

研究傅里叶变换光谱超分辨率的一种新方法

相里斌 赵葆常 薛鸣球

(中国科学院西安光学精密机械研究所, 西安 710068)

摘 要 应用傅里叶退卷积、自回归模型与截断奇异值分解相结合的方法(简称为FAT方法), 获得了比采用常规变换方法高得多的光谱分辨率。与研究光谱超分辨率的其它方法相比, 用FAT方法进行光谱超分辨率估计, 有分辨率高、谱线细锐、抗噪声能力强和无伪峰等许多优点。

关键词 光谱超分辨率, 傅里叶退卷积, 自回归模型, 截断奇异值分解。

1 引 言

在光谱学的研究中, 人们提出了许多种光谱复原与估计的方法, 尤其是在70年代以来, 随着信息论的不断发展, 使用最大熵方法(MEM)进行光谱超分辨率的研究出现了高潮^[1]。利用最大熵方法能够得到较为客观的估计光谱, 并且实现很高的分辨率, 但同时也存在峰高比变化、抗噪声能力差和伪峰等许多问题^[2]。文献[3]采用了截断奇异值分解与自回归模型相结合的办法, 使光谱估计方法的抗噪声能力大大提高, 基本解决了伪峰问题, 但估计谱峰形较宽、信噪比较低。本文的文献[3]的基础上, 增加了傅里叶退卷积技术, 进一步提高了估计谱的分辨率和信噪比, 峰线位置也更加准确。另外, 由于傅里叶退卷积技术的引入, 使光谱估计过程中出现了光谱线型信息, 从而使对估计谱形状及峰高比的修正成为可能。

2 基本原理

2.1 傅里叶退卷积(FSD)^[4, 5]

在傅里叶变换光谱术中有人们熟知的如下关系:

$$B(\nu) = \int_{-\infty}^{\infty} I(x) \exp(-j2\pi\nu x) dx = F\{I(x)\} \quad (1)$$

$$I(x) = \int_{-\infty}^{\infty} B(\nu) \exp(j2\pi\nu x) d\nu = F^{-1}\{B(\nu)\} \quad (2)$$

其中 $F\{\cdot\}$ 表示傅里叶变换, $F^{-1}\{\cdot\}$ 表示逆傅里叶变换, x 和 ν 分别为光程差和波数。

假设傅里叶退卷积的输入光谱 $B_i(\nu)$ 是由具有线型 $S_i(\nu)$ 的谱线所组成的, 如果希望这些输入线型在经过傅里叶退卷积后, 成为具有期望线型 $S_0(\nu)$ 的输出光谱 $B_0(\nu)$, 则可以采用如下方法:

$$B_0(\nu) = F^{-1}\left\{F\{B_i(\nu)\} \frac{F\{S_0(\nu)\}}{F\{S_i(\nu)\}}\right\}. \quad (3)$$

由输出线型 $S_0(\nu)$ 和输入线型 $S_i(\nu)$ 定义线型细化系数 K , 也称为分辨率增强因子:

$$K = \text{FWHM}[S_i(\nu)] / \text{FWHM}[S_0(\nu)]. \quad (4)$$

其中 $\text{FWHM}[S_i(\nu)]$ 和 $\text{FWHM}[S_0(\nu)]$ 分别代表 $S_i(\nu)$ 及 $S_0(\nu)$ 的半高宽。特别当 $S_0(\nu)$ 为 δ 函数时, 退卷积后干涉图将变形为由振幅不衰减的余弦或正弦函数所组成, 这对其后的预测回归估计是最有利的。

实际上, 在作者进行光谱估计时, 一般总是取 $S_0(\nu)$ 为 δ 函数, 这将使估计谱的修正变得更容易, 结果也更准确。关于估计谱修正的方法及结果将另做介绍。

2.2 自回归(AR)模型与谱估计^[6]

