

Mertz 法傅里叶光谱计算过程的改进

邢 廷 王模昌 龚惠兴

(中国科学院上海技术物理研究所, 上海 200083)

摘 要 叙述了常用的 Mertz 法的基本原理并进一步讨论了其中的计算效率问题, 通过利用实序列离散傅里叶变换的性质与相位校正的具体的处理内容相结合, 优化了 Mertz 法的计算处理, 提高了计算效率.

关键词 傅里叶变换光谱仪, 离散傅里叶变换, Mertz 法, 相位校正.

1 引 言

相位误差的校正是傅里叶变换光谱仪器计算处理中的重要环节, 在傅里叶变换光谱学中, 被测光信号经过双光束迈克耳逊干涉系统形成干涉图, 即相当于一次反傅里叶变换调制处理^[1]:

$$I(\delta) = \int_0^{+\infty} B(\nu) \cos 2\pi\nu\delta d\nu \quad (1)$$

其中, δ 为双光束干涉的光程差, $I(\delta)$ 为光程差为 δ 时的干涉强度, ν 为光谱频率, $B(\nu)$ 是频率为 ν 时入射光的幅度.

对(1)式作傅里叶变换即可得到被测光谱 $B(\nu)$:

$$B(\nu) = \int_{-\infty}^{+\infty} I(\delta) \cos 2\pi\nu\delta d\delta \quad (2)$$

(1)、(2)式分别是干涉图与光谱图的精确表示, 即理想状态下的傅里叶光谱. 但对于实际仪器, 在双光束干涉中常常会有一附加的相位项加于上式的相位项 $2\pi\nu\delta$ 中. 这一附加项可被认为是一误差因素, 它是由光学、电子部件及采样效应产生的, 一般是无法避免的. 这一相位误差将理想的对称干涉图变为不对称的干涉图, 在傅里叶光谱计算中, 必须加以校正, 才能够获得正确的光谱. 校正相位误差常用的方法之一是 Mertz 法.

2 Mertz 法相位校正方式

设相位误差为 θ_ν , 则(1)式所表示的干涉图有如下形式^[1]:

$$I'(\delta) = \int_0^{+\infty} B(\nu) \cos (2\pi\nu\delta - \theta_\nu) d\nu \quad (3)$$

(3) 式中 $I'(\delta)$ 表示存在相位误差的干涉图.

因为存在三角函数关系:

$$\cos(2\pi\nu\delta - \theta_\nu) = \cos 2\pi\nu\delta \cos \theta_\nu + \sin 2\pi\nu\delta \sin \theta_\nu \tag{4}$$

从而可以看出, 误差项 θ_ν 的存在使得原来完全由余弦分量组成的对称的干涉图加入了正弦分量. 于是(3)式可写成复指数形式:

$$I'(\delta) = \int_0^{+\infty} B(\nu) \exp[-i(2\pi\nu\delta - \theta_\nu)] d\nu \tag{5}$$

而光谱为

$$B'(\nu) = \int_{-\infty}^{+\infty} I'(\delta) \exp(-2\pi\nu\delta) d\delta \tag{6}$$

式中以 $B'(\nu)$ 表示从含有相位误差的干涉图 $I'(\delta)$ 计算所得的同样包含误差的光谱.

(6) 式所得的实部 $\text{Re}(\nu)$ 是 $I(\delta)$ 的余弦分量, 虚部 $\text{Im}(\nu)$ 是 $I(\delta)$ 的正弦分量. 而相位误差可由如下(7)式求得:

$$\theta_\nu = \arctan \text{Im}(\nu) / \text{Re}(\nu) \tag{7}$$

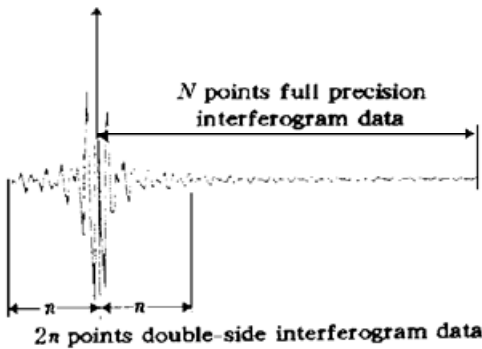


Fig. 1 Interferogram for calculation of spectrum

无相位误差的理想干涉图相对于零光程差(ZPD)点是完全对称的, 这样只需一半的干涉图即可计算得光谱. 而由于相位误差的存在, 干涉图不对称, 这样就需要测量单边干涉图另一侧的部分数据点, 从而在零光程差点为中心形成一小的双边干涉图, 如图 1 所示.

