

光谱估计方法 FAT 的强度修正及品质因子

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 对作者早先提出的光谱估算方法 FAT 作进一步探讨, 提出利用退卷积技术实现光谱线型优化从而修正估计谱相对强度的方法, 同时还提出了反映线型优化度及估计谱可靠性的品质因子的概念。

关键词 光谱估计, 退卷积, 截断奇异值分解。

1 引 言

在文献[1]中作者提出了一种结合傅里叶退卷积(FSD)、自回归模型(AR model)与截断奇异值分解(TSVD)于一体的新光谱估计方法 FAT, 这种方法在获得诸如抗噪声能力强、估计谱分辨率和信噪比高、峰线位置准确、无伪峰等许多优点的同时, 尚存在相对强度失真的问题。本文利用 FAT 方法中傅里叶退卷积技术带来的光谱线型信息, 对估计谱的相对强度进行修正, 得到与真实光谱更为接近的估计谱。

本文将考虑如下傅里叶变换对:

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

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

其中 $B(\nu)$ 为光谱分布函数, $I(x)$ 为干涉强度, $F\{\cdot\}$ 和 $F^{-1}\{\cdot\}$ 分别表示傅里叶变换及其逆变换。

2 谱峰强度修正

在文献[1]中已定义了如下傅里叶退卷积算法:

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

其中 $B_i(\nu)$ 为输入光谱, $S_i(\nu)$ 为输入光谱的线型, $B_0(\nu)$ 是输出光谱, $S_0(\nu)$ 是输出光谱的线型。当取 $S_0(\nu)$ 为 δ 函数时, 退卷积后的干涉图将成为由振幅不衰减的余弦或正弦函数所组成, 理想情况下, 这时的输出光谱应由一系列线型为 δ 函数的谱线组成。

在实际进行超分辨率研究时,一般选取傅里叶退卷积输出光谱的线型为最简单的 δ 函数形式。因此,要改变(3)式中的输出光谱 $B_0(\nu)$,只需调整 $S_i(\nu)$ 就可以了。

为了便于进一步定量地说明谱峰强度修正方法,假设输入光谱由 F 个不同位置、不同振幅的洛仑兹函数组成,即:

$$B_i(\nu) = \sum_{f=1}^F A_f \frac{\gamma_f^2}{\gamma_f^2 + 4(\nu - \nu_f)^2} \quad (4)$$

其中 A_f 为峰强度, γ_f 为半高宽, ν_f 是每个洛仑兹函数顶点的位置。

对(4)式作傅里叶变换,得到干涉强度:

$$I'(x) = \sum_{f=1}^F A_f \pi \gamma_f \cos(2\pi x \nu_f) \exp(-\pi \gamma_f x) / 2. \quad (5)$$

假设线型函数 $S_i(\nu)$ 是一个顶点位于 0、半高宽为 γ 、单位振幅的洛仑兹函数,则其傅里叶变换为:

$$F\{S_i(\nu)\} = F\left\{\frac{\gamma^2}{\gamma^2 + 4\nu^2}\right\} = \pi \gamma \exp(-\pi \gamma x) / 2. \quad (6)$$

如果(3)式中的输出线型为 δ 函数,那么退卷积后干涉强度的形式为:

$$\begin{aligned} I(x) &= \sum_{f=1}^F A_f \gamma_f \cos(2\pi x \nu_f) \exp(-\pi \gamma_f x) / [\gamma \exp(-\pi \gamma x)] \\ &\approx \sum_{f=1}^F A_f \cos(2\pi x \nu_f). \quad (\text{当所有 } \gamma_f \approx \gamma \text{ 时}) \end{aligned} \quad (7)$$

将上式按 x 离散化,并写成矩阵形式:

$$\begin{bmatrix} I_1 \\ I_2 \\ \vdots \\ I_M \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & \cdots & C_{1F} \\ C_{21} & C_{22} & \cdots & C_{2F} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ C_{M1} & C_{M2} & \cdots & C_{MF} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \\ \vdots \\ A_F \end{bmatrix}. \quad (8)$$