一般地, 一个线性系统的输出能够表示为系统脉冲响应函数与其输入的卷积:

$$O(t) = H(t) * A(t). \quad (5)$$

对傅里叶变换光谱仪来说, 与(5)式对应, 干涉强度分布表达式可表示成:

$$I'(x) = a(x) * I(x). \quad (6)$$

其离散形式的卷积算式为:

$$I'_i = \sum_{k=1}^P a_k I_{i-k}, \quad (i = P+1, P+2, \dots, N) \quad (7)$$

其中 P 是脉冲响应函数序列 a_k 的元素数目, N 是干涉图采样点数。(7)式正好与 P 阶自回归模型相符 a_k 是该模型的系数。对(6)式两边作傅里叶变换, 得:

$$B'(v) = F\{a(x)\} B(v)$$

因: $B'(v) = B(v) - \varepsilon(v)$

有: $B(v) = F\{a(x)\} B(v) + \varepsilon(v) \quad (8)$

式中的 $\varepsilon(v)$ 表示噪声谱。由(8)式可以得到输入光谱的估计式:

$$|B(v)| = \frac{|\varepsilon(v)|}{|1 - \sum_{k=1}^P a_k \exp(j2k\pi\nu\Delta x)|} \approx \frac{\sigma}{|1 - \sum_{k=1}^P a_k \exp(j2k\pi\nu\Delta x)|} \quad (9)$$

式中 $|\cdot|$ 表示取模, σ 是噪声谱 $\varepsilon(v)$ 的均方差, Δx 是干涉图采样间隔, $\Delta x = 1/2\nu_{\max}$ 。

所以只要能够求出回归系数 a_k , 就可以对光谱做出估计。

2.3 截断奇异值分解(TSVD)^[7]

回归系数 a_k 可用截断奇异值分解方法求得。事实上, (7)式可表示成如下矩阵形式:

$$VI = MI \cdot VA \quad (10)$$

其中:

$$VI = (I_{P+1}, I_{P+2}, \dots, I_N)^t, \quad t \text{ 表示转置(下同)}, \quad VA = (a_P, a_{P-1}, \dots, a_1)^t,$$

$$MI = \begin{bmatrix} I_1 & \dots & \dots & \dots & I_P \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ I_{N-P} & \dots & \dots & \dots & I_{N-1} \end{bmatrix}.$$

则: $VA = MI^+ \cdot VI \quad (11)$

这里 MI^+ 是矩阵 MI 的广义逆矩阵, 可表示为:

$$MI^+ = \sum_{i=1}^r \frac{1}{\lambda_i} (V_i U_i^t) \quad (12)$$

λ_i 、 U_i 和 V_i 分别是矩阵 MI 的奇异值与左右奇异向量， T 为截断水平，即丢弃 λ_{T+1} 、 λ_{T+2} 、 \dots 等这些较小的奇异值及对应的奇异向量(设 λ 按降序排列，下同)，便可获得向量 VA 的稳定解。

3 FAT 方法参数的确定及计算机实验

FAT 的参数主要有回归阶数 P 和截断水平 T ，其确定规则可归纳如下：

1) $2F \leq P \leq N/2$ ； F 为谱峰的个数，条件 $P \leq N/2$ 是由截断奇异值分解方法决定的。一般，为了兼顾分辨率和信噪比， P 值取在 $N/3$ 附近比较好，当噪声较大时， P 值应稍小一些，噪声较小时， P 值可取到上限，即 $N/2$ 。

2) T 可以通过分析奇异值曲线得到。图 1 是任一假设光谱及其估计过程中得到的奇异值曲线，可以明显地看出在 λ_{11} 点，奇异值突然减小到接近于 0，故截断水平 $T = 10$ 。又因为每一个谱峰对应着两个奇异值^[3]，所以谱峰个数 F 也可以同时确定，即 $F = 5$ 。

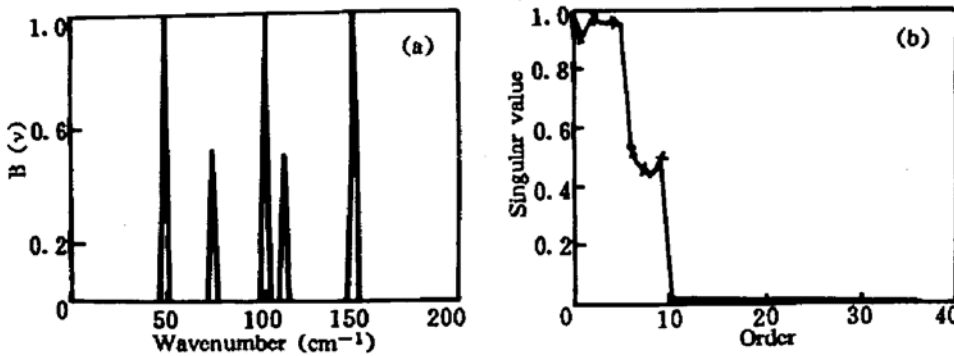


Fig. 1 The spectra and corresponding singular values ($x_{max} = 0.2$ cm, $P = 36$, p-p noise = 10^{-2})