这一小的双边干涉图作为整个不对称的全干涉图的一部分, 是不对称的, 包含着相位信息, Mertz 法就是利用这一小双边干涉图计算相位误差, 并用以对光谱进行校正.

3 高效率 Mertz 法计算傅里叶光谱

3.1 提高效率的途径

为了校正相位误差, 必须根据所测量的干涉图推导出具体的误差值 θ_ν , 进而在计算中加以校正. 在 Mertz 法中, 利用小的双边干涉图获取 θ_ν .

如果在保证测量精度的情况下, 需采样 N 个点, 则在干涉图的一侧采样 N 个足以满足光谱精度要求的数据点, 如图 1 所示. 为了计算相位误差, Mertz 法要求在干涉图的另一侧采一定数目的点, 假设为 n 个, 这样就在零光程差点两侧形成了 $2n$ 个点组成的小双边干涉图, 它包含了相位误差信息. 根据 Mertz 法的计算流程, 由 $2n$ 个点的双边干涉图所得到的光谱由实部 Re 与虚部 Im 组成, 由(7)式, 就得到相位误差.

由傅里叶光谱学的原理可知, 由 $2n$ 点的干涉图所得到的 θ_ν 同样覆盖了所需要的光谱波段, 只是其精度与 $2N$ 点的全双边干涉图相比, 仅为后者的 n/N , 所以在 Mertz 法中, 对 $N + n$ 点的全干涉图做离散傅里叶变换, 同时要对 $2n$ 点的小双边干涉图也做傅里叶变换; 由于后者精度不够, 须用插值处理使其与 $n + N$ 点的全干涉图精度相匹配, 从而被用来校正全干涉图中的相位误差.

由于 $n + N$ 点的干涉图与 $2n$ 点的小双边干涉图的傅里叶变换都是实序列的傅里叶变换,

并且补零扩展后的干涉图的离散傅里叶变换结果相当于原干涉图直接离散傅里叶变换所得结果再做插值处理. 从而可以看出, 在 Mertz 法光谱计算中, 可以省略插值处理这一环节, 取而代之的是傅里叶变换的同时做插值处理. 这为提高计算效率提供了有效途径.

3.2 算法实现

1) 省略插值计算

如前所述, 用补零扩展后做离散傅里叶变换的处理流程, 是取代离散傅里叶变换后再作插值.

对 m 点干涉图做离散傅里叶变换, 结果得到实部 $m/2$ 个点与虚部 $m/2$ 个点并且覆盖整个光谱波段的有效数据. 如果在 m 点干涉图的尾部附加 m 个零点, 那么所得结果为实部 m 个点与虚部 m 个点的有效数据. 在每组 m 点数据中, $m/2$ 个点是线性独立的, 另外 $m/2$ 个点是插值点, 插值函数是由所采用的切趾函数决定的.

如果将全干涉图序列表示为: $\{X\}_{n+N}$, 其中下标 $n+N$ 代表序列 X 共有 $n+N$ 个数据点; 小双边干涉图为 $\{x\}_{2n}$, 在其尾部接序 $N-n$ 个零点, 即使其数据数目也达到同全干涉图一致的 $n+N$ 个:

$$\{x\}_{2n} \xrightarrow{\text{补零扩展}} \{x\}_{2n+(N-n)}$$

然后作傅里叶变换:

$$\mathcal{F}\{X\}_{n+N} = \{X'\}_{n+N} \quad (8)$$

$$\mathcal{F}\{x\}_{2n+(N-n)} = \{x'\}_{2n+(N-n)} \quad (9)$$

(8) 式与(9) 式在傅里叶变换结果的意义上具有同等精度(实际精度还是由最大光程差所决定的).

改进的算法只做一次 $n+N$ 点的离散傅里叶变换, 而不要再做插值的计算量为

$$\begin{aligned} \text{乘法: } A_m &= (n+N)/2 \log_2(n+N) \\ \text{加法: } A_p &= (n+N)/2 \log_2(n+N) \end{aligned} \quad (10)$$

而如果按常规算法, 要做一次 $2n$ 点离散傅里叶变换, 且要单独做线性插值. 如果采用简单的线性插值, 总的计算量约为

$$\begin{aligned} \text{乘法: } A_m &= n + n \log_2 2n \\ \text{加法: } A_p &= (n+N)/2 + 2n \log_2 2n \end{aligned} \quad (11)$$

比较(10) 式与(11) 式, 可知, 改进后的算法计算量实际增加了, 但是, 一方面, 在 N 与 n 相差不是很大的情况下($N < 5n$), 计算量增加并不是很多; 另一方面, 补零扩展后得到了两个等长的实序列, 这为下一步利用实序列的性质大幅度减少计算量做好准备.

