

文章编号: 0253-2239(2006)11-1676-5

基于奇异值分解的数字波前拟合算法

常丽萍 沈卫星 林尊琪

(中国科学院上海光学精密机械研究所, 上海 201800)

摘要: 提出了基于奇异值分解、采用泽尼克多项式拟合干涉波前的算法, 该算法直接从线性方程组入手, 对矩阵进行奇异值分解分解, 在求解逆矩阵的过程中, 采用阈值法对奇异值的倒数进行非常规的置换($\infty \rightarrow 0$), 可直接得到系数向量。理论分析和实验证明, 相对于传统的格拉姆-施密特正交法, 该算法可首先通过求解条件数判断线性方程矩阵是否奇异, 对于解决病态方程组或奇异矩阵的最小二乘问题, 有很好的稳定性, 避免了由最小二乘构造的法方程组出现病态而引入的计算误差, 且易于编程。

关键词: 光学测量; 波前拟合; 奇异值分解; 泽尼克多项式

中图分类号: TN247 文献标识码: A

Algorithm for Digital Wavefront Fitting Based on Singular Value Decomposition

Chang Liping Shen Weixing Lin Zunqi

(Shanghai Institute of Optics and Mechanics, the Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201800)

Abstract: An algorithm based on singular value decomposition (SVD) is presented to fit the wavefront with Zernike polynomials. In the current algorithm, SVD is applied to decompose the matrix of the linear equations directly. In the process of computing the inverse matrix, a threshold value is employed to modify the reciprocals of singular values which are zero or too small. Then the Zernike coefficients can be worked out immediately. Compared with the typical Gram-Schmidt orthogonalization, SVD has good stabilization when solving the least square problem of the ill-conditioned equations or singular matrix. And also because of avoiding construction of normal equation group, the computational error is eliminated. Moreover, it is quite easy to be programmed.

Key words: optcal measurement; wavefront fitting; singular value decomposition; Zernike polynomials

1 引言

干涉测试技术一直被认为是检验光学系统波像差最有效、最精确的手段之一, 首先在干涉图上得到离散在有限数量孤立点上的相位数据, 然后对这些采样点上的离散数据进行拟合插值处理, 得到整个光学波面连续光滑的面形形状。拟合精度的高低直接影响测量精度。因此, 对波面离散数据的高精度拟合在干涉测量过程中至关重要。由于泽尼克多项式在单位圆上正交, 其多项式又很容易与光学设计中的赛德尔像差系数建立联系, 故大多数波前拟合都是将泽尼克多项式作为拟合基底函数^[1]。

应用较多的传统拟合算法主要有^[2]: 最小二乘法、格拉姆-施密特正交法^[3]、协方差矩阵法等。以前

的绝大部分文献推荐采用格拉姆-施密特正交法, 然而在实际计算中发现, 在相同泽尼克多项式阶数的情况下, 格拉姆-施密特正交法虽然没有出现最小二乘法中正则方程系数矩阵严重病态的情况, 但在构造正交归一函数系时却存在严重的相关, 同样得不到稳定的解, 也就无法保证拟合干涉波面测量结果的可靠性和精度^[4]; 同时在解决超定(over-determined)方程, 或者病态矩阵的最小二乘法问题时, 传统方法中, 法方程组的条件数比矛盾方程组的条件数要大, 因此解法方程组引起的误差要比直接解矛盾方程组引起的误差大得多^[5]。因此我们采用目前在现代数值分析中广泛应用的奇异值分解算法。奇异值分解算法是直接从矛盾方程组着手, 可避免引入较多的计算误差,

作者简介: 常丽萍(1980~), 女, 河南安阳人, 中国科学院上海光学精密机械研究所硕士研究生, 主要从事光学检测方面的研究。E-mail: changliping@mail.siom.ac.cn

导师简介: 沈卫星(1970~), 男, 上海人, 中国科学院上海光学精密机械研究所副研究员, 主要从事光学检测和加工的研究。

收稿日期: 2006-01-10; 收到修改稿日期: 2006-04-07

具有更好的稳定性和更好的求解精度。

2 泽尼克多项式

n 阶泽尼克多项式 z_n^l 可表示为两个函数的乘积^[6]：

$$\begin{aligned} z_n^l &= R_n^l(\rho) \exp(il\theta) = \\ &R_n^l(\rho) \begin{cases} \sin((n-2m)\theta), & (n-2m) > 0 \\ \cos((n-2m)\theta), & (n-2m) \leq 0 \end{cases}, \quad (1) \\ m &= (n-1)/2 \end{aligned}$$

