Wavemeter 光谱仪分辨率低, 反卷积方法提高光谱分辨率效果显著。

图 7 给出用 ELIAS III 光谱仪测量的两台激光器光谱及其反卷积结果。图 7(a)为单纵模激光器光谱图, 实测的激光器光谱谱宽 (FWHM)为 0.283 pm, 反卷积后激光器光谱谱宽 (FWHM)为 0.226 pm; 图 7(b)为多纵模激光器光谱图, 测量结果显示该激光器有三个纵模, 纵模间隔为 0.587 pm, 谱宽 (FWHM)为 1.298 pm。三个纵模的纵模宽度 (FWHM)分别为 0.299、0.306、0.285 pm, 反卷积后三个纵模的纵模宽度分别为 0.263、0.272、0.250 pm。另外, Melles Griot 公司的产品手册给出, 该型号激光器的纵模间隔为 438 MHz, 即 $\Delta\lambda=0.585$ pm。所以迭代反卷积结果更接近激光器真实光谱, 能分辨出激光器的多个纵模。

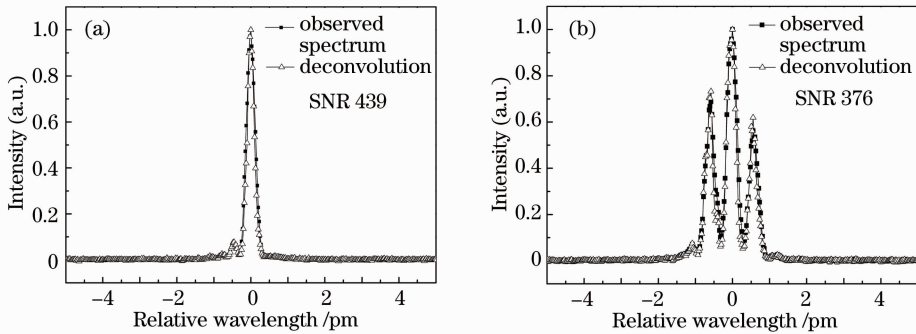


图 7 ELIAS III 光谱仪测量的两台激光器光谱及其反卷积结果。(a)单纵模激光器;(b)多纵模激光器

Fig. 7 Observed and deconvolved spectra of the He-Ne lasers using ELIAS III spectrometer.

(a) single-longitudinal-mode laser; (b) multi-longitudinal-mode laser

通过对比图 6 和图 7 中的光谱参数可知, 反卷积处理过程存在误差, 即图 6 的反卷积结果与激光器真实光谱之间存在误差。误差来源主要包括光谱仪的仪器响应函数计算不准确、Wavemeter 光谱仪采样率低和未对实测光谱噪声进行处理。下面以多纵模激光器为例说明光谱仪采样率对反卷积结果的影响。通过对两台光谱仪测量的多纵模 632.8 nm He-Ne 激光器光谱信号的频谱分析可知, 光谱信号的最低采样率分别为 $1.264 \times 10^{10} \text{ cm}^{-1}$ (Wavemeter) 和 $8.263 \times 10^{10} \text{ cm}^{-1}$ (ELIAS III)。而实际上 Wavemeter 光谱仪的采样率为 $f_s = 3.131 \times 10^{10} \text{ cm}^{-1} < 8.263 \times 10^{10} \text{ cm}^{-1}$, 在低采样率时, 对低分辨率光谱仪测量光谱进行反卷积处理的结果与高分辨率光谱仪测量结果之间存在误差。

5 结 论

基于迭代反卷积和维纳滤波的数据处理方法有效消除了光谱仪响应函数引起的光谱展宽, 提高了光谱仪分辨率。另外, 通过数值仿真和实验可知, 对于多纵模激光器光谱, 低采样率时迭代反卷积方法可以分辨出激光器的多个纵模, 而由于维纳滤波是一种规整化的逆滤波, 在低采样率时, 为了抑制噪声, 反卷积结果被平滑, 激光器光谱的纵模信息丢失, 不能分辨出激光器的多个纵模。随着采样率的增大, 维纳滤波的误差小于迭代反卷积。

