

傅里叶退卷积光谱噪声特性研究*

高晓峰 相里斌

(中国科学院西安光学精密机械研究所, 西安 710068)

摘要 通过数学推导给出了更为一般的计算傅里叶退卷积 FSD(Fourier self-deconvolution) 光谱信噪比变化率的公式. 研究了在六种不同切趾函数情况下, 当退卷积系数由小逐渐增大时, 傅里叶退卷积光谱信噪比变化率随切趾长度的变化. 研究表明, 当傅里叶退卷积由欠退卷积过渡到完全退卷积再到过退卷积时, 傅里叶退卷积光谱信噪比的衰减迅速加快.

关键词 傅里叶退卷积; 光谱信噪比; 退卷积系数; 切趾

中图分类号 TH744 **文献标识码** A

0 引言

在光谱的傅里叶变换域内, 消除或减小卷积函数的影响, 使谱线得到细化的方法称为傅里叶退卷积技术^[1~4]. 在光谱分辨率增强技术中, 线型优化这一步基本上都采用了傅里叶退卷积技术^[5]. 傅里叶退卷积技术作为一种线性方法, 成为傅里叶变换光谱学和凝聚态红外光谱分析中最常用的一种光谱分辨率增强技术. 然而遗憾的是, 傅里叶退卷积技术在细化光谱谱线的同时, 会降低光谱的信噪比, 导致其细化光谱谱线的能力在实际中受到噪音的严重制约. 芬兰学者 Kauppinen 曾推导过一个假定在完全退卷积条件下傅里叶退卷积光谱信噪比变化率的公式^[1], 该公式分析了切趾函数和切趾长度对光谱噪声特性的影响. 然而, 退卷积系数对光谱噪声特性的影响不容忽视, 因为在实际光谱中谱线宽度不可能完全一致, 无法做到所有谱线完全退卷积. 当不完全退卷积时, 对应的线型是随退卷积系数而变化的, 其对应的谱线细化倍数也是随退卷积系数而变化的, 如何选取退卷积系数是一个必须考虑的问题. 本文通过数学方法推导出更为一般的计算傅里叶退卷积光谱信噪比变化率的公式. 研究了在六种不同切趾函数情况下, 当退卷积系数由小逐渐增大时, 傅里叶退卷积光谱信噪比变化率随切趾长度的变化, 给出了计算结果和关系图. 最后从信噪比的角度给出了退卷积系数的选取原则.

1 基本原理

由傅里叶变换光谱学可知, 光谱图与其相应的干涉图是一对傅里叶变换对

$$E(\nu) = \int_{-\infty}^{+\infty} I(x) \exp(i2\pi\nu x) dx = F^{-1}\{I(x)\} \quad (1)$$

$$I(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} E(\nu) \exp(-i2\pi\nu x) d\nu = F\{E(\nu)\} \quad (2)$$

式中 $E(\nu)$ 、 $I(x)$ 分别表示光谱图和干涉图.

* 国家 863 高技术研究发展计划资助

Tel: 029-88887625 Email: gaofx10@126.com

收稿日期: 2005-08-24

傅里叶退卷积后的光谱图为

$$E_L(\nu) = F^{-1}\left\{\frac{D_g(x)}{F\{E_0(\nu)\}} I(x)\right\} \quad (3)$$

式中 $D_g(x)$ 为切趾函数, $\frac{1}{F\{E_0(\nu)\}}$ 被称为退卷积函数.

归一化的 Lorentzian 线型和 Gaussian 线型的退卷积函数分别为

$$l(x) = \exp(-2\pi\sigma|x|) \quad (4a)$$

$$g(x) = \exp(-\pi^2\sigma^2/x) \quad (4b)$$

式中 σ 称为退卷积系数. Lorentzian 线型和 Gaussian 线型是红外光谱学的基本线型模型, 实际的光谱线型都可以用这两种线型模型的某种组合来表示.

傅里叶退卷积技术的分辨率增强能力由分辨率增强因子来表示

$$K = 2\sigma_0/\Delta_{1/2} \quad (5)$$

式中 $2\sigma_0$ 为光源谱线的半峰全宽, $\Delta_{1/2}$ 为傅里叶退卷积光谱的谱线半峰全宽.