θ 为角座标, ρ 为归一化径向距离, $R_n^l(\rho)$ 是与径向坐标有关的函数, n 为多项式的阶数, l 为与角度有关的参量, n 和 l 同奇偶性。 $(n-2m) > 0$, 取正弦函数; $(n-2m) \leq 0$, 取余弦函数。

泽尼克多项式在单位圆上正交, 满足圆形光瞳的特点, 其正交性也使拟合多项式的系数能相互独立, 避免了由于系数之间的耦合而造成物理意义上的混淆。

在波面拟合中, 一般是将干涉波面用 L 个泽尼克多项式的线性组合表示, 采用单个角标 j 来代替角标 n 和 m , $j = n(n+1)/2 + m + 1$, 则有

$$w(x, y) = \sum_{j=1}^L k_j z_j(x, y), \quad (2)$$

其中 $z_j(x, y)$ 为 j 级泽尼克多项式, k_j 是泽尼克多项式的线性系数, $j = 1, 2, 3, \dots, L$,

$$L = (n+1)(n+2)/2.$$

3 奇异值分解算法

3.1 奇异值分解算法

奇异值分解定理^[7]:

A 是实 $m \times n$ 矩阵, 必有正交阵 $U = [u_1, u_2, \dots, u_m] \in R^{m \times n}$ 和 $V = [v_1, v_2, \dots, v_n] \in R^{n \times n}$, 使得 $U^T A V = [\Sigma_1 \quad 0 \quad 0 \quad 0]$, 对角矩阵 $\Sigma_1 = \text{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_r)$, r 是矩阵 A 的秩, 其中 $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_r > 0$; 数值 $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_r$ 连同 $\sigma_{r+1} = \sigma_{r+2} = \dots = \sigma_n = 0$ ($m > n$), 一起称为矩阵 A 的奇异值。

定义矩阵 A 的条件数

$$\text{cond } A = \sigma_1 / \sigma_p,$$

σ_1, σ_p 分别是奇异值中的最大和最小值。

条件数是衡量线性方程数值稳定性的一个重要指标。刻画了求解线性方程时, 误差经过矩阵 A 的传播扩大为解向量的误差程度。当条件数很大时, A 的行向量或列向量的线性相关性很强。

3.2 波面拟合

给定干涉图上 N 个数据点 $w_i(x_i, y_i), i=1, 2, \dots, N$, 将(2)式写成矩阵形式有^[8]

$$W = ZK, \quad (3)$$

其中 W 是 $N \times 1$ 测量波前数据矩阵; Z 是 $N \times L$ 泽尼克多项式矩阵; K 是 $L \times 1$ 系数矩阵。

一般有 $N > L$, (3)式为超定方程组, 不存在一般意义上的准确解, 可求得最优解。采用优值函数定义, 求 K 使

$$\chi^2 \equiv |Z \cdot K - W|^2 \quad (4)$$

最小。

传统做法是利用正规方程组解最小二乘问题(4)式。利用泽尼克多项式拟合波面时, 虽然 Z 一般不存在奇异值 σ_j 为 0, 但有可能存在奇异值 σ_j 非常小, 一般方法可能给出方程组的形式解, 但解向量可能有非常大的分量, 得到的 W 将是一个非常差的近似解。而且, 直接从正规方程得到的最小二乘方问题的解对舍入误差十分敏感^[9]。奇异值分解可以很好地解决了这类难题, 给出最优解。

根据奇异值分解定理, 有 $Z = U \Sigma V^T$, $U^T U = V^T V = I$ (单位矩阵)

$$Z = U \cdot \begin{bmatrix} \sigma_1 & & & \\ & \ddots & & \\ & & \sigma_L & \\ & & & \end{bmatrix} \cdot V^T, \\ N \times L \quad N \times L \quad L \times L \quad L \times L$$

由于 U 和 V 为正交矩阵, 逆矩阵等于其转置矩阵; W 是对角矩阵, 逆矩阵仍是对角矩阵, 其对角元素为 σ_j 的倒数, 记 $\Sigma_2 = \text{diag}(1/\sigma_j)$, 有

$$Z^{-1} = V \cdot \Sigma_2 \cdot U^T, \quad (5)$$

在奇异值分解求解过程中当奇异值 σ_j 为 0 或数值非常小时应作如下处理, 其基本步骤为:

1) 设定一合适的阈值。假定机器精度为 ϵ , 采样 N 个数据点, 一般设定阈值为 $N\epsilon$, 当然 N 也可以用 \sqrt{N} 或其他常数代替, 根据计算机精度或数据精度选取。本文拟合中选取 $\epsilon = 1.0 \times 10^{-5}$ 。

2) 对奇异值进行逐个判断, 若 $\sigma_j / \sigma_{\max} < N\epsilon$, 则将相应的 $1/\sigma_j$ 置为 0, 而不是无穷大(设置 $\infty = 0$ 的情况并不常见); 否则, 仍为 $1/\sigma_j$ 。

3) 根据(5)式计算出系数向量 K

$$K = \sum_{i=1}^L \frac{U_{(i)}^T \cdot W}{\sigma_i} V_{(i)}, \quad (6)$$

(6)式就是最小二乘问题的最小范数解。由 0 置换无穷大相当于过滤掉小的奇异值, 当 Z 是从有噪声的观测数据得到时, 这种过滤能够起到很大的作用。

这个分析其实已经忽略了矩阵是奇异的还是非奇异的,具有一般性。

这样根据(6)式就可以求得的泽尼克多项式的系数向量 \mathbf{K} ,也就可以得到离散数据点上波相差用泽尼克多项式线性表示的波面函数。

可以证明奇异值 $\sigma_j = 0$ 或非常小时,将 $1/\sigma_j$ 置

为 0,奇异值分解所求解向量是最小范数解。

一般有 $N > L$, \mathbf{W} 不在奇异矩阵 \mathbf{Z} 的值域内。假设对 \mathbf{K} 添加了某个任意值 $\Delta\mathbf{K}$,则相对应 \mathbf{W} 也添加了一项 $\Delta\mathbf{W}$, $\Delta\mathbf{W} = \mathbf{Z} \cdot \Delta\mathbf{K}$ 。显然 $\Delta\mathbf{W}$ 在 \mathbf{Z} 的值域内, Σ_2 表示有零元素的对角矩阵 Σ_1 被修改过的逆矩阵,对优质函数取弗罗贝尼乌斯范数,有

$$\begin{aligned} |\mathbf{Z} \cdot \mathbf{K} - \mathbf{W} + \Delta\mathbf{W}| &= |(\mathbf{U} \cdot \Sigma_1 \cdot \mathbf{V}^T) \cdot (\mathbf{V} \cdot \Sigma_2 \cdot \mathbf{U}^T \cdot \mathbf{W}) - \mathbf{W} + \Delta\mathbf{W}| = \\ &= |[(\mathbf{U} \cdot \Sigma_1 \cdot \Sigma_2 \cdot \mathbf{U}^T - 1) \cdot \mathbf{W} + \Delta\mathbf{W}]| = \\ &= |\mathbf{U} \cdot [(\Sigma_1 \cdot \Sigma_2 - 1) \cdot \mathbf{U}^T \cdot \mathbf{W} + \mathbf{U}^T \cdot \Delta\mathbf{W}]| = \\ &= |(\Sigma_1 \cdot \Sigma_2 - 1) \cdot \mathbf{U}^T \cdot \mathbf{W} + \mathbf{U}^T \cdot \Delta\mathbf{W}|, \end{aligned}$$

可以看出, $(\Sigma_1 \cdot \Sigma_2 - 1)$ 是对角矩阵, 只有当 $\sigma_j = 0$ 时其第 j 个分量为非零值; 而由于 $\Delta\mathbf{W}$ 是 \mathbf{Z} 的值域, 只有当 $\sigma_j \neq 0$ 时 $\mathbf{U}^T \cdot \Delta\mathbf{W}$ 的第 j 个分量为非零值, 因此当 $\Delta\mathbf{W} = 0$ 时, 可得到 $|\mathbf{Z} \cdot \mathbf{K} - \mathbf{W} + \Delta\mathbf{W}|$ 的最小长度解, 即 $r \equiv |\mathbf{Z} \cdot \mathbf{K} - \Delta\mathbf{W}|$ 的最优化解。