参 考 文 献

- 1 O. P. Sievaenen. Resolution enhancement of Raman spectra of solids using true linear prediction and deconvolution[J]. *Appl. Spectrosc.*, 1999, **53**(2): 144~149
- 2 D. K. Buslov, N. A. Nikonenko, N. I. Sushko *et al.*. Resolution enhancement in IR spectra of carbohydrates by the deconvolution method and comparison of the results with low-temperature spectra[J]. *Appl. Spectrosc.*, 2000, **54**(11): 1651~1658
- 3 T. Nakaike, O. Wakabayashi, T. Suzuki *et al.*. Spectral metrologies for ultra-line-narrowed F₂ laser[C]. *SPIE*, 2002, **4691**: 1714~1721
- 4 V. A. Lorenz-Fonfria, E. Padros. Maximum entropy deconvolution of infrared spectra: use of a novel entropy expression

- without sign restriction[J]. *Appl. Spectrosc.*, 2005, **59**(4): 474~486
- 5 Yuan Jinghe. Blind deconvolution of X-ray diffraction profiles by using high-order statistics[J]. *Opt. Engng.*, 2009, **48**(7): 076501
- 6 N. Zorina, G. Revalde, R. Disch. Deconvolution of the mercury 253.7 nm spectral line shape for the use in absorption spectroscopy[C]. *SPIE*, 2008, **7142**: 71420J
- 7 R. L. Tolboom, N. J. Dam, N. M. Sijtsema *et al.*. Quantitative spectrally resolved imaging through a spectrograph[J]. *Opt. Lett.*, 2003, **28**(21): 2046~2048
- 8 Yuan Jinghe, Hu Ziqiang, Sun Jinzuo. High-order cumulant-based blind deconvolution of Raman spectra[J]. *Appl. Opt.*, 2005, **44**(35): 7595~7601
- 9 Li Zhengzhi. Deconvolution of overlapped dand contours[J]. *Spectrosc. & Spectral Anal.*, 1985, **5**(3): 1~7
李正直. 重迭光谱线形的解卷积方法[J]. *光谱学与光谱分析*, 1985, **5**(3): 1~7
- 10 Zou Mouyan. Deconvolution and Signal Recovery[M]. Beijing: National Defence Industry Press, 2001. 91~157
邹谋炎. 反卷积和信号复原[M]. 北京: 国防工业出版社, 2001. 91~157
- 11 P. A. Jansson. Deconvolution of Images and Spectra (2nd ed.)[M]. New York: Academic Press, 1997. 76~181
- 12 V. A. Lorenz-Fonfria, E. Padros. Method for the estimation of the mean Lorentzian bandwidth in spectra composed of an unknown number of highly overlapped bands[J]. *Appl. Spectrosc.*, 2008, **62**(6): 689~700
- 13 J. Katrasnik, F. Pernus, B. Likar. Deconvolution in acousto-optical tunable filter spectrometry[J]. *Appl. Spectrosc.*, 2010, **64**(11): 1265~1273
- 14 Qian Lin, Li Zhengzhi, Xu Guoliang. Application of deconvolution and self-deconvolution techniques in infrared spectroscopy[J]. *Acta Optica Sinica*, 1984, **4**(6): 546~552
钱霖, 李正直, 许国梁. 消卷积和自消卷积方法在红外光谱测量中的应用[J]. *光学学报*, 1984, **4**(6): 546~552
- 15 G. W. Halsey, D. E. Jennings, W. E. Blass. Deconvolution of diode-laser spectra[J]. *J. Opt. Soc. Am. B*, 1985, **2**(5): 837~841
- 16 O. Wakabayashi, J. Sakuma, T. Suzuki *et al.*. Spectral measurement of ultra line-narrowed F₂ laser[C]. *SPIE*, 2001, **4346**: 1066~1073
- 17 D. K. Buslov, N. A. Nikonenko. Regularized method of spectral curve deconvolution[J]. *Appl. Spectrosc.*, 1997, **51**(5): 666~672
- 18 J. K. Kauppine, D. J. Moffatt, H. H. Mantsch *et al.*. Fourier self-deconvolution: a method for resolving intrinsically overlapped bands[J]. *Appl. Spectrosc.*, 1981, **35**(3): 271~276
- 19 Cheng Peiqing. Digital Signal Process (3rd ed.)[M]. Beijing: Qinghua University Press, 2009. 34~43
程佩青. 数字信号处理教程(第三版)[M]. 北京: 清华大学出版社, 2009. 34~43