基于快速高斯网格法的非线性光谱复原方法

沈 燕 柏财勋 王 昊 周建强 李建欣

南京理工大学电子工程与光电技术学院, 江苏 南京 210094

摘要 针对傅里叶变换光谱仪中的非线性光谱复原精度低的问题,研究了一种基于快速高斯网格(FGG)法的非线性光谱复原方法。首先研究了基于 FGG 法的非均匀傅里叶变换理论,利用仿真结果验证了 FGG 法的高复原精度 及其可行性。搭建了双折射偏振干涉光谱测量实验装置,利用该方法对非等间隔采样的干涉信号进行了光谱复原 处理,复原结果与光谱仪的测量结果基本一致。理论仿真和实验结果均表明,采用 FGG 法能够有效实现非线性光 谱复原。

Nonlinear Spectral Recovery Based on Fast Gaussian Gridding

Shen Yan Bai Caixun Wang Hao Zhou Jianqiang Li Jianxin

School of Electronic and Optical Engineering, Nanjing University of Science and Technology, Nanjing, Jiangsu 210094, China

Abstract For the low precision of nonlinear spectral recovery of the Fourier transform spectrometer, a nonlinear spectral recovery method based on the fast Gaussian gridding (FGG) is studied. The theory of non-uniform Fourier transform based on FGG is studied and the simulation verifies the high recovery precision and the feasibility of the FGG method. A spectral measurement device of birefringent polarization interference is set up and the spectral recovery for the unequal-interval sampled interference signal is carried out. The spectrum recovered based on the FGG method is basically consistent with the result of spectrometer. The theoretic simulation and experimental results show that the nonlinear spectral recovery can be realized effectively by the FGG method. **Key words** spectroscopy; spectral recovery; Fourier transform; nonlinear sampling; fast Gaussian gridding

OCIS codes 300.6170; 300.6300; 110.4234

1引言

傅里叶变换光谱技术具有光通量大、光谱分辨率高等特性,已成为一种重要的光谱测量技术。该光谱测量技术主要包括光学干涉、数据采集和光谱复原。如果对干涉信息进行均匀采样,则常规快速傅里叶变换(FFT)可以精确复原目标的光谱^[1]。但由于干涉光路或机电扫描的非线性问题,采集系统难以对干涉信号进行均匀采样,此时干涉信号的光程差(OPD)采样间隔是非线性变化的。例如,在转镜式干涉光谱仪中,转镜的转动会引入光程差非线性变化的问题^[2-3];在 Sagnac 型干涉成像光谱仪和双折射偏振干涉光谱仪中,同样存在光程差非线性采样问题^[4-7]。如果不考虑非线性采样的影响,仍采用 FFT 进行光谱反演,将会影响光谱复原的精度。针对傅里叶变换光谱仪中的采样非线性问题,国内外研究人员进行了深入研究并提出了多种光谱反演方法,例如光程差替换法、干涉图二次采样法、非均匀快速傅里叶变换(NUFFT)等^[8-10]。其中,NUFFT 法的复原精度相对较高。但是对于数据采集量很大的傅里叶变换光谱仪及成像光谱仪而言,在保

收稿日期: 2016-05-20; 收到修改稿日期: 2016-06-07; 网络出版日期: 2016-08-12

基金项目: 国家自然科学基金(61475072)

作者简介: 沈 燕(1992—),女,硕士研究生,主要从事干涉光谱技术方面的研究。E-mail: 15062205612@163.com 导师简介: 李建欣(1977—),男,博士,副教授,博士生导师,主要从事精密光学测试与干涉成像光谱技术方面的研究。 E-mail: ljx@vip.163.com(通信联系人)

激光与光电子学进展

证复原精度的前提下,需要减小 NUFFT 光谱复原的计算量,以提高光谱测量效率。因此,本文研究了一种 基于快速高斯网格(FGG)法的 NUFFT 光谱复原方法,在达到高精度光谱复原的同时有效提高光谱复原效 率。本文通过数值仿真与实验对比,验证了基于 FGG 法进行光谱复原的准确性和有效性。