4 实验测试与结论

4.1 计算机模拟

在干涉图波面拟合上, 文献[3]中的格拉姆-施密特正交法是大家公认和实验证明了精度较高的算法, 目前在测试工作中广泛应用, 为了检验奇异值分解算法用于波面拟合的精确度, 我们分别对这两种算法进行计算机模拟和拟合比较, 从而证明奇异值分解的可行性。

具体做法是: 任意设定 36 项泽尼克多项式系数, 圆形光学输出光瞳, 满足泽尼克多项式在圆域上的正交性, 采样点取在以干涉图的中心为圆心, 半径为 31 个采样点的圆域内(共 2969 个采样点), 通过已知的 36 项泽尼克系数, 根据(2)式就可以表示出在这些采样点上的理想相位波面, 其常数项为 -0.013, 绕 x 轴倾斜系数为 1.154, 绕 y 轴倾斜系数为 0.404, 像散和离焦系数都为 0.006, 三级沿 x 落差系数为 0.032 等, 各对应于泽尼克多项式所表示的波面像差系数。对此理想波面分别采用格拉姆-施密特正交法和奇异值分解法进行模拟, 理想系数和拟合之间的差异可反映该算法的可行性。拟合系数如表 1 所示, 其中 rms 值是波面本身的均方差值。

从上表中的系数比较可看出, 奇异值分解算法和格拉姆-施密特正交法应用于理想波面都具有很高的精度, 拟合系数与设定系数基本相同, 理想波面拟合误差的均方值可达到 10^{-15} , 精度很高。证明奇

表 1 计算机模拟结果(单位: 波长)

Table 1 Results of computer simulation
(in the unit of wavelength)

Item	Preset coefficient	Gram-Schmidt	SVD
1	-0.013	-0.0130	-0.0130
2	1.154	1.1540	1.1540
3	0.404	0.4040	0.4040
4	0.006	0.0060	0.0060
5	0.006	0.0060	0.0060
6	0.000	-0.0000	0.0000
7	0.017	0.0170	0.0170
8	0.032	0.0320	0.0320
9	-0.030	-0.0300	-0.0300
10	0.005	0.0050	0.0050
11	-0.021	-0.0120	-0.0120
12	0.006	0.0060	0.0060
13	-0.018	-0.0180	-0.0180
14	-0.016	-0.0160	-0.0160
15	0.007	0.0070	0.0070
16	0.003	0.0030	0.0030
17	-0.013	-0.0130	-0.0130
18	-0.000	-0.0000	0.0000
19	0.006	0.0060	0.0060
20	-0.022	-0.0020	-0.0020
21	-0.000	-0.0000	-0.0000
22	-0.009	-0.0090	-0.0090
23	-0.006	-0.0060	-0.0060
24	-0.003	-0.0030	-0.0030
25	-0.005	-0.0050	-0.0050
26	0.000	-0.0000	0.0000
27	0.012	0.0120	0.0120
28	0.002	0.0020	0.0020
29	0.004	0.0040	0.0040
30	0.014	0.0140	0.0140
31	0.033	0.0330	0.0330
32	-0.021	-0.0120	-0.0120
33	0.003	0.0030	0.0030
34	-0.004	-0.0040	-0.0040
35	0.014	0.0140	0.0140
36	0.005	0.0050	0.0050
rms	0.0222	0.0222	0.0222

异值分解用于波面拟合是可行的,同时由于算法本身的性质,在解决超定方程时相对于其他的算法应更加稳定,不会出现拟合失败的问题。

4.2 实验应用测试

在实际测试中,由数字 ZYGO 干涉仪采集到一幅干涉图如图 1 所示,为直径大约 220 像素的干涉图,提取其相位并解包裹得到包含着被测波面信息的离散干涉波面相位数据,波面拟合即是将这些离散数据拟合成尽可能和实际波面一致的波面函数。干涉图是由相移法获得,干涉离散数据由 Metropro 软件从多幅干涉图中提取。图 1 的干涉图用来反映该波面的形状,实际的相位数据是由多幅干涉图得到的。在整个光瞳内按照直径为 180 个采样点采样,由采样点的离散数据,根据(3)式~(6)式,计算得到 36 项泽尼克多项式系数,即可实现奇异值分解算法的波面函数,其等高线如图 2。图 3 是传统格拉姆-施密特正交法在相同条件下的波面拟合结果。

