

doi:10.3788/gzxb20134212.1491

利用贝叶斯方法提高光谱仪的测量准确度

董宇航, 岑松原

(中国计量学院 光学与电子科技学院, 杭州 310018)

摘要:基于贝叶斯条件概率公式并结合卷积定理,推导出一种能够利用系统输出和系统响应函数来反卷积求取系统输入函数的理论公式.根据光谱仪的性能参量,结合点扩散函数的主要来源(狭缝衍射、光栅衍射和光学系统像差)的理论公式,推导出光谱仪的点扩散函数,并对光谱仪的测量结果进行基于贝叶斯反卷积原理的光谱校正;利用反卷积前后的光谱数据差值,引入“光谱曲线标准差”概念,用于判断反卷积结果的数据准确度.实验结果表明,该方法能够有效地通过对系统输出进行迭代,消除点扩散函数的影响,将“模糊”后的光谱数据较好地恢复成原始光谱曲线,从而提高光谱仪的准确度.

关键词:贝叶斯反卷积;光谱仪;点扩散函数

中图分类号:O433.4

文献标识码:A

文章编号:1004-4213(2013)12-1491-5

Improving Spectrograph Accuracy by Bayesian Method

DONG Yu-hang, CEN Song-yuan

(Optical and Electronically Technology College, China Jiliang University, Hangzhou 310038, China)

Abstract: Based on Bayesian condition probability formula and combined with convolution theorem, a theoretical formula is derived that utilizes output and response functions to acquire input function with deconvolution. According to the performance parameter in spectrograph and point-spread functions of main sources (theoretical formula of slit diffraction, grating diffraction and optical system aberration) the point-spread function of the spectrography is derived, and then this function is used to rectify the measuring result based on Bayesian deconvolution; using the difference of spectrum data before and after deconvolution, the concept “standard deviation of spectrum curve” is introduced to judge the data accuracy of the deconvolution output. The experimental result indicates that this method can effectively eliminate the influence of point spread function through iteration of system output, recover the original spectrum data from a “blurred” curve, and ultimately improve the accuracy of spectrograph.

Key words: Bayesian deconvolution; Spectrograph; Point-spread function

0 引言

光谱仪作为一种通用光学仪器,在物理、化学、生物等多个学科领域内得到广泛的使用,但是其光谱分辨率受到狭缝衍射、光栅衍射和光学系统像差等因素的限制,使得光谱仪测试结果中出现光谱变形现象,需要对数据进行处理恢复原始光谱.这相当于通过测量输出和已知输入重构未知输入的反卷积过程.但是反卷积过程中,由于已知输入经常是一

个点扩散函数,而且其在正负无穷处都趋向于零,因此如果直接使用多项式除法,这些极小项会将误差放大,甚至超过原始信号强度.这就是反卷积的病态问题.对此问题目前常用的算法有 Lucy-Richard 反卷积^[1-4]、维纳逆滤波^[5-7]、Van Cittert 迭代和傅里叶滤波^[8]等. Daniel Walter 等^[9]采用 Richard-Lucy 反卷积对信号进行处理,并与低通滤波器的处理效果进行比较,用于消除点扩散函数对图像带来的图像模糊、信噪比降低等效应. Gary H. Glover^[10]的

基金项目:浙江省 LED 照明新技术科技创新团队项目(No. 2010R50020)资助

第一作者:董宇航(1989-),男,硕士,主要研究方向为光谱分析及算法. Email:dyh_418@126.com

导师(通讯作者):岑松原(1974-),男,副研究员,博士,主要研究方向为 LED 光学设计. Email:allantsern@cjlu.edu.cn

收稿日期:2013-04-14;录用日期:2013-06-05

研究中,维纳逆滤波被用于解调不同频率下,个体行为曲线的重叠情况.杨艳美等^[11]也利用维纳滤波进行图像复原,并针对维纳其恢复运动模糊加噪图像时出现的振铃效应提出了改进算法.