当退卷积系数 σ 等于原谱线半峰全宽 $2\sigma_0$ 的一半时, 令 $\delta = \sigma - \sigma_0$, 即 $\delta = 0$ 时, 此时退卷积被称为完全退卷积; 当退卷积系数 σ 分别小于和大于原谱线半峰全宽 $2\sigma_0$ 的一半时, 即 $\delta < 0$ 和 $\delta > 0$ 时, 退卷积则分别被称为欠退卷积和过退卷积. 完全退卷积时得到的退卷积光谱线型由切趾函数 $D_g(x)$ 所对应的傅里叶变换 $F^{-1}\{D_g(x)\}$ 决定, 这时分辨率增强因子可定义为

$$K = \frac{2\sigma_0}{\Delta_{1/2}} = \frac{2\sigma_0}{a/2L} = \frac{4\sigma_0 L}{a} \quad (6)$$

式中 $a/2L$ 为切趾函数所对应的谱线半峰全宽.

2 退卷积光谱噪声特性

2.1 理论分析

对于一个随机白噪音光谱 $N(\nu)$ 和其所对应的干涉图 $n(x)$, 假定 $N(\nu)$ 和 $n(x)$ 均为实偶函数. 应用 Parseval 关系式可得

$$\int_{-\infty}^{+\infty} N^2(\nu) d\nu = \int_{-\infty}^{+\infty} n^2(x) dx \quad (7)$$

在实际条件下积分应限制在范围 $(-\nu_0, \nu_0)$ 和 $(-L_0, L_0)$ 之间, 应用一般切趾函数 $A(x)$, 式(7)变为

$$\int_{-\nu_0}^{\nu_0} N_A^2(\nu) d\nu = \int_{-L}^L A^2(x) n^2(x) dx \quad (8)$$

式中一般切趾函数 $A(x)$ 定义为

$$[A(x)=0, |x|>L, A(x)\neq 0, |x|\leq L]$$

且为偶函数, 相对于切趾函数来说, $n^2(x)$ 变化很快, 可看做常量放在积分符号之外, 并用其均方根来表示.

$$\int_{-\nu_0}^{\nu_0} N_A^2(\nu) d\nu = \frac{1}{2L} \int_{-L}^L n^2(x) dx \int_{-L}^L A^2(x) dx = \bar{n}^2 \int_{-L}^L A^2(x) dx \quad (9)$$

光谱图噪音的均方根可表示为

$$\sqrt{N_A^2} = \sqrt{\frac{1}{2\nu_0} \int_{-\nu_0}^{\nu_0} N_A^2(\nu) d\nu} = \sqrt{\frac{\bar{n}^2}{2\nu_0} \int_{-L}^L A^2(x) dx} = \frac{\sqrt{\bar{n}^2}}{\sqrt{\nu_0}} \sqrt{\int_{-L}^L A^2(x) dx} \quad (10)$$

对于一般线型函数 $E_0(\nu)$, 其高度(即信号)可由式(11)给出

$$E_0(0) = \int_{-\infty}^{+\infty} I_0(x) dx \quad (11)$$

当 $E_0(\nu)$ 为 Lorentzian 线型时

$$I_0(x) = F\{E_0(\nu)\} = \exp(-2\pi\sigma_0|x|) \quad (12)$$

经过切趾的高度为

$$E_0^A(0) = \int_{-L}^L A(x) I_0(x) dx = 2 \int_0^L A(x) I_0(x) dx \quad (13)$$

则经过切趾后光谱图信噪比的一般公式为

$$(S/N)_A = \frac{E_0^A(0)}{\sqrt{N_A^2}} = \frac{2 \cdot \sqrt{\nu_0} \cdot \int_0^L A(x) I_0(x) dx}{\sqrt{\bar{n}^2} \cdot \sqrt{\int_0^L A^2(x) dx}} \quad (14)$$

由式(14)可得到光谱图退卷积之前信噪比为

$$(S/N)_S = \frac{2 \cdot \sqrt{\nu_0} \cdot \int_0^{\infty} S(x) I_0(x) dx}{\sqrt{\bar{n}^2} \cdot \sqrt{\int_0^{\infty} S^2(x) dx}} \quad (15)$$

式中 $S(x)$ 为记录系统的内在平滑函数.