2 基于快速高斯网格法的光谱复原理论

2.1 光谱与干涉信号的傅里叶变换关系

根据傅里叶变换光谱学的理论,傅里叶变换光谱仪所获取的干涉信息为[1]

$$I(\Delta) = 2 \int_{0}^{+\infty} B(\sigma) \left[1 + \cos(2\pi\sigma\Delta) \right] d\sigma, \qquad (1)$$

式中 $I(\Delta)$ 为采集的干涉强度分布, $B(\sigma)$ 为测量目标的光谱分布, Δ 为光程差, σ 为波数($\sigma = 1/\lambda$)。如果不考虑直流分量 $I(+\infty)$,并将 $B(\sigma)$ 扩展到负波数区域,此时(1)式可改写为

$$I(\Delta) = \int_{-\infty}^{+\infty} B(\sigma) \cos(2\pi\sigma\Delta) \,\mathrm{d}\sigma\,.$$
⁽²⁾

在理想干涉情况下,光谱信息和干涉信息之间存在严格的傅里叶变换关系[1],即

$$B(\sigma) = \mathfrak{J}^{-1}[I(\Delta)], I(\Delta) = \mathfrak{J}[B(\sigma)].$$
(3)

在仪器的实际应用中,需要离散采样干涉信息。设干涉信息的采样间隔序列为 $x_n = [x_0, x_1, \dots, x_{N-1}]$,其中 N 为非等间隔干涉数据的点数, $x_j \in [0, 2\pi]$ ($j = 0, 1, \dots, N-1$),对应的离散干涉数据序列 I_n 可以表示为

$$I_{n} = [I_{0}, I_{1}, \cdots, I_{N-1}] = \sum_{j=0}^{N-1} I(x_{j}) \delta(x - x_{j}), \qquad (4)$$

式中 $I(x_j)$ 为连续干涉信号I(x)在采样位置 x_j 处的值。对干涉数据 I_n 作离散傅里叶变换,可得到对应的 光谱强度序列为

$$B(k) = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} I(x_j) \exp(-ikx_j), k = -\frac{M}{2}, \cdots, \frac{M}{2} - 1,$$
(5)

式中 k 为离散波数序数, M 为光谱谱段数。

2.2 非均匀快速傅里叶变换方法

NUFFT 是为了对非等间隔采样的离散数据进行 FFT 而提出的一种解决方法^[11]。与对原始非均匀采 样数据直接插值、对获得的卷积数据均匀重采样的方法相比,NUFFT 可有效减少重采样过程中原始数据信 息熵的丢失,从而保证复原光谱的精度。为了提高干涉数据的光谱复原效率,利用高斯核函数的指数衰减特 性估计傅里叶变换系数,可以快速估计相位均匀网格点,从而提高 NUFFT 的运算速度。以下为采用 NUFFT 进行非线性光谱复原的基本步骤:

 1)将高斯脉冲函数与非均匀干涉数据卷积以实现对非均匀干涉数据的平滑处理,其中高斯脉冲函数 (又称核函数)可表示为

$$g_{\tau}(x) = \exp(-x^2/4\tau), \qquad (6)$$

式中 τ 为高斯核函数参数,它决定核函数的指数衰减速率,卷积运算得到的干涉信号可表示为

$$I_{\tau}(x) = I(x) * g_{\tau}(x) = \int_{0}^{2\pi} I(y) g_{\tau}(x-y) dy,$$
(7)

式中 $I_{\tau}(x)$ 为变量 x 在 $[0,2\pi]$ 范围内平滑、无限积分的函数,使用均匀网格点采样 $I_{\tau}(x)$,则均匀网格点 $m\Delta x$ 处的离散值 $I_{\tau}(m\Delta x)$ 可表示为

$$I_{\tau}(m\Delta x) = \sum_{j=0}^{N-1} I(x_j) \exp\left[-(m\Delta x - x_j)^2/4\tau\right], m = 0, 1, \cdots, M_{\tau} - 1,$$
(8)

式中 Δx 为过采样时的采样间隔($\Delta x = 2\pi/M_r$,其中 M_r 为过采样点数), m 为网格采样点;