本文提出的贝叶斯反卷积^[12-15]是一种新的反卷积算法.该方法基于贝叶斯条件概率公式,结合卷积定理,可以推导出其迭代公式.在利用该方法进行计算的过程中,可以根据实际需求,通过控制迭代次数和判断反卷积所得数据与真实数据的偏差,来决定计算准确度.相比其他常见滤波方法,贝叶斯反卷积能够消除许多假定的参量,如滤波器带宽及边沿陡度等带来的误差;这些参量的微小误差都会对结果造成较大的影响,其迭代过程也能较好地避免病态问题的产生.因此贝叶斯反卷积可以广泛用于图像处理、信号处理等方面.

1 贝叶斯反卷积

贝叶斯定理是由条件概率公式推导而出,可表示为

$$P(H|D) = \frac{P(D|H)P(H)}{P(D)} \quad (1)$$

式中 $P(H)$ 是先验概率, $P(H|D)$ 是后验概率.本文中用 $T(\text{true})$ 表示真实数据, $M(\text{measure})$ 表示测量数据.这样,两者之间的关系可表示为

$$M = R \cdot T \quad (2)$$

式中 $R(\text{response})$ 称为响应函数.将式(2)带入(1)中,并利用全概率公式可得

$$P(T_i | M_k) = \frac{P(M_k | T_i)P(T_i)}{\sum_j P(M_k | T_j)P(T_j)} \quad (3)$$

结合全概率公式的另一个表达形式可得

$$P(T_i) = \sum_k \frac{P(M_k | T_i)P(T_i)P(M_k)}{\sum_j P(M_k | T_j)P(T_j)} \quad (4)$$

由于式(4)左右两边都出现了 $P(T_i)$, 经过 n 次循环后,式(4)变形为

$$P^{(n+1)}(T_i) = P^{(n)}(T_i) \sum_k \frac{P(M_k | T_i)P(M_k)}{\sum_j P(M_k | T_j)P^{(n)}(T_j)} \quad (5)$$

由于迭代初始值 $P^{(0)}(T_i)$ 未知,但是 R 是一个扩散函数, $P^{(0)}(T_i)$ 一定在 $P(M)$ 的范围内,所以将 $P(M)$ 作为 $P(T_i)$ 的初始值是合理的.并由 $\sum_k R_{ik} = 1$, 可得

$$P(M_k | T_i) = R_{ki} \quad (6)$$

结合式(6)及概率中几个基本公式,将式(5)用矩阵的方法重新表述为

$$T_i^{(n+1)} = T_i^{(n)} \sum_k \frac{R_{ki} M_k}{\sum_j R_{kj} T_j^{(n)}} \quad (7)$$

这时的 $T_i^{(n+1)}$ 就是经过 n 次迭代后的 T_i 值.

2 光谱仪测量过程的模拟

一个典型的光谱仪结构如图1.其响应函数可以通过仪器参量求得.实验采用的光谱仪为线阵

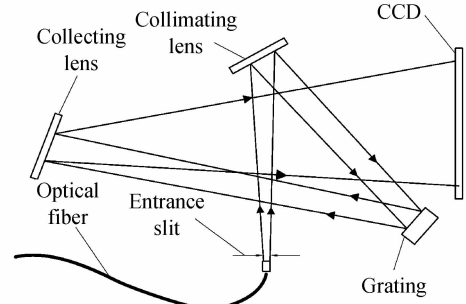


图1 光谱仪结构

Fig.1 Structure chart of spectrograph

CCD 光谱仪,属于凝视系统,其点扩散函数是狭缝衍射、光栅衍射和光学系统像差共同作用的结果^[16],可表示为

$$h_o = h_{sl}(x) * h_{gr}(x) * h_{ab}(x) \quad (8)$$

式中 $*$ 表示卷积运算.设狭缝宽度为 ω ,成像透镜焦距为 f_2 ,则狭缝衍射卷积因子为

$$h_{sl}(x) = \frac{\omega}{2l} \text{sinc}^2 \left(\frac{\omega x}{l \sqrt{x^2 + f_2^2}} \right) \quad (9)$$

