第5卷 第4期 光学学报 Vol. 5, No. 4
1985年4月 ACTA OPTICA SINICA April, 1985

条纹分析中一种简单的 Zernike 多项式拟合方法

刘月爱
(中国科学院光电技术研究所)

提要

本文介绍了一种实现干涉条纹Zernike多项式拟合的简单算法。该算法虽然仍是基于 Gram-Schmidt 正交化方法，但用该算法求解 Zernike 系数时并不需要经过正交化过程，而是用谱 Zernike 多项式的协方差矩阵的线性变换来直接求解。因而它很适合于编写拟合过程的计算机程序，是一种比较理想的实现 Zernike 多项式拟合的算法。

一、引　言

随着现代科学技术的迅猛发展，对光学元件加工精度要求越来越高。传统的只从干涉条纹分布来简单地估计波面质量，已不能满足精密光学检测的要求。因此，用电子计算机对干涉条纹进行精密定量分析就显得越来越重要了。

在用计算机分析干涉条纹时，往往是对被检波面多点采样，并用一个多项式来拟合这些数据点。一个较适用的拟合多项式为 Zernike 多项式。该多项式的指导思想是将一个任意波面看作由无穷多个基面的线性组合[1]而成，即：$W=a_0+a_1s_1+a_2s_2+\cdots+a_js_j+\cdots$，中式 s_j 表示各基面，其表达式参见文献[5]。系数 a_j 为相应的权因子，它们都为常数。

应该指出，s_j 为定义在单位圆上的正交多项式，因而实际光瞳都要经过归一化后方可进行 Zernike 多项式拟合。

二、算法的推导

要求解系数 $a_j(j=1,\ \cdots,\ n)$，可以直接使用最小二乘法，但这种方法求得的解在数值上是不稳定的。虽然增加抽样点数可以改善这种情况，但这又带来了计算量增大的问题[2]。本文介绍的方法是基于 Gram-Schmidt 正交化方法来求解。

假若用前 n 项 Zernike 多项式来表示波面，则对于 N 次测量，有

$$W_i=a_0+a_1s_{1i}+a_2s_{2i}+\cdots+a_js_{ji}+\cdots+a_ns_{ni},\quad (i=1,\ \cdots,\ N\ 而且\ N>n) \tag{1}$$

其中 s_{ji} 表示 s_j 在第 i 个测量点上的值。求 N 次测量的平均值：

$$\overline{W}=a_0+a_1\bar{s}_1+a_2\bar{s}_2+\cdots+a_j\bar{s}_j+\cdots+a_n\bar{s}_n, \tag{2}$$

这里变量 s_j 的平均值 $\bar{s}_j$ 定义为：$\bar{s}_j=\dfrac{1}{N}\sum\limits_{i=1}^{N}s_{ji}$，

收稿日期：1984年6月1日；收到修改稿日期：1984年10月4日

从(1)中减去(2)，并令 $U_{mi}=W_i-\overline{W}$ 及 $U_{ji}=s_{ji}-\bar{s}_j$，则有：

$$U_{mi}=a_1U_{1i}+a_2U_{2i}+\cdots+a_jU_{ji}+\cdots+a_nU_{ni},\quad (i=1,\ \cdots N)。$$

现在，我们按照 Gram-Schmidt 正交法，以 U_j 的线性组合来重构一个在数据点上正交的多项式 P_j[4]，并使得 $U_m=C_1P_1+C_2P_2+\cdots+C_jP_j+\cdots+C_nP_n$。该式用矩阵形式表示为：

$$U_m=(C_1C_2\cdots C_n)\begin{pmatrix}P_1\\P_2\\\vdots\\P_n\end{pmatrix}, \tag{3}$$

P_k 和 P_j 的正交性可以表示为：

$$\sum_{i=1}^{N}P_{ji}P_{ki}=0,\quad j\neq k, \tag{4}$$

我们按照下式来构造 P_j

$$\begin{pmatrix}U_1\\U_2\\\vdots\\U_n\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1 & & & 0\\\alpha_{21} & 1 & & \\\cdots & \cdots & \ddots & \\\alpha_{n1} & \alpha_{n2} & \cdots & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}P_1\\P_2\\\vdots\\P_n\end{pmatrix}, \tag{5}$$

因为 $P_{1i}P_{2i}$ 为正交，即：

$$\sum_{i=1}^{N}P_{1i}P_{2i}=\sum_{i=1}^{N}U_{2i}P_{1i}-\alpha_{21}\sum_{i=1}^{N}P_{1i}P_{1i}=0,$$

$$\therefore\quad \alpha_{21}=\sum_{i=1}^{N}U_{2i}P_{1i}\Big/\sum_{i=1}^{N}P_{1i}P_{1i},$$