2) 一次 $n+N$ 点离散傅里叶变换同时完成 $\{x\}_{n+N}$ 与 $\{x\}_{2n}$ 的傅里叶变换

由于相位误差导致了干涉图中正弦分量的存在, 所以在 Mertz 法中, 无论是 $\{X\}_{n+N}$ 还是 $\{x\}_{2n}$ 都要做复数离散傅里叶变换, 此时, 输入数据的虚部设置为 0. 这在计算上是必要的, 但却是低效率的.

根据实序列傅里叶变换的性质, 纯实序列傅里叶变换的实部 Re 为偶函数, 虚部 Im 为奇函数; 而纯虚数列的傅里叶变换的实部 Re 为奇函数, 虚部 Im 为偶函数. 这样可以将全干涉数据序列 $\{X\}_{n+N}$ 与小双边干涉图数据序列 $\{x\}_{2n}$ 分别作为一个复数序列的实部与虚部, 用一次复数离散傅里叶变换同时计算序列 $\{X\}_{n+N}$ 与 $\{x\}_{2n+(N-n)}$ 的傅里叶变换, 其中 $\{x\}_{2n+(N-n)}$ 为

补零扩展后的小双边干涉图序列.

这样形成如下离散傅里叶变换的输入序列: $\{Y\}_{n+N}$, 其中 $Y_m = X_m + jx_m$, X_m 与 x_m 分别为序列 $\{X\}_{n+N}$ 与 $\{x\}_{2n}$ 的第 m 个数据, 且 $1 \leq m \leq n+N$.

对 $\{Y\}_{n+N}$ 作离散傅里叶变换:

$$\begin{aligned} \mathcal{F}\{Y\}_{n+N} &= \{Y'\}_{n+N} \\ Y'_k &= \sum_{m=0}^{n+N-1} (X_m + jx_m) W^{mk} \end{aligned} \quad (12)$$

根据离散傅里叶变换的线性性质:

$$\begin{aligned} \operatorname{Re}(Y_k) &= \operatorname{Re}(X_k) - \operatorname{Im}(x_k) \\ \operatorname{Im}(Y_k) &= \operatorname{Im}(X_k) + \operatorname{Re}(x_k) \end{aligned} \quad (13)$$

利用纯实数序列与纯虚数序列的奇偶性质^[2], 可以得到

$$\begin{aligned} \operatorname{Re}(X_k) &= [\operatorname{Re}(Y_k) + \operatorname{Re}(-Y_k)]/2 \\ \operatorname{Re}(x_k) &= [\operatorname{Im}(Y_k) + \operatorname{Im}(-Y_k)]/2 \end{aligned} \quad (14)$$

这里, 只需计算序列 $\{X\}_{n+N}$ 与 $\{x\}_{2n+(N-n)}$ 的傅里叶变换的实部, 并且实际上只需计算实部的一半数据, 因为实序列的傅里叶变换的实部是偶函数(即偶对称). 由此可见, 通过这样算法上的改变, 大大减少了运算量.

3) 计算量的比较

常规 Mertz 法计算需做一次 $n+N$ 点离散傅里叶变换, 一次 $2n$ 点离散傅里叶变换, 以及一次 n 点到 $(n+N)/2$ 点的插值, 所需计算量为

$$\begin{aligned} \text{乘法: } A_m &= n + [(n+N)/2] \log_2(n+N) + n \log_2 2n \\ \text{加法: } A_p &= (n+N)/2 + (n+N) \log_2(n+N) + 2n \log_2 2n \end{aligned} \quad (15)$$

与此相对应, 在前面所叙述的改进中将计算过程精简为一次 $n+N$ 点离散傅里叶变换, 一次(14)式的处理, 而(14)式中除以 2 的除法计算在这里可以省略, 归并到 Mertz 法其他处理步骤中去, 最终其计算量为

$$\begin{aligned} \text{乘法: } A_m &= [(n+N)/2] \log_2(n+N) \\ \text{加法: } A_p &= (n+N) \log_2(n+N) + (n+N) \end{aligned} \quad (16)$$

由(15)式与(16)式对比可知, 改进算法的计算效率大大提高.