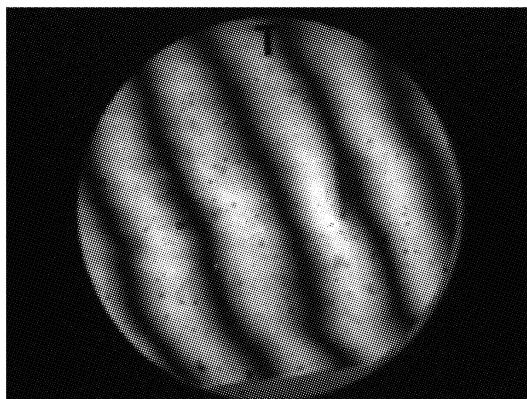


图 1 实际的干涉图

Fig. 1 Actual interferogram

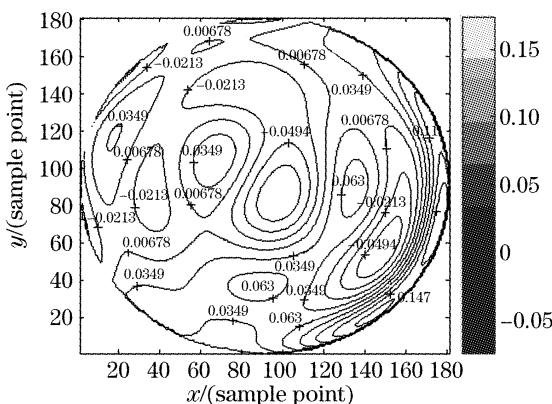


图 2 奇异值分解测试波面等高线图

Fig. 2 Contour plot of wavefront estimated by SVD

可看出,格拉姆-施密特正交法拟合误差的均方差和峰谷值分别为 0.2377λ 和 2.0454λ ,奇异值分解算法均方差和峰谷值值分别为 0.2372λ 和 2.0450λ 。虽然两者精度基本一样,但一旦 Z 和 W 有扰动,格

拉姆-施密特正交法由于条件数较大,会对解向量产生较大的误差,而奇异值分解由于对较小的奇异值做了处理,故具有更好的稳定性。

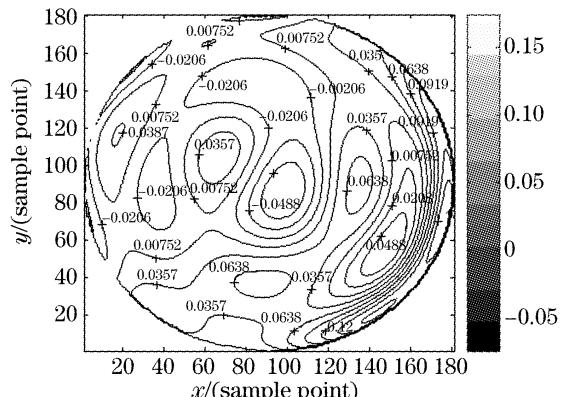


图 3 格拉姆-施密特正交法测试波面等高线图

Fig. 3 Contour plot of wavefront estimated by Gram-Schmidt orthogonalization

5 结 论

奇异值分解方法与传统的格拉姆-施密特正交法实验拟合结果精度基本相同,但奇异值分解算法理论简单,计算步骤较少,易于编程,可避免引入较多的计算误差,一般来说,对病态方程或奇异矩阵拟合不会失败,具有比其他算法更高的稳定性。特别是随着现代干涉测试技术越来越趋向于向高速和高频发展,剪切干涉图和存在高频成分干涉图的波面拟合将具有奇异特性;另外,由于泽尼克多项式仅在单位连续圆域上正交,而实际会存在一些方形或环形光瞳,仍然采用泽尼克多项式对其进行波面拟合时,矩阵 Z 是奇异的,奇异值分解可以很好地解决这些问题,比传统的方法更加适用。另外奇异值分解具有其广泛性,同样适合于采用其他基底函数的情况,比如勒让德多项式(对方形孔径)和由 Mahajan 等人提出的针对环形孔径的泽尼克环形多项式^[10]。