同样有：

$$\sum_{i=1}^{N}P_{1i}P_{3i}=\sum_{i=1}^{N}U_{3i}P_{1i}-\alpha_{32}\sum_{i=1}^{N}P_{2i}P_{1i}-\alpha_{31}\sum_{i=1}^{N}P_{1i}P_{1i}$$

$$=\sum_{i=1}^{N}U_{3i}P_{1i}-\alpha_{31}\sum_{i=1}^{N}P_{1i}P_{1i}=0,$$

$$\therefore\quad \alpha_{31}=\sum_{i=1}^{N}U_{3i}P_{1i}\Big/\sum_{i=1}^{N}P_{1i}P_{1i}。$$

同理得：

$$\alpha_{32}=\sum_{i=1}^{N}U_{3i}P_{2i}\Big/\sum_{i=1}^{N}P_{2i}P_{2i},$$

余此类推，可得：

$$\alpha_{jk}=\sum_{i=1}^{N}U_{ji}P_{ki}\Big/\sum_{i=1}^{N}P_{ki}P_{ki},\quad j>k, \tag{6}$$

又根据(5)式有

$$\alpha_{jk}=1,\quad j=k, \tag{7}$$

$$\alpha_{jk}=0,\quad j<k。 \tag{8}$$

这样所有的 α_{jk} 都依次求出，这时 $P_j(j=1,\cdots,n)$ 即为已知。之后，再用最小二乘法来解系数 $C_j(j=1,\ \cdots,\ n)$ 即要求使方差：

$\sigma^2=\dfrac{1}{N}\sum\limits_{i=1}^{N}\left(U_{mi}-\sum\limits_{j=1}^{N}C_jP_{ji}\right)^2$，为最小时系数 C_j 的值。

令 $\dfrac{\partial\sigma^2}{\partial C_j}=-\dfrac{2}{N}\sum\limits_{i=1}^{N}P_{ji}\left(U_{mi}-\sum\limits_{j=1}^{n}C_jP_{ji}\right)=\dfrac{-2}{N}\sum\limits_{i=1}^{N}(U_{mi}P_{ji}-C_jP_{ij}^2)=0$，得：

$$C_j=\sum_{i=1}^{N}U_{mi}P_{ji}\Big/\sum_{i=1}^{N}P_{ji}P_{ji}。\tag{9}$$

将(5)式代入下式

$$U_m=(a_1\,a_3\cdots a_n)\begin{pmatrix}U_1\\U_2\\\vdots\\U_n\end{pmatrix},$$

得到:

$$U_m=(a_1\,a_2\cdots a_n)\begin{pmatrix}1 & & & 0\\\alpha_{21} & 1 & & \\\cdots & \cdots & \ddots & \\\alpha_{n1} & \alpha_{n2} & \cdots & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}P_1\\P_2\\\vdots\\P_n\end{pmatrix}。$$

将上式与(3)式相比较,得

$$(C_1C_2\cdots C_n)=(a_1a_2\cdots a_n)\begin{pmatrix}1 & & & 0\\\alpha_{21} & 1 & & \\\cdots & \cdots & \ddots & \\\alpha_{n1} & \alpha_{n2} & \cdots & 1\end{pmatrix},\tag{10}$$

据此,我们可以写出 a_j 的代数表示式

$$\left.\begin{aligned}&a_n=C_n,\\&a_j=C_j-\sum_{i=j+1}^{n}\alpha_{ij}a_i,\quad (j=1,\ 2,\ \cdots,\ n-1)\end{aligned}\right\}\tag{11}$$

由(2)式又可得

$$a_0=\overline{W}-\sum_{j=1}^{n}a_j\bar{s}_j,\tag{12}$$

至此, Zernike 表达式就完全求得。现在我们以 $n=2$ 为例来实施一下拟合过程。

$$U_3=a_1U_1+a_2U_2,$$

$$\alpha_{21}=\sum_{i=1}^{N}U_{2i}U_{1i}\Big/\sum_{i=1}^{N}U_{1i}U_{1i}=\frac{A_{12}}{A_{11}}。$$

其中 A_{ij} 表示 s_i 与 s_j 的协方差,当然也就是 U_i 与 U_j 的协方差:

$$A_{ij}=\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N}U_{ik}U_{jk}=\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N}(s_{ik}-\bar{s}_i)(s_{jk}-\bar{s}_j)=\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N}s_{ik}s_{jk}-\bar{s}_i\bar{s}_j,$$

$$C_1=\sum_{i=1}^{N}U_{3i}U_{1i}\Big/\sum_{i=1}^{N}U_{1i}U_{1i}=A_{13}/A_{11},$$

$$C_2=\sum_{i=1}^{N}U_{3i}P_{2i}\Big/\sum_{i=1}^{N}P_{2i}P_{2i}=\frac{A_{32}A_{11}-A_{12}A_{31}}{A_{22}A_{11}-A_{12}A_{21}}。$$