其中 $C_{mf} = \cos(2\pi x_m \nu_f)$ 。

由于使用 FAT 方法能够得到(较)准确的峰线位置 ν_f ,因此解线性方程组(8)便可以得到(较)真实的谱峰强度 A_f 。

一般情况下,方程的个数 M 总大于谱峰个数 F ,因此为了保证方程组(8)有稳定解,可以采用截断奇异值分解来获得谱峰强度 A_f 的最小模最小二乘解^[2]: $[A] = [C]^+ [I]$,从而使失真的光谱强度得以修复。

从以上分析不难看出,退卷积时使用的线型函数 $S_i(\nu)$ 与实际输入光谱线型的相似程度,直接影响着光谱强度修正的准确性。选择与实际输入光谱线型最相近的 $S_i(\nu)$ 的过程常被称作“线型优化”。

3 估计谱品质因子 q

不论使用何种方法进行光谱估计,对估计结果都应该有一个衡量标准。Kauppinen^[3, 4] 在

介绍他设计的光谱分辨率增强方法 LOMEP* 时,曾提出了一种反映该方法结果优劣的品质因子,但因为它对算法本身的分辨极限未做考虑,因此是无法全面反映光谱估计结果的。

一般地,影响 FAT 方法分辨能力的因素主要有线型优化程度、噪声大小及自回归模型阶数等。理想情况下, $I(x)$ 在退卷积处理后,由 FAT 得到的估计谱应是一系列 δ 函数;而实际上在各种影响因素的作用下,估计谱会变得比较平缓,通常估计谱越平缓,估计结果就越差。可以以此为依据提出一种衡量估计谱结果好坏的品质因子。由于自相关函数可表征一个随机过程变化的剧烈程度,所以估计谱的自相关函数值就能够反映其形状变化快慢,因此可以根据估计谱的自相关函数来定义估计谱品质因子:

$$q = 1 - \sqrt{R_z(\xi)/R_z(0)} \quad (9)$$

其中 $R_z(\xi)$ 和 $R_z(0)$ 分别是估计谱波数相差 ξ 和 0 时的自相关函数。若估计谱点数为 N , 则其离散表达式为:

$$\begin{aligned} R_z(\xi) &= \sum_{n=1}^{N_R} B(v_n + \xi) B(v_n) / N_R \\ R_z(0) &= \sum_{n=1}^{N_R} B(v_n) B(v_n) / N_R \end{aligned} \quad (10)$$

其中 v_n 是波数的离散值, $N_R = N - \xi$ 。因为 $R_z(0)$ 是自相关函数的最大值,故 $0 \leq q \leq 1$ 。显然, q 越接近于 1, 估计结果越好, 否则估计结果就越差。

不难想象, q 的大小还与估计谱离散点数、波数范围以及 ξ 值有关, 因此, 在计算 q 时, 估计谱点数 N 、光谱范围 $\Delta\sigma$ 等参数是应该事先确定好的。通常取足够大的 N , 以保证自相关函数的计算精度, $\Delta\sigma$ 则能包容所有谱峰即可, 另外要假设 $\xi = 0.05N$ 。实验表明, 在这种情况下, 如果品质因子 $q < 0.6$, 则 FAT 的估计结果就不可信了。品质因子的作用主要有两条: 一是衡量估计光谱的可信程度; 二是用来寻找最理想的输入线型 $S_i(\nu)$, 即实现线型优化。

4 算法小结

从前面及文献[1]的讨论中可以看到, 对输入光谱的估计主要是对谱峰数目、位置、形状和强度的估计。其中对数目与位置的估计, 用以前人们所提出的多种光谱估计方法都可以实现, 但对形状和强度的估计则不然。作者利用 FAT 方法中傅里叶退卷积技术带来的光谱线型信息, 实现了对谱线形状的优化和谱峰强度的修正。

本文将包括强度和线型修正措施在内的 FAT 方法命名为“FATIC 方法”。将 FATIC 算法归结起来: 1) 利用 FAT 得到谱线形状信息 $S_i(\nu)$ (用 q 检测线型优化程度, 取 q 最大时的 $S_i(\nu)$ 为输入光谱的线型); 2) 利用 FAT 实现对谱峰数目和位置的估计 (用 q 判断估计结果的可靠性); 3) 利用谱峰强度修正方法修正估计谱线型及相对强度。这样便完成了对光谱数目、位置、形状及强度的估计。