2) 根据(5)式中描述的傅里叶变换关系,对卷积干涉数据 $I_{\tau}(m\Delta x)$ 进行 FFT 可得到 $I_{\tau}(m\Delta x)$ 的离散 傅里叶变换谱为

$$B_{\tau}(k) \approx \frac{1}{M_{\tau}} \sum_{m=0}^{M_{\tau}-1} I_{\tau}(m\Delta x) \exp\left(-ikm\Delta x\right), k = 0, 1, \cdots, M_{\tau}-1,$$
(9)

此时 $B_{\tau}(k)$ 为 $I_{\tau}(m\Delta x)$ 对应的光谱估计;

3)为了减小高斯核函数 g_r(x)的平滑效应,需要在频域进行退卷积处理,则非等间隔采样干涉数据 I_n 对应的光谱强度为

$$B(k) = B_{\tau}(k)/G(k), k = 0, 1, \cdots, M_{r} - 1,$$
(10)

式中G(k)为高斯核函数的离散变换谱,根据(10)式可以估算任意均匀网格点 m Δx 处的干涉强度。

采用上述 NUFFT 方法进行光谱复原的过程可以总结为三个步骤:第一步,求(8)式中的卷积干涉数据 $I_{\tau}(m\Delta x)$;第二步,对 $I_{\tau}(m\Delta x)$ 进行 FFT 处理得到(9)式中的 $B_{\tau}(k)$;第三步,对 $B_{\tau}(k)$ 进行退卷积处理得 到(10)式中的 B(k)。其中,运算量最大的过程是第一步中对 $I_{\tau}(m\Delta x)$ 的求解,如(8)式所示,求取 $I_{\tau}(m\Delta x)$ 需遍历所有非等间隔采样点位置 x_n ,因此运算量非常大。

2.3 快速高斯网格法

FGG 法是由文献[12]提出的一种 NUFFT 运算加速实现方法。由于高斯核函数的衰减速度很快,干涉 强度 $I(x_j)$ 对远离 x_j 位置的网格点 $m\Delta x$ 的影响可忽略不计。因此,在 FGG 法中计算 $I_{\tau}(m\Delta x)$ 时只需要 考虑 $m\Delta x$ 点附近的干涉强度的影响。这种方法利用高斯函数的衰减特性,有效降低了重采样运算的复杂 度。此外,计算 $I_{\tau}(m\Delta x)$ 时,对各个因式分别求解并存储,可明显减少运算次数。对(8)式中的指数因子进 行因式分解可得

 $\exp\left[-\left(m\Delta x - x_{j}\right)^{2}/4\tau\right] = \exp\left(-\frac{x_{j}^{2}}{4\tau}\right) \left[\exp\left(\frac{x_{j}\Delta x}{2\tau}\right)\right]^{m} \exp\left[-\left(m\Delta x\right)^{2}/4\tau\right]_{*}$ (11)

从(11)式可以看出,前两项因式 exp($-x_j^2/4\tau$)和 exp($x_j\Delta x/2\tau$)中都含有 x_j ,而第三项 exp[$-(m\Delta x)^2/4\tau$]与 x_j 无关。因此,对于每一个非等间隔采样点 x_j 来说,仅需计算及存储两个映射指数 exp($-x_j^2/4\tau$)和 exp($x_j\Delta x/2\tau$),而 exp[$-(m\Delta x)^2/4\tau$]的计算及存储在整个过程中只需进行一次即可。该处理方式优化了运算过程,有效降低了运算复杂度。

结合上述的快速运算思想,基于 FGG 法的 NUFFT 的重点步骤为 $I_{\tau}(m\Delta x)$ 的快速求解。设 $\xi_{j} = m_{0}\Delta x (\xi_{j} \leq x_{j}), \xi_{j}$ 为最靠近 x_{j} 的均匀网格点, m_{0} 为采样网格点序号。设 p 为高斯核函数单边可延伸覆 盖的网格点数量,其取值由所设定的运算精度决定^[11]。高斯核函数参数 τ 由非等间隔干涉数据点数、过采 样倍数和所设定的运算精度确定。 $I_{\tau}(m\Delta x)$ 的具体计算过程为:

1) 计算及存储指数分别为

E

$$E_{0} = \exp\left[-(x_{j} - \xi_{j})^{2}/4\tau\right], j = 0, 1, \cdots, N-1,$$
(12)

$$E_{1} = \exp\left[\left(x_{j} - \xi_{j}\right) \Delta x / 2\tau\right], j = 0, 1, \cdots, N - 1,$$
(13)

$$_{2}(m') = \exp\left[-(m'\Delta x)^{2}/4\tau\right], -p < m' \leq p;$$
(14)

2) 对于任意非等间隔采样点 x_i , 计算 $m' = -p + 1, -p + 2, \dots, p$ 离散坐标所对应的函数为

$$I_{\tau} [(m_{0} + m') \Delta x] = \sum_{j=0}^{N-1} I(x_{j}) \exp\{-[x_{j} - (m_{0} + m')\Delta x]^{2}/4\tau\}$$

$$= \sum_{j=0}^{N-1} I(x_{j}) E_{0} E_{1}^{m'} E_{2}(m'), m' = -p + 1, -p + 2, \cdots, p,$$
(15)

式中均匀网格点 $m = m_0 + m', m' = -p + 1, -p + 2, \dots, p,$ 将 $I_{\tau}[(m_0 + m')\Delta x]$ 累加至对应的 $I_{\tau}(m\Delta x)$ 即可获得卷积干涉数据序列。

因此,FGG 法是 NUFFT 的一种运算加速实现方法,并不改变计算的数值结果,两者具有相同的复原精度,但 FGG 法的运算效率明显得到提高。

3 仿真与分析

为了验证基于 FGG 法的光谱复原的可行性,分别利用 FFT 和 FGG 法处理同一光谱分布形成的非线性 干涉信号,将得到的计算结果与原始光谱分布进行对比。在仿真过程中,首先由两个重叠的高斯分布构成宽 波段光谱分布 B(σ),其表达式为

$$B(\sigma) = c_0 \exp\left[-(\sigma - \sigma_0)^2 / s_0^2\right] + c_1 \exp\left[-(\sigma - \sigma_1)^2 / s_1^2\right],$$
(16)

式中 σ₀ 和 s₀ 分别为第 1 个高斯分布的中心波数和光谱带宽, σ₁ 和 s₁ 分别为第 2 个高斯分布的中心波数和

光谱带宽, c₀和 c₁分别为两个高斯分布的幅度系数。

仿真过程中,把原始光谱分布的波段范围设置为 400~800 nm,其他参数设置: $s_0 = 312.6 \text{ cm}^{-1}, \sigma_0 = 15630 \text{ cm}^{-1}, s_1 = 2625 \text{ cm}^{-1}, \sigma_1 = 18756 \text{ cm}^{-1}, c_0 = 1, c_1 = 0.7$ 。利用原始光谱分布 $B(\sigma)$ 按照非线性光程采样函数 $O_{\text{OPD}}(n) = 4.87 \times 10^{-3} \times \sin(0.15n\pi/180)$ 得到的干涉强度分布为 I(n)。其中,原始光谱分布 $B(\sigma)$ 如图 1 所示,非线性光程采样函数 $O_{\text{OPD}}(n)$ 如图 2(a)所示,干涉强度分布 I(n)如图 2(b)所示。



图 2 仿真的光程差非线性分布与干涉强度分布。(a)光程差非线性分布;(b)干涉强度分布 Fig. 2 Simulation of nonlinear OPD and interference intensity distributions. (a) Distribution of nonlinear OPD; (b) distribution of interference intensity

分别采用 FFT 和 FGG 法对干涉信号进行光谱复原得到的结果如图 3 所示。以原始光谱为参考基准, 采用光谱标准偏差作为评价标准,评价两种光谱复原方法的精度。光谱标准偏差定义为

$$E = \sqrt{\sum_{i=0}^{M-1} (\hat{S}_i - S_i)^2 / (M-1)}, \qquad (17)$$

式中 S_i 为标准光谱, \hat{S}_i 为反演光谱,M为光谱谱段数。

基于(17)式,计算得到 E_{FFT}=0.3391, E_{FGG}=0.0191。结合图 3 所示的曲线分布差异和光谱标准偏差的 计算结果,可以看出使用 FFT 方法对非线性干涉信号直接进行复原,重建光谱分布存在一定的偏移和畸变, 其光谱复原的误差很大。而采用 FGG 法重建的光谱分布与原始光谱分布基本一致,其光谱复原精度很高。 上述仿真结果表明,FGG 能够精确复原光程差非线性采样情况下的光谱分布。