对于傅里叶退卷积光谱图, 考虑光谱线型为 Lorentzian 线型函数, 代入 $A(x) = D_g(x) \cdot l(x)$, 其中 $l(x)$ 是 Lorentzian 线型的退卷积函数. 其信噪比为

$$(S/N)_l = \frac{2 \cdot \sqrt{\nu_0} \cdot \int_0^L D_g(x) l(x) I_0(x) dx}{\sqrt{\bar{n}^2} \cdot \sqrt{\int_0^L D_g^2(x) l^2(x) dx}} \quad (16)$$

对于 Lorentzian 线型的傅里叶退卷积光谱图, 其信噪比变化率为

$$Q = \frac{(S/N)_l}{(S/N)_S} = \frac{\int_0^L D_g(x) l(x) I_0(x) dx \cdot \sqrt{\int_0^{\infty} S^2(x) dx}}{\int_0^{\infty} S(x) I_0(x) dx \cdot \sqrt{\int_0^L D_g^2(x) l^2(x) dx}} \quad (17)$$

当考虑真实光谱图受到 $F^{-1}\{D_g(x)\}$ 平滑的情况, 即 $S(x) = D_g(x)$, 此时变化率单纯表示傅里叶退卷

积对光谱图信噪比的影响. 式(15)和(17)分别变为

$$(S/N)_D = \frac{2 \cdot \sqrt{\nu_0} \cdot \int_0^L D_g(x) I_0(x) dx}{\sqrt{\bar{n}^2} \cdot \sqrt{\int_0^L D_g^2(x) dx}} \quad (18)$$

$$Q_D(L, \delta) = \frac{(S/N)_l}{(S/N)_D} = \frac{\int_0^L D_g(x) l(x) I_0(x) dx}{\int_0^L D_g(x) I_0(x) dx} \cdot \frac{\sqrt{\int_0^L D_g^2(x) dx}}{\sqrt{\int_0^L D_g^2(x) l^2(x) dx}} = \frac{\int_0^L D_g(x) \exp(2\pi\delta x) dx}{\int_0^L D_g(x) \exp(-2\pi\sigma_0 x) dx} \cdot \frac{\sqrt{\int_0^L D_g^2(x) dx}}{\sqrt{\int_0^L D_g^2(x) \exp[4\pi(\sigma_0 + \delta)x] dx}} \quad (19)$$

实际上通常所比较的是相对于实验记录的信噪比的变化率, 这时需要知道记录系统的内在平滑函数. 对于傅里叶变换光谱学, 一般来说内在平滑函数即切趾长度为最大光程差的矩形函数. 式(15)和(17)分别变为

$$(S/N)_{L_0} = \frac{2 \cdot \sqrt{\nu_0} \cdot \int_0^{L_0} I_0(x) dx}{\sqrt{\bar{n}^2} \cdot \sqrt{L_0}} \quad (20)$$

$$Q_{L_0}(L, L_0, \delta) = \frac{(S/N)_l}{(S/N)_{L_0}} = \frac{\int_0^L D_g(x) l(x) I_0(x) dx \sqrt{L_0}}{\int_0^{L_0} I_0(x) dx \sqrt{\int_0^L D_g^2(x) l^2(x) dx}} = \frac{\int_0^L D_g(x) \exp(2\pi\delta x) dx \cdot \sqrt{L_0}}{\int_0^{L_0} \exp(-2\pi\sigma_0 x) dx \cdot \sqrt{\int_0^L D_g^2(x) \exp[4\pi(\sigma_0 + \delta)x] dx}} \approx \frac{2\pi\sigma \sqrt{L_0} \cdot \int_0^L D_g(x) \exp(2\pi\delta x) dx}{\sqrt{\int_0^L D_g^2(x) \exp[4\pi(\sigma_0 + \delta)x] dx}} \quad (21)$$

式中假定 L_0 足够大

$$\int_0^{L_0} \exp(-2\pi\sigma_0 x) dx = \frac{1}{2\pi\sigma_0} \quad (22)$$

2.2 计算结果

当不完全退卷积(即 $\delta \neq 0$) 时, 对应的线型随 δ 而变化, 其对应的分辨率增强因子也在变化. 因此, 信噪比变化率只能表示为切趾长度 L 的函数. 为了与 Kauppinen 得到的数据^[1] 进行比较, 不同切趾函数条件下的切趾长度 L 可分别取作当 $\delta = 0$ (即 $\sigma = \sigma_0$) 时, 分辨率增强因子 K 所对应的切趾长度.