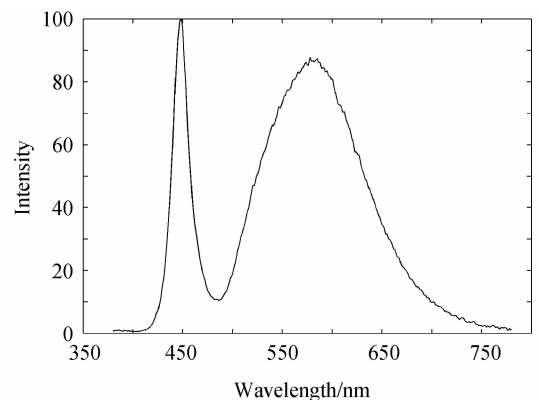
设光栅常量为 d ,刻槽宽度为 ω_1 ,则光栅衍射卷积因子为

$$h_{gr}(x) = \text{sinc}^2 \left(\frac{\omega_1}{\lambda \sqrt{1 + (f_2/x)^2}} \right) \cdot \left[\frac{\sin(N\pi d/\lambda \sqrt{1 + (f_2/x)^2})}{N \sin(\pi d/\lambda \sqrt{1 + (f_2/x)^2})} \right]^2 \quad (10)$$

光学系统像差的综合效果可近似表述为

$$h_{ab}(x) = \exp(-a(\lambda) \cdot x^2) \quad (11)$$

简化计算起见,本文将该综合作用的点扩散函数近似为高斯函数,如图2(b);原始光谱则采用典型的白光LED光谱如图2(a).实际光谱仪的测量过程,相当于原始光谱与光谱仪点扩散函数进行卷积.用 T 表示真实光谱数据, M 表示测量光谱数据,



(a) Original spectrum

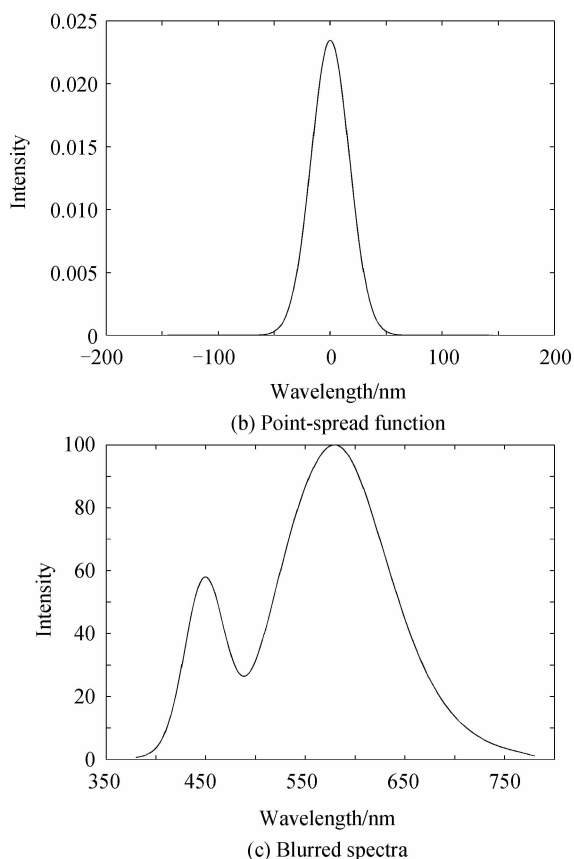


图2 光谱仪测试过程中3个参量的谱线信息
Fig. 2 Spectra of three parameters in the measurement of the spectrography

R 表示光谱仪点扩散函数,三者之间的关系可由矩阵形式表示为

$$M=R \cdot T \tag{12}$$

由于点扩散函数的影响,原本较明显的峰值部分变得模糊,其结果如图 2(c). 比较图 2(a)和图 2(c),可以明显发现在经过光谱仪的点扩散函数作用后,黄光区的光谱变形非常严重. 这不仅影响到对光谱数据的后期处理,而且对需要通过光谱来判断的光学元件各项性能参量带来了较大的误差. 因此,对其进行数据处理,恢复原始光谱是非常有必要的.

3 实测 LED 光谱校正

在得到了光谱仪的响应函数 R ,并通过模拟得到光谱仪的实测光谱 M 后,将两个参量带入式(7),经过 1 024 次迭代,可以基本恢复 LED 的原始光谱. 其中迭代次数可以通过控制式(7)中的求和项 S 来判断.