5 计算机模拟

图 1 是使用 FAT 及 FATIC 方法进行光谱估计的计算机模拟结果, 其中(a)为假设的原始

* Kauppinen 的 LOMEP 方法是以对干涉图进行真实的线性预测为基础的光谱复原算法, 其中使用了线性预测技术对干涉图进行延拓, 并用逆傅里叶变换将延拓后的干涉图复原为光谱。这种方法实际上应属于“周期图方法”。

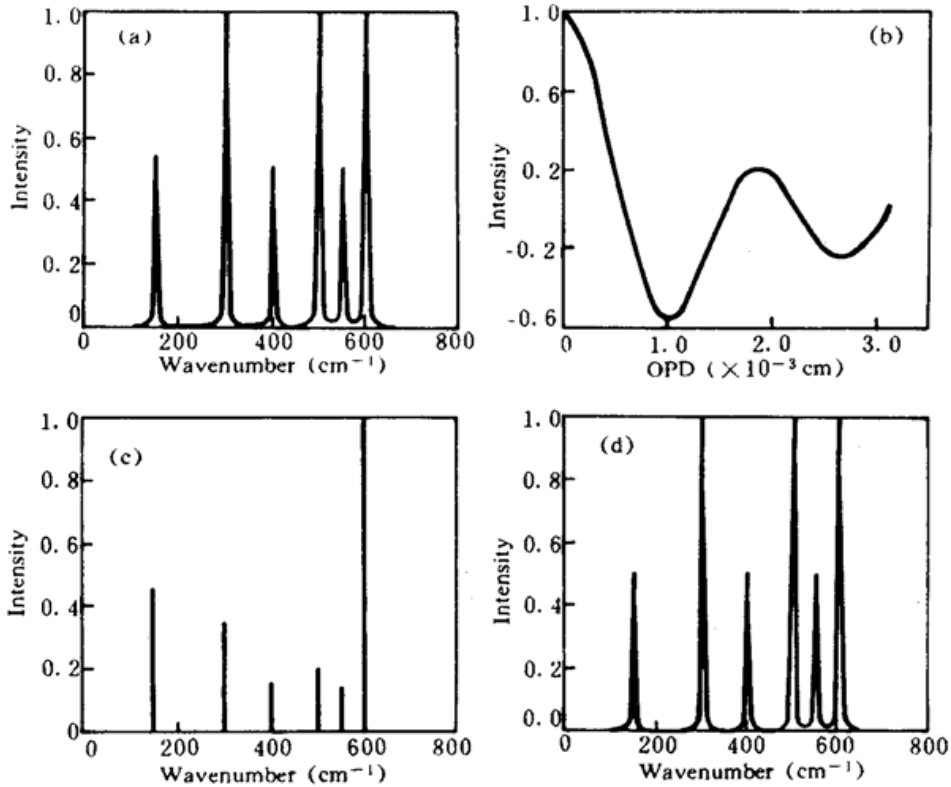


Fig. 1 The estimated spectra by FAT and FATIC

(a) Assumed spectrum, (b) Interferogram, (c) Estimated spectrum by FAT, (d) Estimated spectrum by FATIC

光谱, (b)为干涉图, (c)是用 FAT 方法得到的未做线型修正的估计谱, (d)为 FATIC 方法得到的估计谱。计算机模拟使用的假设原始光谱由六个线型为洛仑兹函数的峰组成, 具体参数是: 顶点位置(cm^{-1}) $\nu_1 = 150$, $\nu_2 = 300$, $\nu_3 = 400$, $\nu_4 = 500$, $\nu_5 = 550$, $\nu_6 = 600$, 相对峰高 $A_1 = A_3 = A_5 = 1$, $A_2 = A_4 = A_6 = 2$, 半高宽均为 5 cm^{-1} , 干涉图对称且采样点数 M 为 101, 最大光程差 $L = 0.003125 \text{ cm}$, 自回归模型阶数为 $P = 100$ 。假设估计是理想的, 即线型选择无误差、整个过程无噪声。

从图中可以看到, 在理想情况下, 用 FATIC 方法得到的估计谱与假设的原始光谱是一样的。品质因子也与这一结果相符, $q = 1$ 。

图 2 给出了不同条件下用 FATIC 方法获得的估计谱及相应的品质因子, 其中假设光谱由三条洛仑兹线型的发射谱线组成, 顶点波数分别为 150、200、300(cm^{-1}), 相对峰高为 1、2、1, 半高宽均为 5 cm^{-1} ; 干涉图采样点数 $M = 101$ 且对称, 最大光程差 $L = 0.003125 \text{ cm}$;