(a) original spectra, (b) singular value

实验中还发现，由矩阵 MI 的条件数和干涉图的信噪比 R 也能够确定截断水平 T ^[8]。矩阵 MI 的条件数定义为：

$$D_i = \lambda_1 / \lambda_i \tag{13}$$

则当 $D_i \geq R$ 时， $T = i - 1$ 。

下列图形就是利用 FAT 方法进行计算机模拟的结果，其中干涉图采样点数均为 80。图 2 是回归阶数 P 取不同值时，估计谱的变化情况，其中(a)图为原光谱。可以看出，随着 P 值从大到小变化，估计谱中的噪声越来越小，分辨率也越低，谱线变得越来越平滑，但总的说来，当 P 值在一个较大范围内变化时($P = 40 \sim 20$)，对估计谱的影响并不十分严重。图 3 是同一光谱在噪声强度变化时的复原情况，可见噪声越大，估计谱的分辨率和信噪比越差。图 3 还反映出 FAT 方法有很强的抗噪声能力，即使在噪声水平与小峰高度差不多时，仍能较好地估计出小峰，并且不出现伪峰。图 4 是本文介绍的 FAT 方法与文献[3]方法的比较，可以看出，用文献[3]的方法所获得的估计谱谱线较宽，信噪比较低，而用 FAT 方法得到的估计谱则十分清晰。图 5 是采用不同方法时得到的复原或估计谱，其中(b)是用傅里叶变换方法复原的光谱，四条谱线已无法分辨，(c)是使用文献[3]中的方法获得的估计谱，(d)是用 FAT 方法估计的光谱，分辨率更高。

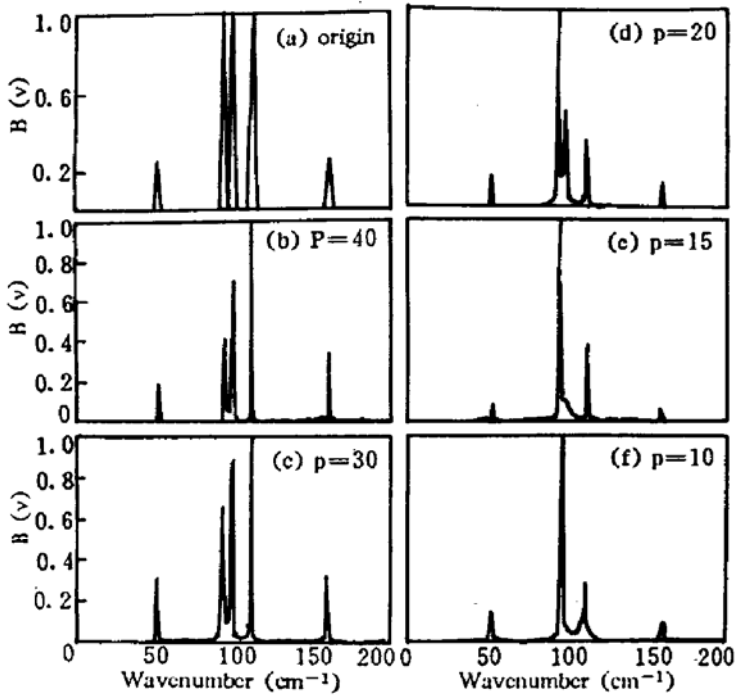


Fig. 2 Estimated spectra under different AR order P ($x_{\max} = 0.2$ cm, $T = 10$, p-p noise $= 5 \times 10^{-2}$)