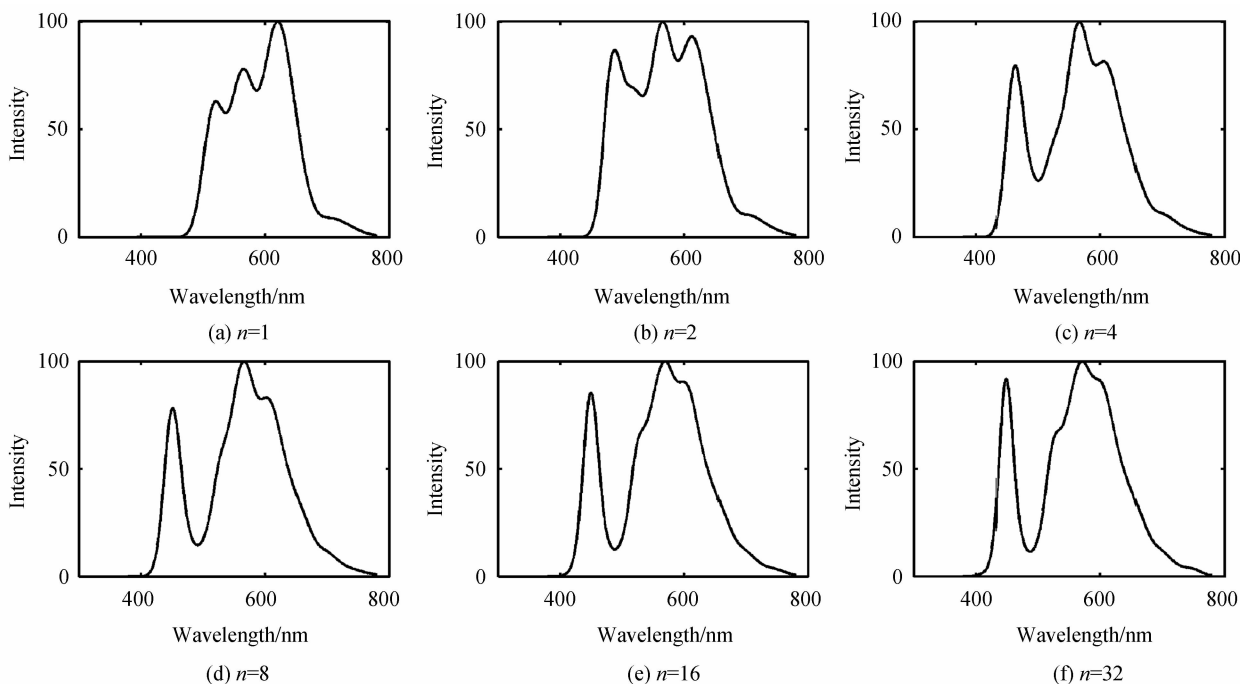
$$S=\sum_k \frac{R_{ki} M_k}{\sum_j R_{kj} T_j} \rightarrow 1 \tag{13}$$

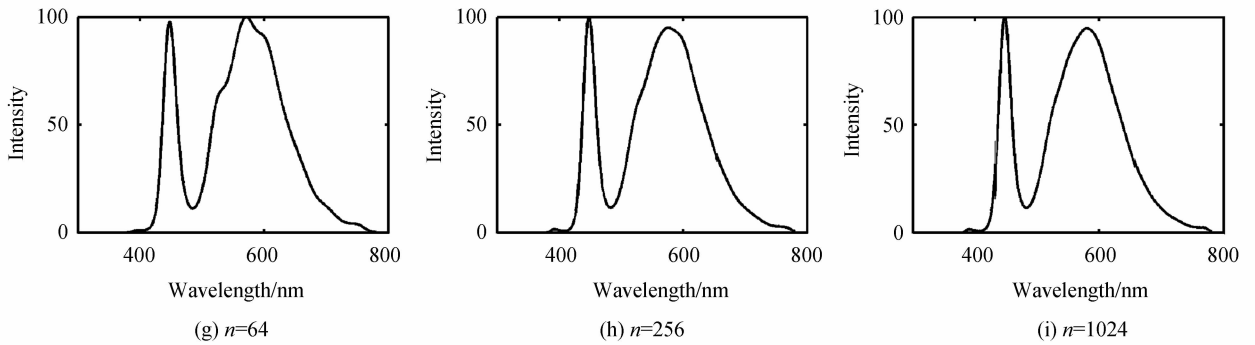
如果该迭代收敛,那么 S 的值应该趋向于 1. 所以最后可以通过判断 S 值和 1 的偏差度 η 来确定迭代是否收敛到极限值. 经过实验数据验证,发现当迭代次数为 1 024 次时

$$\eta=|P-1|/1 \leq 1e-4 \tag{14}$$

这时可以基本确定 T 已经收敛至极限值,式(7)最后得到的 T 即白光 LED 实际光谱. 具体反卷积过程中,光谱数据的变化过程见图 3.