取 $\sigma_0 = 5 \text{ cm}^{-1}$, δ 取 $-4 \sim 4 \text{ cm}^{-1}$, 间隔为 0.5 cm^{-1} , 共九点. K 取 $0.1 \sim 5.0$, 间隔为 0.1 , 共五十点. 由式(6)可得: $L = aK/4\sigma_0$. 六种切趾函数所对应的切趾长度 L 分别为: 矩形函数 boxcar: $0.006035 \sim 0.30175 \text{ cm}$; 三角函数 triangular: $0.00886 \sim 0.443 \text{ cm}$; 三角平方函数 triangular²: $0.011795 \sim 0.58975 \text{ cm}$; Bessel 函数 Bessel: $0.00952 \sim 0.476 \text{ cm}$; 余弦函数 cosine:

0.010~0.500 cm; 高斯函数 Gaussian: 0.01015~0.5075 cm.

2.2.1 光谱受窗函数平滑的信噪比变化率 $Q_D(L, \delta)$

六种切趾函数条件下光谱受窗函数平滑的信噪比变化率 $Q_D(L, \delta)$ 的计算结果如图 1. 每图中从右

至左, 九条曲线分别对应 $\delta = [-4, -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3, 4] \text{cm}^{-1}$. 当 $\delta = 0$ 时, 即每图中从右数第五条紫色曲线, 其表示的是完全退卷积时信噪比变化率, 与芬兰学者 Kauppinen 得到的数据^[1] 有着很好的一致性.

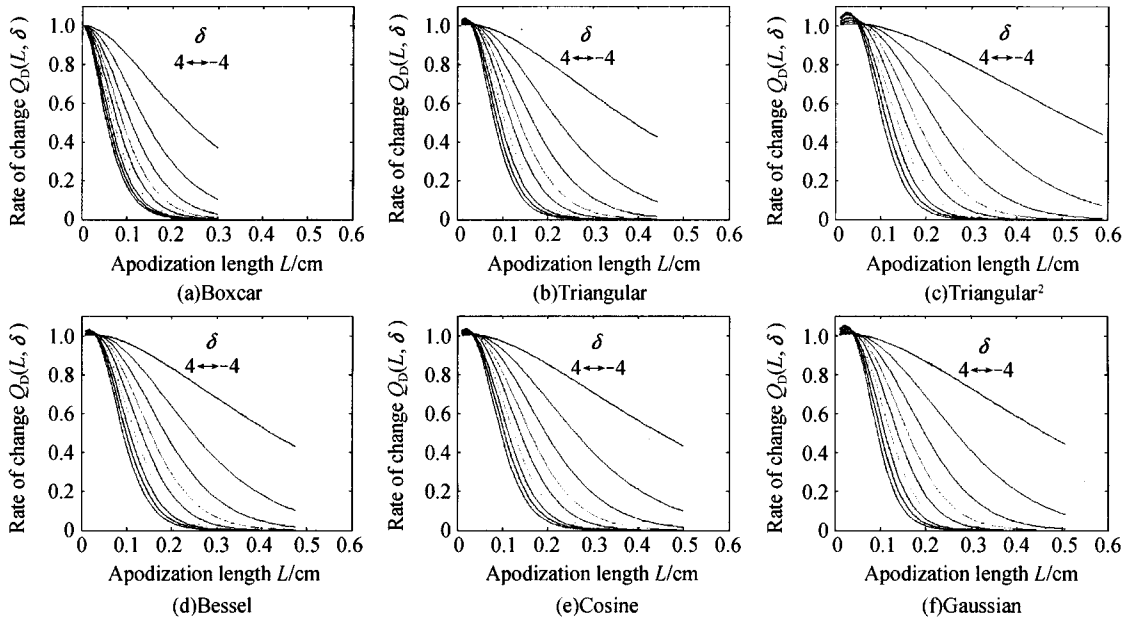


图 1 由式(19)计算出光谱受窗函数平滑的信噪比变化率 $Q_D(L, \delta)$ 的曲线图
Fig. 1 $Q_D(L, \delta)$ curves computed using Eq. (19)