根据(11)式有:

$$a_2=C_2=(A_{32}A_{11}-A_{12}A_{31})/(A_{22}A_{11}-A_{12}A_{21}),$$

$$a_1=C_1-\alpha_{21}C_2=(A_{13}A_{22}-A_{23}A_{12})/(A_{22}A_{11}-A_{12}A_{21})。$$

$n=2$ 时的协方差矩阵为:

$$\begin{pmatrix}A_{11} & A_{12} & A_{13}\\A_{21} & A_{22} & A_{23}\\A_{31} & A_{32} & A_{33}\end{pmatrix},$$

按照协方差的定义，有 $A_{ij}=A_{ji}$，
对上述矩阵进行线性变换可得

$$\begin{pmatrix} 1 & A_{12}/A_{11} & A_{13}/A_{11} \\ 0 & 1 & \dfrac{A_{23}A_{11}-A_{13}A_{21}}{A_{22}A_{11}-A_{21}A_{12}} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{pmatrix},$$

显然其前两行所组成的矩阵恰是矩阵

$$\begin{pmatrix} 1 & \alpha_{21} & C_1 \\ 0 & 1 & C_2 \end{pmatrix}。$$

因此，当 $n=2$ 时协方差矩阵的前两行所组成的矩阵就是关于 a_1、a_2 的线性方程系统的增广矩阵。

不难推证，当 $n=3$ 时，协方差矩阵的前三行所组成的矩阵也是解线性方程系统的增广矩阵，因此有下述推论：

推论：

用 Gram-Schmidt 最小二乘法进行 n 项 Zernike 多项式拟合时，协方差矩阵的前 n 行所组成的矩阵

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1n} & A_{1n+1} \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2n} & A_{2n+1} \\ & & \cdots & & \\ A_{n1} & A_{n2} & \cdots & A_{nn} & A_{nn+1} \end{pmatrix}$$

就是解线性方程系统的增广矩阵。

证明：

我们用数学归纳法来证明上述推论成立。

前面已证得 $n=2$ 时推论成立。

设 $n=k$ 时推论亦成立，则

$$\begin{pmatrix} 1 & b_{12} & \cdots & b_{1k-1} & b_{1k} \\ 0 & 1 & \cdots & b_{2k-1} & b_{2k} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & b_{k-1k} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \alpha_{21} & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \alpha_{k-11} & \alpha_{k-12} & \cdots & 1 & 0 \\ \alpha_{k1} & \alpha_{k2} & \cdots & \alpha_{kk-1} & 1 \end{pmatrix}^T,$$

右上角的 T 表示转置。

及：

$$\begin{pmatrix} b_{1k+1} \\ b_{2k+1} \\ \vdots \\ b_{kk+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ \vdots \\ C_k \end{pmatrix}。$$

前一等式的左方矩阵表示三角化后的协方差矩阵的前 k 行与前 k 列上的元素所组成的矩阵。后一等式的左方矩阵表示协方差矩阵的第 $k+1$ 列上的前 k 个元素所组成的矩阵。

当 $n=k+1$ 时若推论成立，则：

$$\begin{pmatrix} 1 & b_{12} & \cdots & b_{1k} & b_{1k+1} \\ 0 & b & \cdots & b_{2k} & b_{2k+1} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & b_{kk+1} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \alpha_{21} & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \alpha_{k1} & \alpha_{k2} & \cdots & 1 & 0 \\ \alpha_{k+11} & \alpha_{k+12} & \cdots & 0 & 1 \end{pmatrix}^T,$$

及：

$$\begin{pmatrix} b_{1k+2} \\ b_{2k+2} \\ \vdots \\ b_{k+1k+2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ \vdots \\ C_{k+1} \end{pmatrix}。$$

事实上，前面已假定 $n=k$ 时推论是成立的，因此这里只要证明：

$$\left.\begin{aligned} b_{ik+1} &= \alpha_{k+1i} \\ b_{ik+2} &= C_i \end{aligned}\right\} \quad (i=1,\ 2,\cdots,k+1)$$

就可以了。

$$\because \quad b_{1k+1} = \frac{A_{1k+1}}{A_{11}},$$

$$\alpha_{k+11} = \sum_{i=1}^{N} U_{k+1i} U_{1i} \Big/ \sum_{i=1}^{N} U_{1i} U_{1i} = \frac{A_{1k+1}}{A_{11}},$$

$$\therefore \quad b_{1k+1} = \alpha_{k+11}。$$

又 $\qquad \because \quad b_{2k+1} = (A_{2k+1}A_{11} - A_{k+11}A_{12})/(A_{22}A_{11} - A_{12}A_{21}),$