参 考 文 献

- Daniel Malacara, Manuel Servin, Zacarias Malacara. *Interferogram Analysis for Optical Testing* [M]. New York: Marcel Dekker, 1998. 96~103
- Yan Jingzhou, Lei Fan, Zhou Bifang et al.. Algorithms for wavefront fitting using Zernike polynomial [J]. *Opt. Prec. Eng.*, 1999, 7(5): 119~128 (in Chinese)
鄢静舟,雷凡,周必方等.用 Zernike 多项式进行波面拟合的几种算法[J].光学精密工程,1999,7(5): 119~128
- Daniel Malacara, J. Martin Carpio-Valadéz, J. Javier Sánchez-Mondragón. Wavefront fitting with discrete orthogonal polynomials in a unite radius circle [J]. *Opt. Engng.*, 1990, 29(6): 672~675

- 4 Mo Weidong. Application and methods to fit optical interfere wave surface with quantizing technique [J]. *Chin. J. Computational Physics*, 2003, **20**(6): 514~520 (in Chinese)
莫卫东. 光学干涉波面数字化处理方法与应用[J]. 计算物理, 2003, **20**(6): 514~520
- 5 Yan Jingzhou, Sun Houhuan, Gao Zhiqiang et al.. A new algorithm for wavefront fitting using Zernike polynomial[J]. *Acta Mathematica Scientia*, 2000, **20**(3): 378~385 (in Chinese)
鄢静舟, 孙厚环, 高志强等. 用 Zernike 多项式进行波面拟和的一种新算法[J]. 数学物理学报, 2000, **20**(3): 378~385
- 6 Daniel Malacara. *Optical Shop Testing* [M]. Bai Guoqiang, Xue Jun'ao et al. transl. Beijing: China Machine Press, 1983. 443~460 (in Chinese)
D. 马拉卡拉. 光学车间检验[M]. 白国强, 薛君敖等译. 北京: 机械工业出版社, 1983. 443~460
- 7 Zhang Xianda. *Matrix Analysis and Applications* [M]. Beijing: Tsinghua University Press, 2004. 341~358 (in Chinese)
张贤达. 矩阵分析与应用[M]. 北京: 清华大学出版社, 2004. 341~358
- 8 Bo Qi, Hongbin Chen, Nengli Dong. Wavefront fitting of interferograms with Zernike polynomials [J]. *Opt. Engng.*, 2002, **41**(7): 1565~1569
- 9 William H. Press, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling et al.. *Numerical Recipes in C: the Art of Scientific Computing* [M]. Cambridge: Cambridge University Press, 1992. 59~70
- 10 Ge Aiming, Chen Jinbang, Chen Lei et al.. Mathematical vector model for interferogram of arbitrary apertures of the fitting process[J]. *Infrared and Laser Engineering*, 2000, **29**(6): 42~46 (in Chinese)
葛爱明, 陈进榜, 陈磊等. 任意形状孔径的干涉图像波面拟合的数学矢量模型[J]. 红外与激光工程, 2000, **29**(6): 42~46

征 订 启 事

《中国激光》增刊

第十七届全国激光学术会议于 2005 年 10 月 19~22 日在四川绵阳富乐山大酒店召开。本次会议由中国光学学会与中国电子学会联合主办。共有 350 多名来自高校、研究所以及公司激光领域的研究人员参加了本次会议。

本次大会共收到论文 330 篇,《中国激光》将其中的优秀论文 126 篇汇编成册,以增刊形式出版了《第十七届全国激光学术会议论文集》,为广大激光工作者提供了一份有价值的参考资料。

按照研究方向,论文集分为激光物理、非线性光学、高能固体激光与超短脉冲激光、新型激光器、激光技术及晶体材料、激光应用、光束传输、激光薄膜及元器件等专栏。较全面地反映了近年来我国激光科学技术研究、应用和产业化的最新成果,显示了激光科学技术对国家十一五规划、国家 863 计划、国家 973 计划、重大项目、国家基金和产业发展等方面的重要作用与贡献。

论文集共计 462 页,进口雅光纸精印,定价 100 元。欢迎订阅。

《光学手册》

这是我国编写的第一本基础性大型光学手册。本书顾问为著名光学专家龚祖同,主编为李景镇。

本书为 16 开,1541 页,定价 100 元。全书有 2700 多个公式,1400 余幅插图和 400 多个数据表格,230 万字。是“一本兼顾光学工作者和非光学科技工作者的参考书”(引自王大珩院士为本书的题词)。本书能使读者在较短时间内全面了解某门光学分科的主要内容,查阅公式、数据省时省力。

电话:021—69918427

电子信箱:gexiaohong@siom.ac.cn

地址:上海 800-211 信箱

邮政编码:201800

联系人:葛晓红