

文章编号: 1005-5630(2015)06-0504-05

# 基于拟合算法的傅里叶变换光谱仪光谱反演

李 涛, 华建文, 孙晓杰, 陈 仁

(中国科学院上海技术物理研究所, 上海 200083)

**摘要:** 在傅里叶变换光谱仪(FTS)中, 精确获取每个干涉信号采样点处的光程差是获取光谱图的关键。动镜速度的波动会对等时间采样造成采样误差, 而当目标光源波长较短时无法直接利用传统方法进行等光程差采样。分析了速度波动误差对光谱的影响, 并提出了一种基于拟合算法计算干涉信号每个采样点处光程差的方法, 在动镜速度波动较大的情况下对可见光波段的干涉信号进行采样反演。实验结果表明, 此方法准确度高, 适用于各种傅里叶变换光谱仪。

**关键词:** 傅里叶变换光谱仪; 光谱反演; 拟合算法; 可见光谱

**中图分类号:** TP 911. 73 **文献标志码:** A **doi:** 10. 3969/j. issn. 1005-5630. 2015. 06. 007

## Spectrum recovery method of the Fourier transform spectrometer based on fitting algorithm

LI Tao, HUA Jianwen, SUN Xiaojie, CHEN Ren

(Shanghai Institute of Technical Physics of the Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200083, China)

**Abstract:** In the Fourier transform spectrometer (FTS), obtaining the optical path difference of each sampling points accurately is the key of data processing. The velocity fluctuation of moving mirror will cause equal-time sampling error, and traditional equal optical path difference sampling method can not be used for visible wavelengths. The influence of speed fluctuation is analyzed and a method to calculate the optical path difference of each sampling points based on fitting algorithm is developed. The method is verified by processing the interference signal of visible light with large velocity fluctuation. The experimental results verify its correctness and effectiveness. This method can also be used in any kind of Fourier transform spectrometer.

**Keywords:** FTS; spectrum recovery; fitting algorithm; vis spectrum

## 引 言

傅里叶变换光谱仪(FTS)因其具有高光谱分辨率、高光通量<sup>[1-2]</sup>、杂散光影响小、波数精确度高等优点在化学分析、大气探测等领域应用越来越广泛。其中可以获得非常高的光谱分辨率是傅里叶变换光谱仪最重要的优点, 而光谱分辨率虽然受限于仪器自身, 但是干涉信号采样误差和反演算法带来的误差同样会影响最终的光谱分辨率<sup>[3-4]</sup>。在傅里叶变换光谱仪中, 随着动镜的移动, 两干涉光束产生光程差, 从而产生一个随光程差变化的干涉信号。干涉信号和光谱数据是一对傅里叶变换对<sup>[4]</sup>, 对获取到的干涉信号

收稿日期: 2015-03-26

基金项目: 国家国防科技工业局“十二五”民用航天课题(Y1K1300G0)

作者简介: 李 涛(1989—), 男, 博士研究生, 主要从事电路与系统、光谱仪研究。E-mail: zczy\_it@163. com

通信作者: 华建文(1957—), 男, 研究员, 主要从事光学仪器研究。E-mail: tleejason@163. com

以光程差为变量做傅里叶变换即可得到入射光的光谱数据,因此要进行光谱反演就需要在采样干涉信号的同时能精确地获取每个干涉信号采样点处的光程差。

如果动镜运动速度为绝对匀速,那么对干涉信号进行等时间采样等同于等光程差采样。但在实际情况中,动镜速度不可能是绝对匀速的,如果继续采用等时间采样则不可避免会导致非常大的采样误差,从而在得到的光谱图中产生误差<sup>[5]</sup>。常用的方法是采用激光作为参考信号,对其进行滤波整形后作为干涉信号采样的触发信号,这种方法只适用于目标光源波长大于参考激光两倍的傅里叶变换光谱仪中,例如中长波红外傅里叶变换光谱仪,当目标光源在近红外和可见光波段时,继续采用上述方法则会因不满足奈奎斯特采样定理而无法从离散的干涉信号中复原出光谱数据。本文基于曲线拟合算法提出了一种精确获取每个干涉信号等时间采样点处光程差的方法,仍然采用激光作为参考信号,对于波长在可见光波段甚至紫外波段的目标光源,即使速度波动较大,只要等时间采样频率满足采样定理,本方法都可以获取每个数据点处的光程差,从而对干涉信号进行精确反演获取光谱数据。