由图 1 可以看出, 不同切趾函数, 不同退卷积程度, 曲线峰值变化不大. 不同切趾函数在相同条件下, 傅里叶自退卷积信噪比变化率下降的速度不同. 但是在每图中从欠退卷积逐渐过渡到过退卷积, 信噪比变化率曲线单调下降迅速加快的趋势相同.

2.2.2 光谱只受系统内在平滑函数影响的信噪比变化率 $Q_{L_0}(L, L_0, \delta)$

同样为了与 Kauppinen 得到的数据^[1] 进行比较, 取完全退卷积条件下分辨率增强因子最大值 $K_0 = 5$, 由式(6)可得: $L_0 = aK_0/4\sigma_0$, 内在平滑函数为矩形函数的切趾长度 $L_0 = 0.30175 \text{ cm}$. 六种切趾函数条件下光谱只受系统内在平滑函数影响的信噪比变化率 $Q_{L_0}(L, L_0, \delta)$ 的计算结果如图 2. 每图中从右至左, 九条曲线分别对应 $\delta = [-4, -3, -2, -1, 0,$

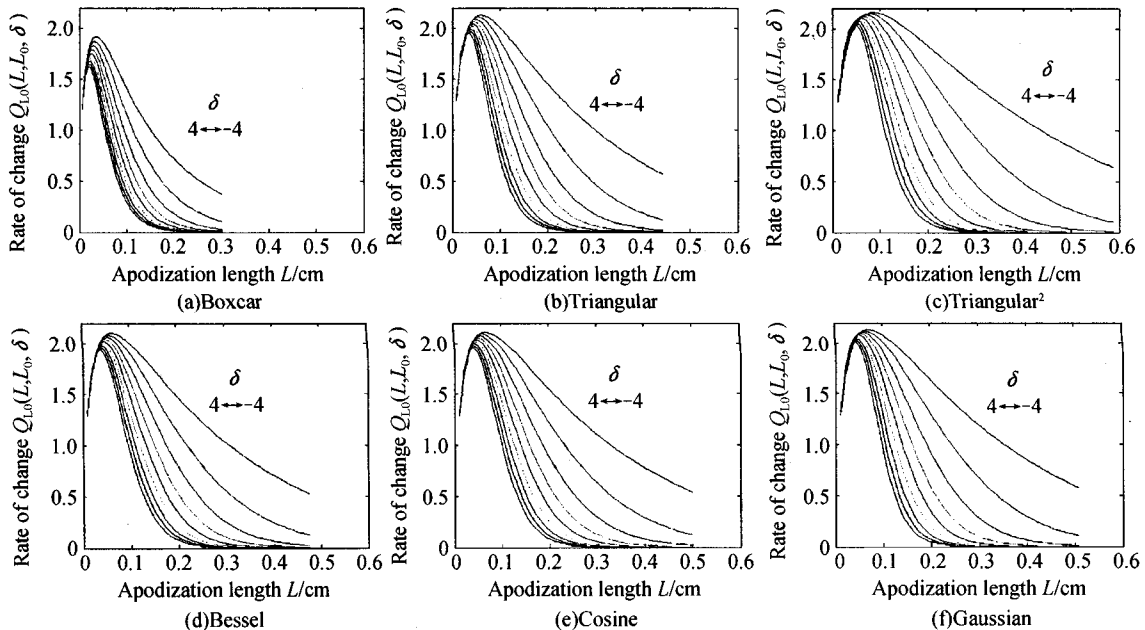


图 2 由式(21)计算出光谱只受系统内在平滑函数影响的信噪比变化率 $Q_{L_0}(L, L_0, \delta)$ 的曲线图
Fig. 2 $Q_{L_0}(L, L_0, \delta)$ curves computed using Eq. (21)

1, 2, 3, 4] cm^{-1} . 当 $\delta=0$ 时, 即每图中从右数第五条曲线, 其表示的是完全退卷积时信噪比变化率, 与 Kauppinen 得到的数据^[1]有着很好的一致性.