4 计算结果

图 2 为在计算数据量不断增加的情况下原算法与改进算法计算所耗时间的比较. 这里只关心相对值, 以排除具体计算设备性能差异的影响. 在图 2 的计算中, 用于校正相位误差的小双边干涉图的数据量 $2n \equiv \frac{1}{8}N$, 在这一条件下, 考察数据量不断增加时两种计算过程的效率. 而图 3 是在 $N \equiv 32K$ ($K=1024$) 的情况下, 改变 n 值即改变用于校正相位误差的小双边干涉图的数据量, 考察两种计算过程的效率之比.

由图 2 可以看出, 改进的方法的效率高于原算法, 一般至少可提高 5% 以上的计算效率. 当数据量不断增加时, 前者的优势明显. 这是因为当总数据量增加时, 用于相位校正的数据量也增加, 而改进的算法由于省略了一次傅里叶变换, 计算耗时显然要比原算法少. 同理, 当用于相位校正的双边干涉数据的比重增加时, 即图 3 所示的情况, 在这种情况下改进算法

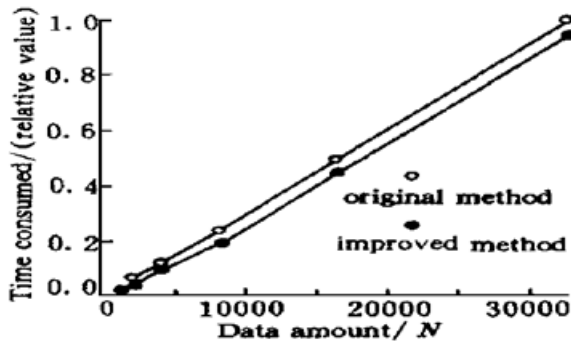


Fig. 2 Comparison of computation time when $2n \equiv \frac{1}{8}N$ and N changes

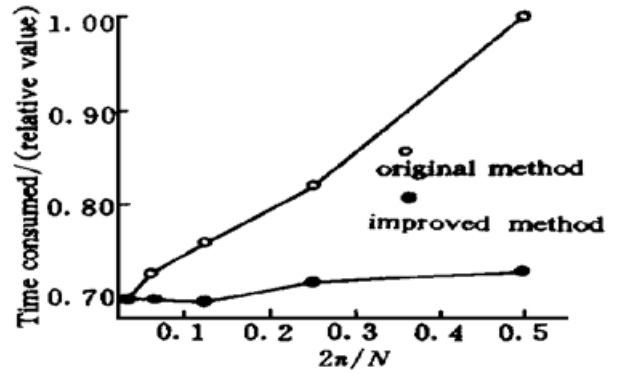


Fig. 3 Comparison of computation time when $N \equiv 32K$ and $2n/N$ changes

优势最明显, 从图 3 的曲线清楚地表明了这一点. 而且从图 3 可以看出, 当用于相位校正的数据增加时, 即 $2n/N$ 增加时, 原算法的运算量明显增加, 而改进算法运算量几乎保持不变, 这一优点显然是由改进后的算法结构决定的.

另外, 由于省略了插值处理等环节, 计算程序的结构也更为简洁, 这也有助于计算效率的提高. 需要指出的是, 上述算法假定了计算处理过程中采用的是离散傅里叶变换所等效的插值方法, 如果实际需要不同的插值处理, 则不能直接采用上述方法.

参 考 文 献

- [1] Griffiths P R, de Haseth J A. *Fourier Transform Infrared Spectroscopy*. New York: John Willey & Sons, 1986. 26~ 31
- [2] Nussbaumer H J. *Fast Fourier Transform and Convolution Algorithms*. Berlin, Heidelberg, New York: Springer-Verlag, 1981. 100~ 101

A Method to Improve the Computing Efficiency of Mertz Method in Fourier Transform Spectroscopy

Xing Ting Wang Mochang Gong Huixing

(Shanghai Insitute of Technical Physics, The Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200083)

(Received 15 December 1997; revised 2 March 1998)

Abstract The correction of phase error is an important step in the calculation of Fourier transform spectrum. The problem of computation efficiency of the commonly used phase correction method, Mertz method, is studied in detail. By applying the quality of real serial Fast Fourier Transform (FFT) and combining it with the computing process, an improved algorithm is obtained, which demonstrates greater computation efficiency and is easier to use.

Key words Fourier transform spectrometer (FTS), discrete Fourier transform (DFT), Mertz method, phase error correction.