## 1 傅里叶变换光谱仪干涉信号分析

傅里叶变换光谱仪属于调频的干涉光谱仪,主要用来观测光谱信息,常用的傅里叶变换光谱仪采用的是经典迈克尔逊结构,光程差是动镜行程的两倍,其光学结构如图 1 所示。动镜采用角镜,这样可以消除动镜倾斜造成的影响<sup>[6]</sup>,而且在相同的动镜行程下可以获取四倍的光程差,从而得到更高的光谱分辨率。入射光被分束器分成强度相等的两束光,经分束器反射的光束经过左侧的定镜 1 和定镜 2 到达角镜左侧,然后反射回来,经分束器反射和投射分别到达探测器 2 和探测器 1;而经分束器透射的光束经右侧的定镜 3 和定镜 4 到达角镜右侧,然后反射回来,经分束器反射和投射到达探测器 1 和探测器 2。当动镜沿着光轴来回做直线运动时,在探测器上汇合的两光束的光程差发生周期性变化,形成干涉信号。在傅里叶变换光谱仪中,动镜作匀速扫描的过程,相当于在整个采样过程中以速度  $u$  对干涉光信号进行调制,其结果是把频率很高的光波调制成频率很低的电信号<sup>[7]</sup>。干涉信号被红外探测器转换为电信号,经过放大器和模拟滤波器,进入模数转换器进行等光程差采样,得到数字干涉图。

根据单色光的合成原理,对于辐射亮度为  $B(\sigma)$  的单色光源,经过如上所述的光学结构所得干涉信号的强度为:

$$I(\Delta) = B(\sigma) \cos^2(\pi\sigma\Delta) = \frac{1}{2}B(\sigma)[1 + \cos(2\pi\sigma\Delta)] \quad (1)$$

式中: $\Delta$  为经分束片分光后的两束相干光的光程差; $\sigma$  为光源的波数。显而易见,只有交流部分含有光谱信息,因此通常称探测到的交流信号为干涉信号。对单色光而言,通过动镜运动改变光程差  $\Delta$  所得到的干涉图为一余弦(或正弦)曲线<sup>[7-8]</sup>。当入射光为连续光谱时,输出的干涉信号是各个频率成分的干涉信号叠加:

$$I(\Delta) = \int_{v_1}^{v_2} B(v) \cos(2\pi v \Delta) dv \quad (2)$$

式中: $v_1$ 、 $v_2$  分别为入射连续光谱的最小波数和最大波数。在实际光谱仪中,光程差是有限的,对式(2)做傅里叶变换即可得到入射光的光谱信息:

$$B(v) = \int_{-L}^{+L} A(\Delta) \cos(2\pi v \Delta) d\Delta \quad (3)$$

式中: $L$  为仪器实际的动镜单边最大行程。在此条件下,根据瑞利判据可以得到仪器的实际光谱分辨率为:

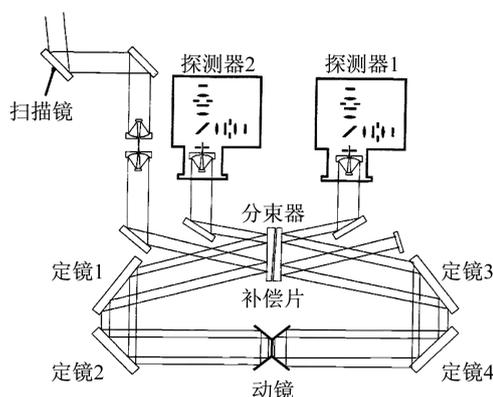


图 1 傅里叶变换光谱仪光学结构

Fig. 1 The optical structure of FTS

$$\delta v = \frac{1}{2L} \quad (4)$$

如果动镜速度是绝对匀速的,则光程差是时间  $t$  的线性函数即  $\Delta = V_0 t$ ;这在实际仪器中是不现实的,假设速度波动误差是周期为  $T$  的正弦函数,即  $\Delta = V_0 t + \epsilon \sin(2\pi t/T)$ ,其中  $\epsilon$  为速度波动的幅值,将其代入式(1)中,式(1)的交流部分可得:

$$I(t) = B(\sigma) \cos[2\pi\sigma(V_0 t + \epsilon \sin(2\pi t/T))] \quad (5)$$

利用三角公式对上式做简化处理可以得到:

$$I(t) = B(\sigma) \cos 2\pi\sigma V_0 t - \frac{1}{2} B(\sigma) 2\pi\epsilon \sigma \cos(2\pi\sigma V_0 t - \frac{2\pi}{T} t) + \frac{1}{2} B(\sigma) 2\pi\epsilon \sigma \cos(2\pi\sigma V_0 t + \frac{2\pi}{T} t) \quad (6)$$

式(6)中后两项就是所谓的鬼线。如果采用等时间采样采集上述干涉信号,再直接对其做傅里叶变换,在所得到的光谱数据中会有额外的尖峰出现。如果入射光源为连续光谱,则所得到的光谱图会有很多鬼线出现。常用的方法是采用稳频激光作为参考信号,这是因为激光单色性好而且波长  $\lambda_0$  已知,动镜每移动  $\lambda_0/4$  便产生一个干涉信号周期,即每当激光干涉信号出现过零点时就知道光程差变化了  $\lambda_0/2$ ,因此只要以参考激光干涉信号过零点作为采样触发信号即可实现等光程差采样<sup>[9]</sup>。然而从采样点中复原出原谱线必须保证采样频率满足奈奎斯特采样定理,如果目标光源的波长  $\lambda$  全都大于激光波长的两倍,那么当光程差每变化一个  $\lambda$ ,激光干涉信号已经至少出现了 4 个过零点,此时满足奈奎斯特采样定理;但是当目标光源的波长小于激光波长的两倍时,光程差每变化一个  $\lambda$ ,激光干涉信号只出现一个过零点,甚至不出现。即对于工作波段为  $0.4 \sim 1.0 \mu\text{m}$  的傅里叶变换光谱仪,继续采用上述方法进行等光程采样则会造成干涉信息丢失,无法得到完整干涉信号,更无法得到光谱信息,因此如何对可见光干涉信号进行等光程差采样是能否反演出可见光光谱的关键。

## 2 利用曲线拟合算法获取光程差

在现在智能的控制方案下,虽然动镜往复运动的实际速度是不断变化的,但其速度不会存在突变的现象,因此在傅里叶变换光谱仪中,不可能存在动镜移动  $0.10 \sim 0.25 \mu\text{m}(\lambda/4)$  的过程中速度发生很大变化的情况,一般在动镜移动这么短的距离过程中,速度基本可以看作是匀速的。那么在光程差变化一个激光波长的过程中,产生的激光干涉信号应该是一个标准的带有初始相位的单频率正弦信号。

对于采集到的离散信号,很少能直接求得其函数表达式,一般是采用插值和拟合的方法,利用采集到的离散数据点来得出一条近似正确的连续的曲线。如果采样得到的离散信号点没有误差则采用插值方法,如果采样得到的离散信号点与真实值有差距则采用曲线拟合方法。常用的获取曲线的方法有样条插值、多项式插值、多项式拟合、基于遗传算法的拟合算法等,其中多项式拟合是最小二乘拟合的一种常用形式。最小二乘法是应用最广泛的曲线拟合算法,其核心思想是寻找合适的函数参数使得函数与所采样得到的数值之间的误差平方和达到最小<sup>[10]</sup>,即使下式达到最小值:

$$e^2 = \sum_{i=0}^N [y_i - f(x_i)]^2 \quad (7)$$

式中: $N$  为采样总数。当用标准正弦信号去拟合时,即  $f(x) = A \sin(2\pi f x + \varphi) + B$ ,其中幅值  $A$ 、频率  $f$ 、相位  $\varphi$ 、直流分量  $B$  四个参数都是未知的<sup>[11]</sup>,而且误差平方和是这四个参数的非线性函数,因此无法求出误差平方和的闭合解,只能用迭代法求出每个参数的局部最优解。