由图 2 可以看出, 不同的切趾函数条件下, 曲线族峰值不同, 矩形切趾函数稍低, 其余切趾函数峰值相近. 在每图中信噪比变化率曲线先升后降, 在过峰值后单调下降. 从欠退卷积逐渐过渡到过退卷积, 单调下降趋势迅速加快, 从右向左, 曲线峰值少许下降且前移, 上升段九条曲线几乎重合, 下降段逐渐展开.

3 结论

由图 1、图 2 及其计算数据可以看出: 无论是光谱图受窗函数平滑影响的信噪比变化率 $Q_D(L, \delta)$ 还是光谱图只受系统内在平滑函数影响的信噪比变化率 $Q_{L_0}(L, L_0, \delta)$, 完全退卷积条件下 ($\delta=0$), 当切趾长度 L 大于 $K=0.5$ 所对应的切趾长度时, 信噪比变化率曲线呈单调下降趋势. 由欠退卷积逐渐过渡到过退卷积, 信噪比变化率曲线单调下降趋势迅速加快. 这意味着傅里叶退卷积技术在细化光谱谱线的同时会降低光谱的信噪比, 并且过退卷积时光谱信噪比的衰减最大, 噪音迅速增大. 从信噪比的角

度考虑, 虽然过退卷积的谱线细化倍数最大, 但是光谱信噪比的衰减也最大, 导致光谱中弱小信号有可能被增大的噪音湮没. 因此得到退卷积系数的选取原则: 傅里叶自退卷积中退卷积系数应取光谱中最窄谱线的半峰全宽.

参考文献

- 1 Kauppinen J K, Moffatt D J, Cameron D G, *et al.* Noise in fourier self-deconvolution. *Applied Optics*, 1981, **20** (10): 1866~1879
- 2 董瑛, 相里斌, 赵葆常. Fourier 变换光谱学退卷积技术的理论研究. *光子学报*, 2002, **31**(7): 841~846
Dong Y, Xiangli B, Zhao B C. *Acta Photonica Sinica*, 2002, **31**(7): 841~846
- 3 Kauppinen J K, Moffatt D J, Mantsch H H, *et al.* Fourier self-deconvolution; A method for resolving intrinsically overlapped bands. *Applied Spectroscopy*, 1981, **35** (3): 271~276
- 4 Kauppinen J K, Partanen J. *Fourier Transforms in Spectroscopy*. Wiley-VCH Verlag GmbH, 2001
- 5 相里斌, 赵葆常, 薛鸣球. 研究傅里叶变换光谱超分辨率的一种新方法. *光学学报*, 1995, **15**(11): 1529~1533
Xiangli B, Zhao B C, Xue M Q. *Acta Optica Sinica*, 1995, **15**(11): 1529~1533

Signal-to-Noise Ratio Study on Fourier Self-deconvolution of Fourier Transform Spectrum

Gao Xiaofeng, Xiangli Bin

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

Received date: 2005-08-24

Abstract A more general formula thinking over deconvolution coefficient for computing changes in the signal-to-noise ratio of the spectrum resulting from the Fourier self-deconvolution procedure was derived. Fourier self-deconvolution could reduce the intrinsic halfwidths of lines, which was in practice limited by the noise in the spectrum. The choice of deconvolution coefficient seriously influence the changes in the SNR of Fourier transform spectrum. With the help of the derived formula, the rate of decrease in the SNR as a function of apodization length for six different apodization function was studied, when deconvolution coefficient increased gradually. It was shown that when deconvolution coefficient increased gradually, the rate of decrease in the SNR become great rapidly.

Keywords Fourier self-deconvolution; Signal-to-noise ratio; Deconvolution coefficient; Apodization



Gao Xiaofeng was born in 1976. He received the B. S. Degree in applied physics from the Northwest Polytechnical University in 1998. He is presently pursuing the Ph. D. Degree in optical engineering at Xi'an Institute of Optics and Precision Mechanics, Chinese Academy of Sciences. He is currently engaged in research on imaging spectroscopy and digital signal processing techniques.