及 $\qquad \alpha_{k+12} = \sum_{i=1}^{N} U_{k+1i} P_{2i} \Big/ \sum_{i=1}^{N} P_{2i} P_{2i} = \dfrac{A_{k+12}A_{11} - A_{12}A_{k+11}}{A_{22}A_{11} - A_{12}A_{21}},$

$$\therefore \quad b_{2k+1} = \alpha_{k+12}。$$

余此类推，不难证得 $b_{ik+1} = \alpha_{k+1i} (i=1,\ 2,\cdots,k+1)$，

同理可证：$b_{ik+2} = C_i (i=1,\ 2,\cdots,k+1)$，因此，上述推论成立。

现在讨论拟合的精度问题。在 $n=2$ 时，数据点相对于拟合出的曲面的方差为：

$$\begin{aligned} \sigma_2^2 &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (U_{mi} - C_1 P_{1i} - C_2 P_{2i})^2 \\ &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (U_{mi}^2 - 2C_1 P_{1i} U_{mi} + C_1^2 P_{1i}^2 - 2C_2 P_{2i} U_{mi} + C_2^2 P_{2i}^2) \\ &= A_{mm} - 2C_1 A_{mm} + C_1 \frac{A_{m1}}{A_{11}} A_{11} - 2C_2 (A_{m2} - \alpha_{21} A_{m1}) \\ &\quad + C_2 \frac{A_{11}A_{m2} - A_{12}A_{m1}}{A_{22}A_{11} - A_{12}A_{21}} \cdot \frac{A_{22}A_{11} - A_{12}A_{21}}{A_{11}} \\ &= A_{mm} - C_1 A_{m1} - C_2 (A_{m2} - \alpha_{21} A_{m1}) \\ &= A_{mm} - (a_1 + a_2 \alpha_{21}) A_{m1} - a_2 (A_{m2} - \alpha_{21} A_{m1}) = A_{mm} - a_1 A_{m1} - a_2 A_{m2}。 \end{aligned}$$

当 $n=3$ 时的方差为：

$$\begin{aligned} \sigma_3^2 &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (U_{mi} - C_1 P_{1i} - C_2 P_{2i} - C_3 P_{3i})^2 \\ &= A_{mm} - C_1 A_{m1} - C_2 (A_{m2} - \alpha_{21} A_{m1}) - C_3 [A_{m3} - \alpha_{32} (A_{m2} - \alpha_{21} A_{m1}) - \alpha_{31} A_{m1}] \\ &= A_{mm} - a_1 A_{m1} - a_2 A_{m2} - a_3 A_{m3}, \end{aligned}$$

余此类推可有：$\sigma_n^2 = \dfrac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \left(U_{mi} - \sum_{j=1}^{n} C_i P_{ji} \right)^2 = A_{mm} - \sum_{j=1}^{n} a_j A_{mj},$

因此 n 项拟合的方差为：$\sigma_n^2 = A_{mm} - \sum_{j=1}^{n} a_j A_{mj}$。

三、结　论

该方法经过实际计算应用，证明是可靠的，与一般多项式带权最小二乘法[3]相比，它具有一次性求解 Zernike 多项式系数的优点。并且用本文所提出的方法求解 Zernike 系数要比用带权最小二乘法求解一般多项式系数来得简单，因为它只需要把协方差矩阵当作解线性方程系统的增广矩阵就可求得 Zernike 系数。而且求解拟合方差也是比较简便的。因此，该方法不失为一种较理想的求解 Zernike 多项式系数的方法。

本文在写作过程中得到宋从武老师的热心指导和认真审阅，在此特表示衷心感谢。

参 考 文 献

[1] John Loomis; «*FRINGE User's Manual*», (Version 2 Optical Science Center University of Arizona Nov. 1976).
[2] J. Y. Wang and D. E. Silva; *Appl. Opt.*, 1980, **19**, No. 9, 1510.
[3] 伍树东，郑辉；«光学学报», 1983, **3**, No. 9 (Dec).
[4] A. H. Guenther and D. H. Liebenberg; «*Optical Interferograms—Reduction and Interpretation*», (American Society for Testing and Materials Baltimore, Md, 1978), 71.
[5] D. Malacara; «*Optical Shop Testing*», (New York 1978), 493.

A simple method for Zernike polynomial fitting in fringe analysis

LIU YUEAI
(*The Institute of Optics and Electronics, Academia Sinica*)

(Received 1 June 1984; revised 4 October 1984)

Abstract

A simple method for Zernike polinomial fitting in fringe analysis is given. Though the method is still based on a Gram-Schmidt orthogonalizing technique, it is not necessary to orthogonalize the polynomials during fitting. The linear transposition of the covariance matrix of the polynomials can work out the Zernike coefficinces directly. So it offers a better algorithm to Zernike polynomial fitting.