本文基于最小二乘法用  $f(x) = a + b \sin(cx) + d \cos(cx)$  对每个激光干涉信号周期进行正弦拟合,求出每个周期对应正弦信号的四个参数和拟合误差,如果能用该方法拟合出结果而且拟合误差非常小,则可近似认为:在光程差变化一个激光波长的过程中,产生的激光干涉信号是一个标准的单频率正弦信号。在傅里叶变换光谱仪中,由于参考激光干涉信号和目标光源干涉信号所经过电路的延迟不同,即使是采用等光程差采样仍然会有采样误差产生,根据文献<sup>[12-13]</sup>的计算,只要速度波动的相对误差小于 2%,这

种误差对光谱的影响基本可以忽略。因此只要每个干涉信号周期的拟合误差小于 2%，则基本可以忽略。对一个完整干涉信号的拟合流程图如图 2 所示。

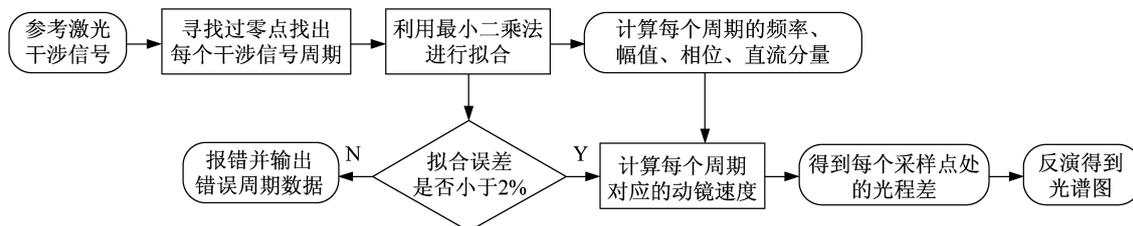


图 2 拟合流程图

Fig. 2 Flow chat of fitting

首先是寻找参考激光干涉信号的过零点,根据过零点把干涉信号分为一个个“正弦”周期,对每个周期利用最小二乘法进行正弦曲线拟合,得到频率、幅值、相位、直流分量、拟合误差五个参数,根据频率可以得到每个周期内的平均速度  $V = f\lambda_0$ ,如果拟合误差超过 2% 则报错并输出错误的周期。如果拟合误差全部小于 2% 则利用下式求出每个采样点处光程差:

$$\Delta_K = \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^{m_j} (f_j \cdot \frac{1}{f_s} \cdot \lambda_0) + \sum_{k=m_1+\dots+m_n}^K (f \cdot \frac{1}{f_s} \cdot \lambda_0) \quad (8)$$

式中:  $n$  为第  $K$  个采样点前的整周期的个数;  $m_j$  为每一个整周期内的采样点数;  $f_j$  为采样频率;  $\lambda_0$  为参考激光波长。根据傅里叶变换光谱仪的干涉信号表达式,用所得到的光程差进行光谱反演<sup>[14-15]</sup>,对于可见光目标光源来说,其波数范围为  $10\,000 \sim 25\,000 \text{ cm}^{-1}$ ,同时本文傅里叶变换光谱仪的最大光程差为  $\pm 10 \text{ cm}$ ,即光谱分辨率为  $0.05 \text{ cm}^{-1}$ ,因此以  $0.05 \text{ cm}^{-1}$  为波数间隔,对每个波数所对应的光源进行反演:

$$B(\sigma_i) = \sum_{q=1}^N [A_q \cos(2\pi\sigma_i \Delta_q) (\Delta_{q+1} - \Delta_q)] \quad (9)$$

式中:  $\sigma_i = 10\,000 + 0.05i$ ,  $i$  为  $0 \sim 3 \times 10^5$ ,即波数从  $10\,000 \text{ cm}^{-1}$  到  $25\,000 \text{ cm}^{-1}$  每隔  $0.05 \text{ cm}^{-1}$  计算一次。