Fig. 3 Spectrum distribution obtained by two recovery methods

4 实验与分析

4.1 实验装置

为了验证 FGG 法对实际干涉信息进行光谱复原的有效性,搭建了基于双折射偏振干涉的光谱测量实验装置,如图 4 所示。该装置由散射器(S)、横向剪切分束器和成像系统组成。其中,横向剪切分束器由偏振分束器(PBS)、Wollaston 棱镜(WP)和角锥反射体(R)组成,成像系统由成像物镜(L)和探测器(D)组成。实验装置 的工作 波段 为 430 ~ 650 nm; PBS 的尺寸为 25 mm × 25 mm × 25 mm; WP 的尺寸为 14 mm×14 mm×5 mm,它的光轴与 x 轴的夹角为 45°;角锥的直径为 12.7 mm;成像物镜的焦距为 75 mm;探测器为 CMOS 相机(型号:PCO.edge4.2M),它与系统光轴垂直并且水平倾斜 45°放置,图像分辨率为 2048 pixel×2048 pixel,像元大小为 6.5 μ m。当待测光束入射至散射器后,在探测器靶面上形成二维分布的干涉图像。进行光谱复原时,首先提取单幅干涉图像中任意一行的干涉数据,然后对其作傅里叶变换,得到对应光束的光谱信息。



图 4 基于双折射偏振干涉的光谱测量装置示意图

Fig. 4 Diagram of spectral measurement setup based on birefringent polarization interference

4.2 采样间隔定标

在双折射横向剪切干涉中,光程差分布与光束视场角存在非线性关系,因此图像中任意一行的干涉数据 为非均匀采样^[6]。利用 FGG 法进行光谱复原,需要对干涉数据的采样间隔进行定标处理。实验中采用波 长为 654.5 nm 的激光照射散射片以获得单色光的干涉信号,再利用傅里叶变换相位解调方法求得光程差的 非线性采样曲线^[13],如图 5 所示。



Fig. 5 Nonlinear sampling curves of OPD

4.3 光谱测量实验

利用上述的实验装置和采样间隔定标曲线,对绿色 LED 光源进行了光谱测量验证。为了比较测量结果,首先利用光纤光谱仪(USB4000,海洋光学公司)对 LED 光源进行光谱测量,得到的光谱分布曲线如图 6 所示,该光谱分布作为 FFT 和 FGG 两种测量方法的比较基准。

采用图 4 装置测量绿色 LED 光源,得到的干涉图像和经过预处理的干涉数据分别如图 7(a)、(b)所示。 利用 FFT 和 FGG 法分别对该干涉数据进行反演计算,所复原的光谱分布如图 8 所示。为了便于对结果作 比较,重新计算光谱仪得到的光谱分布,由原来的波长域分布变换至波数域^[14]。从图 8 中可以看出,相较于 FFT 法,FGG 法复原得到的分布曲线更接近于光谱仪的测量结果。实验结果表明,利用 FGG 法能够更加 有效地复原光程差非线性采样情况下的光谱分布。









图 7 (a)采集的干涉图像;(b)经过预处理的干涉数据

Fig. 7 (a) Interferogram collected; (b) interference data obtained by preprocessing



图 8 FFT 和 FGG 法复原得到的光谱分布与原始光谱分布的对比图

Fig. 8 Comparison of recovered spectrum distributions by FFT and FGG methods with original spectrum