从图 3(i)的曲线中可以看出,模糊了的光谱数据已经较好地恢复成原始光谱.



图3 反卷积过程中光谱变化(n :迭代次数)Fig. 3 Change of spectra during iteration (n : iterations)

4 实验结果分析及讨论

将经过反卷积后的光谱曲线和 LED 的原始光谱测试数据作对比图(图 4),发现两条曲线差异微小.将“模糊”光谱、迭代后的光谱分别和真实光谱求差(图 5),发现反卷积后与真实光谱的差异较反卷积前减小.

为了进一步量化对光谱准确度的评价,本文定义了光谱曲线标准偏差 σ 来判断测试结果与真实光

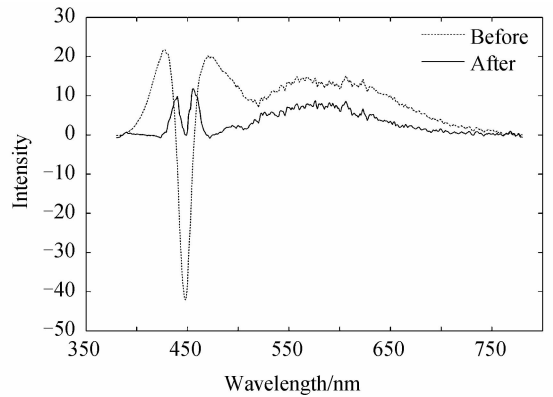


图5 反卷积前后和真实光谱差值

Fig. 5 Difference of original spectra and before (after) iteration

谱之间的区别.该参量可表达为

$$\sigma = \frac{\sum [X(\lambda) - Y(\lambda)]^2}{n} \quad (15)$$

式中 $X(\lambda)$ 和 $Y(\lambda)$ 分别代表测试光谱和真实光谱, n 表示光谱数据采样点数.由该定义式可看出,当两光谱完全相同时,标准偏差 σ 为 0. σ 越大表示光谱偏差较大, σ 越小则两光谱差异程度越小.

分别将反卷积前的光谱曲线(图 2(c))和处理后的光谱曲线(图 4(b))与真实光谱作对比,求取光谱曲线标准偏差 σ , 可得: $\sigma_{\text{before}} = 145.546$; $\sigma_{\text{after}} = 17.822$. 通过该参量对比可以发现,贝叶斯反卷积对模糊后的光谱实现了较好的恢复,从而实现了光谱仪准确度的提高.

5 结论

对于各类光源来说,由光谱仪点扩散函数引起的测试光谱图像变形会引起对其性能参量的错误评估.例如在照明光源的测试中,会造成光度及色度指标的误差.因此,由于贝叶斯方法能够较好地消除点扩散函数的影响,恢复光谱数据,其在低准确度光谱仪中的应用将具有广泛的前景.