### 3 实验验证

为验证本文所提出的方法,对所用傅里叶变换光谱仪进行速度开环控制,在速度有较大波动的情况下进行干涉信号采样。动镜采用无刷直流电机驱动,电机本身速度较快,经过减速箱减速,动镜运动的平均速度控制在  $3 \text{ cm/s}$ ,根据干涉信号频率和速度、波数的关系,可得干涉信号的频率范围为  $100 \sim 400 \text{ kHz}$ ,因此选择采样频率为  $2 \text{ MS/s}$ ,采样位数为 16 位。

参考激光采用波长为  $0.6852 \mu\text{m}$  的稳频氦氖激光器,因对可见光波段气体的吸收率较低,为方便进行结果对比,目标光源分别采用波长为  $0.6598 \mu\text{m}$  的红色激光和波长为  $0.532 \mu\text{m}$  的绿色激光。对动镜移动一个单程所获得的数据进行处理可以得到实际速度波动情况,如图 3(a) 所示,计算其波动的相对误差值为  $10.04\%$ 。拟合误差如图 3(b) 所示,最大拟合误差为  $1.30\%$ ,拟合误差的平均值为  $0.37\%$ ,满足误差小于 2% 的要求。图 4 和图 5 分别为用本文提出的算法对波长为  $0.6598 \mu\text{m}$  和波长为  $0.532 \mu\text{m}$  的光源进行光谱反演的结果,并给出峰值光谱处的细节,从实验结果中可以看出,当速度变化较大时,采用本文所用的方法所得到的反演结果波数准确度高,而且基本可以达到仪器自身的光谱分辨率  $0.05 \text{ cm}^{-1}$ 。

### 4 结 论

傅里叶变换光谱仪的动镜速度不可避免地会有波动,对等时间采样的干涉信号直接进行傅里叶变换将会产生很大的光谱误差。当目标光源为中长波红外光时,可以用参考激光干涉信号触发采样以实现等光程差采样,但是当目标光源的波长较短时,无法直接进行等光程差采样。本文提出了一种基于曲线拟合的光程差获取算法,能在速度波动较大时仍然能准确地反演出光谱图,而且适用于任何波段的目标光源,同时对速度均匀性无严格要求,降低了对控制系统精度的要求。