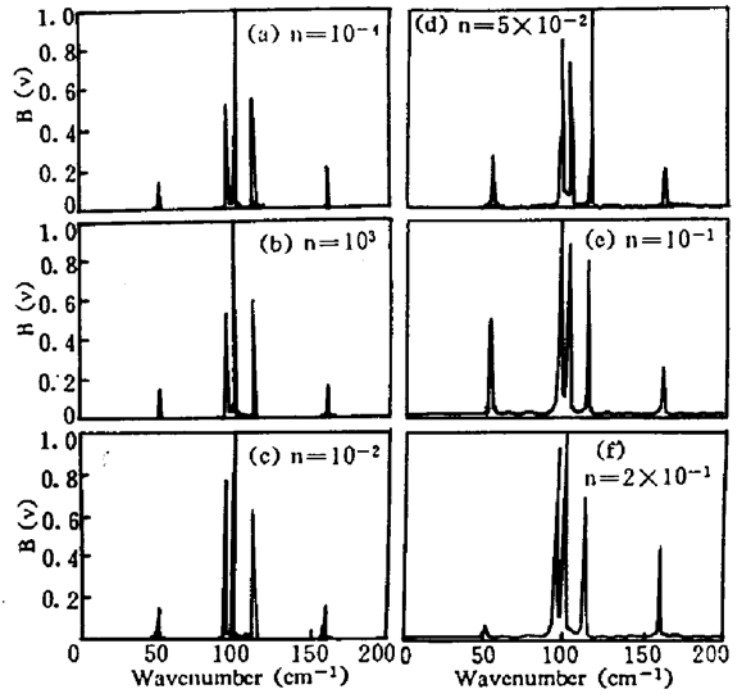


Fig. 3 Estimated spectra under different noise level ($x_{\max} = 0.2$ cm, $P = 36$, $T = 10$)

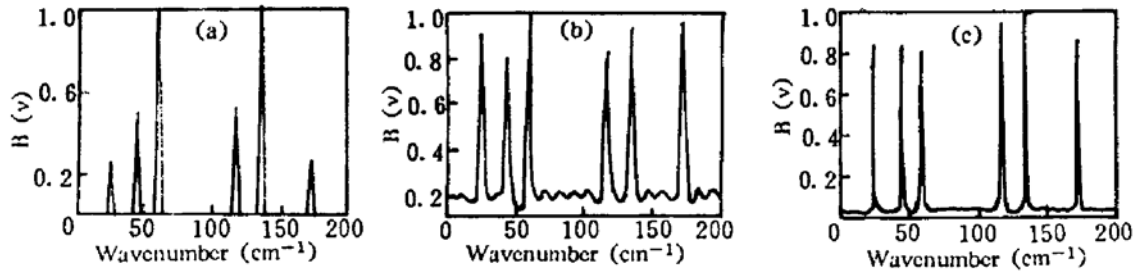


Fig. 4 Comparison of the estimated spectra by FAT and the method proposed in reference [3] ($x_{\max} = 0.2$ cm, $P = 36$, $T = 12$, p-p noise $= 1 \times 10^{-2}$) (a) The origin, (b) By [3] method, (c) By FAT

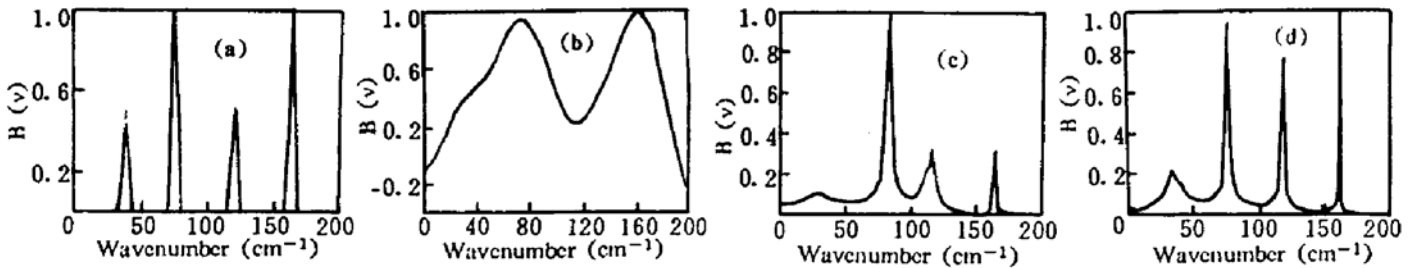


Fig. 5 Comparison of the recovered/estimated spectra by different methods ($x_{\max} = 0.02$ cm, $P = 36$, $T = 8$, p-p noise $= 10^{-5}$) (a) The origin, (b) By FT, (c) By [3] method, (d) By FAT