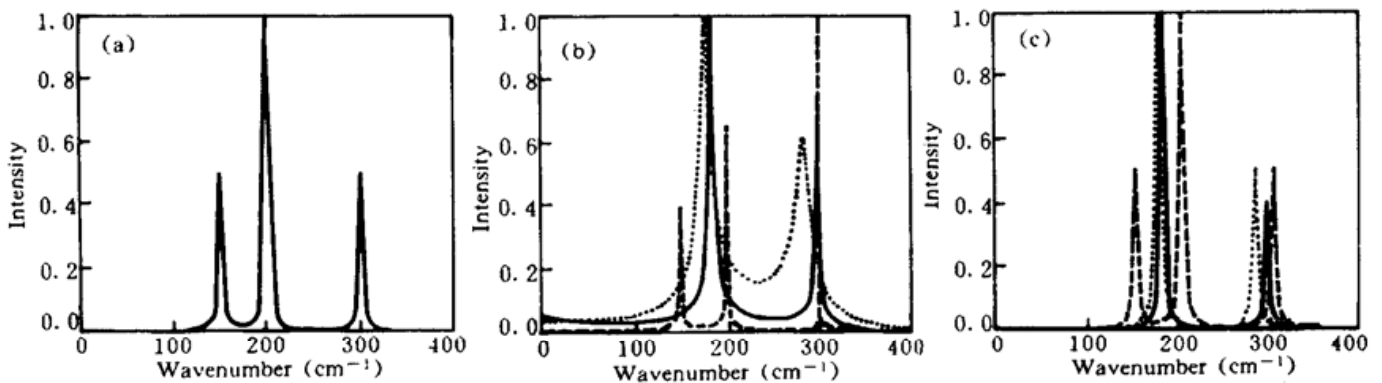


Fig. 2 The estimated spectra and the corresponding quality factors

(a) Assumed spectrum, (b) The estimated spectra when p-p noise = 10^{-3} —; p-p noise = 10^{-5} ---; line shape errors exist The corresponding q are 0.41, 0.75, 0.18 respectively, (c) FATIC of c

回归阶数 P 为 100。由图 2(b)可以看出, 品质因子 q 真实地反映了估计谱的可信程度。当噪声很小时, 其估计结果比较好。当线型选择有误差(设退卷积时所用线型函数为 $\gamma = 6 \text{ cm}^{-1}$ 的洛仑兹函数)时的估计谱, q 比较小, 所以估计谱结果不可信, 图 2(c)是图 2(b)相应的修正结果。

结 论 本文对在文献[1]中提出的光谱估计方法 FAT 作了更进一步的完善, 得到 FATIC 方法。使用 FATIC 方法能够在获得高光谱分辨率的同时保持原来的线型和相对强度, 从而彻底克服了诸多光谱估计方法丢失光谱线型及相对强度信息的致命弱点。

本文介绍的方法具有算法稳定、简洁, 结果分辨率高、线型及峰高比准确、无伪峰等优点, 是一种具有一定研究价值的光谱估计新方法。

参 考 文 献

- [1] 相里斌, 赵葆常, 薛鸣球, 研究富利叶变换光谱超分辨率的一种新方法. 光学学报, 1995, 15(11): 1529~1533
- [2] 王松桂, 贾忠贞著, 矩阵论中不等式, 合肥, 安徽教育出版社, 1994: 31~33
- [3] 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
- [4] J. K. Kauppinen, D. J. Moffatt, M. R. Hollberg *et al.*, Characteristics of the LOMEP line-narrowing method. *Appl. Spectrosc.*, 1991, 45(9): 1516~1521

Intensity Correction and Quality Factor of FAT

Xiangli Bin Zhao Baochang Xue Mingqiu

(Xi'an Institute of Optics and Precision Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Xi'an 710068)

(Received 19 March 1995; revised 29 May 1995)

Abstract In this paper, further discussion about the FAT — a new spectral estimating method proposed by the authors, is offered and a method to correct the relative intensity is presented. An algorithm of quality factor is also proposed to judge the spectral line shape optimization and the estimated spectra.

Key words spectral estimation, deconvolution, TSVD