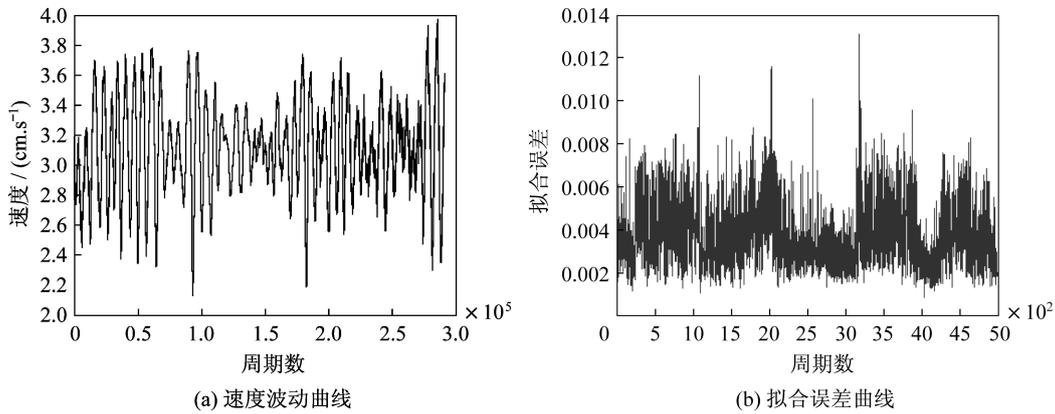


图 3 速度误差和拟合误差曲线  
Fig. 3 Speed error and fitting curve of error

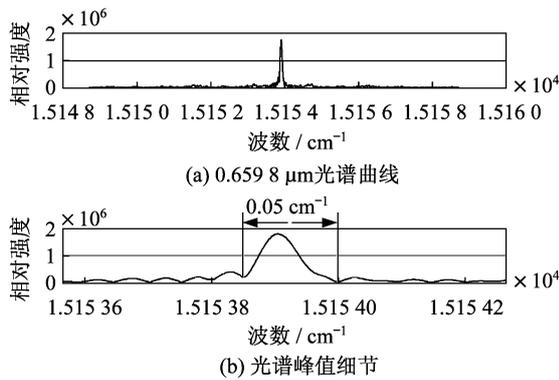


图 4 0.659 8 μm 光源光谱图  
Fig. 4 0.659 8 μm spectrum

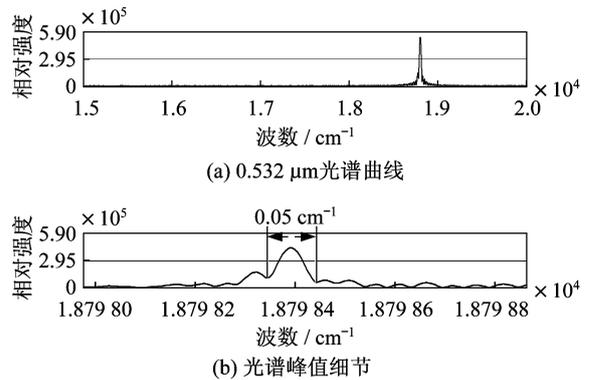


图 5 0.532 μm 光源光谱图  
Fig. 5 0.532 μm spectrum

参考文献:

[ 1 ] 夏翔. 干涉光谱仪多速度模式扫描技术研究[D]. 上海:中国科学院研究生院(上海技术物理研究所), 2014:11-15.  
 [ 2 ] 吴航行, 华建文, 王模昌. 新型红外空间遥感用傅里叶变换光谱仪[J]. 红外与激光工程, 2004, 33(4): 397-400.  
 [ 3 ] 盛灏. 傅里叶变换光谱仪干涉信号数据获取研究[D]. 上海:中国科学院研究生院(上海技术物理研究所), 2014: 14-21.  
 [ 4 ] 范世福. 光谱技术和仪器的新发展[J]. 光学仪器, 2000, 22(4): 35-40.  
 [ 5 ] 王明艳. 基于 DSP 的弹光调制非均匀干涉信号获取及反演算法研究[D]. 太原: 中北大学, 2013: 31-35.  
 [ 6 ] 王文桂. 干涉光谱仪[M]. 北京: 宇航出版社, 1988: 180-190.  
 [ 7 ] 杨隆梓, 段星辉, 魏焕东, 等. 星载傅立叶光谱仪数据采集技术研究[J]. 科学技术与工程, 2008, 8(8): 2034-2037.  
 [ 8 ] 胡盛雯, 殷德奎. 高光谱大气探测仪干涉信号的获取电路设计[J]. 红外与激光工程, 2006, 35(S1): 528-533.  
 [ 9 ] 胡玲, 潘征宇, 洪扁, 等. 双拼激光干涉仪中的数字相位计设计[J]. 光学仪器, 2014, 36(3): 258-262.  
 [ 10 ] 齐国清, 吕健. 正弦曲线拟合若干问题探讨[J]. 计算机工程与设计, 2008, 29(14): 3677-3680.  
 [ 11 ] 梁志国, 朱济杰, 孟晓风. 四参数正弦曲线拟合的一种收敛算法[J]. 仪器与仪表学报, 2006, 27(11): 1513-1519.  
 [ 12 ] WILLIAMS C S. Mirror misalignment in fourier spectroscopy using a Michelson interferometer with circular aperture[J]. Applied Optics, 1966, 5(6): 1084-1085.  
 [ 13 ] COHEN D L. Performance degradation of a Michelson interferometer when its misalignment angle is a rapidly varying, random time series[J]. Applied Optics, 1997, 36(18): 4034-4042.  
 [ 14 ] 姚涛, 吕群波, 相里斌, 等. 非均匀采样干涉数据光谱反演技术研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2010, 30(5): 1430-1433.  
 [ 15 ] 吕群波, 姚涛, 相里斌, 等. 干涉数据光谱反演方法研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2010, 30(1): 114-117.

(编辑: 刘铁英)