5 结 论

详细研究了基于 FGG 法进行非线性光谱复原的算法理论,对干涉数据非线性采样条件下的 FFT 和 FGG 复原方法进行了仿真分析。搭建了基于双折射干涉原理的傅里叶变换光谱仪装置,采用傅里叶变换相 位解调方法求得光程差的非线性采样曲线,对绿色 LED 光源进行光谱测量验证。实验结果表明,FGG 能够 有效地解决傅里叶变换光谱仪中的非线性光谱复原问题,并且具有复原精度高、运算量低等优点。

参考文献

- Griffiths P R, de Haseth J A. Fourier transform infrared spectrometry [M]. 2nd edition Hoboken: John Wiley & Sons, 2007.
- 2 Wadsworth W, Dybwad J P. Ultra high-speed chemical imaging spectrometer[C]. SPIE, 1997, 3082: 148-154.

- 3 Griffiths P R, Hirsche B L, Manning C J. Ultra-rapid-scanning Fourier transform infrared spectrometry[J]. Vibrational Spectroscopy, 1999, 19(1): 165-176.
- 4 Cabib D, Buckwald R A, Garini Y, *et al*. Spatially resolved Fourier transform spectroscopy (spectral imaging): a powerful tool for quantitative analytical microscopy[C]. SPIE, 1996, 2678: 278-291.
- 5 Zhang C M, Xiangli B, Zhao B C, et al. A static polarization imaging spectrometer based on a Savart polariscope [J]. Optics Communications, 2002, 203(1-2): 21-26.
- 6 Harvey A R, Fletcher-Holmes D W. Birefringent Fourier-transform imaging spectrometer [J]. Optics Express, 2004, 12 (22): 5368-5374.
- 7 Li Jianxin, Meng Xin, Zhou Wei, *et al*. Image plane interferometric hyperspectral imaging based on reimaging[J]. Acta Optica Sinica, 2012, 32(12): 1230001.

李建欣, 孟 鑫, 周 伟, 等. 基于二次成像的像面干涉高光谱成像方法[J]. 光学学报, 2012, 32(12): 1230001.

- 8 Jing Juanjuan, Zhou Jinsong, Xiangli Bin, *et al*. Comparison of correction methods for nonlinear optic path difference of reflecting rotating Fourier transform spectrometer[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2010, 30(6): 1678-1682. 景娟娟,周锦松,相里斌,等. 反射转镜式干涉光谱仪光程差非线性修正方法比较[J]. 光谱学与光谱分析, 2010, 30 (6): 1678-1682.
- 9 Zhang Minjuan, Wang Zhaoba, Wang Zhibin, *et al*. Fast spectral rebuild garithmetic of PEM-FTS nonlinear phase interferogram data[J]. Chinese J Lasers, 2013, 40(5): 0515001.
 张敏娟, 王召巴, 王志斌, 等. PEM-FTS 非线性干涉信号的快速光谱反演算法[J]. 中国激光, 2013, 40(5): 0515001.
- 10 Wang Mingyan, Wang Zhibin, Zhang Jilong, et al. Research for fast spectrum recovery algorithm of PEM nonequiphase phase interference signal[J]. Acta Optica Sinica, 2012, 32(5): 0507001.

王明艳, 王志斌, 张记龙, 等. 弹光调制非等相位干涉信号的快速光谱反演算法[J]. 光学学报, 2012, 32(5): 0507001.

- 11 Dutt A, Rokhlin V. Fast Fourier transforms for nonequispaced data[J]. SIAM Journal on Scientific Computing, 1993, 14 (6): 1368-1393.
- 12 Greengard L, Lee J Y. Accelerating the nonuniform fast Fourier transform[J]. SIAM Review, 2004, 46(3): 443-454.
- 13 Takeda M, Ina H, Kobayashi S. Fourier-transform method of fringe-pattern analysis for computer-based topography and interferometry[J]. Journal of the Optical Society of America, 1982, 72(1): 156-160.
- 14 Zhao Baochang, Yang Jianfeng, Xue Bin, *et al*. Calibration of Chang'E-1 satellite interference imaging spectrometer[J]. Acta Photonica Sinica, 2010, 39(5): 769-775.
 赵葆常,杨建峰,薛 彬,等. 嫦娥一号干涉成像光谱仪的定标[J]. 光子学报, 2010, 39(5): 769-775.

093003-7