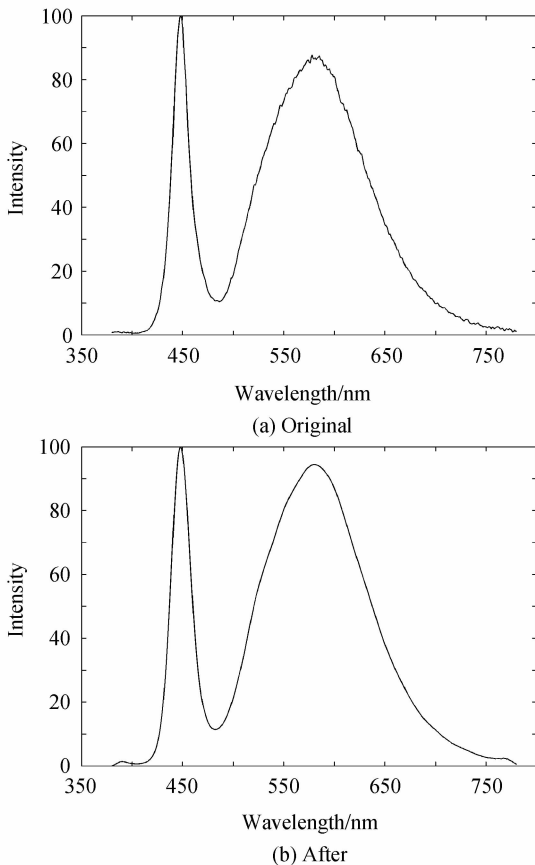


图4 反卷积前后光谱比较

Fig. 4 Comparison between spectra before and after iteration

参考文献

- [1] WANG H, HUO J, SONG C. A blind image restoration algorithm based on cumulants[C]. Beijing: Signal Processing, 2006 8th International Conference on. IEEE, 2006.
- [2] LEE J, CHUN J, LEE D. MTF compensation algorithm based on blind deconvolution for high resolution remote sensing satellite[C]. SPIE, 2012, **8399**: 83990R.
- [3] WALSH J R, LUCY L B. Extracting point source spectra/recovering extended object spectra using richardson-lucy restoration [C]. Canberra, Australia: Planetary Nebulae: Their Evolution and Role in the Universe, 2003: 412.
- [4] GUILLAUME M, LLEBARIA A, AYMERIC D, *et al.* Deblending of the UV photometry in GALEX deep surveys using optical priors in the visible wavelengths[C]. San Jose, CA: Electronic Imaging 2006. International Society for Optics and Photonics, 2006.
- [5] FERGUSON B, ABBOTT D. De-noising techniques for terahertz responses of biological samples[J]. *Microelectronics Journal*, 2001, **32**(12): 943-953.
- [6] PAPANIKOLAOU S, BOHN F, SOMMER R L, *et al.* Universality beyond power laws and the average avalanche shape[J]. *Nature Physics*, 2011, **7**(4): 316-320.
- [7] STRIKE J A, HIND M D, SAINI M S, *et al.* Unsteady surface pressure reconstruction on an oscillating airfoil using the wiener deconvolution method[C]. Chicago, Illinois: 27th AIAA Aerodynamic measurement technology and ground testing conference, 2010.
- [8] JANSSON P A. Deconvolution of images and spectra [M]. 2nd ed. Dover Publications, 2009.
- [9] WALTER D, LIU A, FRANKLIN E, *et al.* Contrast enhancement of luminescence images via point-spread deconvolution [C]. Austin, TX: Photovoltaic Specialists Conference (PVSC), 2012: 000307-000312.
- [10] GLOVER G H. Deconvolution of impulse response in event-related BOLD fMRI[J]. *Neuroimage*, 1999, **9**(4): 416-429.
- [11] YANG Yan-mei, GAO Man-tun, HE Jian. Wiener filtering image restoration technology research and improvement[J]. *Science Technology and Engineering*, 2012, **12**(29): 7611-7615.
杨艳美, 高满屯, 贺剑. 维纳滤波图像复原技术的研究与改进[J]. 科学技术与工程, 2012, **12**(29): 7611-7615.
- [12] DOWN T A, RAKYAN V K, TURNER D J, *et al.* A bayesian deconvolution strategy for immunoprecipitation-based DNA methylome analysis[J]. *Nature biotechnology*, 2008, **26**(7): 779-785.
- [13] ANDRIEU C, BARAT É, DOUCET A. Bayesian deconvolution of noisy filtered point processes [J]. *IEEE Transactions on Signal Processing*, 2001, **49**(1): 134-146.
- [14] MAKNI S, BECKMANN C, SMITH S, *et al.* Bayesian deconvolution fMRI data using bilinear dynamical systems [J]. *Neuroimage*, 2008, **42**(4): 1381-1396.
- [15] JOHNSON T D. Bayesian deconvolution analysis of pulsatile hormone concentration profiles [J]. *Biometrics*, 2003, **59**(3): 650-660.
- [16] YANG Huai-dong, CHEN Xin-ke, HUANG Xing-yue. Global modeling and analyzing of grating spectrometers[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2009, **29**(1): 281-284.
杨怀栋, 陈科新, 黄星月, 等. 光栅光谱仪的整体建模与分析[J]. 光谱学与光谱分析, 2009, **29**(1): 281-284.