4 FAT 方法的特点

FAT 方法的优点归结起来主要有: 1) 估计谱具有更高的分辨率和信噪比, 峰线位置也非常准确。这是因为经(3)式退卷积后的干涉图成为仅包含振幅不衰减的余弦或正弦函数的形式, 这样会提高预测回归精度, 并且得到的估计谱是由线型为近似 δ 函数的谱线所组成的。这种高精度的预测回归和足够细锐的输出线型保证了估计谱的高分辨率、高信噪比和准确的谱线位置; 2) 光谱估计过程中引入了光谱线型信息, 因此有可能实现对估计谱形状和峰高比的修正; 3) 由于截断奇异值分解方法固有的滤波性质, 使 FAT 方法具有比最大熵方法更强

的抗噪声能力；4) 通过对奇异值变化规律的分析 and 处理，可以很容易地确定截断水平 T ，并可准确地判断或选择估计谱峰的数目；5) 自回归模型的阶数 P 对估计谱的影响不大。

另一方面，FAT 方法也存在一些不足：1) 由于使用了截断奇异值分解方法，对计算机容量的要求很高。当然，随着计算机技术的飞速发展，这一问题将迎刃而解；2) 由于截断奇异值分解方法不便于理论推导，所以 FAT 的许多性质很难由理论分析得到，只有通过大量的数字实验来归纳总结。

结 论 介绍了一种结合傅里叶退卷积、自回归模型与截断奇异值分解于一体的新光谱估计方法 FAT，它具有算法简便(如参数很容易确定)、分辨率高、抗噪声能力强和无伪峰等许多优点，同时，由于傅里叶退卷积技术的引入，使在 FAT 方法的基础上对估计谱的修正成为可能。

参 考 文 献

- [1] E. T. Jaynes, On the rationale of maximum-entropy methods. *Proc. IEEE*, 1982, **70**(9) : 939~952
- [2] J. K. Kauppinen, E. K. Saario, What is wrong with MEM. *Appl. Spectrosc.*, 1993, **47**(8) : 1123~1127
- [3] K. Minami, S. Kawata, S. Minami, Superresolution of Fourier transform spectra by autoregressive model fitting with singular value decomposition. *Appl. Opt.*, 1985, **24**(2) : 162~167
- [4] J. K. Kauppinen, D. J. Moffatt, H. H. Mantsch *et al.*, Fourier self-deconvolution; a method for resolving intrinsically overlapped bands. *Appl. Spectrosc.*, 1981, **35**(3) : 271~276
- [5] J. K. Kauppinen, D. J. Moffatt, D. G. Cameron *et al.*, Noise in Fourier self-deconvolution. *Appl. Opt.*, 1981, **20**(10) : 1866~1879
- [6] J. K. Kauppinen, D. J. Moffatt, M. R. Hollberg *et al.*, A new line-narrowing procedure based on Fourier self-deconvolution, maximum entropy, and linear prediction. *Appl. Spectrosc.*, 1991, **45**(3) : 411~416
- [7] K. Yoshihara, B. C. Zhao, A. Kitade, Far infrared spectroscopy by the Fabry-Perot interferometer IV. *Japan J. Appl. Phys.*, 1985, **24**(3) : L207~L209
- [8] David O. Walsh, P. A. Nielsen-Delaney, Direct method for superresolution. *J. Opt. Soc. Am. (A)*, 1994, **11**(2) : 572~579

A New Method for Superresolution of Fourier Transform Spectra

Xiangli Bin Zhao Baochang Xue Mingqiu

(Xian Institute of Optics & Precision Mechanics, Academia Sinica, Xian 710068)

(Received 10 October 1994; revised 9 January 1995)

Abstract A new method combining the Fourier self-deconvolution (FSD), autoregressive model (AR) and truncated singular value decomposition (TSVD) for superresolution estimating of Fourier transform spectra is discussed. Comparing to the other methods for the purpose of resolution enhancement, the method proposed in this paper (as is called the FAT method) has the advantages of higher resolution, narrower line shape, no spurious peaks and insensitive to noise.

Key words superresolution, Fourier self-deconvolution, autoregressive model, truncated singular value decomposition.